



Н. А. Кириченко

**КВАНТОВАЯ ФИЗИКА
КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СИСТЕМ**

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)

Н. А. Кириченко

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ

*Допущено
Учебно-методическим объединением
высших учебных заведений Российской Федерации
по образованию в области прикладных математики и физики
в качестве учебного пособия для студентов вузов
по направлению «Прикладные математика и физика»*

МОСКВА
МФТИ
2012

УДК 145
ББК 22.31я73
К43

Рецензенты:

Доктор физико-математических наук, профессор *Г. В. Склизков*

Кандидат технических наук *В.А. Овчинкин*

Кириченко, Н. А.

К43 Квантовая физика конденсированных систем. : учеб.
пособие / Н. А. Кириченко. – М. : МФТИ, 2012. – 200 с.
ISBN 978-5-7417-0431-8

Изложены основные вопросы квантовой физики систем многих частиц: тепловое излучение, фононы, зонная теория твердых тел, физика металлов и полупроводников, магнитные свойства вещества. Пособие подготовлено на основе лекций курса общей физики, читавшихся автором в Московском физико-техническом институте.

Предназначено студентам, изучающим данный предмет, а также преподавателям в качестве справочного материала.

УДК 145
ББК 22.31я73

ISBN 978- 5-7417-0431-8

© Кириченко Н. А., 2012

© Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего профессионального
образования «Московский физико-технический институт
(государственный университет)», 2012

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
Глава 1. РАВНОВЕСНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ	7
1.1. Закон Кирхгофа	7
1.1.1. Определения (7). 1.1.2. Закон Кирхгофа (9). 1.1.3. Вывод закона Кирхгофа (10).	
1.2. Формула Планка	11
1.2.1. Идеальный газ фотонов (11). 1.2.2. Распределение Планка (12). 1.2.3. Формула Планка (13). 1.2.4. Распределение энергии по длинам волн (16). 1.2.5. Распределение Вина (16). 1.2.6. Распределение Рэлея–Джинса (16). 1.2.7. Закон смещения Вина (17). 1.2.8. Плотность энергии равновесного излучения (18). 1.2.9. Закон Стефана–Больцмана (18). 1.2.10. Плотность потока фотонов равновесного излучения (19). 1.2.11. Уравнение состояния излучения (19). 1.2.12. Термодинамика равновесного излучения (20).	
1.3. Дополнение: некоторые интегралы	22
Глава 2. СПОНТАННОЕ И ВЫНУЖДЕННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. ЛАЗЕРЫ	23
2.1. Спонтанное и вынужденное излучение	23
2.1.1. Спонтанные и вынужденные переходы (23). 2.1.2. Вывод формулы Планка (25).	
2.2. Прохождение света через двухуровневую систему	27
2.2.1. Коэффициенты поглощения и усиления (27). 2.2.2. Пример: коэффициент поглощения двухуровневой системы (28).	
2.3. Методы создания инверсной населённости	29
2.3.1. Инверсная населённость (29). 2.3.2. Трёхуровневая схема (30). 2.3.2. Четырёхуровневая схема (31).	
2.4. Лазеры	31
2.4.1. Некоторые типы лазеров (31). 2.4.2. Порог генерации (33). 2.4.3. Резонатор (34). 2.4.4. Добротность резонатора (34). 2.4.5. Функция пропускания резонатора (35).	
Глава 3. ФОНОНЫ. МОДЕЛЬ ДЕБАЯ	38
3.1. Кристаллы	38
3.1.1. Типы химической связи (38). 3.1.2. Кристаллическая решётка. Основные периоды (40). 3.1.3. Элементарная и примитивная ячейки (40).	
3.2. Колебания в цепочках атомов	41
3.2.1. Колебания и волны в одномерной цепочке (41). 3.2.2. Колебания в цепочке атомов двух сортов (43).	
3.3. Фононы. Модель Дебая	47
3.3.1. Фононы (47). 3.3.2. Квазиимпульс (49). 3.3.3. Модель Дебая (49).	
3.4. Теплоёмкость и теплопроводность в модели Дебая	52
3.4.1. Теплоёмкость в модели Дебая (52). 3.4.2. Концентрация и средняя энергия фононов (54). 3.4.3. Теплопроводность в модели Дебая (55). 3.4.4. Взаимодействие фононов. Процессы переброса (56). 3.4.5. Роль столкновений фононов в теплопроводности (58).	
3.5. Оценки	59
3.5.1. Дебаевская частота и температура Дебая (59). 3.5.2. Скорость звука (60). 3.5.3. Теплопроводность (60).	
Глава 4. ЭЛЕКТРОНЫ В ТВЁРДЫХ ТЕЛАХ	62
4.1. Распределение Ферми–Дирака	62
4.1.1. Определения (62). 4.1.2. Вывод распределения Ферми–Дирака (63). 4.1.3. Число состояний электрона (64). 4.1.4. Энергия Ферми (64). 4.1.5. Химический потенциал (65). 4.1.6. Поверхность Ферми (66). 4.1.7. Температура вырождения (66). 4.1.8. Давление электронного газа (67). 4.1.9. Численные оценки (67).	
4.2. Обратная решётка	68

4.2.1. Обратная решётка в случае прямоугольной прямой решётки (68).	4.2.2. Обратная решётка в случае непрямоугольной прямой решётки (69).	4.2.3. Индексы Миллера (71).
4.3. Электроны в периодическом потенциале	72	
4.3.1. Волны Блоха (72).	4.3.2. Квазиимпульс и энергия электронов (73).	
4.4. Зонная структура энергетического спектра электронов	74	
4.4.1. Возникновение зонной структуры (74).	4.4.2. Вывод закона дисперсии в модели сильной связи (77).	
4.5. Диэлектрики, полупроводники, металлы	82	
4.5.1. Число состояний в зоне (82).	4.5.2. Валентные зоны и зоны проводимости (82).	4.5.3. Диэлектрики, полупроводники, металлы (82).
4.6. Эффективная масса электрона	84	
Глава 5. МЕТАЛЛЫ	88	
5.1. Электронная теплоёмкость металлов	88	
5.2. Теплопроводность металлов	89	
5.2.1. Электрон-фононное взаимодействие в металлах (89).	5.2.2. Квантовомеханическая теория теплопроводности металлов (90).	5.2.3. Электронная и решёточная теплопроводность (91).
5.3. Электропроводность металлов	93	
5.3.1. Закон Ома. Классическая теория Друде (93).	5.3.2. Закон Видемана–Франца. Классическая теория (94).	5.3.3. Квантовомеханическая теория проводимости металлов (95).
5.3.4. Формула Друде в квантовой теории (96).	5.3.5. Закон Блоха–Грюнайзена (99).	
Глава 6. ПОЛУПРОВОДНИКИ	101	
6.1. Свойства полупроводников	101	
6.1.1. Собственные и примесные полупроводники (101).	6.1.2. Электроны и дырки (103).	6.1.3. Концентрация электронов и дырок (104).
6.1.4. Уровень Ферми в полупроводнике (106).	6.1.5. Уровень Ферми в двухуровневой системе (107).	6.1.6. Релаксация носителей в полупроводниках (108).
6.1.7. Проводимость полупроводников (109).	6.1.8. Проводимость примесных полупроводников (110).	6.1.9. Межзонное туннелирование (113).
6.2. Контактные явления в полупроводниках	114	
6.2.1. Электронно-дырочный переход (p – n -переход) (114).	6.2.2. Распределение потенциала в области p – n -перехода (115).	6.2.3. Выпрямляющие свойства p – n -перехода (118).
Глава 7. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ	121	
7.1. Основные свойства сверхпроводников	121	
7.1.1. Сверхпроводимость (121).	7.1.2. Разрушение сверхпроводимости магнитным полем (122).	7.1.3. Эффект Мейсснера. Диамагнетизм сверхпроводников (122).
7.1.4. Теория Лондонов (123).	7.1.5. Сверхпроводники I и II рода (125).	
7.2. Природа сверхпроводимости	125	
7.2.1. Куперовское спаривание (125).	7.2.2. Термодинамическое критическое поле (127).	7.2.3. Экспериментальное подтверждение существования щели (128).
7.2.4. О механизме притяжения электронов в решётке (130).	7.2.5. Импульс куперовских пар (131).	7.2.6. Длина когерентности (132).
7.2.7. Сверхтекучесть. Критерий Ландау (134).	7.2.8. Критический ток в сверхпроводниках (137).	
7.3. Квантование магнитного потока	138	
7.3.1. Квант магнитного потока (138).	7.3.2. Другой вывод закона квантования магнитного потока (139).	
7.4. Оценка критических магнитных полей	154	
7.4.1. Вихревая структура сверхпроводников II рода (140).	7.4.2. Оценка первого и второго критических полей (141).	
7.5. Эффект Ааронова–Бома	142	
Глава 8. КВАНТОВЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА	145	
8.1. Двумерный электронный газ	145	

8.1.1. Полевой транзистор (145). 8.1.2. Гетероструктуры. МДП-структуры (146). 8.1.3. Двумерный электронный газ (147).	
8.2. Классический эффект Холла	148
8.3. Квантующее магнитное поле	150
8.3.1. Уровни Ландау (150). 8.2.2. Заполнение уровней Ландау (151).	
8.4. Квантовый эффект Холла (КЭХ)	153
8.4.1. Целочисленный квантовый эффект Холла (ЦКЭХ) (153). 8.4.2. Дробный квантовый эффект Холла (ДКЭХ) (156). 8.4.3. О квазичастицах в КЭХ (157).	
Глава 9. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА	159
9.1. Парамагнетики, диамагнетики, ферромагнетики	159
9.2. Диамагнетизм	161
9.2.1. Ларморова прецессия (161). 9.2.2. Диамагнитная восприимчивость (162).	
9.3. Парамагнетизм	163
9.3.1. Теория Бриллюэна (163). 9.3.2 Адиабатическое размагничивание (166).	
9.4. Электронный парамагнетизм	167
9.5. Ферромагнетизм	170
9.5.1. Гистерезисные явления (170). 9.5.2. Закон Кюри–Вейсса (171). 9.5.3 Теория Вейсса (172). 9.5.4. О квантовомеханической теории ферромагнетизма (175). 9.5.5. Спиновые волны (178). 9.5.6. Магноны, их вклад в спонтанную намагниченность и теплоёмкость ферромагнетиков (179). 9.5.7. Доменная структура ферромагнетиков (181).	
Глава 10. ВЕЩЕСТВО В ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЯХ	184
10.1. Некоторые сведения о звёздах	184
10.1.1. Определения (184). 10.1.2. Диаграмма Герцшпрунга–Рассела (185). 10.1.3. Солнце (187).	
10.2. Нейтронные звёзды	187
10.2.1. Общие сведения (187). 10.2.2. Радиус нейтронной звезды (188).	
10.3. Белые карлики	190
10.3.1. Общие сведения (190). 10.3.2. Идеальный газ электронов (192). 10.3.3. Белые карлики с плотностью $\rho < \rho_{\text{рел}}$ (192). 10.3.4. Вырожденный релятивистский ферми-газ (193). 10.3.5. Предельная масса белого карлика (194).	
10.4. Нейтронизация вещества	196
Некоторые физические константы	198
Литература	199

Предисловие

Предлагаемое пособие основано на лекциях, читавшихся автором студентам МФТИ в курсе общей физики.

Изложение квантовой физики делится на две части. Первая часть включает принципы и основные уравнения, а также некоторые приложения. Здесь рассматриваются отдельные микрочастицы и системы с небольшим числом частиц. Однако законы квантовой физики в полной мере могут проявляться не только в микроскопических, но и в макроскопических масштабах, определяя поведение больших систем. Одним из впечатляющих примеров являются сверхпроводники, свойства которых невозможно объяснить без использования законов квантовой физики. Лазеры, ставшие в настоящее время неотъемлемым инструментом науки и техники и уже прочно вошедшие в быт, порождены развитием квантовой электроники. Без привлечения законов квантовой механики невозможно объяснить и такое привычное явление, как магнетизм.

Изложение этих и ряда других вопросов, относящихся к системам многих частиц, обычно входит во вторую часть курса квантовой физики. Здесь должны совместно использоваться законы как квантовой, так и статистической физики.

Этому и посвящено данное пособие. Построена теория равновесного (теплого) излучения. Обсуждаются понятия спонтанного и вынужденного излучения и принципы физики лазеров. Далее рассмотрены колебания кристаллических решёток и сформулирована теория фононов. На этой основе строится квантовая теория теплоёмкости и теплопроводности твёрдых тел. Затем излагаются принципы зонной теории и обсуждаются её приложения к физике металлов и полупроводников. Отдельные главы посвящены квантовому эффекту Холла, сверхпроводимости и магнитным свойствам вещества. Включён также раздел, посвящённый экстремальным состояниям вещества, реализующимся в нейтронных звёздах и белых карликах.

К сожалению, из-за ограниченного объёма книги многие интересные и важные проблемы не получили отражения. Однако изложение построено таким образом, чтобы все принципиальные моменты были отражены, а формальная сторона представлена достаточно полно.

Для более подробного изучения предмета можно рекомендовать книги [1–15], список которых приведён в конце пособия.

Глава 1. РАВНОВЕСНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

1.1. Закон Кирхгофа

1.1.1. Определения

Равновесное (тепловое) излучение — это излучение, испускаемое веществом и возникающее за счёт его внутренней энергии (в отличие, например, от люминесценции, возбуждаемой внешними источниками энергии).

Равновесное излучение можно создать, поместив нагретое вещество в замкнутую полость, полностью отражающую излучение (рис. 1.1.1). В результате процессов поглощения-испускания излучения телом устанавливается состояние равновесия, в котором поглощаемая энергия сравнивается с испускаемой. В состоянии термодинамического равновесия контактирующие подсистемы имеют одинаковую температуру. Поэтому тепловое излучение можно характеризовать той же температурой, что и находящееся в равновесии с ним вещество.

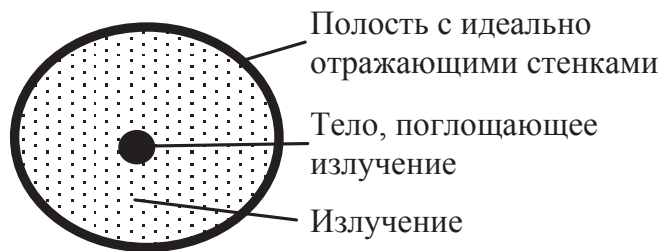


Рис. 1.1.1. Нагретое поглощающее тело, помещённое в замкнутую полость с идеально отражающими стенками, приходит в равновесие с излучением

Плотность энергии ρ излучения — это количество энергии в единичном объёме: $dU = \rho dV$. Поскольку излучение с разными частотами может нести разную энергию, вводят *спектральную плотность энергии излучения ρ_ω* соотношением

$$d\rho = \rho_\omega d\omega, \quad \rho = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega.$$

Равновесное излучение характеризуется следующими признаками: оно является неполяризованным (векторы **E** и **H** меняются в каждой точке хаотически), изотропно, однородно, плотность энергии зависит только от температуры, причём это выполняется на любой частоте:

$$\rho_{\omega} = \rho_{\omega}(T), \quad \rho = \rho(T).$$

Поток энергии Φ есть количество энергии излучения, переносимое в единицу времени. Размерность потока есть $[\Phi] = \text{Вт}$.

Поток энергии $d\Phi$ излучения от тела в телесный угол $d\Omega$ в направлении θ (отсчитываемом от нормали к излучающей поверхности) от площадки dS , имеющей видимую площадь $dS_{\perp} = dS \cos \theta$ (рис. 1.1.2), равен

$$d\Phi = B d\Omega dS_{\perp} = B d\Omega dS \cos \theta.$$

Величина B называется *испускающей (излучательной) способностью тела в заданном направлении*, или *энергетической яркостью*. С ней связана *светимость* R :

$$R = \int B \cos \theta d\Omega,$$

где интегрирование выполняется по всем разрешённым направлениям.

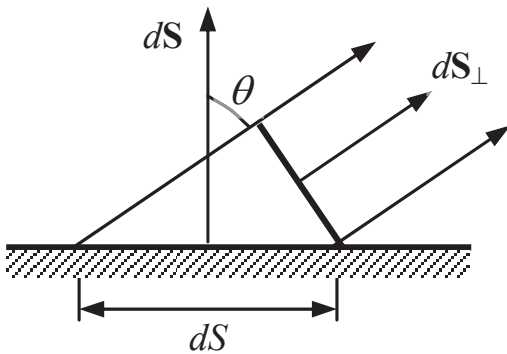


Рис. 1.1.2. Фактическая (dS) и видимая (dS_{\perp}) площади излучающей площадки тела

Источник (свещающееся тело) называется *ламбертовским* (подчиняется *закону Ламберта*), если его испускающая способность B не зависит от направления. Иными словами, две площадки с одинаковой *видимой* площадью (рис. 1.1.2) излучают в один и тот же телесный угол $d\Omega$ одинаковый поток энергии. Для ламбертовского источника яркость и испускающая способность связаны простым соотношением:

$$R = B \int_0^{\pi/2} \cos \theta \cdot 2\pi \sin \theta d\theta = \pi B. \quad (1.1.1)$$

Спектральная плотность потока излучения Φ_{ω} , т.е. поток энергии в единичном диапазоне частот, определяется соотношением

$$d\Phi = \Phi_{\omega} d\omega.$$

Спектральная испускающая способность B_{ω} на частоте ω определяется соотношением

$$dB = B_{\omega} d\omega.$$

Соответственно интегральная (по всем частотам) испускательная способность оказывается равной

$$B = \int_0^{\infty} B_{\omega} d\omega.$$

Аналогично, соотношением $dR_{\omega} = R_{\omega} d\omega$ вводится *спектральная светимость* R_{ω} , причём

$$R = \int_0^{\infty} R_{\omega} d\omega.$$

Пусть излучение падает на тело, которое может поглощать это излучение полностью или частично. Обозначим падающий на тело поток как $\Phi^{(\text{пад})}$, а поглощаемый поток — как $\Phi^{(\text{погл})}$. Величина

$$A = \Phi^{(\text{погл})} / \Phi^{(\text{пад})}$$

называется *поглощательной способностью* тела. Рассматривая излучение на частоте ω , можно ввести *спектральную поглощательную способность*: $A_{\omega} = \Phi_{\omega}^{(\text{погл})} / \Phi_{\omega}^{(\text{пад})}$. При этом

$$\Phi_{\omega}^{(\text{погл})} = \int_0^{\infty} A_{\omega} \Phi_{\omega}^{(\text{пад})} d\omega.$$

Очевидно, что на всех частотах $A_{\omega} \leq 1$.

Тело называется *абсолютно чёрным*, если на всех частотах $A_{\omega} = 1$. Такое тело полностью поглощает падающее на него излучение с произвольным спектральным составом, «перерабатывая» его в равновесное излучение с температурой, равной температуре тела.

1.1.2. Закон Кирхгофа

Закон Кирхгофа (1859 г.) формулируется следующим образом:

Отношение испускательной способности тела к его поглощательной способности есть функция только температуры и частоты, одинаковая для всех тел:

$$B_{\omega} / A_{\omega} = f(\omega, T). \quad (1.1.2)$$

Функция $f(\omega, T)$ даёт выражение для испускательной способности абсолютно чёрного тела. Она связана со спектральной плотностью энергии излучения соотношением

$$f(\omega, T) = c\rho_\omega(T)/4\pi.$$

Для абсолютно чёрного тела ($A_\omega = 1$) испускательная способность определяется полной (по всем частотам) плотностью энергии равновесного излучения:

$$B = \frac{c\rho(T)}{4\pi}, \quad \rho = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega.$$

1.1.3. Вывод закона Кирхгофа

Пусть нагретое тело помещено в оболочку с полностью отражающими стенками (рис. 1.1.1). Производимое этим телом излучение, отразившись от стенок полости, возвращается к телу.

Рассмотрим состояние равновесия. Обозначим спектральную плотность энергии равновесного излучения в полости как ρ_ω . Выделим диа-

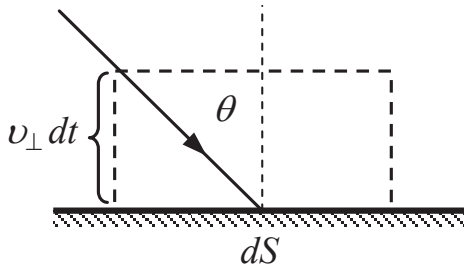


Рис. 1.1.3. К выводу закона Кирхгофа

пазон спектра $\omega \div \omega + d\omega$. Вследствие изотропии доля излучения, летящая в телесный угол $d\Omega$, есть $d\Omega/4\pi$, а соответствующая плотность энергии в интервале частот $d\omega$ равна $\rho_\omega d\omega \cdot (d\Omega/4\pi)$. За время dt до поверхности дойдёт излучение, удаленное от неё на расстояние $\nu_\perp dt = c \cos \theta dt$ (рис. 1.1.3). Энергия излу-

чения, находящегося в цилиндре высотой $\nu_\perp dt$ и площадью основания dS , равна

$$dU = dS \cdot \nu_\perp dt \cdot \rho_\omega d\omega \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{c\rho_\omega}{4\pi} d\omega \cdot \cos \theta d\Omega dS dt.$$

Поэтому поток энергии, падающий на тело, равен

$$d\Phi^{(\text{пад})} = \frac{dU}{dt} = \frac{c\rho_\omega}{4\pi} d\omega \cdot \cos \theta d\Omega dS.$$

Этот поток поглощается телом:

$$d\Phi^{(\text{погл})} = A_\omega d\Phi^{(\text{пад})}.$$

Поглощенная энергия преобразуется в излучаемую энергию:

$$d\Phi^{(\text{изл})} = B_\omega d\omega \cdot \cos \theta dS \cdot d\Omega.$$

В состоянии равновесия поглощенный и излученный потоки совпадают:

$$d\Phi^{(\text{погл})} = d\Phi^{(\text{изл})}.$$

Отсюда следует, что

$$A_\omega \frac{c\rho_\omega}{4\pi} d\omega \cdot \cos\theta dS d\Omega = B_\omega d\omega \cdot \cos\theta dS d\Omega.$$

Таким образом, получаем закон Кирхгофа:

$$\frac{B_\omega}{A_\omega} = \frac{c\rho_\omega}{4\pi}. \quad (1.1.3)$$

1.2. Формула Планка

1.2.1. Идеальный газ фотонов

Энергия электромагнитного поля равна

$$W = \int \frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2}{8\pi} dV. \quad (1.2.1)$$

Представим поле в виде суперпозиции плоских волн:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \sum_i \mathbf{E}_i, \quad \mathbf{H} = \sum_i \mathbf{H}_i; \\ \mathbf{E}_i &= \mathbf{E}_{0,i}(t) \exp(i\mathbf{k}_i \mathbf{r}), \quad \mathbf{H}_i = \mathbf{H}_{0,i}(t) \exp(i\mathbf{k}_i \mathbf{r}); \\ \mathbf{E}_{0,i}(t) &= \mathbf{e}_i \exp(-i\omega_i t), \quad \mathbf{H}_{0,i}(t) = \mathbf{h}_i \exp(-i\omega_i t), \end{aligned} \quad (1.2.2)$$

причём для каждой из волн векторы \mathbf{e}_i , \mathbf{h}_i и \mathbf{k}_i взаимно ортогональны и образуют правую тройку. Тогда вследствие некогерентности отдельных волн полная энергия поля W может быть представлена в виде суммы энергий отдельных волн:

$$W = \sum_{\substack{\text{(по всем} \\ \text{волнам)}}} W_i. \quad (1.2.3)$$

Как видно из (1.2.2), каждой плоской волне сопоставляется гармонический осциллятор:

$$\ddot{\mathbf{E}}_i + \omega_i^2 \mathbf{E}_i = 0, \quad \ddot{\mathbf{H}}_i + \omega_i^2 \mathbf{H}_i = 0.$$

Известно, что энергия осциллятора может принимать дискретный набор значений:

$$W_n^{(i)} = \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i. \quad (1.2.4)$$

Это можно интерпретировать так, что электромагнитное поле представлено в виде совокупности квантов колебаний — *фотонов*. Величина n_i имеет смысл числа квантов, отвечающих осциллятору с частотой ω_i .

Фотон обладает энергией $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\mathbf{k}$.

В силу поперечности электромагнитных волн для каждого волнового вектора существуют две независимые линейные поляризации $\mathbf{e}_1 \perp \mathbf{k}$, $\mathbf{e}_2 \perp \mathbf{k}$; $\mathbf{e}_1 \perp \mathbf{e}_2$. В квантовой физике более удобно рассматривать круговую поляризацию. Соответственно фотон характеризуется спиральностью (проекцией спина на направление импульса: $s_p = \mathbf{sp}/p$). При этом вследствие поперечности возможны два значения спиральности: $s_p = -1$ и $s_p = +1$.

Таким образом, электромагнитное поле можно представить как совокупность квантов — фотонов, имеющих определённые энергию, импульс и спиральность. Поскольку уравнения электромагнитного поля в вакууме (или линейной среде) линейны, то электромагнитные волны проходят друг через друга без взаимодействия (принцип суперпозиции). Соответственно фотоны в указанных условиях не взаимодействуют друг с другом, образуя *идеальный газ фотонов*. Энергия фотонного газа равна сумме энергий образующих его фотонов:

$$E = V \sum_{\mathbf{k}, j} \hbar \omega_{\mathbf{k}, j} \left(n_{\mathbf{k}, j} + \frac{1}{2} \right), \quad n_{\mathbf{k}, j} = 0, 1, 2, \dots \quad (1.2.5)$$

(V — объём, занятый излучением, j — спиральность).

Число квантов (фотонов) может не сохраняться вследствие процессов испускания–поглощения излучения веществом.

1.2.2. Распределение Планка

Как уже говорилось, электромагнитное поле можно рассматривать как совокупность осцилляторов с разными частотами. Рассмотрим один из осцилляторов поля с собственной частотой ω . Его энергия может принимать дискретный набор значений: $E_n = \hbar \omega (n + 1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$. При конечной температуре T системы число осцилляторов, имеющих энергию E_n , даётся распределением Больцмана:

$$N_n = A \exp(-E_n/k_B T),$$

где A — нормировочная постоянная, k_B — постоянная Больцмана. Поскольку средняя энергия осциллятора равна

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n N_n}{\sum_{n=0}^{\infty} N_n},$$

то с учётом квантования уровней энергии имеем

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \hbar \omega \exp \left[- \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right]}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[- \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right]} = \frac{1}{2} \hbar \omega + \hbar \omega \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \exp(-nx)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nx)}. \quad (1.2.6)$$

Здесь для краткости введено обозначение: $x = \hbar \omega / k_B T$. Найдём входящих сюда сумм:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nx) = \frac{1}{1 - e^{-x}},$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} n \exp(-nx) = - \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nx) = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2}.$$

В итоге получаем

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega + \hbar \omega \frac{1}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1} = \left(n(\omega) + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega,$$

где введено среднее число заполнения

$$n(\omega) = \frac{1}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1}. \quad (1.2.7)$$

Это соотношение называется *распределением Планка* и даёт среднее число квантов с частотой ω (энергией $\hbar \omega$), находящихся при температуре системы T в одном и том же квантовом состоянии (в частности, с одинаковыми векторами импульсов \mathbf{p} и проекциями спина s_z).

1.2.3. Формула Планка

Пусть излучение находится в ящике объёмом V и пусть $d^3 k$ — элемент объёма в пространстве значений волнового вектора. Тогда в элементе объёма фазового пространства $d\Gamma = V d^3 k$ имеется $dN = 2 d\Gamma / (2\pi)^3$ различных допустимых состояний (волновых векторов и ориентаций спина). Множитель «2» связан с наличием двух различных поляризаций. К этому соотношению можно прийти на основе следующих рассуждений.

Рассмотрим излучение, помещенное в большой прямоугольный ящик объёмом V и сторонами L_x, L_y, L_z . Поле излучения в этом ящике

представляет собой суперпозицию плоских волн, характеризуемых частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} . Считая, что поле находится в вакууме, имеем связь между ω и \mathbf{k} : $\omega = ck$. В ящике с зеркальными стенками¹ проекции волнового вектора могут принимать следующие значения:

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} N_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} N_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} N_z,$$

где $N_x, N_y, N_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Отсюда находим, что число ΔN_x различ-

ных значений k_x в интервале Δk_x равно $\Delta N_x = \frac{L_x}{2\pi} \Delta k_x$. Аналогично,

$\Delta N_y = \frac{L_y}{2\pi} \Delta k_y$, $\Delta N_z = \frac{L_z}{2\pi} \Delta k_z$. Полное число различных значений вол-

новых векторов в диапазоне

$$k_x \div k_x + \Delta k_x, \quad k_y \div k_y + \Delta k_y, \quad k_z \div k_z + \Delta k_z$$

равно

$$\Delta N = \Delta N_x \Delta N_y \Delta N_z = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z.$$

Необходимо также учесть две возможные поляризации фотонов, для чего нужно удвоить полученное число ΔN . Имея в виду, что величина $L_x L_y L_z = V$ есть объём ящика, находим окончательно максимально возможное число фотонов в рассматриваемом объёме и волновыми векторами в элементе объёма $d^3 k = dk_x dk_y dk_z$ 3-мерного \mathbf{k} -пространства:

$$dN = 2V \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (1.2.8)$$

Вследствие изотропии излучения можно выполнить интегрирование по направлениям волнового вектора \mathbf{k} . Переходя от волнового числа к частоте излучения ($k = \omega/c$), получим

$$dN = 2V \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = V \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}.$$

¹ С формальной точки зрения данный подход опирается на теорему о том, что интегрируемая функция $f(x)$, определённая в конечной области $0 < x < L$, может быть разложена в комплексный ряд Фурье: $f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \exp(inqx)$, $q = 2\pi/L$.

Величина

$$g(\omega) = \frac{1}{V} \frac{dN}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \quad (1.2.9)$$

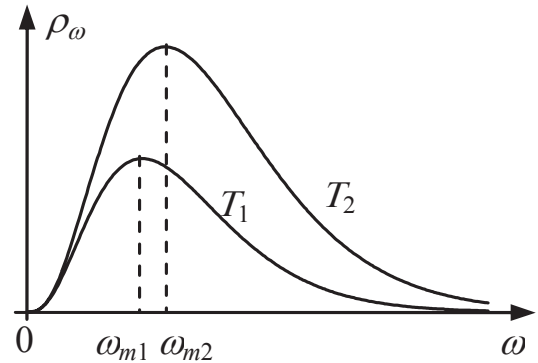
называется *спектральной плотностью состояний*.

Объёмная плотность энергии равновесного излучения в диапазоне частот $\omega \div \omega + d\omega$ дается *формулой Планка*:

$$\rho_\omega d\omega = n(\omega) \cdot \hbar\omega \cdot g(\omega) d\omega = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \frac{\hbar\omega^3 d\omega}{\pi^2 c^3}. \quad (1.2.10)$$

На рис. 1.2.1 приведены графики функции ρ_ω для двух значений температуры.

Рис. 1.2.1. Спектральное распределение плотности энергии для двух значений температуры: $T_1 < T_2$. Спектральные кривые не могут пересекаться ни в одной точке (кроме точки $\omega = 0$).
 $\omega_m = 2,82 k_B T / \hbar$



Покажем, что кривые $\rho_\omega(T_1)$ и $\rho_\omega(T_2)$ как функции частоты не могут пересекаться при $\omega > 0$.

Пусть в одной ёмкости содержится равновесное излучение при температуре T_1 , а в другой — при температуре T_2 , причём $T_1 < T_2$. Приведем эти ёмкости в контакт через окно с фильтром, пропускающим излучение с частотой ω в интервале $d\omega$. Поскольку плотность потока энергии изотропного излучения равна $dq = c\rho_\omega d\omega/4$ (раздел 1.2.10), то суммарная плотность потока энергии из сосуда 2 в сосуд 1 равна

$$dq = dq_2 - dq_1 = \frac{1}{4} c [\rho_\omega(T_2) - \rho_\omega(T_1)] d\omega.$$

Согласно второму началу термодинамики (в формулировке Клаузиуса), невозможен самопроизвольный переход тепла от тела, менее нагретого, к телу, более нагретому (без изменения состояния всех иных тел). Это означает, что поток энергии должен быть направлен в сосуд 1, имеющий меньшую температуру (T_1), т.е. $dq > 0$. Следовательно,

$$\rho_\omega(T_1) < \rho_\omega(T_2).$$

1.2.4. Распределение энергии по длинам волн

Наряду с распределением энергии по частотам можно ввести распределение по длинам волн: $\rho_\lambda d\lambda = \rho_\omega d\omega$. При этом окажется, что

$$\rho_\lambda d\lambda = \frac{1}{\exp(2\pi c\hbar/k_B T \lambda) - 1} \frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5} d\lambda. \quad (1.2.11)$$

1.2.5. Распределение Вина

Частный случай формулы Планка, отвечающий низким температурам (высоким частотам): $\hbar\omega \gg k_B T$, называется *распределением Вина* и имеет вид

$$\rho_\omega d\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) d\omega. \quad (1.2.12)$$

1.2.6. Распределение Рэля–Джинса

Частный случай формулы Планка, отвечающий высоким температурам (низким частотам): $\hbar\omega \ll k_B T$, называется *распределением Рэля–Джинса* и имеет вид

$$\rho_\omega d\omega = k_B T \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}. \quad (1.2.13)$$

Последняя формула может быть получена из классической термодинамики на основании теоремы о равнораспределении энергии по степеням свободы. Действительно, если в единице объёма имеется всего $g(\omega)d\omega = \omega^2 d\omega / \pi^2 c^3$ различных допустимых колебательных состояний, а на каждое из них приходится энергия $k_B T$, то всего в единице объёма будет содержаться энергия $(\omega^2 d\omega / \pi^2 c^3) k_B T$, что соответствует распределению Рэля–Джинса.

Заметим следующее. При выводе распределения Планка (1.2.7) дискретность энергетических состояний была существенна. Если бы энергия могла меняться непрерывно, возникало бы иное распределение. В самом деле, в таком пределе мы должны были бы положить $E_n = n\hbar\omega$, где аргумент n меняется непрерывно в пределах $0 \leq n < \infty$ (нулевые колебания в данном подходе не рассматриваются, что формально можно сделать, сменив начало отсчёта энергии). Соответственно, заменяя суммирование интегрированием, вместо равенств (1.2.6) нужно записать следующее:

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{n=0}^{\infty} E_n N_n dn}{\int_{n=0}^{\infty} N_n dn} = \frac{\int_{n=0}^{\infty} n \hbar \omega \exp\left(-\frac{\hbar \omega}{k_B T} n\right) dn}{\int_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\hbar \omega}{k_B T} n\right) dn} = k_B T.$$

Таким образом, средняя энергия любого осциллятора не зависит от частоты и определяется только температурой. Но эта ситуация отвечает теореме классической физики о равнораспределении энергии по степеням свободы, и мы возвращаемся к распределению Рэлея–Джинса:

$$\rho_{\omega} d\omega = \langle E \rangle g(\omega) d\omega = k_B T \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}.$$

1.2.7. Закон смещения Вина

Спектральная плотность энергии ρ_{ω} как функция частоты имеет максимум (рис. 1.2.1), который находится из условия $\partial \rho_{\omega} / \partial \omega = 0$, или

$$x = 3(1 - e^{-x}), \quad x = \hbar \omega / k_B T \Rightarrow x \approx 2,82.$$

Частота, отвечающая этому максимуму, равна

$$\omega_m = 2,82 k_B T / \hbar. \quad (1.2.14)$$

Видно, что она линейно растет с температурой. Частоте ω_m отвечает длина волны $\lambda_m = 2\pi c / \omega_m$, удовлетворяющая условию

$$\lambda_m T = 0,51 \text{ см} \cdot \text{К}. \quad (1.2.15)$$

Аналогично, функция ρ_{λ} имеет максимум при значении длины волны, определяемой из равенства $\partial \rho_{\lambda} / \partial \lambda = 0$, или

$$y = 5(1 - e^{-y}), \quad y = 2\pi c \hbar / k_B T \lambda \Rightarrow y \approx 4,965.$$

Соответствующая длина волны дается формулой

$$\frac{2\pi c \hbar}{k_B T \lambda_m} = 4,965 \Rightarrow \lambda_m T = 0,29 \text{ см} \cdot \text{К}. \quad (1.2.16)$$

Полученное равенство, в частности, показывает, что температуре поверхности Солнца $T = 6000 \text{ К}$ отвечает длина волны $\lambda_m \approx 0,5 \text{ мкм}$ (зелёная линия спектра).

Соотношения (1.2.15) и (1.2.16) носят название *закона смещения Вина* и показывают, как изменяется положение максимума спектральной плотности энергии в зависимости от температуры.

1.2.8. Плотность энергии равновесного излучения

Найдём полную (по всем частотам) плотность энергии теплового излучения:

$$\rho(T) = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega = \frac{1}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\hbar \omega^3 d\omega}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1} = a T^4. \quad (1.2.17)$$

Здесь

$$a = \frac{\pi^2 k_B^4}{15 \hbar^3 c^3}. \quad (1.2.18)$$

При вычислении интеграла в (1.2.17) учтено равенство (раздел 1.2.13)

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

1.2.9. Закон Стефана–Больцмана

Поскольку для абсолютно чёрного тела испускательная способность не зависит от направления (т.е. является ламбертовским), то для него $R = \pi B$. В соответствии с законом Кирхгофа (1.1.3) и формулами (1.2.17), (1.2.18) отсюда получаем закон Стефана–Больцмана:

$$R = c \rho / 4 = \sigma T^4, \quad \sigma = c a / 4. \quad (1.2.19)$$

Величина σ называется постоянной Стефана–Больцмана:

$$\sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60 \hbar^3 c^2} = 5,67 \cdot 10^{-5} \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{К}^4}. \quad (1.2.20)$$

Соотношение (1.2.19) было установлено экспериментально Й. Стефаном в 1879 г. и теоретически получено на основе термодинамики Л. Больцманом в 1884 г.

Интенсивность равновесного излучения (т.е. количество энергии, пересекающей единичную площадку за единицу времени) можно найти из следующего. Вследствие изотропии число ударов частиц (фотонов) с частотой ω о единичную площадку в единицу времени равно $j_\omega = N_\omega c / 4$ (раздел 1.2.10). Умножая j_ω на энергию одного фотона $\hbar \omega$ и учитывая, что $\hbar \omega N_\omega = \rho_\omega$, получим плотность потока энергии (интенсивность) на частоте ω : $I_\omega = c \rho_\omega / 4$. Выполняя здесь интегрирование по всем частотам, находим полную интенсивность излучения:

$$I = c \rho / 4 = \sigma T^4. \quad (1.2.21)$$

Таким образом, интенсивность равновесного излучения с температурой T равна энергетической светимости абсолютно чёрного тела с той же температурой.

1.2.10. Плотность потока фотонов равновесного излучения

Рассмотрим столкновения фотонов равновесного излучения с неподвижной стенкой (рис. 1.2.2). Выделим группу квантов, имеющих энергию $\varepsilon = \hbar\omega$ и импульс $p = \varepsilon/c$. Их концентрацию обозначим dN_ω .

Вследствие изотропии излучения в телесный угол $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ летит доля фотонов, равная $d\Omega/4\pi$. Соответственно концентрация этих фотонов равна $dN_\omega \frac{d\Omega}{4\pi}$. За время dt до поверхности долетят кванты, удаленные от нее на расстояние $v_z dt$, где $v_z = c \cos\theta$ — компонента скорости,

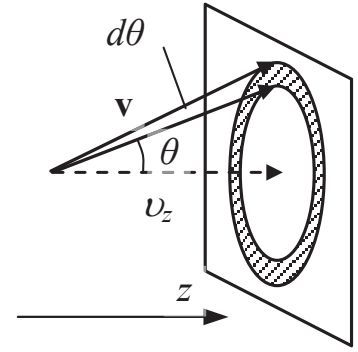


Рис. 1.2.2. Столкновения фотонов со стенкой

нормальная к поверхности (c — скорость света). Всего в площадку dS попадут фотоны, находящиеся в цилиндре объёмом $v_z dt dS$, т.е. $v_z dt dS dN_\omega \frac{d\Omega}{4\pi}$ частиц выделенной группы. Суммируя результат по всем допустимым углам ($0 < \theta < \pi/2$) и деля результат на $dt dS$, получаем

$$dj(\omega) = \int dN_\omega c \cos\theta \frac{d\Omega}{4\pi} = c \cdot dN_\omega \frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi/2} \cos\theta \cdot 2\pi \sin\theta d\theta = \frac{c}{4} dN_\omega.$$

Суммируя $dj(\omega)$ по всем частотам, получаем *плотность потока* фотонов, т.е. число частиц, пересекающих единичную площадку в единицу времени: $[j] = \text{частиц}/(\text{см}^2 \cdot \text{с})$:

$$j = Nc/4$$

(N — число фотонов в единице объёма).

1.2.11. Уравнение состояния излучения

Как и в предыдущем разделе, рассмотрим столкновения молекул газа с неподвижной стенкой (рис. 1.2.2). Выделим группу фотонов, имеющих частоту ω и концентрацию dN_ω . Вследствие изотропии в телесный угол $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ летит доля квантов, равная $d\Omega/4\pi$, а их

плотность составляет $dN_\omega \frac{d\Omega}{4\pi}$. За время dt до поверхности долетят молекулы, удаленные от нее на расстояние $v_z dt$, где $v_z = c \cos \theta$. Всего в площадку dS попадут фотоны, находящиеся в цилиндре объемом $v_z dt dS$, содержащем $v_z dt dS dN_\omega \frac{d\Omega}{4\pi}$ квантов выделенной группы. Каждый фотон при упругом столкновении со стенкой передаст ей импульс $2p_z = (2\hbar\omega/c) \cos \theta$. Поэтому импульс, сообщаемый площадке за время dt , составляет

$$\Delta p_z^{(tot)} = \left(\frac{2\hbar\omega}{c} \cos \theta \right) \left(v_z dt dS dN_\omega \frac{d\Omega}{4\pi} \right).$$

Суммируя $\Delta p_z^{(tot)}$ по всем допустимым углам ($0 < \theta < \pi/2$) и деля результат на $dS dt$, получаем вклад в давление, производимый выбранной группой фотонов:

$$\begin{aligned} dP(\omega) &= \int dN_\omega c \cos \theta \cdot \frac{2\hbar\omega}{c} \cos \theta \frac{d\Omega}{4\pi} = \\ &= dN_\omega \cdot \hbar\omega \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{1}{3} dN_\omega \cdot \hbar\omega. \end{aligned}$$

Учтём, что $dN_\omega \cdot \hbar\omega = \rho_\omega d\omega$, где ρ_ω — спектральная плотность энергии излучения. Поэтому, суммируя результат по всем частотам, получаем уравнение состояния равновесного излучения:

$$P = \rho/3. \quad (1.2.22)$$

1.2.12. Термодинамика равновесного излучения

Получим температурную зависимость плотности энергии равновесного излучения, используя законы термодинамики.

Фотоны — это частицы, движущиеся со скоростью $v = c$. Поэтому давление фотонного газа связано с плотностью энергии соотношением (1.2.22): $P = \rho/3$.

Для равновесного излучения плотность энергии есть функция только температуры. Следовательно, внутренняя энергия излучения, находящегося в объеме V , равна

$$U(T, V) = \rho(T)V. \quad (1.2.23)$$

Найдём зависимость ρ от температуры. Используем основное термодинамическое соотношение

$$TdS = dU + PdV,$$

где S — энтропия, P — давление, V — объём. С другой стороны, считая $U = U(T, V)$, можем записать

$$TdS = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT + \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P \right] dV.$$

Полагая здесь $dT = 0$, имеем

$$T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P.$$

Воспользуемся далее тождеством Максвелла. Именно, для свободной энергии $F = U - TS$ справедливо равенство $dF = -SdT - PdV$. Поэтому $S = -(\partial F / \partial T)_V$, $P = -(\partial F / \partial V)_T$, откуда следует тождество: $(\partial S / \partial V)_T = (\partial P / \partial T)_V$. Таким образом, получаем

$$T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P.$$

Подстановка сюда выражений (1.2.22) и (1.2.23) для давления P и энергии U равновесного излучения приводит к дифференциальному уравнению:

$$T \frac{1}{3} \frac{d\rho}{dT} = \rho + \frac{1}{3} \rho, \text{ или } \frac{d\rho}{dT} = \frac{4\rho}{T}.$$

Решение полученного уравнения имеет вид

$$\rho = aT^4. \quad (1.2.24)$$

Константа a не может быть определена методами только одной термодинамики.

Таким образом, методы термодинамики приводят к той же температурной зависимости плотности энергии излучения, что и статистические методы (раздел 1.2.8).

Для изотропного газа плотность потока энергии даётся формулой

$$q = \frac{1}{4} N \langle \varepsilon v \rangle, \quad (1.2.25)$$

где N — концентрация частиц (част./см³), v — скорость частиц, ε — энергия, приходящаяся на частицу, а угловые скобки означают усреднение по статистическому распределению частиц. Для газа фотонов (све-

та) величина q совпадает с интенсивностью излучения I . Поскольку $\nu = c$, а величина $N \langle \varepsilon \rangle = \rho$ есть плотность энергии, то

$$I = \frac{c\rho}{4} = \frac{ca}{4} T^4. \quad (1.2.26)$$

Сравнение этого равенства с соотношением (1.2.21) $I = \sigma T^4$ позволяет выразить константу a через постоянную Стефана–Больцмана σ :

$$a = 4\sigma/c.$$

1.3. Дополнение: некоторые интегралы

В расчётах с использованием распределений Планка и Ферми встречаются интегралы $\int_0^\infty x^{\alpha-1} (e^x \pm 1)^{-1} dx$. Эти интегралы выражаются через специальные функции — дзета-функцию Римана $\zeta(\alpha)$ и гамма-функцию $\Gamma(\alpha)$ — формулами

$$\int_0^\infty \frac{x^{\alpha-1}}{e^x - 1} dx = \Gamma(\alpha)\zeta(\alpha), \quad \int_0^\infty \frac{x^{\alpha-1}}{e^x + 1} dx = (1 - 2^{1-\alpha})\Gamma(\alpha)\zeta(\alpha), \quad \operatorname{Re} \alpha > 1.$$

Дзета-функция определяется рядом

$$\zeta(\alpha) = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^\alpha}, \quad \operatorname{Re} \alpha > 1.$$

Частные значения:

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}, \quad \zeta(6) = \frac{\pi^6}{945};$$

$$\zeta(3/2) = 2,612, \quad \zeta(5/2) = 1,341, \quad \zeta(3) = 1,202, \quad \zeta(5) = 1,0369.$$

Гамма-функция определяется равенствами

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt, \quad \Gamma(z+1) = z\Gamma(z).$$

Для целочисленных значений аргумента справедливо представление

$$\Gamma(n) = (n-1)!.$$

Частные значения:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(1) = 1, \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \Gamma(2) = 1; \quad \Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin \pi x}.$$

Глава 2. СПОНТАННОЕ И ВЫНУЖДЕННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. ЛАЗЕРЫ

2.1. Спонтанное и вынужденное излучение

2.1.1. Спонтанные и вынужденные переходы

Пусть имеется идеальный газ, состоящий из одинаковых атомов, каждый из которых может находиться в одном из двух состояний — с энергией E_1 или энергией E_2 , $E_2 > E_1$ (рис. 2.1.1). Такой газ будем называть *двухуровневой средой*. Обозначим число атомов (в единице объёма среды) в нижнем состоянии N_1 , а в верхнем — N_2 .

Атом, находящийся на уровне E_2 , может *самопроизвольно* перейти в нижнее энергетическое состояние (E_1), испустив квант света с энергией $E = E_2 - E_1$ и частотой $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$. Так формируется *спонтанное излучение*. Спонтанные переходы с нижнего уровня (E_1) на верхний (E_2) запрещены законом сохранения энергии.

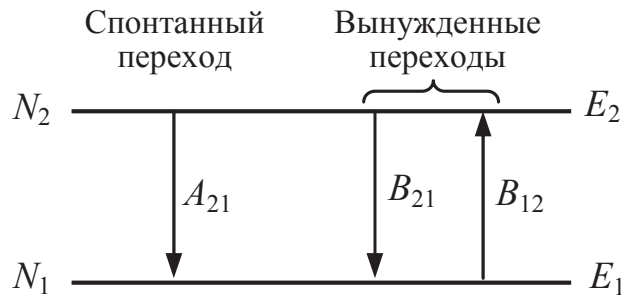


Рис. 2.1.1. Спонтанные и вынужденные переходы в двухуровневой системе. Рядом со стрелками указаны коэффициенты Эйнштейна, описывающие соответствующие переходы

Число самопроизвольных переходов $E_2 \rightarrow E_1$ в единицу времени пропорционально числу атомов в состоянии с энергией E_2 :

$$\left(\frac{dN_2}{dt} \right)_{\text{сп}} = -A_{21}N_2. \quad (2.1.1)$$

Коэффициент A_{21} имеет смысл вероятности спонтанного перехода $E_2 \rightarrow E_1$ отдельного атома в единицу времени. Если τ — характерное время перехода, то $A_{21} = 1/\tau$. С величиной A_{21} связана эффективная ширина уровня E_2 : $\Gamma = \hbar/\tau$, или *естественная ширина* спектральной линии.

Поскольку полное число атомов не меняется: $N_1 + N_2 = N = \text{const}$, то вытекающее из (2.1.1) равенство

$$\left(\frac{dN_1}{dt} \right)_{\text{сп}} = A_{21}N_2 \quad (2.1.2)$$

определяет темп образования атомов в состоянии E_1 за счёт спонтанных переходов.

Если в среде присутствует излучение с частотой ω , то атом в состоянии E_1 может поглотить квант $\hbar\omega$ и перейти в состояние E_2 . Наоборот, если атом находился в состоянии E_2 , то в результате взаимодействия с излучением он может перейти в нижнее состояние E_1 . При этом испускается квант света с энергией $\hbar\omega$. Последний процесс называется *вынужденным испусканием* света. Оба указанных процесса обусловлены взаимодействием атомов с имеющимся в среде излучением и поэтому называются *вынужденными переходами*.

Вероятность вынужденных переходов пропорциональна как числу атомов в начальном состоянии, так и числу имеющихся фотонов (т.е. плотности энергии излучения ρ_ω на резонансной частоте ω , отвечающей рассматриваемому переходу). Имея в виду, что уход атома из одного состояния означает его приход в другое состояние, можем записать следующие равенства:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dN_1}{dt} \right)_{\text{вын}} &= -B_{12}\rho_\omega N_1 + B_{21}\rho_\omega N_2, \\ \left(\frac{dN_2}{dt} \right)_{\text{вын}} &= -B_{21}\rho_\omega N_2 + B_{12}\rho_\omega N_1. \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

Коэффициенты B_{12} и B_{21} описывают *вынужденные* переходы соответственно $E_1 \rightarrow E_2$ и $E_2 \rightarrow E_1$ и называются *коэффициентами Эйнштейна*. Они не зависят от температуры среды и определяются лишь свойствами отдельных атомов.

Полная скорость изменения населённости N_1 уровня E_1 за счёт указанных процессов определяется уравнением

$$\frac{dN_1}{dt} = \left(\frac{dN_1}{dt} \right)_{\text{сп}} + \left(\frac{dN_1}{dt} \right)_{\text{вын}} = A_{21}N_2 + B_{21}\rho_\omega N_2 - B_{12}\rho_\omega N_1. \quad (2.1.4)$$

Аналогично записывается уравнение для скорости изменения населённости N_2 уровня E_2 :

$$\frac{dN_2}{dt} = -A_{21}N_2 - B_{21}\rho_\omega N_2 + B_{12}\rho_\omega N_1.$$

В состоянии равновесия $dN_1/dt = 0$, или

$$A_{21}N_2 + B_{21}\rho_\omega N_2 = B_{12}\rho_\omega N_1. \quad (2.1.5)$$

2.1.2. Вывод формулы Планка

Представление о спонтанных и вынужденных переходах позволяет дать альтернативный вывод формулы Планка.

Рассмотрим состояние равновесия. При высоких температурах плотность энергии излучения ρ_ω велика, так что из (2.1.5) следует $B_{21}N_2 = B_{12}N_1$. В соответствии с распределением Больцмана¹

$$N_i = Ag_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) \quad (2.1.6)$$

при $T \rightarrow \infty$ находим $N_2/N_1 = g_2/g_1$. Здесь g_i — кратность вырождения уровня E_i ($i = 1, 2$). В рассматриваемом пределе плотность энергии излучения велика ($\rho \rightarrow \infty$). Поэтому в (2.1.4) можно пренебречь вкладом спонтанных переходов ($A_{21}N_2$) по сравнению с вкладом вынужденных переходов ($B_{12}\rho_\omega N_1$, $B_{21}\rho_\omega N_2$). В результате получаем соотношение между коэффициентами Эйнштейна:

$$B_{21}g_2 = B_{12}g_1. \quad (2.1.7)$$

Решим уравнение (2.1.5) относительно ρ_ω :

$$\rho_\omega = \frac{A_{21}N_2}{B_{12}N_1 - B_{21}N_2} = \frac{A_{21}}{B_{21}} \frac{1}{(B_{21}/B_{12})(N_1/N_2) - 1}.$$

Подставляя сюда (2.1.6) и (2.1.7), получим

$$\rho_\omega = \frac{A_{21}}{B_{21}} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} = \frac{A_{21}}{B_{21}} n(\omega). \quad (2.1.8)$$

При высоких температурах отсюда следует

¹ Здесь и далее везде, где это не может вызвать конфликта обозначений, мы используем для постоянной Больцмана символ k (без индекса «Б»).

$$\rho_{\omega} = \frac{A_{21}}{B_{21}} \frac{kT}{\hbar\omega}. \quad (2.1.9)$$

Поскольку при таких температурах должно выполняться распределение

Рэля—Джинса: $\rho_{\omega} d\omega = kT \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$, то из (2.1.9) находим:

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}. \quad (2.1.10)$$

Окончательно получаем *формулу Планка* для спектральной плотности энергии равновесного излучения:

$$\rho_{\omega} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}. \quad (2.1.11)$$

Заметим, что в соответствии с (2.1.8) отношение вероятностей вынужденного и спонтанного излучения (в единицу времени) равно

$$\frac{(dN_2/dt)_{\text{вын}}}{(dN_2/dt)_{\text{сп}}} = \frac{B_{21}\rho_{\omega}N_2}{A_{21}N_2} = n(\omega), \quad (2.1.12)$$

где $n(\omega)$ — число фотонов в одном квантовом состоянии с энергией $\hbar\omega$, даваемое распределением Планка $n(\omega) = [\exp(\hbar\omega/kT) - 1]^{-1}$.

С точки зрения классической электродинамики механизм вынужденного испускания состоит в следующем. Под действием электромагнитного поля электрон атома совершает вынужденные колебания с частотой ω , в результате чего он излучает электромагнитные волны с той же частотой. Поскольку амплитуда колебаний электрона пропорциональна напряженности электрического поля *имеющегося* излучения ($a \sim E$), а интенсивность испускаемого излучения пропорциональна квадрату амплитуды колебаний ($I \sim a^2$), то интенсивность вынужденного излучения пропорциональна плотности энергии излучения ($I \sim E^2 \sim \rho$).

В результате вынужденного испускания возникает излучение с теми же частотой, фазой и направлением, что и у исходного излучения, тогда как в случае спонтанного испускания меняются, по крайней мере, фаза и направление.

2.2. Прохождение света через двухуровневую среду

2.2.1. Коэффициенты поглощения и усиления

Пусть в среде, состоящей из двухуровневых атомов, распространяется излучение вдоль оси x . Найдём закон изменения количества когерентного излучения в среде, создаваемого за счёт вынужденного испускания. Обозначим числа атомов в единице объёма вещества в состояниях E_1 и E_2 соответственно N_1 и N_2 , а число фотонов в единице объёма — N_ϕ .

Изменение числа квантов за время dt , т.е. на участке траектории $dx = cdt$, равно

$$\begin{aligned} dN_\phi &= dN_\phi^{(-)} + dN_\phi^{(+)} = \\ &= -B_{12}\rho_\omega N_1 \frac{dx}{c} + B_{21}\rho_\omega N_2 \frac{dx}{c} = \left[\frac{N_2}{g_2} - \frac{N_1}{g_1} \right] B_{21}g_2\rho_\omega \frac{dx}{c}. \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

Первое слагаемое описывает убыль числа фотонов за счёт вынужденного поглощения, а второе — генерацию за счёт вынужденного испускания. Спонтанная часть возникшего излучения не учитывается, поскольку она не когерентна излучению, генерируемому при вынужденном испускании. Использовано соотношение $B_{21}g_2 = B_{12}g_1$ между коэффициентами Эйнштейна. Введём плотность потока энергии (интенсивность) излучения

$$I = \rho c = N_\phi \cdot \hbar\omega \cdot c.$$

Входящая сюда плотность энергии излучения ρ связана со спектральной плотностью ρ_ω соотношением $\rho = \rho_\omega \Delta\omega$, где $\Delta\omega$ — ширина спектра. Если считать, что $\Delta\omega$ определяется только естественной шириной линии, то можно положить $\Delta\omega = A_{21}$. В реальных веществах такое приближение может оказаться несправедливым, поскольку на ширину спектра $\Delta\omega$ влияют многие иные факторы.

Умножая обе стороны равенства (2.2.1) на $\nu\hbar\omega$, получим уравнение

$$dI = \alpha I dx, \quad (2.2.2)$$

где введено обозначение

$$\alpha = \frac{\hbar\omega}{\nu} \frac{B_{21}}{\Delta\omega} g_2 \left(\frac{N_2}{g_2} - \frac{N_1}{g_1} \right) \equiv \sigma \Delta N, \quad \Delta N = \frac{N_2}{g_2} - \frac{N_1}{g_1}. \quad (2.2.3)$$

При $\alpha = \text{const}$ из (2.2.2) следует соотношение

$$I = I_0 e^{\alpha x}. \quad (2.2.4)$$

Поскольку величины N_1 , N_2 имеют размерность $[N_i] = \text{см}^{-3}$, то размерность коэффициента σ есть $[\sigma] = \text{см}^2$. Поэтому данная величина называется *сечением вынужденного перехода*. В частном случае $g_1 = g_2 = 1$ и $\Delta\omega = A_{21}$ из (2.2.4) находим

$$\sigma = \frac{\hbar\omega}{c} \frac{B_{21}}{A_{21}} = \frac{\hbar\omega}{c} \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} = \frac{\pi^2 c^2}{\omega^2} = \frac{\lambda^2}{4}.$$

Например, при $\lambda = 1 \text{ мкм}$ находим $\sigma = 2,5 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2$.

Если $\alpha < 0$, то число фотонов в среде уменьшается. В этом случае величину $\beta = -\alpha > 0$ называют *коэффициентом поглощения* (затухания), причём

$$I = I_0 e^{-\beta x}. \quad (2.2.5)$$

Это соотношение, называемое *законом Бугера–Ламберта–Бера*, экспериментально открыл П. Бугер (1729 г.) и подробно исследовал И. Г. Ламберт (1760 г.). А. Бер (1852 г.) установил зависимость коэффициента поглощения β от концентрации N поглощающего вещества:

$$\beta = \sigma N.$$

В противоположном случае $\alpha > 0$ число фотонов в среде экспоненциально растёт. Тогда о величине α говорят как о *коэффициенте усиления*.

2.2.2. Пример: коэффициент поглощения двухуровневой системы

Пусть излучение малой интенсивности распространяется в двухуровневой среде. Известно, что коэффициент поглощения этой среды при температуре $T = 0$ равен $\beta|_{T=0} = \beta_0$. Требуется найти зависимость этого коэффициента от температуры. Считаем $g_1 = g_2 = 1$.

Поскольку интенсивность излучения мала, то можно пренебречь вынужденными переходами, обусловленными самим излучением. Тогда населённость уровней определяется только температурой среды. В частности, при $T = 0$ имеем $N_2 = 0$, $N_1 = N_0$, где N_0 — концентрация атомов среды. Из (2.2.3) находим $\beta_0 = -\alpha = \sigma N_0$.

При температуре $T > 0$ населённость уровней определяется распределением Больцмана:

$$N_1 = A \exp(-E_1/kT), \quad N_2 = A \exp(-E_2/kT).$$

Здесь A — нормировочная постоянная, значение которой можно найти из условия: $N_1 + N_2 = N_0$. Это даёт

$$A = \frac{N_0}{\exp(-E_1/kT) + \exp(-E_2/kT)}.$$

Отсюда находим населённости уровней:

$$N_1 = N_0 \frac{\exp(-E_1/kT)}{\exp(-E_1/kT) + \exp(-E_2/kT)},$$

$$N_2 = N_0 \frac{\exp(-E_2/kT)}{\exp(-E_1/kT) + \exp(-E_2/kT)}.$$

Полагая $E_2 - E_1 = \hbar\omega$, перепишем эти выражения в виде

$$N_1 = N_0 \frac{\exp(\hbar\omega/kT)}{1 + \exp(\hbar\omega/kT)}, \quad N_2 = N_0 \frac{1}{1 + \exp(\hbar\omega/kT)}.$$

Таким образом, получаем искомую формулу:

$$\beta = \sigma(N_1 - N_2) = \sigma N_0 \frac{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}{\exp(\hbar\omega/kT) + 1} = \beta_0 \operatorname{th} \left(\frac{\hbar\omega}{2kT} \right).$$

В предельном случае высоких температур ($kT \gg \hbar\omega$) отсюда следует,

что $\beta = \beta_0 \frac{\hbar\omega}{2kT}$. В обратном предельном случае низких температур

($kT \ll \hbar\omega$) получаем $\beta = \beta_0 [1 - 2 \exp(-\hbar\omega/kT)]$.

2.3. Методы создания инверсной населённости

2.3.1. Инверсная населённость

Как следует из (2.2.1), для усиления излучения необходимо

$$\frac{N_2}{g_2} - \frac{N_1}{g_1} > 0, \quad \text{или} \quad \frac{N_2}{N_1} > \frac{g_2}{g_1}.$$

Данное неравенство называют *условием инверсной населённости*. В частном случае, когда $g_1 = g_2$, оно означает, что для усиления число атомов на верхнем уровне должно быть больше, чем на нижнем: $N_2 > N_1$.

В состоянии термодинамического равновесия в соответствии с распределением Больцмана:

$$N_i = Ag_i \exp(-E_i/kT)$$

выполняется противоположное неравенство. Следовательно, в равновесной среде усиление излучения невозможно.

2.3.2. Трёхуровневая схема

Для создания инверсной населённости уровней используют трёхуровневую (рис. 2.3.1) и четырёхуровневую (рис. 2.3.2) схемы.

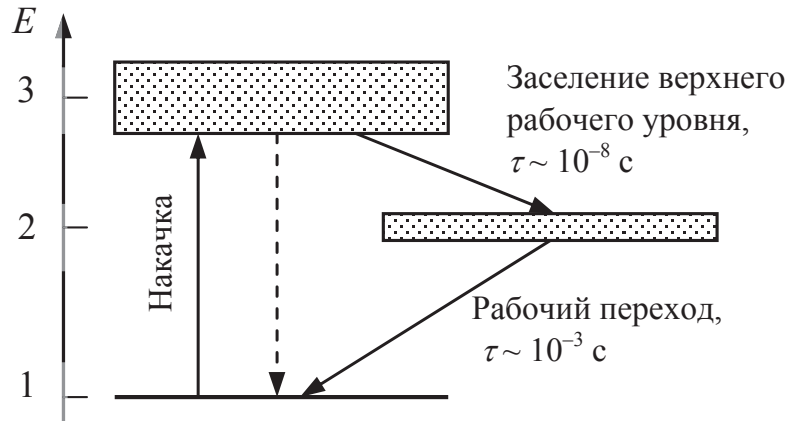


Рис. 2.3.1. Трёхуровневая схема

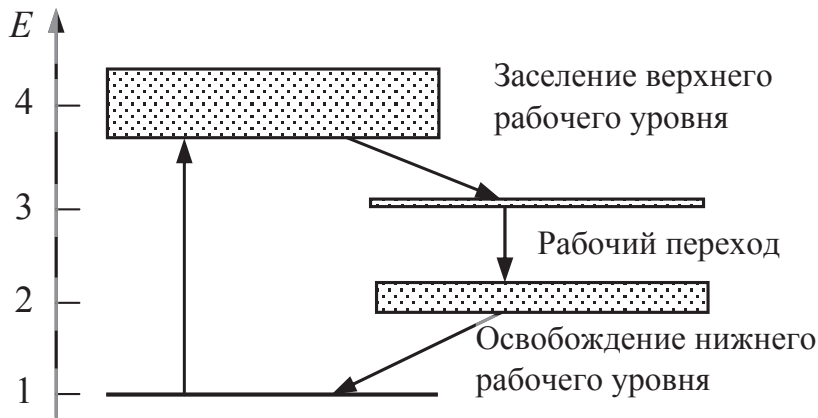


Рис. 2.3.2. Четырёхуровневая схема

На основе трёхуровневой схемы можно получать лишь отдельные импульсы генерации, поскольку при непрерывной накачке система приходит в состояние равновесия, инверсия населённостей уровней 2 и 1 пропадает и оказывается $N_1 > N_2$. Дело в том, что ширина уровня 2 конечная, а уровня 1 — нулевая (поскольку это основное состояние и переходы из него в более низкие состояния невозможны). В результате происходит накопление атомов на уровне 1.

2.3.3. Четырёхуровневая схема

В четырёхуровневой схеме можно осуществлять непрерывную генерацию излучения (используя непрерывную накачку), поскольку уровень 2 опустошается очень быстро (вследствие его большой ширины по сравнению с уровнем 3), и между уровнями 2 и 3 всегда будет существовать инверсия населённостей.

К рассмотренным выше трёх- и четырёхуровневым схемам сводятся (в той или иной степени) все применяемые методы создания инверсной населённости уровней.

2.4. Лазеры

Слово «лазер» составлено из первых букв слов, указывающих на принцип работы устройства:

LASER = Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation (усиление света посредством вынужденного испускания излучения).

Лазеры называют также *оптическими квантовыми генераторами* (ОКГ).

2.4.1. Некоторые типы лазеров

Первый лазер был создан Т. Мейманом в 1960 г. Активной средой являлся рубин — корунд (Al_2O_3), в котором 0,05% ионов Al^{3+} заменена ионами Cr^{3+} . Схема уровней рубина показана на рис. 2.4.1. Рабочим является переход с уровня R в основное состояние (уровень 1). Обозначения уровней R , U , B , Y происходят от букв слова «RUBY» — «рубин».

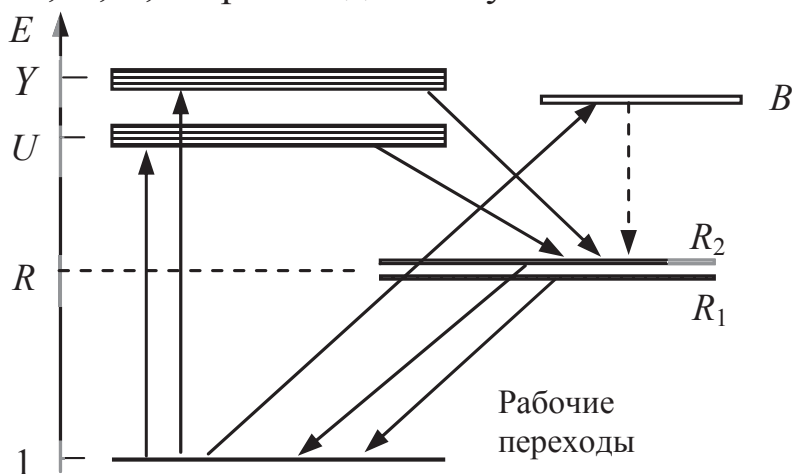


Рис. 2.4.1. Схема энергетических уровней и переходов в рубиновом лазере

Основным переходам $1 \rightarrow U$ и $1 \rightarrow Y$, обеспечивающим накачку лазера, соответствуют длины волн $\lambda \approx 560$ нм (U) (зелёная линия) и $\lambda \approx 410$ нм (Y) (фиолетовая линия).

Время жизни уровней U , B и Y мало (порядка 10^{-8} с), это широкие уровни. Время же жизни уровня R велико (порядка 10^{-3} с), это узкий, метастабильный уровень.

Переходы с уровней Y , B и U на уровень R — безызлучательные. В этих переходах энергия превращается в энергию колебаний решётки.

Уровень R представляет собой систему двух узких близко расположенных уровней R_1 и R_2 . Поэтому при переходах с этих уровней в основное состояние 1 возникают две линии с длинами волн $\lambda_1 = 694,3$ нм ($R_1 \rightarrow 1$) и $\lambda_2 = 692,3$ нм ($R_2 \rightarrow 1$). Инверсия населённости, приводящая к генерации излучения, создаётся именно между уровнем R и основным состоянием 1.

Большинство современных лазеров работают по четырёхуровневой схеме. К ним относятся, в частности, такие твердотельные лазеры, как лазер на неодимовом стекле, или ИАГ-лазер ($\text{Nd}^{3+}:\text{YAG}$ -лазер; аббревиатура YAG расшифровывается как иттрий-алюминиевый гранат). Рабочее тело представляет собой кристалл граната, в котором часть ионов Y^{3+} замещена ионами неодима, $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12} + 1,5\% \text{Nd}^{3+}$. Основная длина волны излучения этого лазера есть $\lambda = 1,06$ мкм.

В качестве ещё одного примера упомянем гелий-неоновый (He–Ne) лазер. Схема уровней и переходы, приводящие к генерации излучения, показаны на рис. 2.4.2.

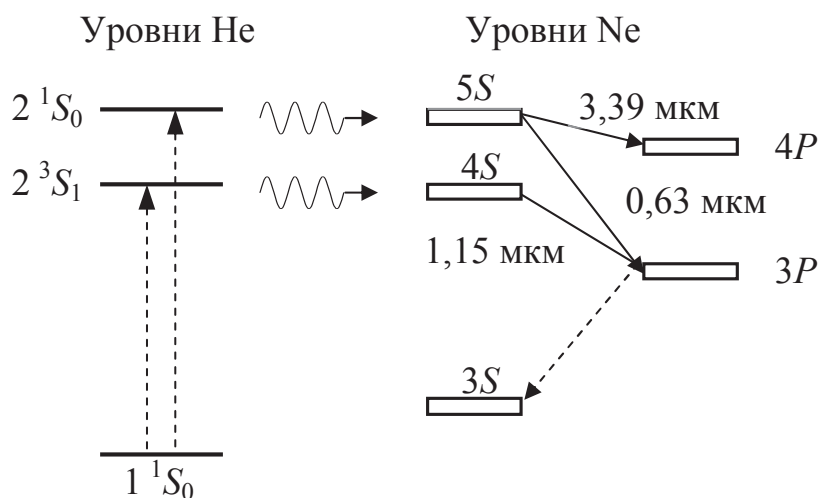


Рис. 2.4.2. Схема уровней гелия и неона. Возбужденным состояниям гелия соответствуют энергии 19,82 эВ и 20,61 эВ. Уровни гелия 2^3S_1 и 2^1S_0 — метастабильные с временем жизни порядка 1 мс. Уровни неона $4S$ и $5S$ близки к уровням 2^3S_1 и 2^1S_0 гелия, что позволяет осуществлять эффективную перекачку энергии от гелия к неону при столкновении атомов

Внешний источник возбуждает атомы гелия, которые в свою очередь в результате столкновений передают свою энергию атомам неона:

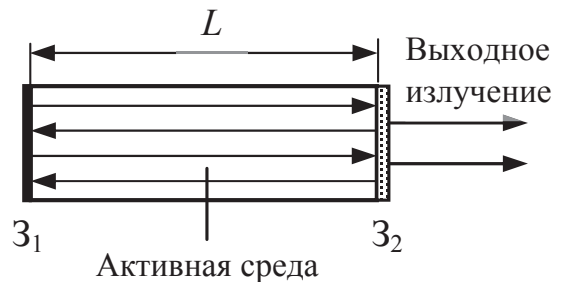
$\text{He}^* + \text{Ne} \rightarrow \text{He} + \text{Ne}^* + \Delta E_{\text{кин}}$. Рабочие переходы происходят между уровнями Ne. Основной переход отвечает длине волны $\lambda = 0,63$ мкм (в красной области спектра).

Среди других ОКГ укажем CO_2 -лазеры, позволяющие получать непрерывное излучение большой мощности ($10^2 \div 10^3$ киловатт) в инфракрасном диапазоне спектра ($\lambda = 10,6$ мкм и $\lambda = 9,6$ мкм). В этих лазерах излучение генерируется при переходах между колебательными уровнями молекулы CO_2 . Для накачки лазера в газ добавляется азот, который возбуждается электрическим разрядом, а затем передает энергию молекулам CO_2 . Кроме того, в газовую смесь добавляется гелий, который позволяет эффективно осуществлять опустошение нижнего колебательного уровня молекул CO_2 . Типичное соотношение концентраций компонентов смеси составляет $\text{CO}_2 : \text{N}_2 : \text{He} = 1 : 1 : 8$.

2.4.2. Порог генерации

Типичная схема лазера показана на рис. 2.4.3. Активная среда находится между зеркалами Z_1 и Z_2 , образующими резонатор лазера. Зеркало Z_2 полупрозрачное, и через него излучение частично выходит из резонатора. Благодаря зеркалам излучение многократно проходит резонатор, в результате чего достигается достаточно полное превращение закачанной в среду энергии в энергию лазерного излучения.

Рис. 2.4.3. Схема лазера. Z_1 — глухое зеркало, Z_2 — полупрозрачное зеркало. Зеркала ограничивают резонатор, по которому многократно проходит свет (как показано линиями со стрелками). Часть излучения выходит через зеркало Z_2



Даже при наличии инверсии населённостей уровней генерация может не начаться, если потери энергии излучения слишком велики. Получим простейшую оценку порога генерации. Пусть R_1 и R_2 — коэффициенты отражения зеркал Z_1 и Z_2 , а I_0 — начальная интенсивность излучения (у зеркала Z_2). Тогда при однократном проходе по резонатору ($Z_2 \rightarrow Z_1$) интенсивность излучения составит $I_0 e^{\alpha L}$. После отражения от зеркала Z_1 в резонаторе останется $I' = I_0 e^{\alpha L} R_1$, а после повторного прохождения резонатора ($Z_1 \rightarrow Z_2$) и отражения от зеркала Z_2 останется

$$I'' = I' e^{\alpha L} R_2 = I_0 e^{2\alpha L} R_1 R_2.$$

Условие усиления состоит в том, что $I'' > I_0$

$$I_0 e^{2\alpha L} R_1 R_2 > I_0 \Rightarrow \alpha > \frac{1}{2L} \ln \left(\frac{1}{R_1 R_2} \right).$$

Таким образом, для начала генерации коэффициент усиления должен превышать некоторое критическое значение.

2.4.3. Резонатор

Помимо обеспечения достаточно полного съёма энергии накачки активной среды, резонатор может использоваться для выделения узких спектральных линий. Так же, как интерферометр Фабри–Перо, резонатор прозрачен для длин волн излучения, удовлетворяющих условию $m\lambda = 2L$ (рис. 2.4.4).

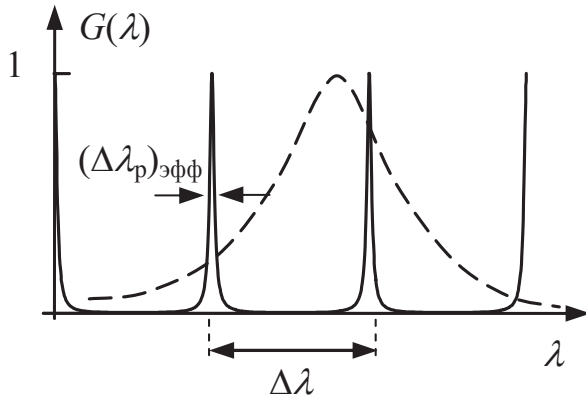


Рис. 2.4.4. Функция пропускания интерферометра Фабри–Перо. Штриховой линией показан естественный (лоренцевский) контур линии

Интервал между пропускаемыми длинами волн составляет $\Delta\lambda \approx \lambda^2/2L$, а эффективная ширина линии излучения, выходящего из резонатора, равна $\Delta\lambda_{\text{эфф}} = \lambda/Q$. Эта формула следует из определения добротности: $Q = \omega/\Delta\omega$, преобразованного с помощью равенства $\Delta\omega/\omega = \Delta\lambda/\lambda$, вытекающего из связи $\omega = 2\pi c/\lambda$. Добротность резонатора оценивается по формуле $Q = \frac{L}{\lambda} \cdot \frac{4\pi}{1 - R_1 R_2}$. Отсюда следует, что в

случае резонаторов с высокой добротностью ($Q > 10^9$) лазер может генерировать узкие линии, имеющие ширину много меньше естественной ширины.

2.4.4. Добротность резонатора

Найдём добротность открытого объёмного резонатора, образованного двумя плоскими параллельными зеркалами с коэффициентом от-

ражения R , близким к единице, $1 - R \ll 1$. Будем считать, что $L \gg \lambda$, где L — расстояние между зеркалами, λ — длина волны. Кроме того, предполагаем, что потери энергии обусловлены только выходом излучения из резонатора вследствие частичной прозрачности зеркал.

Для нахождения добротности воспользуемся формулой

$$Q = 2\pi \frac{E_0}{\Delta E}, \quad (2.4.1)$$

где E_0 — энергия, накопленная в резонаторе на некоторый момент времени, ΔE — энергия, теряемая за период колебаний поля.

В указанных предположениях с достаточной точностью можно считать, что в резонаторе устанавливается стоячая волна, эквивалентная суперпозиции двух одинаковых бегущих волн, распространяющихся навстречу друг другу. Если поток энергии в каждой из этих волн равен P , то энергия, накопленная в резонаторе, равна

$$E_0 = 2Pl/c. \quad (2.4.2)$$

Мощность потерь составляет при этом $(1 - R)2P$. Тогда за период колебаний T теряется энергия

$$\Delta E = 2P(1 - R)T. \quad (2.4.3)$$

Поскольку

$$\lambda = cT, \quad (2.4.4)$$

то применение формулы (2.4.1) даёт

$$Q = 2\pi \frac{E_0}{\Delta E_0} = 2\pi \frac{L}{\lambda} \cdot \frac{1}{1 - R}. \quad (2.4.5)$$

2.4.5. Функция пропускания резонатора

Найдём зависимость пропускания резонатора от его размеров и длины волны.

Рассмотрим резонатор как систему из двух одинаковых плоских параллельных частично прозрачных зеркал, на одно из которых из внешней среды падает излучение по нормали к поверхности. Будем считать, что потери и генерация излучения в объёме резонатора пренебрежимо малы: его энергия в резонаторе может меняться только за счёт прохождения через границы (зеркала). Формально это учитывается неравенством $R < 1$.

Если напряжённость поля, падающего на резонатор, равна $E_{\text{вх}} = E_0$, то после прохождения первого зеркала амплитуда составит $E_0 d$, где d — амплитудный коэффициент прохождения зеркала. Далее

волна проходит многократно внутри резонатора, отражаясь от зеркал и частично выходя через зеркала.

На выходе из этой системы (после второго зеркала) поле есть суперпозиция волн, прошедших расстояние между зеркалами один раз, три раза, пять раз и т.д. многократно. Эти волны испытали отражения от зеркал соответственно два раза, четыре раза, шесть раз и т.д. В итоге поле на выходе определяется суммой

$$E_{\text{вых}} = E_0(1 - R) \left[1 + R \exp(-2ikL) + R^2 \exp(-4ikL) + \dots \right]. \quad (2.4.6)$$

Коэффициент $(1 - R)$ равен квадрату модуля амплитудного коэффициента пропускания d одного зеркала: $1 - R = d^2$ и возникает вследствие того, что после прохождения второго зеркала амплитуда волны приобретает дополнительный множитель d . Поскольку коэффициент R равен квадрату модуля амплитудного коэффициента отражения от одного зеркала: $R = r^2$, то в соответствии с законом сохранения $r^2 + d^2 = 1$ находим: $d^2 = 1 - r^2 = 1 - R$.

Коэффициент R входит в формулу (2.4.6) в разных степенях в соответствии с тем, что за каждый полный цикл распространения излучения между зеркалами («туда» и «обратно») оно испытывает двукратное отражение, причём однократное отражение учитывается амплитудным коэффициентом отражения r : $r^2 = R$.

Соответствующие показатели степени (R, R^2, R^3, \dots и т.д.) указывают номер такого цикла. Возникновение фазовых сдвигов на каждом из циклов учитывается степенью экспоненты $\exp(-2ikL)$, где k — волновое число: $k = \omega/c = 2\pi/\lambda$.

Так как $R < 1$, то геометрическая прогрессия в (2.4.6) легко суммируется, что даёт комплексный коэффициент пропускания по напряжённости поля:

$$\Gamma = \frac{E_{\text{вых}}}{E_{\text{вх}}} = (1 - R) \frac{\exp(ikL)}{1 - R \exp(-2ikL)}. \quad (2.4.7)$$

Коэффициент передачи по мощности (или *функция пропускания резонатора*)

$$G = \frac{I_{\text{вых}}}{I_{\text{вх}}} = |\Gamma|^2 = \frac{(1 - R)^2}{1 - 2R \cos(2kL) + R^2} \quad (2.4.8)$$

дает спектральную зависимость пропускания при нормальном падении излучения на зеркало. График функции $G(\lambda)$ показан на рис. 2.4.4.

В резонансе, т.е. при условии

$$\cos 2kL = 1 \Rightarrow kL = \pi m, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.9)$$

имеем $G = 1$. Это означает, что вне зависимости от степени связи резонатора с внешним пространством, т.е. при любом коэффициенте пропускания зеркала $1 - R$, коэффициент пропускания в резонансе равен единице, лишь бы не было иных, не учтённых в задаче потерь энергии.

Заметим также, что условие резонанса (2.4.9) эквивалентно известному условию возникновения стоячих волн:

$$L/\lambda = m/2, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.10)$$

Глава 3. ФОНОНЫ. МОДЕЛЬ ДЕБАЯ

3.1. Кристаллы

3.1.1. Типы химической связи

Атомы могут образовывать соединения (молекулы, конденсированное вещество) за счёт различных типов химической связи. Выделяют четыре основных типа связей: 1) *ван-дер-ваальсова*, 2) *ионная* (или *гетерополярная*), 3) *ковалентная* (или *гомеополярная*), 4) *металлическая*.

1. Ван-дер-ваальсовы силы притяжения действуют между нейтральными атомами и обуславливают существование молекулярных кристаллов (например, органических соединений). Они возникают вследствие деформации электронных оболочек атомов и формирования атомных диполей (рис. 3.1.1) и вызванного этим диполь-дипольного взаимодействия.

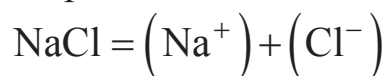


Рис. 3.1.1. Ван-дер-ваальсово взаимодействие нейтральных атомов

Зависимость силы взаимодействия от расстояния нетрудно установить следующим образом. Пусть у одного из атомов возник дипольный момент p_1 . На расстоянии r создаваемое им поле составляет $E \sim p_1/r^3$. Это поле индуцирует дипольный момент второго атома: $p_2 \sim a^3 E \sim (a/r)^3 p_1$, где a — эффективный радиус атома. Поскольку потенциальная энергия взаимодействия диполей есть $U \sim p_1 p_2 / r^3$, то это даёт следующую зависимость: $U \sim p_1^2 / r^6$.

Связь, обусловленная ван-дер-ваальсовыми силами, является слабой, её разрыв требует малых затрат энергии. Соответственно малой оказываются теплоты плавления и возгонки.

2. Ионная (гетерополярная) связь — это связь, вызываемая кулоновским взаимодействием заряженных ионов. Например, в молекуле



электрон переходит от Na к Cl (у атома Na на внешней оболочке присутствует один электрон, а атом Cl может принять один электрон до

полного заполнения внешней оболочки). В результате возникает сильное притяжение ионов Na^+ и Cl^- .

Ионная связь приводит к возникновению *ионных кристаллов*.

3. Ковалентная (гомеополярная) связь возникает у сходных атомов (H_2 , N_2 и т.д.). Её механизм состоит в том, что внешние электроны обобществляются (рис. 3.1.2), объединяясь попарно в системы с нулевым спином (т.е. в парасостоянии). При таком объединении энергия не повышается: принцип Паули не запрещает электронам в парасостоянии обладать всеми прочими одинаковыми квантовыми числами (в том числе, энергией) и не вызывает отталкивания: электрон получает возможность находиться у каждого из атомов молекулы. В результате согласно соотношению неопределённостей Гейзенберга кинетическая энергия каждого из обобществляемых электронов понижается (вследствие увеличения доступной им области движения).

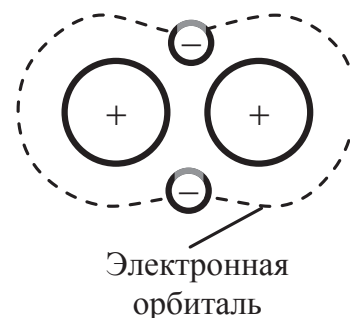
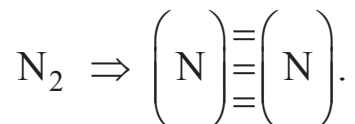


Рис. 3.1.2. Ионная связь атомов в молекуле

Ковалентная связь является направленной, локализованной и насыщаемой. Число обобществляемых электронов, называемое *кратностью ковалентной связи*, зависит от валентности атомов. Например, в молекуле N_2 (с электронной конфигурацией атомов $1s^2 2s^2 2p^3$) обобществляется по три $2p$ -электрона от каждого атома:



Ковалентная связь приводит к возникновению *атомных кристаллов*. К их числу относятся алмаз, кристаллы Si, Ge и т.д.

Атомные кристаллы, как и ионные, имеют высокую энергию связи и обладают высокой устойчивостью.

4. Металлическое взаимодействие характерно для чистых металлов и их соединений между собой. Оно связано с наличием *электронов проводимости*, свободно движущихся в кристаллической решётке. Эти электроны благодаря кулоновским силам взаимодействуют с положительно заряженными ионами металлов, скрепляя их между собой в кристалл. Обобществлённые электроны называют *электронным газом* (или *электронной жидкостью*).

Металлическая связь, в отличие от ионной и ковалентной, является нелокализованной, ненаправленной и ненасыщенной.

3.1.2. Кристаллическая решётка. Основные периоды

В твёрдом теле атомы располагаются на определённых расстояниях друг от друга, соответствующих минимуму потенциальной энергии. Дальнейшему сближению препятствует отталкивание электронов внутренних оболочек, обусловленное принципом Паули.

Атомы могут располагаться периодически, образуя *кристалл*, или *кристаллическую решётку*. Точки, в которых находятся атомы, называются *узлами* решётки.

Важным свойством кристалла является *симметрия*, состоящая в том, что он совмещается с самим собой при параллельных переносах, или *трансляциях*. Наличие пространственной периодичности в некотором направлении, задаваемом единичным вектором \mathbf{e} ($|\mathbf{e}|=1$), означает, что существует такой вектор $\mathbf{a} = a\mathbf{e}$, что кристалл совмещается с собой при сдвиге на $n\mathbf{a}$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Вектор \mathbf{a} минимальной длины называется *основным периодом* в данном направлении.

В случае трёхмерного кристалла можно выбрать три некопланарных вектора $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ таким образом, что сдвиг на вектор

$$\mathbf{a} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.1.1)$$

приводит к совмещению кристалла с собой. Векторы $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ являются периодами по задаваемым ими направлениям. Из всевозможных наборов $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ можно выбрать *основные периоды*, через которые выражаются все прочие периоды. В дальнейшем будем предполагать, что набор векторов $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ образован основными периодами.

3.1.3. Элементарная и примитивная ячейки

Выберем какой-либо узел кристалла и отложим из него три основных периода (рис. 3.1.3). Параллелепипед, построенный на этих периодах, называется *элементарной ячейкой*, или *параллелепипедом Браве*. Если элементарная ячейка содержит только атомы в вершинах параллелепипеда, то она называется *примитивной ячейкой*. Всевозможные трансляции примитивных ячеек образуют *примитивную решётку*, или *решётку Браве*. Примитивная решётка может быть получена всевозможными трансляциями

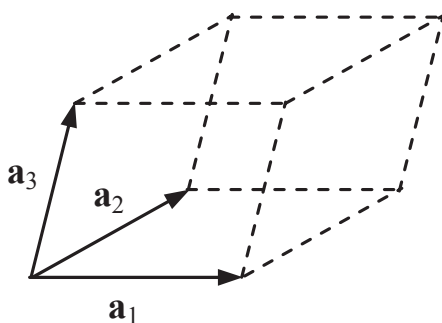


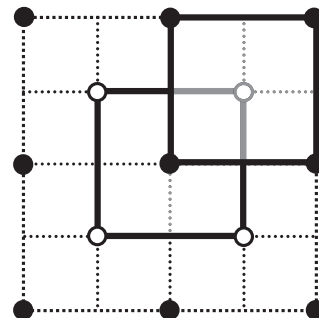
Рис. 3.1.3. Элементарная ячейка, построенная на трёх основных периодах $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$

(3.1.3) только одного узла.

Атомы могут располагаться не только

в вершинах параллелепипеда Браве. Если они находятся также в центрах граней ячейки, то ячейка называется *гранецентрированной*. Если же дополнительный атом находится в центре ячейки, то она называется *объёмноцентрированной*. Эти дополнительные узлы не могут быть получены трансляциями одного какого-либо узла. Однако соответствующие кристаллы можно рассматривать как вдвинутые друг в друга примитивные решётки. Пример показан на рис. 3.1.4.

Рис. 3.1.4. Гранецентрированная решётка представляет собой две вдвинутые друг в друга примитивные решётки. Узлы этих решёток обозначены кружками разных цветов, а две соответствующие примитивные ячейки выделены жирными линиями



В случае примитивной 3-мерной решётки на одну ячейку приходится ровно один атом. Действительно, всего одна ячейка имеет 8 вершин, а каждая вершина в кристалле принадлежит одновременно 8 ячейкам (т.е. одной ячейке принадлежит $1/8$ атома). Поэтому на одну ячейку

приходится $z = 8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ атом.

Если ячейка объёмноцентрированная, то на одну ячейку в кристалле приходится $z = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$ атома (дополнительный атом — центральный).

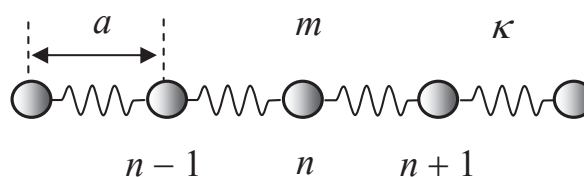
Наконец, если ячейка гранецентрированная, то атомы в центре каждой из шести граней принадлежат одновременно двум ячейкам, так что на одну ячейку приходится $z = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$ атома.

3.2. Колебания в цепочках атомов

3.2.1. Колебания и волны в одномерной цепочке

Рассмотрим колебания атомов в кристаллической решётке на примере одномерной цепочки (рис. 3.2.1).

Рис. 3.2.1. Цепочка атомов массы m каждый, соединённых пружинками жесткостью κ . Расстояние между атомами в состоянии покоя равно a



Обозначим положение n -го атома в состоянии покоя $x_n^{(0)} = na$, а его смещение относительно положения равновесия $u_n = x_n - x_n^{(0)}$. Тогда уравнение движения этого атома записывается в виде

$$m\ddot{u}_n = -\kappa(u_n - u_{n-1}) + \kappa(u_{n+1} - u_n),$$

или

$$m\ddot{u}_n = \kappa(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \quad (3.2.1)$$

Полагая $u_n = u_0 \exp(ikx_n^{(0)} - i\omega t)$, получаем

$$-m\omega^2 = \kappa(e^{ika} - 2 + e^{-ika}), \text{ или } 2\kappa - m\omega^2 = 2\kappa \cos ka.$$

Отсюда находим закон дисперсии колебаний:

$$\omega(k) = \omega_0 |\sin(ka/2)|, \quad \omega_0 = 2\sqrt{\kappa/m}. \quad (3.2.2)$$

График $\omega(k)$ показан на рис. 3.2.2.

Результат (3.2.2) означает, что благодаря взаимодействию атомов колебания могут осуществляться уже не на одной частоте, а на любой из диапазона $0 \leq \omega \leq \omega_0$. Спектр $\omega(k)$ —

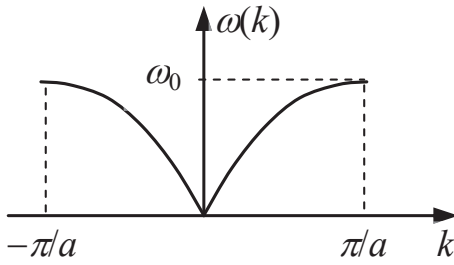


Рис. 3.2.2. Закон дисперсии волн для простой цепочки атомов

периодическая функция волнового числа k с периодом $K = 2\pi/a$. Диапазон физически различных значений волнового числа k есть $k \in [-\pi/a, \pi/a]$. Этот диапазон называется первой зоной Бриллюэна. Полная ширина этой зоны равна K .

В длинноволновом пределе $ka \ll 1$, или $\lambda \gg a$, закон дисперсии (3.2.2) принимает вид $\omega = sk$, где $s = a\omega_0/2$. Величина s имеет смысл скорости звука (длинноволновых возбуждений): $s = \omega/k|_{k \rightarrow 0}$.

Отметим, что длина волны, отвечающая границе спектра (рис. 3.2.2), равна

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi}{k_{\max}} = \frac{2\pi}{\pi/a} = 2a.$$

Длина волны $\lambda = a$ исключается, поскольку она отвечала бы синфазным движениям всех атомов цепочки, т.е. движению всей цепочки как целого:

$$u_n = u_0 \exp(ikx_n^{(0)} - i\omega t) = u_0 \exp[i(2\pi/a)na - i\omega t] = u_0 \exp(-i\omega t).$$

Если цепочка имеет конечную длину L , то существует длинноволновая граница спектра (на всей длине цепочки уместается полволны):

$$\lambda_{\max} = 2\pi/k_{\min} = 2L, \quad k_{\min} = \pi/L.$$

Рассмотрим длинноволновый предел $ka \ll 1$, или $\lambda \gg a$. Поскольку за один шаг $\Delta n = 1$ по переменной n функция $u_n(t)$ меняется мало, номер атома n можно рассматривать как непрерывную переменную. С учётом этого преобразуем выражение в правой части (3.2.1):

$$\kappa(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) = \kappa(\Delta n)^2 \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{(\Delta n)^2} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial n^2} = \kappa a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

Здесь использована известная аппроксимация производной $\partial^2 u / \partial n^2$ и введена координата n -го атома $x = na$ как непрерывная переменная. В результате мы пришли вместо (3.2.1) к волновому уравнению:

$$\frac{1}{s^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad s = a \sqrt{\frac{\kappa}{m}} = \frac{a\omega_0}{2}.$$

Входящая сюда величина s есть фазовая скорость, так что связь частоты и волнового числа имеет вид $\omega = sk$. Этот же результат мы получили непосредственно из (3.2.2) в пределе $ka \ll 1$.

Таким образом, осуществлен переход от колебаний отдельных атомов к *коллективным колебаниям* системы атомов — волнам.

Выражение $u(x, t) = u_0 \exp(ikx - i\omega t)$ описывает волну, распространяющуюся вдоль оси x . Любой колебательный процесс в цепочке может быть представлен как суперпозиция волн, отвечающих различным значениям волнового числа k и частоты $\omega(k)$. Эти волны называются *нормальными*.

В общем случае *нормальные колебания*, или *нормальные моды*, — это набор характерных для колебательной системы типов гармонических колебаний. Каждое из нормальных колебаний физической системы характеризуется своей частотой. Набор частот нормальных колебаний составляет *колебательный спектр*. Произвольное колебание физической системы можно представить в виде суперпозиции нормальных колебаний.

3.2.2. Колебания в цепочке атомов двух сортов

Рассмотрим колебания в одномерной цепочке, состоящей из атомов двух сортов (рис. 3.2.3). Пусть массы атомов равны m и M , причём

$M > m$. Для определённости считаем, что атомы m изображены чёрными кружками, а атомы M — светлыми.

Расстояние между соседними атомами в состоянии покоя обозначим a . Тогда в состоянии покоя координаты атомов m и M равны

$$\begin{aligned} x_n^{(0)} &= 2na \quad (\text{атомы массой } m), \\ y_n^{(0)} &= (2n+1)a \quad (\text{атомы массой } M), \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

причём $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

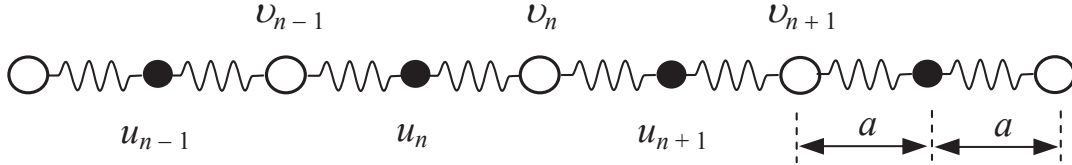


Рис. 3.2.3. Цепочка атомов массами m (чёрные шарики) и M (светлые шарики), соединенных пружинками жесткостью κ . В состоянии покоя расстояние между любой парой соседних атомов равно a

При возбуждении системы атомы отклоняются от положения равновесия. Обозначим их смещения следующим образом (рис. 3.2.3):

$$\text{атомы } m: u_n = x_n - x_n^{(0)},$$

$$\text{атомы } M: v_n = y_n - y_n^{(0)}.$$

Запишем уравнения движения атомов (рис. 3.2.3):

$$m\ddot{u}_n = -\kappa(u_n - v_{n-1}) + \kappa(v_n - u_n),$$

$$M\ddot{v}_n = -\kappa(v_n - u_n) + \kappa(u_{n+1} - v_n),$$

или

$$m\ddot{u}_n = -\kappa(2u_n - v_{n-1} - v_n),$$

$$M\ddot{v}_n = -\kappa(2v_n - u_n - u_{n+1}), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Для решения этой системы положим

$$u_n = A_1 \exp(ik \cdot x_n^{(0)} - i\omega t) = A_1 \exp(ik \cdot 2na - i\omega t),$$

$$v_n = A_2 \exp(ik \cdot y_n^{(0)} - i\omega t) = A_2 e^{ika} \exp(ik \cdot 2an - i\omega t).$$

Подстановка этих выражений в (3.2.3) даёт

$$\begin{aligned} (2\kappa - m\omega^2) A_1 &= \kappa A_2 e^{ika} (e^{-2ika} + 1), \\ (2\kappa - M\omega^2) A_2 e^{ika} &= \kappa A_1 (1 + e^{2ika}). \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

Перемножая полученные равенства, получаем закон дисперсии:

$$(2\kappa - m\omega^2)(2\kappa - M\omega^2) = \kappa^2 (1 + e^{2ika})(e^{-2ika} + 1).$$

Учитывая равенство $(1 + e^{2ika})(e^{-2ika} + 1) = 2(1 + \cos 2ka)$, перепишем полученный закон в виде биквадратного уравнения:

$$\omega^4 - 2\kappa \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \omega^2 + \frac{2\kappa^2}{mM} (1 - \cos 2ka) = 0. \quad (3.2.5)$$

Введём следующие обозначения:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{2\kappa}{\mu}}.$$

Тогда решение уравнения (3.2.5) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \frac{\omega_0^2}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 ka} \right), \\ \omega_2^2 &= \frac{\omega_0^2}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 ka} \right), \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

где величина γ^2 даётся выражением

$$\gamma^2 = \frac{16\kappa^2}{mM\omega_0^4} = \frac{4mM}{(m+M)^2}.$$

Поскольку $\gamma^2 \leq 1$, то оба решения в (3.2.6) (частоты ω_1 и ω_2) являются действительными числами для всех значений входящих сюда масс частиц (m и M), периодов цепочки (a) и волновых чисел k .

Как видно из (3.2.6), имеются две качественно различные ветви колебаний: $\omega_1(k)$ и $\omega_2(k)$. Для них

$$\omega_1(0) = 0, \quad \omega_2(0) = \omega_0 \neq 0.$$

Первая ветвь называется *акустической*, а вторая — *оптической*¹.

Даваемые формулами (3.2.6) функции $\omega_1(k)$ и $\omega_2(k)$ являются периодическими с периодом

$$K = 2\pi/2a = \pi/a. \quad (3.2.7)$$

Поэтому достаточно ограничиться рассмотрением только одной (первой) зоны Бриллюэна:

¹ Верхняя ветвь спектра колебаний называется оптической по той причине, что соответствующие колебания в ионных кристаллах можно возбудить с помощью оптического излучения ИК-диапазона спектра.

$$-\pi/2a \leq k \leq \pi/2a.$$

Графики зависимостей $\omega_1(k)$ и $\omega_2(k)$ приведены на рис. 3.2.4.

1) *Длинноволновый предел*: $ka \rightarrow 0$. Из (3.2.5) находим

$$\omega_1 \approx \sqrt{\frac{\omega_0^2 \gamma^2}{4}} (ka)^2 = \sqrt{\frac{2\kappa}{m+M}} ka, \quad \omega_2 = \omega_0 \left(1 - \frac{1}{8} \gamma^2 (ka)^2 \right).$$

Отсюда следует, что на акустической ветви скорость звука равна

$$s = \left(\frac{\omega_1(k)}{k} \right)_{k \rightarrow 0} = a \sqrt{\frac{2\kappa}{m+M}}.$$

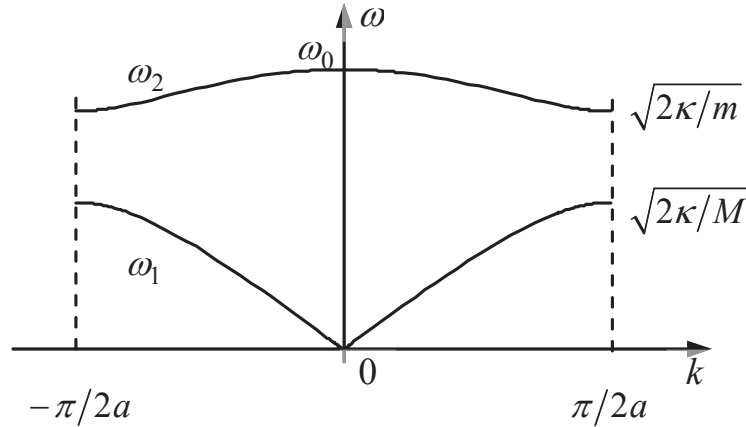


Рис. 3.2.4. Законы дисперсии для колебаний в цепочке, составленной из атомов двух сортов — с массами m и M , $m < M$. Нижняя ветвь — акустическая, верхняя — оптическая

Из первой формулы в (3.2.4) получаем отношение амплитуд колебаний частиц:

$$\frac{A_1}{A_2} = e^{ika} \frac{e^{-2ika} + 1}{2(1 - m\omega^2/2\kappa)}. \quad (3.2.8)$$

Отсюда следует, что в пределе $ka \rightarrow 0$ на акустической ветви ($\omega = \omega_1 \rightarrow 0$) имеем: $(A_1/A_2)_{\text{акуст}} \rightarrow 1$. Это значит, что атомы колеблются синфазно и с одинаковой амплитудой.

На оптической ветви ($\omega = \omega_2 \rightarrow \omega_0 = \sqrt{2\kappa/\mu}$) имеем

$$\left(\frac{A_1}{A_2} \right)_{\text{опт}} = \frac{1}{1 - m/\mu} = -\frac{M}{m}.$$

Последнее равенство можно переписать в виде

$$mA_1 + MA_2 = 0.$$

Это означает, что лёгкие и тяжёлые атомы колеблются в противофазе, причём центр тяжести атомов остаётся неподвижным.

2) *Коротковолновый предел*: $ka \rightarrow \pi/2$. На границе зоны Бриллюэна, т.е. при $ka = \pi/2$, из (3.2.5) следует, что

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{\omega_0^2}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \gamma^2}\right)} = \omega_0 \sqrt{\frac{m}{m+M}} = \sqrt{\frac{2\kappa}{M}},$$

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{\omega_0^2}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \gamma^2}\right)} = \omega_0 \sqrt{\frac{M}{m+M}} = \sqrt{\frac{2\kappa}{m}}.$$

Из первой формулы (3.2.4) находим отношение амплитуд колебаний на *акустической ветви*:

$$\frac{A_1}{A_2} = e^{ika} \frac{e^{-2ika} + 1}{2(1 - m\omega_1^2/2\kappa)} \rightarrow 0 \text{ при } ka \rightarrow \pi/2$$

(учтено, что $e^{-i\pi} = -1$, а знаменатель в нуль не обращается).

Из второй формулы (3.2.4) находим на *оптической ветви*:

$$\frac{A_2}{A_1} = e^{-ika} \frac{1 + e^{2ika}}{2(1 - M\omega_2^2/2\kappa)} \rightarrow 0 \text{ при } ka \rightarrow \pi/2$$

(учтено, что в этой формуле знаменатель в нуль не обращается).

Таким образом, на границе зоны Бриллюэна на акустической ветви колебания совершают только тяжёлые атомы, а на оптической ветви — только лёгкие.

3.3. Фононы. Модель Дебая

3.3.1. Фононы

Рассмотрим простую цепочку атомов (рис. 3.2.1). Для неё закон дисперсии волн имеет вид, показанный на рис. 3.3.1 (слева).

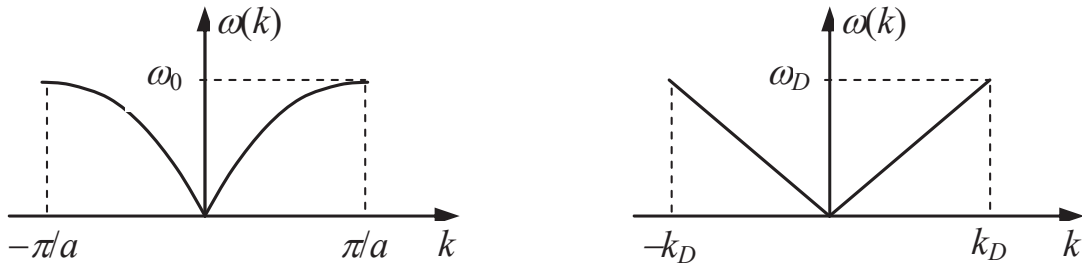


Рис. 3.3.1. Точный закон дисперсии волн для простой цепочки атомов (слева) и закон дисперсии в модели Дебая (справа)

Поскольку в общем случае колебания каждого из атомов могут происходить в трёх взаимно перпендикулярных направлениях, то воз-

можны три различных типа (поляризации) волн: одна продольная и две поперечные. При этом волны могут распространяться в любом направлении в пространстве. Направление распространения задаётся волновым вектором \mathbf{k} .

Энергия кристалла может быть записана как сумма энергий отдельных плоских волн или, что эквивалентно, связанных с ними осцилляторов. Поскольку в квантовой механике энергия осциллятора принимает дискретный набор значений, то для энергии кристалла объёмом V можно записать выражение:

$$U = V \sum_{\mathbf{k}, s} E_{\mathbf{k}, s}, \quad E_{\mathbf{k}, s} = \hbar \omega_{\mathbf{k}, s} \left(n_{\mathbf{k}, s} + 1/2 \right). \quad (3.3.1)$$

Здесь \mathbf{k} — волновой вектор, s — поляризация волны. Отсюда видно, что можно (по аналогии с электромагнитными волнами) перейти от волн в кристаллической решётке к квантам, называемым *фононами*¹. При этом энергия возбуждённого состояния кристалла оказывается равной сумме энергий фононов. Увеличение числа фононов означает рост амплитуды колебаний атомов. Поскольку энергия нулевых колебаний не зависит от температуры, её обычно не рассматривают, полагая, что она определяет начало отсчёта. Соответственно вместо (3.3.1) записывают

$$U = V \sum_{\mathbf{k}, s} \hbar \omega_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s}. \quad (3.3.2)$$

Фонону с частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} , как и фотону, ставятся в соответствие энергия и импульс, равные $E = \hbar \omega$, $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$. Фононы — это бозоны со спином 1. Проекция их спина может принимать три значения: $s_z = 0, \pm 1$ (по числу различных поляризаций звуковых волн в кристалле). Число фононов N не сохраняется и меняется при изменении энергии системы.

Для чисел заполнения фононов $n_{\mathbf{k}, s}$, как и в случае равновесного излучения (фотонного газа), имеет место распределение Планка:

$$n_{\mathbf{k}, s} = \left[\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1 \right]^{-1}. \quad (3.3.3)$$

Эта величина есть число фононов с частотой ω в определённом квантовом состоянии при температуре T . Имеются в виду определённые поляризация и вектор импульса.

¹ Термин «фонон» ввёл Я.И. Френкель в 1932 г.

3.3.2. Квазиимпульс

Поскольку физически различные значения волнового вектора находятся в пределах только одной зоны Бриллюэна, то величина $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ представляет собой не обычный импульс, а *квазиимпульс*. Отличие связано с разбиением движения кристалла на волны *внутри* кристалла (внутренние колебательные степени свободы вещества) и движение кристалла *как целого* (поступательные и вращательные степени свободы). Действительно, при сдвиге волнового числа на $K = 2\pi/a$ фаза колебания n -го атома ($x_n^{(0)} = na$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) оказывается равной

$$\tilde{\varphi}_n = (k + K)x_n^{(0)} - i\omega t = kx_n^{(0)} - i\omega t + 2\pi n = \varphi_n + 2\pi n.$$

Следовательно, фазы колебаний *всех* атомов меняются на целое число 2π . Это означает, что относительное движение атомов (т.е. волны в системе центра масс) не меняется, а имеет место движение кристалла как целого с импульсом $p = \hbar K = 2\pi\hbar/a$. Другими словами, волновые числа k , отличающиеся на mK , $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, физически неотличимы с точки зрения фононной подсистемы.

Сказанное означает, что фонон — квант возбуждения среды — нельзя рассматривать как обычную частицу типа фотона или электрона. Поэтому употребляют название «квазичастица», т.е. объект, подобный реальной частице, но не являющийся таковой. Подчеркнём, что обычные частицы могут существовать как в среде, так и в пустом пространстве, тогда как квазичастицы могут существовать только в среде, колебаниями которой они и являются.

3.3.3. Модель Дебая

В модели Дебая принимается, что закон дисперсии волн имеет вид

$$\omega = s|k|$$

во *всём* допустимом диапазоне значений волнового числа $k \in [-k_m, k_m]$ (рис. 3.3.1 справа). При этом частота пробегает набор значений $0 \leq \omega \leq \omega_D$. Максимальное значение $\omega = \omega_D$ называется *частотой Дебая*. Скорость звука s выбирается той же, что и в точной модели.

Дебаевская частота ω_D и связанное с ней граничное значение волнового числа $k_D = \omega_D/s$ определяются следующим образом.

В объёме V вещества число возможных волновых векторов фононов с компонентами в диапазоне $k_x \div k_x + dk_x$, $k_y \div k_y + dk_y$, $k_z \div k_z + dk_z$

равно

$$dN_{\mathbf{k}} = V \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}$$

(вывод этого соотношения приведён в разделе 1.2.3). Перейдём от волнового вектора к частоте, полагая $\omega = s_{\parallel} k$ — для одной продольной моды и $\omega = s_{\perp} k$ — для каждой из двух поперечных мод. Соответственно полное число разрешённых состояний можно представить в виде

$$dN_{\text{сост}} = dN_{\parallel} + 2dN_{\perp}.$$

Поэтому, заменяя $d^3 k \rightarrow 4\pi k^2 dk$, учитывая равенства

$$dN_{\parallel} = \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{1}{s_{\parallel}^3} \frac{4\pi \omega^2 d\omega}{(2\pi)^3}, \quad dN_{\perp} = \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{1}{s_{\perp}^3} \frac{4\pi \omega^2 d\omega}{(2\pi)^3}$$

и обозначая $3/s^3 = 1/s_{\parallel}^3 + 2/s_{\perp}^3$, получим

$$dN_{\text{сост}} = V g_{\omega} d\omega = V \frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 s^3}.$$

Здесь введена *спектральная плотность состояний*

$$g_{\omega} = \frac{3\omega^2}{2\pi^2 s^3}.$$

Максимальная частота в модели Дебая (ω_D) определяется из того условия, что число всех возможных состояний (колебательных мод) равно числу степеней свободы исходного кристалла:

$$\int_0^{\omega_D} V g_{\omega} d\omega = \int_0^{\omega_D} V \frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 s^3} = 3N \Rightarrow \frac{\omega_D^3}{2\pi^2 s^3} = 3 \frac{N}{V} \Rightarrow \omega_D = \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} s.$$

Здесь N — число атомов в объёме V , каждый из которых обладает тремя степенями свободы. Обозначая

$$k_D = \left(6\pi^2 N/V \right)^{1/3},$$

получаем $\omega_D = k_D s$. Поскольку в твёрдом теле $(V/N)^{1/3} \sim a$, где a — межатомное расстояние, то величина $\hbar k_D \approx \pi \hbar / a$ приблизительно совпадает с импульсом границы зоны Бриллюэна.

С граничной частотой спектра фононов в модели Дебая связывают *температуру Дебая*:

$$\Theta = \hbar \omega_D / k_B.$$

Заметим, что если цепочка с закреплёнными концами имеет длину L , то существует длинноволновая граница спектра стоячих волн, определяемая из условия, что на всей длине цепочки уместится полволны:

$$\lambda_{\max} = 2\pi/k_{\min} = 2L, \quad k_{\min} = \pi/L.$$

Соответственно минимальная частота колебаний составляет

$$\omega_{\min} = s k_{\min} = 2\pi s / \lambda_{\max} = \pi s / L.$$

Таким образом, допустимые частоты спектра находятся в диапазоне

$$\omega_{\min} \leq \omega \leq \omega_D.$$

«Обрезание» спектра на малых частотах может приводить к заметным отличиям свойств систем малых размеров (микроскопических и мезоскопических) от свойств больших (макроскопических) систем. Это, в частности, проявляется в том, что для возбуждения колебаний цепочке нужно сообщить энергию $E \geq \hbar \omega_{\min} = \pi \hbar s / L$.

Поскольку фононы — это бозоны, то спектральное распределение энергии фононного газа даётся формулой

$$\rho_{\omega} d\omega = g_{\omega} d\omega \cdot \hbar \omega \cdot n(\omega) = \frac{3}{2\pi^2 s^3} \frac{\hbar \omega^3 d\omega}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1},$$

где ρ_{ω} — спектральная плотность энергии в единице объёма вещества. График функции ρ_{ω} показан на рис. 3.3.2 для случаев низких (слева) и высоких (справа) температур. Максимум спектральной кривой ρ_{ω} приходится на частоту $\omega_m = 2,82 kT / \hbar$.

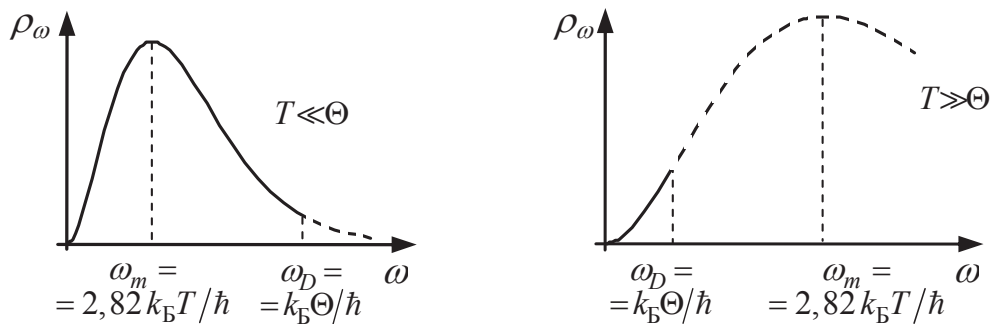


Рис. 3.3.2. Спектральная плотность энергии фононов. Частота, отвечающая максимуму спектра, равна $\omega_m = 2,82 k_B T / \hbar$. В разрешённый набор входят частоты $0 \leq \omega \leq \omega_D$

Основное отличие планковского спектра фононов от спектра теплового излучения состоит в том, что набор допустимых частот в случае

фононов ограничен сверху: $0 < \omega < \omega_D$, тогда как спектр фотонов неограничен: $0 < \omega < \infty$.

Модель Дебая является приближённой, причём предельная частота ω_D подбирается из условия, чтобы при переходе от атомов к волнам не изменилось число степеней свободы. В принципе, чтобы избежать введения нового параметра (ω_D), можно было бы использовать точный закон дисперсии. В качестве примера рассмотрим продольные колебания в одномерной цепочке, описываемые законом дисперсии

$$\omega(k) = \omega_0 \left| \sin \frac{ka}{2} \right|, \quad \omega_0 = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}.$$

Отсюда находим, что

$$k = \frac{2}{a} \arcsin \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right), \quad 0 \leq k \leq \pi/2;$$

$$d\omega = \frac{\omega_0 a}{2} \cos \frac{ka}{2} dk \Rightarrow dk = \frac{2}{\omega_0 a \cos(ka/2)} d\omega = \frac{2}{a} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}.$$

Соответственно спектральная плотность состояний будет определяться формулой

$$\frac{dk}{2\pi} \rightarrow 2 \left(\frac{dk}{2\pi} \right)_{k \geq 0} = \frac{2}{\pi a} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}} = g(\omega) d\omega.$$

Дополнительный множитель «2» возникает в связи с тем, что волновое число меняется в пределах $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$, причём одному значению частоты отвечают два значения волнового числа (рис. 3.3.1 слева).

Легко проверить, что полное число разрешённых состояний (для цепочки длиной $L = Na$) есть

$$G = L \int_0^{\omega_0} g(\omega) d\omega = \frac{2L}{\pi a} \int_0^{\omega_0} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}} = \frac{L}{a} = N.$$

Таким образом, при использовании точного закона дисперсии число степеней свободы в волнах оказывается равным числу степеней свободы образующих цепочку атомов без использования дополнительных предположений.

3.4. Теплоёмкость и теплопроводность в модели Дебая

3.4.1. Теплоёмкость в модели Дебая

Полная энергия тепловых колебаний в объёме V кристалла даётся выражением

$$\begin{aligned} U &= V \int_0^{\omega_D} \rho_{\omega} d\omega = V \frac{3}{2\pi^2 s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega^3 d\omega}{\exp(\hbar \omega/kT) - 1} = \\ &= V \frac{3}{2\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar s} \right)^3 kT \int_0^{\hbar \omega_D/kT} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 9NkT \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \end{aligned}$$

Здесь и далее мы обозначаем постоянную Больцмана как k . При преобразовании учтено, что в соответствии с определением температура Дебая Θ связана со скоростью звука соотношением

$$k_B \Theta = \hbar \omega_D = \left(6\pi^2 N/V \right)^{1/3} \hbar s.$$

Введём функцию Дебая:

$$D(y) = \frac{3}{y^3} \int_0^y \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Эта функция обладает следующими асимптотиками:

$$D(y)|_{y \ll 1} = \frac{3}{y^3} \int_0^y \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \approx \frac{3}{y^3} \int_0^y \frac{x^3 dx}{(1 + x + x^2/2) - 1} \approx \frac{3}{y^3} \int_0^y x^2 \left(1 - \frac{x}{2} \right) dx = 1 - \frac{3}{8} y,$$

$$D(y)|_{y \gg 1} \approx \frac{\pi^4}{5y^3}.$$

Используя введённую функцию, перепишем энергию кристалла:

$$U = 3NkT \cdot D(\Theta/T).$$

Теплоёмкость вещества находится по формуле: $C_V = (\partial U / \partial T)_V$.

Рассмотрим предельные случаи.

1) *Низкие температуры*: $T \ll \Theta$. В этом пределе имеем

$$U = 3NkT \cdot D(\Theta/T)|_{T \ll \Theta} = \frac{3\pi^4}{5} NkT \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 = V \frac{\pi^2 \hbar}{10} \left(\frac{kT}{\hbar s} \right)^3 kT;$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{12\pi^4}{5} Nk \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 = V \frac{2\pi^2 \hbar}{5} \left(\frac{kT}{\hbar s} \right)^3 k \sim T^3.$$

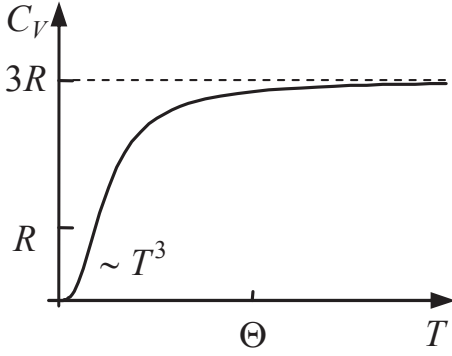
2) *Высокие температуры*: $T \gg \Theta$. В этом пределе находим

$$U = 3NkT \cdot D(\Theta/T) \Big|_{T \gg \Theta} = 3NkT;$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3Nk = 3\nu R.$$

Зависимость теплоёмкости от температуры показана на рис. 3.4.1.

Модель Дебая правильно описывает поведение теплоёмкости при



низких температурах. Однако совпадение теплоёмкости при высоких температурах с её значением, следующим из закона Дюлонга–Пти ($C_V = 3\nu R$), связано со специальным выбором максимальной (дебаевской) частоты ω_D . Поэтому ввиду замены реального спектра колебаний приближённым ($\omega = sk$) модель Дебая не может претендовать на точное описание поведения

Рис. 3.4.1. Температурная зависимость молярной теплоёмкости твёрдого тела в модели Дебая

теплоёмкости в промежуточной области $T \sim \Theta$ и должна рассматриваться, строго говоря, как интерполяционная.

3.4.2. Концентрация и средняя энергия фононов

Концентрация фононов вычисляется по формуле

$$dn_\phi = g_\omega d\omega \cdot n(\omega) = \frac{3}{2\pi^2 s^3} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$

Отсюда находим, что

$$n_\phi = \frac{3}{2\pi^2 s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} = \frac{3}{2\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar s} \right)^3 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^2 dx}{e^x - 1}.$$

Рассмотрим частные случаи.

1) *Низкие температуры:* $T \ll \Theta$. В этой области интегрирование можно распространить до бесконечности. Тогда с учётом того, что

$$\int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = 2 \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^3} = \Gamma(3)\zeta(3) \approx 2,4$$

(раздел 1.2.13), получаем

$$n_\phi = 2,4 \cdot 3 \cdot \underbrace{\frac{\omega_D^3}{2\pi^2 s^3}}_{3N_1} \left(\frac{kT}{\hbar\omega_D} \right)^3 \approx 21,6 N_1 \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3.$$

Здесь $N_1 = N/V$ — концентрация атомов. Имея в виду, что в рассматриваемой области температур плотность энергии равна

$$\rho = \frac{U}{V} = \frac{3\pi^4}{5} N_1 kT \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3,$$

находим среднюю энергию фонона:

$$\varepsilon_\phi = \frac{\rho}{n_\phi} = \frac{3\pi^4}{5 \cdot 21,6} kT = 2,7kT.$$

Это значение близко к величине $\hbar\omega_m = 2,82kT$, отвечающей максимуму спектральной плотности энергии (рис. 3.3.2 слева).

2) *Высокие температуры:* $T \gg \Theta$. В этой области можно приближённо написать:

$$\int_0^{\Theta/T} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} \approx \int_0^{\Theta/T} \frac{x^2 dx}{x} = \frac{1}{2} \left(\frac{\Theta}{T} \right)^2.$$

Соответственно находим концентрацию фононов:

$$n_\phi = \frac{3}{4\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar s} \right)^3 \left(\frac{\Theta}{T} \right)^2 = \frac{3\omega_D^3}{4\pi^2 s^3} \left(\frac{kT}{\hbar\omega_D} \right)^3 \left(\frac{\Theta}{T} \right)^2 = \frac{9}{2} N_1 \frac{T}{\Theta}.$$

Поскольку в данной области температур $\rho = 3N_1 kT$, то средняя энергия фонона даётся равенством

$$\varepsilon = \frac{\rho}{n_\phi} = \frac{3N_1 kT}{\frac{9}{2} N_1 \frac{T}{\Theta}} = \frac{2}{3} k\Theta = \frac{2}{3} \hbar\omega_D.$$

Таким образом, при низких температурах средняя энергия фонона растёт с ростом температуры, а при высоких температурах выходит на постоянное значение порядка максимальной энергии $\hbar\omega_D$.

3.4.3. Теплопроводность в модели Дебая

Перенос энергии в твёрдом теле осуществляется посредством фононов. Коэффициент теплопроводности, входящий в закон Фурье: $\mathbf{q} = -\kappa \text{grad } T$, можно оценить с помощью выражения

$$\kappa = (1/3) C_V \nu l,$$

где ν — средняя скорость фононов, l — длина свободного пробега, C_V — теплоёмкость в расчёте на единицу объёма. Скорость фононов равна скорости звука: $\nu = s$. Длина свободного пробега равна $l = (n_\phi \sigma)^{-1}$ и

определяется столкновениями фононов друг с другом. Здесь n — концентрация фононов, σ — сечение фонон-фононного рассеяния, которое от температуры зависит слабо и определяется ангармонизмом взаимодействия атомов.

1) *Высокие температуры.* Здесь теплоёмкость $C_V \approx \text{const} = 3N_1k$, где N_1 — число атомов в единице объёма. При $T \gg \Theta$ наибольшее число фононов имеет энергию $\hbar\omega \sim k\Theta$ (рис. 3.3.2 справа), так что концентрацию фононов можно оценить как $n_\phi \sim \rho/\hbar\omega_D = \rho/k\Theta \sim 3N_1(T/\Theta)$.

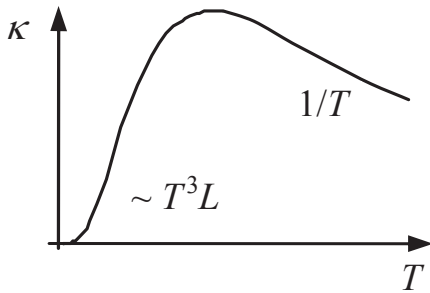


Рис. 3.4.2. Зависимость коэффициента теплопроводности от температуры в модели Дебая

Поэтому $l \sim T^{-1}$. Таким образом, коэффициент теплопроводности зависит от температуры по закону $\kappa \sim 3N_1k s (n_\phi \sigma)^{-1} \sim T^{-1}$.

2) *Низкие температуры.* Здесь теплоёмкость $C_V \sim T^3$. Длина свободного пробега фононов при низких температурах велика и часто ограничивается размерами кристалла L . Поэтому коэффициент теплопроводности зависит от температуры по закону

$\kappa \sim T^3 L$. Вид зависимости $\kappa(T)$ показан на рис. 3.4.2.

3.4.4. Взаимодействие фононов. Процессы переброса

Модель фононов строится исходя из гармонического приближения для взаимодействия атомов, когда

$$U(u) = U_0 + \frac{1}{2} \kappa u^2,$$

где $u = r - R_0$ — смещение атомов от положения равновесия, в котором расстояние между атомами равно R_0 . При этом сила взаимодействия атомов $F = -\partial U/\partial u = -\kappa u$. Это отвечает

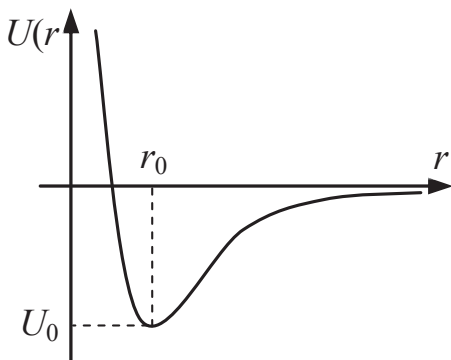


Рис. 3.4.3. Зависимость потенциальной энергии взаимодействия атомов от расстояния

линейным колебаниям в системе, для которых выполняется принцип суперпозиции. Соответственно изначально фононы не взаимодействуют друг с другом.

В общем случае потенциальная энергия взаимодействия атомов зависит от расстояния более сложным образом, как качественно показано на рис. 3.4.3. Отталкивание на малых расстояниях обусловлено отталкива-

нием электронов при перекрытии внутренних оболочек атомов в соответствии с принципом Паули. Поэтому более точно следует записать

$$U(u) = U_0 + \frac{1}{2}\kappa u^2 + \frac{1}{3}\kappa_3 u^3 + \frac{1}{4}\kappa_4 u^4 + \dots$$

Для силы взаимодействия атомов отсюда получаем выражение

$$f(u) = -\frac{\partial U(u)}{\partial u} = -\kappa u - \kappa_3 u^2 - \kappa_4 u^3 + \dots$$

Соответственно благодаря слагаемым $(-\kappa_3 u^2)$ в силе $f(x)$ при наложении двух волн с волновыми векторами и частотами (\mathbf{k}_1, ω_1) и (\mathbf{k}_2, ω_2) :

$$u_1(\mathbf{r}, t) = u_{10} \cos(\mathbf{k}_1 \mathbf{r} - \omega_1 t), \quad u_2(\mathbf{r}, t) = u_{20} \cos(\mathbf{k}_2 \mathbf{r} - \omega_2 t)$$

возникают слагаемые, отвечающие волнам с волновыми векторами и частотами:

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1 \pm \mathbf{k}_2, \quad \omega_3 = \omega_1 \pm \omega_2. \quad (3.4.1)$$

Это можно интерпретировать как процессы рождения-уничтожения фононов, как показано на рис. 3.4.4. Равенства же (3.4.1), записанные в форме

$$\hbar \mathbf{k}_3 = \hbar \mathbf{k}_1 \pm \hbar \mathbf{k}_2, \quad \hbar \omega_3 = \hbar \omega_1 \pm \hbar \omega_2, \quad (3.4.2)$$

имеют смысл законов сохранения энергии и импульса.

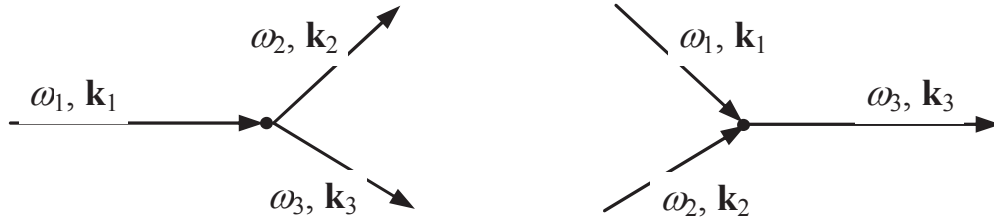


Рис. 3.4.4. Трёхфононные взаимодействия: рождение (слева) и уничтожение (справа) фонона

Как уже говорилось, для фонона величина $\hbar \mathbf{k}$ есть не обычный импульс, а квазиимпульс, определённый только в пределах одной зоны Бриллюэна. Поэтому в более общем виде закон сохранения импульса следует записывать, например, для процесса слияния фононов (рис. 3.4.4 справа) в виде

$$\hbar \mathbf{k}_1 + \hbar \mathbf{k}_2 = \hbar \mathbf{k}_3 + 2\pi \hbar \mathbf{b} m, \quad m = 0, \pm 1, \quad (3.4.3)$$

где \mathbf{b} — вектор обратной решётки (для одномерной структуры $b = a^{-1}$). Процессы при $m = 0$ называются *нормальными*, а при $m \neq 0$ — *процессами переброса*.

При учёте слагаемых вида $(-\kappa_4 u^3)$ в силе $f(u)$ появляются четырёхфононные взаимодействия, пример которых показан на рис. 3.4.5.

3.4.5. Роль столкновений фононов в теплопроводности

В соответствии со сказанным фонон-фононные столкновения приводят к ограничению теплопроводности только тогда, когда при этих столкновениях происходят процессы переброса, в результате которых меняется полный импульс фононного газа (импульс $2\pi m\hbar\mathbf{b}$ передаётся

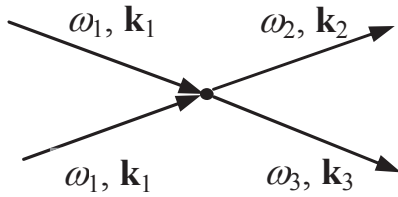


Рис. 3.4.5. Пример четырёхфононного процесса — рассеяния фонона на фононе

кристаллу как целому). Иначе энергия, заключённая в фононах, будет переноситься со скоростью звука от одного края тела до другого. Перераспределение же энергии внутри фононной системы не меняет скорости переноса энергии.

При высоких температурах имеется много фононов с импульсами вблизи границы зоны Бриллюэна, т.е. фононов, частота и волновое число которых оказываются порядка $\omega \sim \omega_D$, $k \sim \omega_D/s \sim k_m$. Поэтому столкновения с перебросом являются преобладающими по сравнению с нормальными. Соответственно температурная зависимость длины свободного пробега фононов определяется практически только их полной концентрацией.

При низких температурах ($T \ll \Theta$) число фононов с импульсами $k \sim \omega_D/s \sim k_m$ экспоненциально мало, $n_\phi \sim \exp(-\hbar\omega_D/kT)$. Поэтому в кристалле большого размера длина пробега экспоненциально велика:

$$l \approx (n_\phi \sigma)^{-1} \sim \exp(\hbar\omega_D/kT) = \exp(\Theta/T).$$

Соответственно $\kappa = C_V s l / 3 \sim T^3 \exp(\Theta/T)$.

Если кристалл имеет конечные размеры L , то нужно учитывать столкновения фононов не только между собой, но и с границами. По правилу сложения вероятностей можно записать интерполяционное выражение для длины свободного пробега:

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_{\phi-\phi}} + \frac{1}{L}, \quad l_{\phi-\phi} = \frac{1}{n\sigma},$$

где $l_{\text{ф-ф}}$ — длина свободного пробега в бесконечной среде (ограничиваемая только фонон-фононными столкновениями). При очень низких температурах число фононов мало и $l_{\text{ф-ф}} \gg L$. Поэтому $l \approx L$, и коэффициент теплопроводности $\kappa = C_V s l / 3 \sim T^3 L$.

Выше мы предполагали, что сечение фонон-фононного рассеяния почти не зависит от температуры. Поясним, почему такое допущение оправдано. Дело в том, что это сечение определяется размером неоднородности плотности в кристалле, вызванной фононом, т.е. характерным «размером» фонона — его длиной волны. Теплопроводность ограничивается лишь фононами с импульсами вблизи границы зоны Бриллюэна ($k_m = \pi/a$). Но у всех этих фононов длина волны одинакова: $\lambda = 2\pi/k_m = 2a$ и не зависит от температуры. Отсюда и следует независимость сечения от температуры.

3.5. Оценки

Введённые характеристики (скорость звука, температура Дебая), будучи зависимыми от свойств конкретных веществ, вместе с тем определяются по порядку величины небольшим числом величин. Получим оценку их значений, одновременно поясняющую физический смысл.

Учтём следующее.

1) В твёрдом теле характерные расстояния между атомами a порядка боровского радиуса:

$$a \sim r_B = \hbar^2 / m e^2 = 0,529 \text{ \AA} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

поскольку эти расстояния определяются электронной конфигурацией атомов. Здесь m — масса электрона.

2) «Жёсткость» κ связи атомов в цепочке (кристалле) оценивается из тех соображений, что при увеличении межатомного расстояния на величину порядка a энергия взаимодействия атомов меняется на величину порядка энергии электронной конфигурации

$$\varepsilon_B = m e^4 / 2 \hbar^2 = 13,6 \text{ эВ}.$$

Соответственно находим

$$\kappa a^2 \sim \varepsilon_B \Rightarrow \kappa \sim \varepsilon_B / r_B^2.$$

Кроме того, используем очевидное соотношение: $\varepsilon_B r_B = e^2 / 2$.

3.5.1. Дебаевская частота и температура Дебая

Оценка проводится следующим образом:

$$\kappa a^2/2 = M \omega^2 a^2/2 \sim M \omega_D^2 a^2/2 \sim \varepsilon_B \Rightarrow \omega_D \sim \sqrt{2\varepsilon_B/Mr_B^2}.$$

Здесь M — масса атома, учтено, что $a \sim r_B$. Отсюда находим

$$\hbar \omega_D \sim \hbar \sqrt{\frac{2\varepsilon_B}{Mr_B^2}} = \varepsilon_B \sqrt{\frac{2\hbar^2}{M\varepsilon_B r_B^2}} = \varepsilon_B \sqrt{\frac{4\hbar^2}{Me^2 r_B}} \sim \varepsilon_B \sqrt{\frac{m}{M} \frac{\hbar^2}{me^2 r_B}} = \varepsilon_B \sqrt{\frac{m}{M}}.$$

Таким образом, получаем оценку: $k\Theta = \hbar \omega_D \sim \varepsilon_B \sqrt{m/M}$. Поскольку в типичных случаях $\sqrt{m/M} \sim 10^{-2}$, то

$$k\Theta \sim 0,1 \text{ эВ}, \quad \Theta \sim 10^3 \text{ К}.$$

Реальные значения температуры Дебая обычно попадают в диапазон $10^2 \div 10^3$ К. Характерно, однако, что «в среднем» с ростом массы атомов температура Дебая уменьшается как $\sqrt{m/M}$.

3.5.2. Скорость звука

Оценка скорости звука получается из следующей цепочки:

$$\omega_D = s k_D \approx \frac{\pi s}{a} \Rightarrow s \approx \frac{a \omega_D}{\pi} = \frac{a}{\pi \hbar} \hbar \omega_D \sim \frac{r_B}{\pi \hbar} \varepsilon_B \sqrt{\frac{m}{M}} \sim \frac{e^2}{2\pi \hbar} \sqrt{\frac{m}{M}},$$

где учтено, что $\varepsilon_B = e^2/2r_B$. Заметим, что величина

$$v_B = e^2/\hbar = \alpha c \approx c/137 \approx 2,2 \cdot 10^8 \text{ см/с}$$

есть скорость электрона в атоме водорода в низшем энергетическом состоянии (согласно боровской теории). Поскольку в типичных случаях $\sqrt{m/M} \sim 10^{-2}$, то для скорости звука получаем оценку

$$s \sim \frac{v_B}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{M}} \sim \frac{2 \cdot 10^8}{2\pi} 10^{-2} \text{ см/с} \sim 3 \text{ км/с}.$$

Это согласуется с наблюдаемыми значениями.

3.5.3. Теплопроводность

Рассмотрим область температур $T > \Theta$. Для оценки коэффициента теплопроводности воспользуемся формулой

$$\kappa \sim C_\phi s l_\phi.$$

Здесь C_ϕ — решёточная теплоёмкость (в расчёте на единицу объёма вещества), l_ϕ — длина свободного пробега фононов (для столкновений с перебросом).

В рассматриваемой области температур фононная теплоёмкость равна $C_\phi = 3N_1k$, где N_1 — число атомов в единице объёма. Если среднее межатомное расстояние есть a , то $N_1 \sim a^{-3}$. Длина свободного пробега фононов даётся формулой $l \approx (n_\phi \sigma)^{-1}$, где σ — сечение фонон-фононного рассеяния, а n_ϕ — концентрация фононов. Сечение σ определяется взаимодействием атомов и может быть оценено как $\sigma \sim a^2$.

В области температур $T > \Theta$ концентрация фононов есть

$$n_\phi \sim N_1 T/\Theta.$$

Поскольку средняя энергия и, следовательно, импульс фононов близки к границе зоны Бриллюэна, то большинство столкновений происходит с перебросом. По этой причине в выражение для длины свободного пробега можно подставить указанное значение концентрации n_ϕ . Соответственно получаем

$$\begin{aligned} \kappa &\sim C_\phi s l_\phi \approx N_1 k \cdot s \cdot \frac{1}{n_\phi \sigma} \sim N_1 k \left(\frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{M}} \right) \frac{1}{(N_1 T/\Theta) a^2} \sim \\ &\sim \frac{\Theta}{T} k N_1 \left(\frac{\hbar}{m} \frac{m e^2}{\hbar^2} \sqrt{\frac{m}{M}} \right) a \sim k \frac{N_1 \hbar}{m} \sqrt{\frac{m}{M}} \frac{\Theta}{T}. \end{aligned}$$

Учтено, что $N_1 \sim 1/a^3$, $a \sim \hbar^2/m e^2$. Как и должно быть, решёточная теплопроводность обратно пропорциональна температуре. Кроме того, поскольку $k\Theta \sim \sqrt{m/M}$, то, как видно из оценки, решёточная теплопроводность убывает («в среднем») с ростом массы атомов по закону $\kappa \sim m/M$.

Глава 4. ЭЛЕКТРОНЫ В ТВЁРДЫХ ТЕЛАХ

4.1. Распределение Ферми–Дирака

4.1.1. Определения

Частицы с полуцелым спином являются фермионами и следуют принципу Паули: в одном квантовом состоянии не может находиться более одного фермиона. Таковыми являются электроны, о которых далее будет идти речь. Число фермионов в одном квантовом состоянии с энергией E при температуре T даётся распределением Ферми–Дирака¹:

$$n(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1}, \quad (4.1.1)$$

где μ — химический потенциал, называемый также *уровнем Ферми*. График функции $n(E)$ приведен на рис. 4.1.1. Это распределение даёт среднее заполнение различных энергетических уровней электронами, находящимися в одинаковом спиновом состоянии (т.е. имеющими одну и ту же проекцию спина s_z).

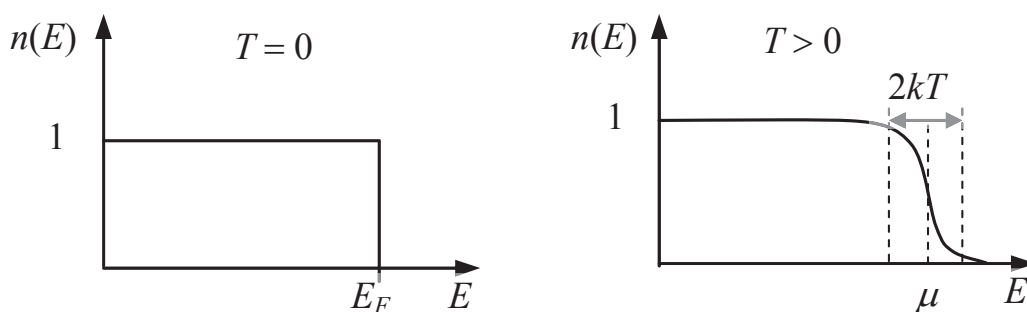


Рис. 4.1.1. Распределение Ферми для случаев $T = 0$ (слева) и $T > 0$ (справа)

В соответствии с принципом Паули в основном состоянии при температуре $T = 0$ частицы заполняют все состояния с энергией от $E = 0$ до максимальной энергии E_F , называемой *энергией Ферми*, причём

¹ Это распределение получено в 1926 году одновременно Э. Ферми и П. Дираком. Вместе с тем, часто говорят кратко: «распределение Ферми».

$$n(E, 0) = n_0(E) = \begin{cases} 1, & E < E_F, \\ 0, & E > E_F. \end{cases} \quad (4.1.2)$$

4.1.2. Вывод распределения Ферми–Дирака

Рассмотрим упругое столкновение двух электронов. В этом процессе выполняется закон сохранения энергии:

$$E_1 + E_2 = E_3 + E_4.$$

Пусть в состояниях с энергиями E_i находится $n(E_i)$ электронов. Вероятность P перехода $(E_1, E_2) \rightarrow (E_3, E_4)$ пропорциональна частоте столкновений взаимодействующих электронов $n(E_1)n(E_2)$ и числу свободных мест в конечном состоянии $[1 - n(E_3)][1 - n(E_4)]$, так что

$$P((E_1, E_2) \rightarrow (E_3, E_4)) \sim n(E_1)n(E_2)[1 - n(E_3)][1 - n(E_4)].$$

Аналогично находится вероятность обратного процесса:

$$P((E_3, E_4) \rightarrow (E_1, E_2)) \sim n(E_3)n(E_4)[1 - n(E_1)][1 - n(E_2)].$$

В состоянии равновесия должен выполняться принцип детального равновесия, состоящий в том, что вероятности прямых и обратных процессов оказываются равными:

$$P((E_1, E_2) \rightarrow (E_3, E_4)) = P((E_3, E_4) \rightarrow (E_1, E_2)).$$

Приравнявая приведенные выше выражения для вероятностей и деля полученное равенство почленно на $n(E_1)n(E_2)n(E_3)n(E_4)$, находим

$$\left(\frac{1}{n(E_1)} - 1 \right) \left(\frac{1}{n(E_2)} - 1 \right) = \left(\frac{1}{n(E_3)} - 1 \right) \left(\frac{1}{n(E_4)} - 1 \right).$$

Обозначим $\varphi(E) = \ln \left(\frac{1}{n(E)} - 1 \right)$. Тогда полученное равенство можно

переписать в виде

$$\varphi(E_1) + \varphi(E_2) = \varphi(E_3) + \varphi(E_4).$$

Данное равенство должно выполняться тождественно при соблюдении закона сохранения энергии $E_1 + E_2 = E_3 + E_4$. Но это возможно, только если $\varphi(E) = \alpha + \beta E$, где α и β — некоторые коэффициенты, не зависящие от энергии. Обозначая $\beta = 1/kT$, $\alpha = -\mu/kT$ и возвращаясь от функции $\varphi(E)$ к $n(E)$, получаем искомое распределение (4.1.1). Величина T имеет смысл температуры, в чем легко убедиться, рассмотрев

предельный случай больших энергий (или малых чисел заполнения: $n \ll 1$), когда мы переходим к обычному распределению Больцмана:

$$n(E) = n_0 \exp(-E/kT).$$

4.1.3. Число состояний электрона

Рассмотрим электронный газ. В модели свободных электронов предполагается, что электроны непосредственно не взаимодействуют друг с другом и находятся в области пространства, свободной от полей. Эта область может быть ограниченной.

Число возможных состояний электрона в элементе объёма фазового пространства Vd^3p равно

$$dN_{\text{сост}} = 2V \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (4.1.3)$$

(множитель «2» обусловлен наличием двух проекций спина электрона $s_z = \pm 1/2$). Учитывая степень заполнения каждого квантового состояния $n = n(E)$, находим число электронов в объёме V с импульсами в элементе объёма пространства импульсов d^3p :

$$dN = dN_{\text{сост}} n(E) = n(E) \cdot 2V \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

В случае, когда (среда) пространство изотропно, то можно выполнить интегрирование по направлениям импульса: $d^3p \rightarrow 4\pi p^2 dp$. Если, кроме того, для энергии электрона справедливо выражение $E = p^2/2m$, то получаем распределение электронов по энергиям:

$$dN(E) = n(E) \cdot 2V \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = V \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \frac{\sqrt{E} dE}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1}. \quad (4.1.4)$$

4.1.4. Энергия Ферми

Рассмотрим электронный газ при $T = 0$. В этом случае распределение по энергиям даётся функцией (4.1.2):

$$n_0(E) = \begin{cases} 1, & E < E_F, \\ 0, & E > E_F. \end{cases}$$

Введем импульс Ферми равенством $E_F = p_F^2/2m$. Тогда число электронов в объёме V определится формулой

$$N = \int_{E \leq E_F} n(E) \frac{2V d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = V \int_0^{p_F} \frac{2 \cdot 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = V \frac{p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

Отсюда находим импульс Ферми: $p_F = (3\pi^2 N_1)^{1/3} \hbar$, где использовано обозначение $N_1 = N/V$ для числа частиц в единице объёма. Заметим, что если ввести среднее расстояние между атомами $a = (V/N)^{1/3}$, то окажется $p_F \approx \pi\hbar/a$. Это приблизительно совпадает с импульсом границы зоны Бриллюэна.

Для энергии Ферми получаем выражение

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{(3\pi^2 N_1)^{2/3} \hbar^2}{2m}. \quad (4.1.5)$$

Полагая $a \approx N_1^{-1/3}$, получаем оценку: $E_F \approx \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$.

4.1.5. Химический потенциал

Химический потенциал μ в распределении Ферми можно найти из того условия, что полное число частиц в системе неизменно (не зависит от температуры):

$$N = \int_0^\infty \frac{dN(E)}{dE} dE = V \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1}. \quad (4.1.6)$$

Это равенство определяет функцию $\mu = \mu(T, N_1)$, где $N_1 = N/V$.

Из (4.1.1) и (4.1.2) нетрудно заметить, что при $T = 0$ химический потенциал совпадает с энергией Ферми: $\mu(0, N_1) = E_F$. В пределе малых температур $kT \ll E_F$ из (4.1.6) можно получить следующее приближённое выражение:

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

При высоких температурах распределение Ферми переходит в распределение Больцмана. При этом энергия Ферми оказывается вспомогательным параметром, связанным с концентрацией носителей. В то же время химический потенциал μ явно характеризует вид распределения

$n(E, T)$. В частности, как видно из (4.1.1), $n(\mu, T) = 1/2$. В этой связи величину μ называют *уровнем Ферми*.

4.1.6. Поверхность Ферми

При температуре $T = 0$ распределение электронов по энергиям имеет вид ступеньки, показанный на рис. 4.1.1 (слева). Граница области занятых состояний даётся уравнением $E = E_F$. В импульсном пространстве этой границе соответствует поверхность $E(\mathbf{p}) = E_F$, называемая *поверхностью Ферми*. Если энергия и импульс связаны соотношением $E = p^2/2m$, то поверхность Ферми является сферой:

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = 2mE_F.$$

В реальных металлах с иной зависимостью $E(\mathbf{p})$ поверхность Ферми может иметь очень сложную форму.

4.1.7. Температура вырождения

Ферми-газ называется *вырожденным*, если его распределение по энергии близко к ступенчатому, показанному на рис. 4.1.1 (слева). Если же распределение сильно отличается от ступенчатого, то газ называется *невырожденным*. В этом случае распределение имеет характерный больцмановский (здесь — максвелловский) вид:

$$dN(E) \sim A\sqrt{E} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)dE$$

(коэффициент A — нормировочная константа).

Характерная температура, при которой происходит переход от вырожденного газа к невырожденному, называется температурой вырождения. В качестве таковой удобно ввести величину

$$T_B = \frac{E_F}{k} = \frac{p_F^2}{2mk} = \frac{(3\pi^2 N_1)^{2/3} \hbar^2}{2mk} \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2 k}$$

(учтено, что $N_1^{2/3} \sim a^{-2}$). При температуре $T \ll T_B$ для основной части электронов $n(E) = 1$. Если же $T \gg T_B$, то распределение $n(E)$ близко к распределению Гиббса.

Смысл введённой таким образом величины T_B выясняется из следующего. Рассмотрим идеальный газ, в котором скорости частиц имеют распределение, близкое к максвелловскому. Длина волны частицы де

Бройля $\lambda_{\text{дБ}} = \frac{h}{m\nu} \approx \frac{h}{\sqrt{3mkT}}$ (для оценки мы приняли $\nu = \sqrt{3kT/m}$). Если концентрация частиц в газе есть N_1 , то в шаре радиусом $\lambda_{\text{дБ}}$ находится в среднем $N \sim \lambda_{\text{дБ}}^3 N_1$ частиц. Если окажется $N \ll 1$, то газ невырожденный, расстояние между частицами столь велико, что их волновые свойства в ансамбле не проявляются. Но это условие означает, что

$$\left(\frac{h}{\sqrt{3mkT}} \right)^3 N_1 \ll 1 \text{ или } kT \gg \frac{h^2}{3ma^2}.$$

Полученное неравенство эквивалентно сформулированному выше условию отсутствия вырождения $T \gg T_B$.

4.1.8. Давление электронного газа

Найдём среднюю энергию электрона:

$$\bar{E} = \frac{\int_{p=0}^{p_F} E(p) \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}}{\int_{p=0}^{p_F} \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}} = \frac{\int_{p=0}^{p_F} \frac{p^2}{2m} \cdot 4\pi p^2 dp}{\int_{p=0}^{p_F} 4\pi p^2 dp} = \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{2m} = \frac{3}{5} E_F.$$

Если концентрация электронов равна n , то плотность энергии электронного газа равна

$$u = N_1 \bar{E} = \frac{3}{5} N_1 E_F.$$

Для изотропного нерелятивистского газа давление и плотность энергии связаны соотношением $P = (2/3)u$. Поэтому находим

$$P = (2/5) N_1 E_F.$$

Поскольку $E_F = (3\pi^2 N_1)^{2/3} \hbar^2 / 2m$, то

$$P = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{5m} N_1^{5/3} \sim N_1^{5/3}. \quad (4.1.7)$$

4.1.9. Численные оценки

Пусть $N_1 \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$ (что типично для концентрации электронов в металлах). Тогда импульс Ферми

$$p_F = (3\pi^2 N_1)^{1/3} \hbar \approx 3\sqrt[3]{10^{23}} \cdot 10^{-27} \approx 1,5 \cdot 10^{-19} \text{ г} \cdot \text{см/с}.$$

Скорость Ферми

$$v_F = p_F / m \approx 1,5 \cdot 10^{-19} / 9 \cdot 10^{-28} \approx 1,6 \cdot 10^8 \text{ см/с}.$$

Энергия Ферми

$$E_F = p_F^2 / 2m \approx (1,5 \cdot 10^{-19})^2 / 2 \cdot 9 \cdot 10^{-28} \approx 10^{-11} \text{ эрг} \approx 6 \text{ эВ}.$$

Температура вырождения

$$T_B = E_F / k \sim 6 \cdot 10^4 \text{ К}.$$

Последняя оценка показывает, что электронный газ в металлах при комнатной температуре сильно вырожден, и его распределение близко к ступенчатому.

По формуле (4.1.7) получаем оценку давления, производимого электронным газом в металле:

$$P = (2/5) N_1 E_F \sim 0,4 \cdot 10^{23} \cdot 10^{-11} = 0,4 \cdot 10^{12} \text{ дин/см}^2 \sim 4 \cdot 10^5 \text{ атм}.$$

4.2. Обратная решётка

4.2.1. Обратная решётка в случае прямоугольной кристаллической решётки

В кристалле электрон находится в поле, создаваемом всеми остальными электронами и остовами атомов, расположенных в узлах решётки. Соответствующий эффективный потенциал $U(\mathbf{r})$ является периодическим, отражающим симметрию кристалла:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{r}). \quad (4.2.1)$$

В случае трёхмерной ортогональной решётки период \mathbf{a} может быть выражен через основные периоды: $\mathbf{a} = n_x \mathbf{a}_x + n_y \mathbf{a}_y + n_z \mathbf{a}_z$. С пространственной решёткой, задаваемой основными периодами $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$, связывают вспомогательную решётку, называемую *обратной*, которая строится следующим образом.

Рассмотрим сначала одномерный кристалл, в котором потенциальная энергия (для электронов) $U = U(x)$ является периодической функцией координаты x с основным периодом a : $U(x + a) = U(x)$. Функцию $U(x)$ можно разложить в ряд Фурье:

$$U(x) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} U_p \exp(ik_p x), \quad (4.2.2)$$

$$k_p = 2\pi p b, \quad b = 1/a. \quad (4.2.3)$$

Входящий в это разложение дискретный набор чисел k_p задаёт «каркас», разбивая всё пространство волновых чисел k на последовательность зон длиной $2\pi b$. Иными словами, мы получаем в k -пространстве структуру — «каркас» с периодом $2\pi b$, которая (с точностью до множителя 2π) и называется одномерной *обратной решёткой*.

Рассмотрим теперь трёхмерную ортогональную пространственную кристаллическую решётку с потенциалом $U(\mathbf{r})$ таким, что

$$U(x + a_x, y, z) = U(x, y, z),$$

$$U(x, y + a_y, z) = U(x, y, z),$$

$$U(x, y, z + a_z) = U(x, y, z).$$

Разложим $U(\mathbf{r})$ в тройной ряд Фурье по координатам x, y, z :

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= \sum_{n_x, n_y, n_z} \Phi(n_x, n_y, n_z) \exp \left[2\pi i (n_x b_x x + n_y b_y y + n_z b_z z) \right] = \\ &= \sum_{\mathbf{b}} U_{\mathbf{b}} \exp(2\pi i \mathbf{b} \mathbf{r}); \quad \mathbf{b} = n_x \mathbf{b}_x + n_y \mathbf{b}_y + n_z \mathbf{b}_z, \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned}$$

В результате получим трёхмерную обратную решётку, которая также является ортогональной. Базисные векторы этой решётки $\{\mathbf{b}_x, \mathbf{b}_y, \mathbf{b}_z\}$ параллельны соответствующим векторам прямой решётки, а их длины определяются простыми соотношениями: $b_i = (a_i)^{-1}$, $i = x, y, z$.

Легко найти в рассматриваемом случае связь объёмов элементарных ячеек прямой (V) и обратной (ν) решёток:

$$V = a_x a_y a_z, \quad \nu = b_x b_y b_z = \frac{1}{a_x a_y a_z} = \frac{1}{V}.$$

4.2.2. Обратная решётка в случае непрямоугольной прямой решётки

Построим обратную решётку для случая, когда исходная (прямая) решётка непрямоугольная.

Разложим потенциал $U(\mathbf{r})$ в тройной ряд Фурье:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} U_{\mathbf{b}} \exp(2\pi i \mathbf{b} \mathbf{r}). \quad (4.2.4)$$

Требование периодичности означает, что сдвиг на произвольный период

$$\mathbf{a} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

не меняет потенциала: $U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{r})$. Согласно (4.2.4) это значит, что $\exp[2\pi i \mathbf{b}(\mathbf{r} + \mathbf{a})] = \exp(2\pi i \mathbf{b} \mathbf{r})$, откуда следует, что

$$\mathbf{b} \mathbf{a} = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.2.5)$$

В частности, при сдвигах на основные периоды оказывается

$$\begin{aligned} \mathbf{b} \mathbf{a}_1 = p_1, \quad \mathbf{b} \mathbf{a}_2 = p_2, \quad \mathbf{b} \mathbf{a}_3 = p_3, \\ p_1, p_2, p_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

Это система трёх уравнений, определяющих вектор \mathbf{b} . Для её решения введём базисные векторы обратной решётки $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3\}$ и положим

$$\mathbf{b} = p_1 \mathbf{b}_1 + p_2 \mathbf{b}_2 + p_3 \mathbf{b}_3. \quad (4.2.7)$$

Найдём векторы $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ и \mathbf{b}_3 . Умножая последовательно (4.2.7) на векторы $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ и \mathbf{a}_3 , получим с учётом (4.2.6):

$$\begin{aligned} \mathbf{b} \mathbf{a}_1 &= p_1 (\mathbf{b}_1 \mathbf{a}_1) + p_2 (\mathbf{b}_2 \mathbf{a}_1) + p_3 (\mathbf{b}_3 \mathbf{a}_1) = p_1, \\ \mathbf{b} \mathbf{a}_2 &= p_1 (\mathbf{b}_1 \mathbf{a}_2) + p_2 (\mathbf{b}_2 \mathbf{a}_2) + p_3 (\mathbf{b}_3 \mathbf{a}_2) = p_2, \\ \mathbf{b} \mathbf{a}_3 &= p_1 (\mathbf{b}_1 \mathbf{a}_3) + p_2 (\mathbf{b}_2 \mathbf{a}_3) + p_3 (\mathbf{b}_3 \mathbf{a}_3) = p_3. \end{aligned}$$

Ввиду произвольности чисел p_1, p_2 и p_3 приходим к следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 \mathbf{a}_1 &= 1, \quad \mathbf{b}_2 \mathbf{a}_1 = 0, \quad \mathbf{b}_3 \mathbf{a}_1 = 0, \\ \mathbf{b}_1 \mathbf{a}_2 &= 0, \quad \mathbf{b}_2 \mathbf{a}_2 = 1, \quad \mathbf{b}_3 \mathbf{a}_2 = 0, \\ \mathbf{b}_1 \mathbf{a}_3 &= 0, \quad \mathbf{b}_2 \mathbf{a}_3 = 0, \quad \mathbf{b}_3 \mathbf{a}_3 = 1. \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

Отсюда следует, что

$$\mathbf{b}_1 \perp \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{b}_1 \perp \mathbf{a}_3, \quad \mathbf{b}_2 \perp \mathbf{a}_1, \quad \mathbf{b}_2 \perp \mathbf{a}_3, \quad \mathbf{b}_3 \perp \mathbf{a}_1, \quad \mathbf{b}_3 \perp \mathbf{a}_2.$$

Поэтому векторы $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ можно представить в виде

$$\mathbf{b}_1 = \beta_1 \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3, \quad \mathbf{b}_2 = \beta_2 \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1, \quad \mathbf{b}_3 = \beta_3 \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2.$$

Коэффициенты β_1, β_2 и β_3 нетрудно найти из условий $\mathbf{a}_i \mathbf{b}_i = 1, i = 1, 2, 3$:

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \frac{1}{\mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}.$$

Поскольку $V = \mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ — это объём параллелепипеда, построенного на векторах $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, т.е. объём элементарной ячейки кристалла, то получаем окончательно:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{V} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3, \mathbf{b}_2 = \frac{1}{V} \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_3 = \frac{1}{V} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2. \quad (4.2.9)$$

С помощью этих формул несложно показать, что объём элементарной ячейки обратной решётки равен $\nu = \mathbf{b}_1(\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = V^{-1}$.

4.2.3. Индексы Миллера

Положение узлов примитивной решётки даётся векторами

$$\mathbf{a} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3,$$

где коэффициенты n_1, n_2, n_3 пробегает целочисленные значения, а начало координат выбрано в одном из узлов. Положение узлов обратной решётки даётся аналогичной формулой:

$$\mathbf{b} = p_1 \mathbf{b}_1 + p_2 \mathbf{b}_2 + p_3 \mathbf{b}_3, \quad p_1, p_2, p_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Из последних равенств следует, что

$$\mathbf{ab} = p_1 n_1 + p_2 n_2 + p_3 n_3.$$

Обозначая координаты узлов прямой решётки как

$$n_1 \rightarrow x, n_2 \rightarrow y, n_3 \rightarrow z,$$

а коэффициенты p_1, p_2, p_3 как

$$p_1 \rightarrow h, p_2 \rightarrow k, p_3 \rightarrow l,$$

получим

$$\mathbf{ab} = hx + ky + lz.$$

При фиксированных значениях h, k, l равенство $\mathbf{ab} = \text{const} \equiv D$, или

$$hx + ky + lz = D \quad (4.2.10)$$

определяет кристаллографическую плоскость, обозначаемую как (h, k, l) . В кристаллографии целочисленные коэффициенты h, k, l называются *индексами Миллера*.

Пример. Найдём индексы Миллера для кристаллографической плоскости (рис. 4.2.1), отсекающей по осям координат отрезки, равные $(2a, 3b, 6c)$, где (a, b, c) — основные периоды решётки.

Для решения задачи запишем уравнение искомой плоскости:

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1, \quad (4.2.11)$$

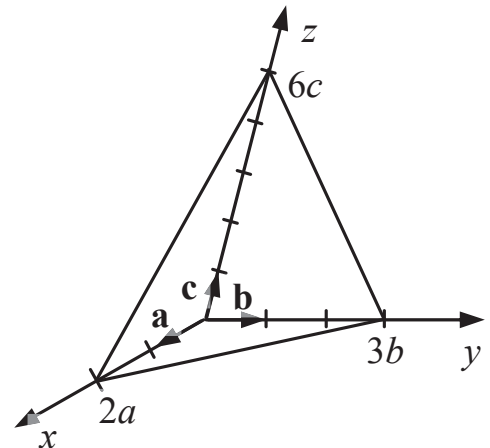


Рис. 4.2.1. Кристаллографическая плоскость $\{3, 2, 1\}$

где координаты x, y, z измеряются в единицах соответствующих периодов. Для рассматриваемой плоскости коэффициенты A, B, C равны

$$A = 2, \quad B = 3, \quad C = 6.$$

Перепишывая равенство (4.2.11) в форме (4.2.10), получаем

$$3x + 2y + z = 6,$$

откуда находим индексы Миллера:

$$h = 3, \quad k = 2, \quad l = 1.$$

Соответствующая плоскость кратко обозначается как $(3, 2, 1)$.

4.3. Электроны в периодическом потенциале

4.3.1. Волны Блоха

Запишем уравнение Шредингера для электрона в периодическом потенциале $U(\mathbf{r})$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (4.3.1)$$

Осуществим сдвиг на вектор трансляции \mathbf{a} :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) + U(\mathbf{r} + \mathbf{a})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = E\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}).$$

Так как $U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{r})$, то последнее уравнение можно переписать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = E\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}). \quad (4.2.2)$$

Отсюда видно, что функции $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ являются решениями одного и того же уравнения Шредингера (4.3.1), т.е. описывают одно и то же состояние. Поэтому они могут отличаться только фазовым множителем:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = C_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}), \quad |C_{\mathbf{a}}|^2 = 1. \quad (4.3.3)$$

Найдём общий вид волновой функции электрона в периодическом потенциале. Положим

$$C_{\mathbf{a}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} \quad (4.3.4)$$

и введем функцию $u(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r})$. Покажем, что $u(\mathbf{r})$ — периодическая функция. Действительно,

$$u(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{a})}\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{a})}[e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r})] = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}). \quad (4.3.5)$$

Таким образом, получаем

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u(\mathbf{r}), \quad (4.3.6)$$

где $u(\mathbf{r})$ — периодическая функция с периодом, равным периоду решётки. Состояния, описываемые волновыми функциями вида (4.3.6), называют *волнами Блоха* (F. Bloch, 1929).

4.3.2. Квазиимпульс и энергия электронов

Если бы поле U было всюду равно нулю, то волновая функция электрона была бы плоской волной

$$\psi = \psi_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (4.3.7)$$

и описывала бы электрон с импульсом $\hbar\mathbf{k}$. В случае ненулевого периодического потенциала величина $\hbar\mathbf{k}$ уже не может рассматриваться как обычный импульс. В самом деле, произведем в C_a замену:

$$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + 2\pi n\mathbf{b}, \quad (4.3.8)$$

в которой \mathbf{b} — произвольный вектор обратной решетки. Согласно (4.2.5) $\mathbf{b}\mathbf{a} = m$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — целое число. Поэтому

$$e^{i(\mathbf{k}+2\pi n\mathbf{b})\mathbf{a}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}. \quad (4.3.9)$$

Таким образом, при сдвиге на $2\pi n\mathbf{b}$ коэффициент C_a не меняется. Это означает, что вектор \mathbf{k} определен лишь с точностью до $2\pi n\mathbf{b}$, где n — произвольное целое число. Поэтому, в отличие от обычного импульса \mathbf{p} , величина $\hbar\mathbf{k}$ является *квазиимпульсом*.

Минимальная ячейка в \mathbf{k} -пространстве, отвечающая физически различным значениям волнового вектора \mathbf{k} , называется *зоной Бриллюэна*. Очевидно, что зона Бриллюэна есть элементарная ячейка обратной решётки.

Энергия электрона, т.е. собственные значения величины E , входящей в уравнение Шредингера (4.3.1), является функцией квазиимпульса $\hbar\mathbf{k}$. Поскольку согласно (4.3.9) значения квазиимпульса $\hbar\mathbf{k}$ и $\hbar(\mathbf{k} + 2\pi n\mathbf{b})$ физически неотличимы, энергия $E(\mathbf{k})$ может рассматриваться как периодическая функция квазиимпульса:

$$E(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}) = E(\mathbf{k}). \quad (4.3.10)$$

При таком подходе функция $E(\mathbf{k})$ не является однозначной: каждому значению \mathbf{k} отвечает бесконечное число значений E , образующих дискретный спектр. При этом вектор \mathbf{k} пробегает значения, принадлежащие только одной зоне Бриллюэна. Данное представление называется *приведённой зонной схемой*. Энергетический спектр почти свободного электрона, когда его энергия равна

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m, \quad (4.3.11)$$

сведённый к первой зоне, показан на рис. 4.3.1 (справа).

Другой подход, не содержащий такой неоднозначности, состоит в том, чтобы рассматривать $E(\mathbf{k})$ как функцию волнового вектора \mathbf{k} , определённую для всех значений \mathbf{k} : $0 \leq |\mathbf{k}| < \infty$, а не только на отрезке $[-\pi b, +\pi b]$. Такое представление называется *расширенной зонной схемой*. Соответствующий спектр показан на рис. 4.3.1 (слева). Сравнивая два представления спектра, нетрудно понять принцип сведения расширенной схемы к приведённой.

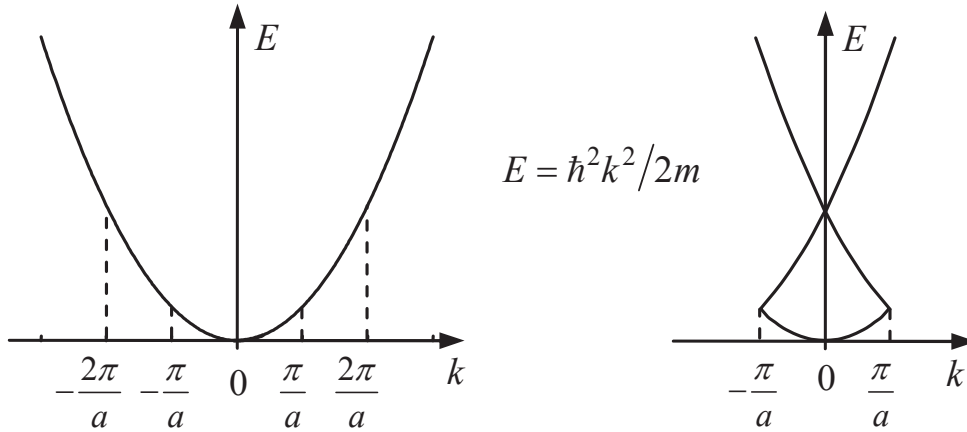


Рис. 4.3.1. Спектр энергии электрона в почти постоянном, но периодическом потенциале. Слева — расширенная зонная схема (обычное представление), справа — приведённая зонная схема (все участки спектра энергии сведены в первую зону Бриллюэна)

В стационарных условиях функции $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi^*(\mathbf{r})$ описывают состояния с одинаковой энергией, поскольку обе суть решения одного и того же уравнения Шредингера с энергией E . Это означает, что в случае периодического потенциала одной энергии соответствуют функции

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \text{ и } \psi^*(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}).$$

Поскольку им отвечают квазиимпульсы $\hbar\mathbf{k}$ и $-\hbar\mathbf{k}$, то энергия оказывается чётной функцией:

$$E(-\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}). \quad (4.3.12)$$

4.4. Зонная структура энергетического спектра электронов

4.4.1. Возникновение зонной структуры

В отдельном атоме спектр энергетических уровней электрона является дискретным. В периодическом же потенциале, образованном большим числом близко расположенных атомов, каждый отдельный уровень

размывается в зону. Расщепление изолированных уровней в зоны связано с тем, что электроны получают возможность перемещаться от одного атома к другому. Сказанное проиллюстрировано на рис. 4.4.1 и 4.4.2 на примере кристалла натрия.

Ширину зоны можно оценить, если учесть, что вследствие туннелирования время T нахождения электрона в одном атоме конечно. Это приводит к неопределённости его энергии: $\Delta E \sim \hbar/T$. В типичных случаях при $d \sim 1 \text{ \AA}$ величина T составляет 10^{-15} с, а неопределённость энергии составляет

$$\Delta E \sim 10^{-27} / 10^{-15} = 10^{-12} \text{ эрг} \sim 1 \text{ эВ}.$$

Полученная величина даёт типичный масштаб ширины энергетических зон в твёрдом теле.

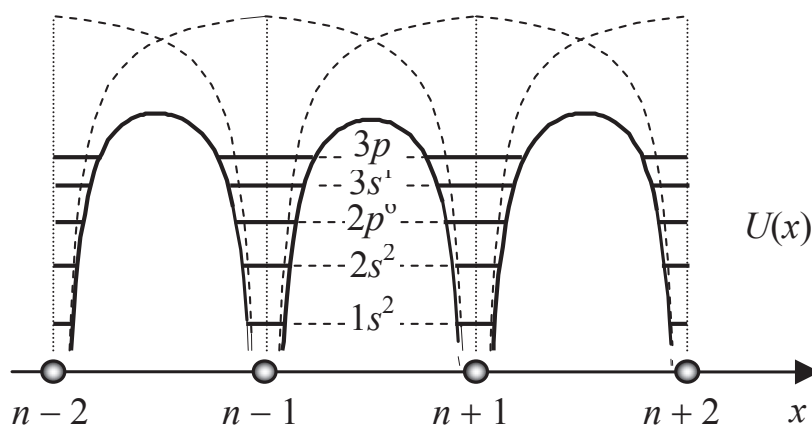
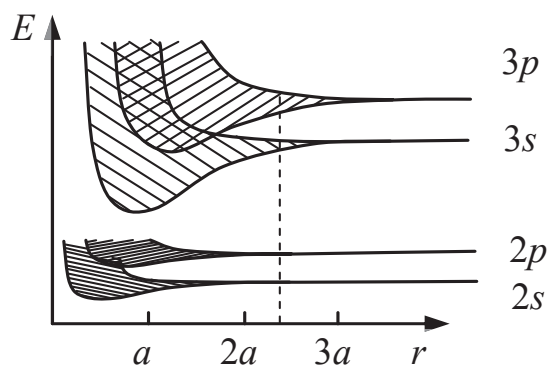


Рис. 4.4.1. Потенциальная энергия электрона в кристаллической решётке натрия. Отрезки горизонтальных линий указывают уровни энергии электрона в изолированном атоме (их спектроскопические обозначения приведены в центре рисунка). Шариками в нижней части рисунка изображены ионы решётки. Пунктирными линиями показаны графики потенциальной энергии электрона в изолированном атоме

Рис. 4.4.2. Изменение структуры энергетических уровней атома натрия и формирование энергетических зон при изменении расстояния между атомами; a — боровский радиус



Формирование энергетических зон из состояний непрерывного спектра проиллюстрировано на рис. 4.4.3. На этом рисунке слева пред-

ставлена обычная параболическая зависимость $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, отвечающая случаю потенциала $U = 0$ (свободное движение). При «включении» потенциала на границе зон, т.е. в точках $k = \pi n/a$, спектр расщепляется, как это показано на рис. 4.4.3 (справа): происходит нарушение непрерывности кривой $E(k)$. Разрывы спектра отвечают запрещённым зонам. Такая картина расщепления характерна для одномерного движения. Вместе с тем существуют потенциалы, для которых некоторые запрещённые зоны исчезают.

Показанная на рис. 4.4.3 функция $E(k)$ однозначна. Такое представление является расширенной зонной схемой. Эту же функцию можно рассматривать, перейдя к приведённой зонной схеме, определив её только в одной зоне Бриллюэна. В результате она оказывается многозначной.

На рис. 4.4.4 (слева) показан пример возможного сведения энергетического спектра к одной зоне Бриллюэна.

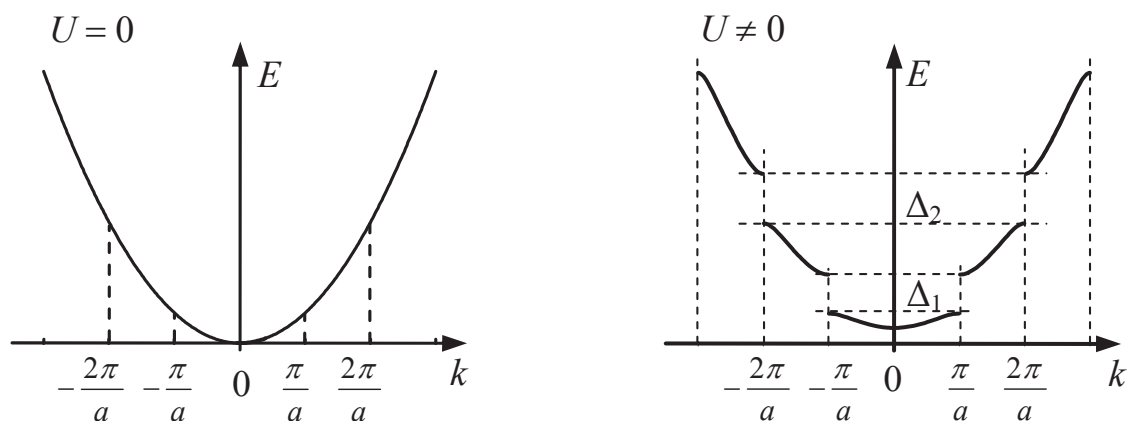


Рис. 4.4.3. Слева — спектр электрона при свободном движении, справа — спектр при движении в периодическом потенциале (расширенная зонная схема); Δ_1 , Δ_2 — запрещённые зоны

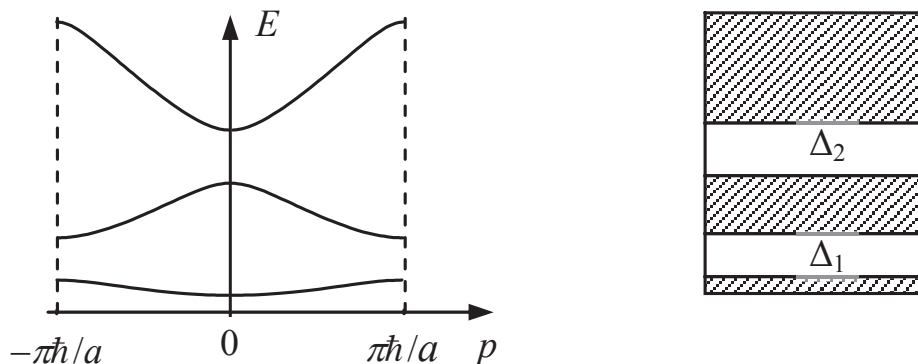


Рис. 4.4.4. Энергетический спектр электрона в кристалле, состоящий из отдельных разрешённых зон, разделённых запрещёнными зонами (Δ_1 , Δ_2). Слева — спектральные зависимости $E(p)$, справа — упрощённая зонная схема

Спектр представляет собой серию кривых, отвечающих разрешённым зонам, между которыми находятся запрещённые зоны. Если не интересоваться явной зависимостью $E(k)$ в пределах разрешённой зоны, то структуру спектра можно упрощённо представить в виде серии полос — зон, как это показано на рис. 4.4.4 (справа). Каждой точке зон отвечает некоторое значение квазиимпульса.

Используют два подхода к расчёту энергетического спектра.

1) *Модель сильной связи* подразумевает, что электрон сильно связан с отдельным атомом, т.е. проводит в атоме значительную часть времени и изредка совершает перескоки между соседними атомами. Вероятность перескока пропорциональна прозрачности барьера D , разделяющего соседние атомы.

Расчёт спектра этим методом приведён в разделе 4.4.2.

2) *Модель слабой связи* основана на приближении почти свободного движения электронов. В данном подходе в качестве начального приближения для решения уравнения Шредингера используются волновые функции свободного электрона: $\psi^{(0)} = a \exp(ikx - i\omega t)$. При этом энергетический спектр почти всюду передаётся обычным законом $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$. Отклонение от него имеет место только на границах зон Бриллюэна, где наблюдается брэгговское отражение.

4.4.2. Вывод закона дисперсии в модели сильной связи

Пусть имеется одномерная цепочка из N атомов. Обозначим волновую функцию электрона в n -м изолированном атоме как ψ_n . Будем считать, что эти волновые функции отвечают одному и тому же квантовому состоянию электрона с энергией $E = E_0$ во всех атомах.

Волновая функция электрона в изолированном атоме подчиняется уравнению Шредингера:

$$\hat{H}_0 \psi_0 = E_0 \psi_0, \text{ или } (\hat{T} + U_0) \psi_0(x) = E_0 \psi_0(x). \quad (4.4.1)$$

Здесь $\hat{T} = (-\hbar^2/2m) \partial^2 / \partial x^2$ — оператор кинетической энергии, $U_0(x)$ — потенциальная энергия взаимодействия электрона с атомом.

Рассмотрим теперь цепочку из $N + 1$ одинаковых атомов, расположенных последовательно с периодом a . В этом случае потенциальная энергия U даётся выражением

$$U(x) = \sum_{n=0}^N U_n(x), \quad U_n(x) = U_0(x - na). \quad (4.4.2)$$

Если атомы можно считать изолированными, то волновая функция электрона в n -м атоме удовлетворяет уравнению, эквивалентному (4.4.1):

$$(\hat{T} + U_n)\psi_n(x) = E_0\psi_n(x). \quad (4.4.3)$$

Здесь $U_n(x)$ — потенциальная энергия взаимодействия электрона с n -м атомом. Очевидно, что функции ψ_n отличаются лишь тем, что они локализованы в соответствующих атомах:

$$\psi_n(x) = \psi_0(x - na). \quad (4.4.4)$$

Функция $\psi_n(x)$ быстро убывает за пределами атома. Качественно закон убывания можно понять, рассматривая модельную задачу, когда атомы являются потенциальными ямами шириной $\sim r_0$, находящимися на большом расстоянии $\sim a \gg r_0$ друг от друга. Тогда вне n -го атома

$$\psi_n(x) \sim \exp(-q|x - na|). \quad (4.4.5)$$

Конкретное значение параметра q зависит от вида потенциальной энергии $U_0(x)$. Если яма прямоугольная с глубиной U_0 (рис. 4.4.5), то

$$q \approx \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$$

(E — энергия электрона).

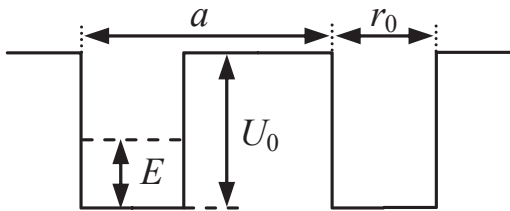


Рис. 4.4.5. Частица с энергией E в периодическом поле, представляющем последовательность прямоугольных потенциальных ям глубиной U_0

Учтём теперь, что при сближении атомов электрон получает возможность попасть из одного атома в другой. Запишем уравнение Шредингера для электрона в цепочке атомов:

$$E\Psi = (\hat{T} + U)\Psi. \quad (4.4.6)$$

Состояние каждого электрона будет представлять суперпозицию его состояний в разных атомах. При этом до тех пор, пока атомы находятся на большом расстоянии a друг от друга, вероятность таких перескоков остается малой, и состояние электрона в атоме меняется слабо: в окрестности n -го атома волновая функция $\Psi(x)$ остаётся близкой к $\psi_n(x)$. В соответствии с этим будем искать приближённое решение (в рамках приближения сильной связи) в виде

$$\Psi(x) = \sum_{n=0}^N C_n \psi_n(x). \quad (4.4.7)$$

Считаем, что волновые функции $\psi_n(x)$ удовлетворяют уравнению (4.4.3) и нормированы: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1$. Подставим (4.4.7) в (4.4.6):

$$\sum_{n=0}^N C_n (\hat{T} + U - E) \psi_n = 0.$$

Перепишем это равенство в виде

$$\sum_{n=0}^N C_n (\hat{T} + U_n + V_n) \psi_n = E \sum_{n=0}^N C_n \psi_n, \quad V_n = U - U_n.$$

Имея в виду уравнение (4.4.4), получаем

$$\sum_{n=0}^N C_n V_n \psi_n = (E - E_0) \sum_{n=0}^N C_n \psi_n. \quad (4.4.8)$$

Для нахождения коэффициентов C_n умножим (4.4.8) почленно на $\psi_m^*(x)$ и проинтегрируем по координате:

$$\sum_{n=0}^N A_{mn} C_n = (E - E_0) \sum_{n=0}^N S_{mn} C_n. \quad (4.4.9)$$

Здесь введены обозначения:

$$A_{mn} = \int \psi_m^* V_n \psi_n dx, \quad S_{mn} = \int \psi_m^* \psi_n dx. \quad (4.4.10)$$

Числа A_{mn} при $m \neq n$ называются *интегралами переноса* (они определяют вероятность перехода электрона между ямами m и n), а числа S_{mn} — *интегралами перекрытия*.

Условие нормировки базисных волновых функций даёт $S_{nn} = 1$ для всех n . Поскольку все атомы в цепочке одинаковы, то интегралы A_{mn} и S_{mn} не могут зависеть от того, в каком месте цепочки расположены m -й и n -й атомы. Следовательно, они зависят только от расстояния между атомами:

$$A_{mn} = A(|m - n|), \quad S_{mn} = S(|m - n|).$$

Далее учтём, что если функции ψ_n и ψ_m относятся к различным ямам, то интегралы A_{mn} и S_{mn} малы вследствие экспоненциального убывания волновых функций при удалении от своих центров локализации:

$$A_{mn} \sim \exp(-qa|m - n|), \quad S_{mn} \sim \exp(-qa|m - n|). \quad (4.4.11)$$

Наконец, коэффициент A_{nn} в рассматриваемых условиях также экспоненциально мал. Действительно, поскольку $V_n = U - U_n$, то согласно (4.4.10) наибольшие слагаемые в нём есть

$$A_{nn} = \int \psi_n^* \psi_n (U_{n-2} + U_{n-1} + U_{n+1} + U_{n+2}) dx.$$

Вследствие того, что величина $\psi_n^* \psi_n$ локализована в n -й яме, а интегрирование выполняется по областям всех прочих ям, оказывается

$$A_{nn} \sim c_1 \exp(-2qa) + c_2 \exp(-4qa) + \dots \quad (4.4.12)$$

Имея в виду, что вероятность перескоков электрона экспоненциально убывает с ростом расстояния между атомами, ограничимся переходами только между соседними атомами:

$$n \leftrightarrow n-1, \quad n \leftrightarrow n+1.$$

Обозначим

$$A_{n-1,n} = A_{n+1,n} = A, \quad S_{n-1,n} = S_{n+1,n} = S.$$

Тогда система уравнений (4.4.9) примет более простой вид:

$$(E - E_0)[C_n + S(C_{n-1} + C_{n+1})] = A_{nn}C_n + A(C_{n-1} + C_{n+1}).$$

Ввиду малости коэффициентов A_{nn} и A разность $E - E_0$ также является экспоненциально малой величиной. Поэтому малой поправкой $S(C_{n-1} + C_{n+1})$ в левой части можно пренебречь. Слагаемое $A_{nn}C_n$ также можно отбросить, поскольку оно, согласно (4.4.12), имеет более высокий порядок малости, чем остальные. Таким образом, мы приходим к системе уравнений

$$(E - E_0)C_n - A(C_{n-1} + C_{n+1}) = 0. \quad (4.4.13)$$

Следует иметь в виду, что для атомов на границах цепочки ($n = 0$ и $n = N$) отсутствуют переходы за пределы цепочки. Это можно учесть, формально полагая $C_{-1} = C_{N+1} = 0$.

Рассмотрим два предельных случая.

1) Система из двух атомов. В этом случае из (4.4.13) имеем систему двух уравнений:

$$\begin{aligned} (E - E_0)C_1 &= AC_2, \\ (E - E_0)C_2 &= AC_1. \end{aligned} \quad (4.4.14)$$

Ее решение показывает, что уровень энергии E_0 расщепляется на два подуровня:

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= E_0 - A, \\ E^{(2)} &= E_0 + A. \end{aligned} \quad (4.4.15)$$

Это значит, что вместо одного уровня в изолированном атоме возникают два уровня в системе атомов.

2) *Бесконечная цепочка атомов.* В этом пределе будем искать решение уравнения (4.4.13) в виде

$$C_n = C_0 e^{ikna} \quad (4.4.16)$$

(a — расстояние между соседними атомами). Подстановка этого выражения в (4.4.13) даёт

$$E = E_0 + A e^{-ika} + A e^{ika} = E_0 + 2A \cos(ka). \quad (4.4.17)$$

Отсюда следует, что в такой цепочке энергия электрона может принимать непрерывный набор значений. Это означает, что вместо дискретного уровня E_0 возникла зона разрешённых значений энергий.

Аналогичным образом и другие уровни энергии, являющиеся дискретными в случае изолированных атомов, превращаются в зоны при сближении атомов. Результирующая зонная схема показана на рис. 4.4.6.

Знак коэффициента A (интеграла переноса) зависит от номера зоны. Для зонной структуры, показанной на рис. 4.4.4 (слева), имеем: $A_1 < 0$, $A_2 > 0$, $A_3 < 0$ и так далее.

В соответствии с (4.4.7), (4.4.16) волновая функция электрона в бесконечной цепочке имеет вид

$$\Psi(x) = C_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikna} \psi_0(x - na).$$

Отметим её важное свойство:

$$\Psi(x + a) = C_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikna} \psi_0(x - (n-1)a) = C_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik(n+1)a} \psi_0(x - na) = e^{ika} \Psi(x).$$

Следовательно, она является функцией Блоха, т.е. качественно правильно описывает движение электрона в периодическом потенциале.

Результат (4.4.18) можно обобщить на трёхмерный случай. Предполагая, например, что кристалл обладает прямоугольной решёткой с основными периодами a_x, a_y, a_z , а $\mathbf{k} = \{k_x, k_y, k_z\}$ — волновой вектор, в тех же приближениях, что и выше, получим закон дисперсии

$$E = E_0 + 2 \left[A_x \cos(k_x a_x) + A_y \cos(k_y a_y) + A_z \cos(k_z a_z) \right]. \quad (4.4.19)$$

Следует иметь в виду, что модель сильной связи подразумевает большие расстояния между атомами, когда вероятность перескока электрона между ними мала. В реальных твёрдых телах (в частности, в металлах) такое допущение неверно. Поэтому рассмотренное приближение не может претендовать на количественное описание электронного спектра, но позволяет понять физическую причину образования зонной структуры и объяснить некоторые закономерности.

Наконец, отметим, что вследствие периодичности потенциала в металлах зонная структура спектра возникает и в случае слабой связи электронов с атомами. При этом отдельные зоны формируются из состояний непрерывного спектра энергий. Кратность вырождения уровней составляет $g = 2$, поскольку на каждом уровне могут разместиться два электрона с проекциями спина: $s_z = -1/2$ и $s_z = +1/2$.

4.5. Диэлектрики, полупроводники, металлы

4.5.1. Число состояний в зоне

Равенство (4.4.13) представляет собой систему $N + 1$ линейных однородных уравнений. Для её совместности необходимо обращение в нуль детерминанта, что приводит к уравнению $(N + 1)$ -й степени относительно энергии E , имеющему $N + 1$ решение. Это значит, что в результате сближения атомов вместо одного энергетического уровня E_0 появляется серия из $N + 1$ различных уровней — по числу атомов в цепочке. Кроме того, нетрудно понять, что если уровень E_0 в изолированном атоме имел кратность вырождения g , то каждый из уровней системы будет иметь ту же кратность вырождения. Следовательно, электронная «ёмкость» зоны не изменяется при объединении атомов в систему.

4.5.2. Валентные зоны и зоны проводимости

В соответствии с принципом Паули электроны в основном состоянии заполняют все уровни от низшего до некоторого максимального. При этом в одно квантовое состояние может попасть не более двух электронов — со спинами $s_z = +1/2$ и $s_z = -1/2$.

Если зоны формируются из уровней энергии непрерывного спектра (т.е. в случае слабой связи электронов с атомами), то кратность вырождения следует брать $g = g_s = 2$.

Разрешённая зона, полностью заполненная электронами, называется *валентной зоной*. Если же разрешённая зона заполнена лишь частично (или вообще свободна), то она называется *зоной проводимости*.

4.5.3. Диэлектрики, полупроводники, металлы

Если в самой нижней зоне проводимости нет электронов, то вещество не проводит электрический ток. Действительно, чтобы возбудить небольшой ток, нужно немного увеличить энергию электронов. Однако все состояния в валентной зоне заняты, и перевести электрон в состояние с большей или меньшей энергией невозможно. Это значит, что ускорить электрон, находящийся в этой зоне, нельзя, и ток не возбуждается. Ток можно возбудить, только если приложить достаточно сильное поле, в результате чего произойдут межзонные переходы, и в зоне проводимости появятся электроны. Такое вещество обладает свойствами изолятора. Если при этом ширина запрещённой зоны $\Delta > 3$ эВ, то вещество называется *диэлектриком*. Если же $\Delta < 3$ эВ, то вещество относят к *полупроводникам*. Для полупроводников типично $\Delta \sim 1$ эВ. Зонная схема диэлектриков и полупроводников показана на рис. 4.5.1.

Рис. 4.5.1. Зонная схема диэлектриков и полупроводников. Заштрихована полностью заполненная зона (валентная зона), пустым прямоугольником показана свободная зона (зона проводимости)

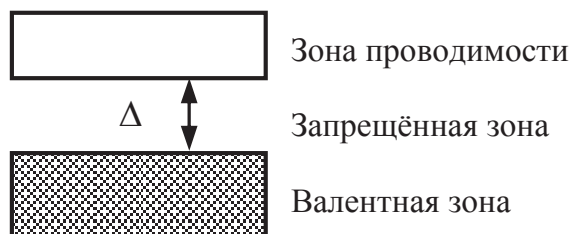


Рис. 4.5.2. Зонная схема металлов. Полностью заполненная зона (валентная зона) заштрихована, полупустым прямоугольником показана зона проводимости

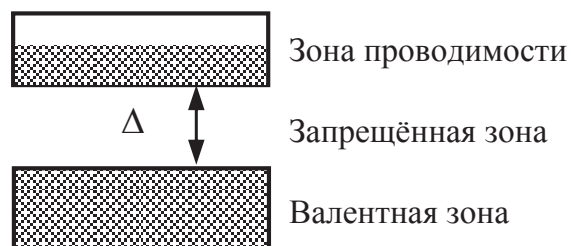
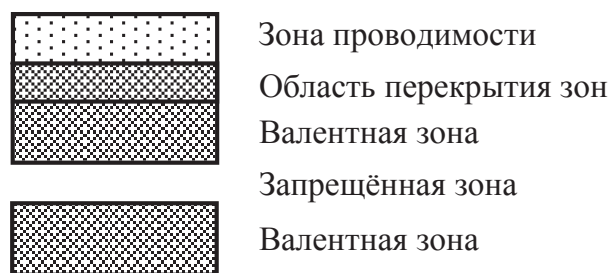


Рис. 4.5.3. Зонная схема проводников с перекрывающимися зонами. Валентная зона частично перекрывается зоной проводимости, в результате чего зоны оказываются заполненными лишь частично



Элементы первой группы таблицы Менделеева отдают по одному электрону в s -зону, поэтому зона заполнена наполовину. Это значит, что внешнее электрическое поле может увеличить энергию электронов, переведя их в свободные состояния с большей энергией. Иначе говоря, в таком веществе электрическое поле возбуждает ток. Такие вещества называются проводниками — металлами. Соответствующая зонная схема показана на рис. 4.5.2.

Атомы элементов второй группы (Be, Mg, Ca, Zn) отдают в зону проводимости по два электрона. Однако из-за особенностей их кристаллической решётки нижняя зона проводимости может оказаться частично заполненной электронами, в результате чего вещество приобретает ненулевую проводимость, т.е. является металлом. Это явление возникает, например, когда имеет место перекрытие валентной зоны и свободной зоны (зоны проводимости). В данном случае образуется так называемая *гибридная зона*, которая заполнена электронами лишь частично (рис. 4.5.3).

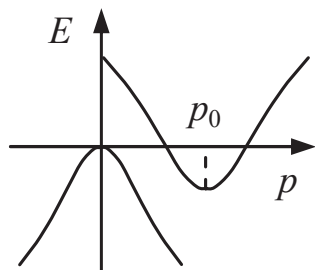


Рис. 4.5.4. Пример спектральных зависимостей в случае, когда зоны частично перекрываются

Пример спектральных зависимостей для случая, когда зоны частично перекрываются, показан на рис. 4.5.4.

4.6. Эффективная масса электрона

Если бы электрон был свободным, его кинетическая энергия давалась бы выражением $E = p^2/2m$. Отсюда находим $m^{-1} = d^2 E / dp^2$.

В кристалле для энергии вблизи экстремума (дна или вершины) зоны в соответствии с (4.4.17) имеем: $E(p) = E_0 + \alpha p^2$. По аналогии со случаем

свободного электрона можно ввести *эффективную массу* электрона m^* соотношением

$$\frac{1}{m^*} = \frac{d^2 E}{dp^2} \Rightarrow (m^*)^{-1} = 2\alpha. \quad (4.6.1)$$

Эта величина зависит как от конкретного вида потенциальной энергии $U_0(x)$, так и от расстояния между атомами (т.е. от вероятности пере-скоков электрона между атомами), и в общем случае отличается от массы свободного электрона.

Для состояний вблизи дна зоны $\alpha > 0$, и здесь эффективная масса положительна: $m^* > 0$. Вблизи верха зоны $\alpha < 0$, так что $m^* < 0$.

Мы рассмотрели одномерный случай. В трёхмерном случае вблизи экстремума (или седловой точки) спектр $E(\mathbf{p})$ можно записать (в главных осях) в виде

$$E = E_0 + \alpha_x p_x^2 + \alpha_y p_y^2 + \alpha_z p_z^2.$$

Соответственно возникают три различные эффективные массы, отвечающие движению электрона вдоль какой-либо из главных осей:

$$\left(m^{*-1}\right)_i = \partial^2 E / \partial p_i^2, \quad i = x, y, z. \quad (4.6.2)$$

В тензорной форме (без привязки к главным осям) это равенство записывают в форме

$$\left(m^{*-1}\right)_{ik} = \partial^2 E / \partial p_i \partial p_k, \quad i, k = x, y, z. \quad (4.6.3)$$

Таким образом, эффективная масса является тензором, величина и знак компонент которого зависят от того, в каких точках спектра они вычисляются. В частном случае кристалла с кубической симметрией эффективная масса не зависит от направления движения электрона и сводится к скаляру. Если же, например, закон дисперсии имеет вид

$$E = E_0 - A_x \cos(k_x a_x) - A_y \cos(k_y a_y) - A_z \cos(k_z a_z),$$

то в области малых импульсов ($ka \ll 1$) получаем три эффективных массы:

$$m_x = \hbar^2 / A_x a_x^2, \quad m_y = \hbar^2 / A_y a_y^2, \quad m_z = \hbar^2 / A_z a_z^2.$$

В зависимости от зоны энергетического спектра (и соответствующего знака коэффициента A_i) эти величины могут быть как положительными, так и отрицательными.

К понятию эффективной массы можно прийти, рассматривая ускорение электронов под действием внешней силы. Ограничимся случаем одномерного движения.

Зная закон дисперсии $E(p)$, можно найти скорость электронов. Действительно, групповая скорость волны равна $v = d\omega/dk = dE/dp$. Эту формулу можно получить также из следующих рассуждений. Работа силы F на участке $dx = vdt$ равна $\delta A = Fdx = Fvdt$. Она идёт на изменение энергии тела, так что

$$dE = Fvdt = (dp/dt)vdt = vdp \Rightarrow v = dE/dp.$$

Рассмотрим одномерное движение электрона в зоне под действием силы F . Ускорение равно

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dp} \right) = \frac{d}{dp} \left(\frac{dE}{dp} \right) \frac{dp}{dt} = \frac{d^2 E}{dp^2} F.$$

Вводя эффективную массу как коэффициент пропорциональности между силой и ускорением ($a = F/m^*$), приходим к выражению (4.6.1).

Положительная эффективная масса означает, что под действием электрического поля E электрон приобретает ускорение против поля

(как и обычный, свободный электрон). Если же эффективная масса отрицательна, то ускорение электрона будет направлено по полю, как у частицы с положительным зарядом.

Таким образом, электрон в свободной зоне при включении внешнего электрического поля вначале ускоряется (его скорость растёт), а затем, после смены знака эффективной массы, тормозится.

Физическая причина такого поведения состоит в следующем. При малых импульсах длина волны электрона велика, среда выглядит практически сплошной, а волны, отражённые от разных атомных слоёв, гасят друг друга. Отсутствие отражённой волны означает, что передаваемый решётке импульс мал и энергия, сообщаемая электрону, практически полностью идёт на его ускорение.

При увеличении импульса ($p = \hbar k$) длина волны ($\lambda = h/p = 2\pi/k$) уменьшается, растёт число атомных слоёв, для которых возможно брэгговское отражение. В результате появляется отражённая волна. В свою очередь это означает, что кристалл как целое принимает на себя часть энергии электрона. Иными словами, уменьшается поток энергии в прямом направлении, групповая скорость волны уменьшается.

На границе зоны Бриллюэна импульс электрона равен $\hbar k = 2\pi\hbar/\lambda = \pi\hbar/a$ (a — период решётки в направлении распространения волны). При этом его длина волны составляет $\lambda = 2a$. Но это равенство совпадает с условием Брэгга–Вульфа отражения волны от кристалла. Это значит, что волна полностью отражается от кристаллической структуры, и в среде возникает стоячая волна, которой отвечает нулевая групповая скорость. Весь импульс электрона передаётся кристаллу как целому.

Следует подчеркнуть, что для квазичастиц — «электронов в металле» — скорость и импульс не связаны простой зависимостью $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. В качестве примера рассмотрим спектр, показанный на рис. 4.6.1:

$$E = E_0 (1 - \cos ka), \quad k = p/\hbar. \quad (4.6.4)$$

Скорость электрона

$$v = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{E_0 a}{\hbar} \sin ka. \quad (4.6.5)$$

Соотношения (4.6.4) и (4.6.5) устанавливают связь энергии, импульса и скорости электрона, причём

$$\left(\frac{E}{E_0} - 1\right)^2 + \left(\frac{v}{v_0}\right)^2 = 1, \quad v = v_0 \sin \frac{pa}{\hbar}, \quad v_0 = \frac{E_0 a}{\hbar}.$$

График функций $v(p) = dE(p)/dp$ показан на рис. 4.6.1 (справа).

Рассматривая пару функций $\{E(p), v(p)\}$, получаем заданную в параметрическом виде связь энергии и скорости электрона $E(v)$. Эта зависимость показана на рис. 4.6.2. Видно, что функция $E(v)$ неоднозначная. Это формально связано с немонотонной зависимостью скорости от импульса (рис. 4.6.1 справа).

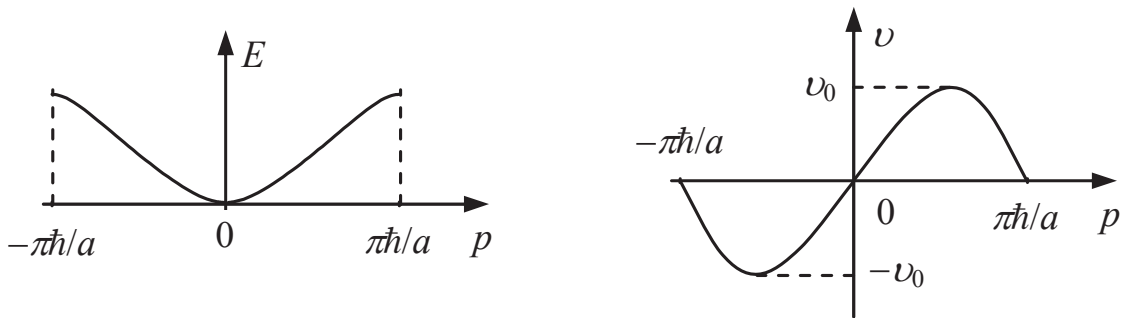
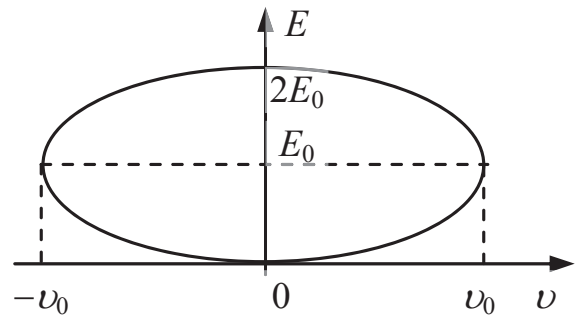


Рис. 4.6.1. Энергетический спектр электрона в разрешённой зоне (слева) и зависимость скорости электрона от импульса (справа)

Рис. 4.6.2. График зависимости энергии электрона от его скорости — двужанная кривая



Глава 5. МЕТАЛЛЫ

5.1. Электронная теплоёмкость металлов

При не слишком высоких температурах электронный газ в металлах сильно вырожден: все нижние состояния зоны проводимости заняты электронами, так что они не могут поглотить энергию, перейдя в соседние, более высокие состояния. Энергию могут поглотить только электроны из узкого слоя вблизи поверхности Ферми шириной $\Delta E \sim 2kT$. Оценим их число.

Считаем поверхность Ферми (в импульсном пространстве) сферой радиуса $p_F = \sqrt{2mE_F}$. Её полный объём равен $\Gamma = \frac{4}{3}\pi p_F^3$. Объём приповерхностного слоя толщиной Δp равен $\Delta\Gamma \approx 4\pi p_F^2 \Delta p$. Имея в виду, что $p = \sqrt{2mE}$, находим

$$\frac{\Delta\Gamma}{\Gamma} \approx 3 \frac{\Delta p}{p_F} \approx \frac{3}{2} \frac{\Delta E}{E_F}.$$

Учтём теперь, что $\Delta E \sim 2kT$. Это даёт

$$\frac{\Delta\Gamma}{\Gamma} \approx \frac{3kT}{E_F}.$$

Полагая $T \approx 300$ К, $E_F/k \approx 60\,000$ К, находим, что $\Delta\Gamma/\Gamma \sim 0,015 \ll 1$.

Один моль металла содержит $\sim N_A \approx 6 \cdot 10^{23}$ электронов. Из них поглощать энергию могут только $\Delta n \sim N_A (\Delta\Gamma/\Gamma) \sim N_A (3kT/E_F)$. Считая, что на каждый подвижный электрон приходится теплоёмкость $3k/2$, получаем теплоёмкость электронного газа (в расчёте на 1 моль)

$$C_V^{(\text{эл})} \approx \frac{3}{2} k \cdot \Delta n \approx \frac{9}{2} R \frac{kT}{E_F} \quad (5.1.1)$$

(учтено, что $kN_A = R$). Более точный расчёт приводит к выражению

$$C_V^{(\text{эл})} = \frac{\pi^2}{2} R \frac{kT}{E_F}. \quad (5.1.2)$$

Поскольку при $T \ll \Theta_D$ молярная решёточная теплоёмкость равна

$$C_V^{(\text{реш})} = \frac{12\pi^4}{5} R \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3,$$

то электронная и решёточная теплоёмкости сравниваются при температуре

$$T_{\text{кр}} = \sqrt{\frac{5}{24\pi^2} \frac{k\Theta^3}{E_F}} \approx \sqrt{\frac{k\Theta^3}{50E_F}}. \quad (5.1.3)$$

При $T > T_{\text{кр}}$ вклад электронов в теплоёмкость мал: $C_V^{(\text{эл})} < C_V^{(\text{реш})}$. Полагая для оценки $\Theta \sim 100$ К, $E_F/k \sim 5 \cdot 10^4$ К, получаем: $T_{\text{кр}} \sim 0,5$ К.

5.2. Теплопроводность металлов

5.2.1. Электрон-фононное взаимодействие в металлах

Остановимся сначала на поведении электронов в металле при конечной (ненулевой) температуре. Электроны в металле — это не обычные частицы, а *квазичастицы*, описываемые блоховскими волновыми функциями. Переход к квазиэлектронам *полностью* учитывает (структурой волновой функции и законом дисперсии) взаимодействие электронов с периодической решёткой, образованной покоящимися ионами. Поэтому в строго периодической структуре квазиэлектроны не взаимодействуют с ионами. Однако если ионы совершают тепловые колебания, то периодичность решётки нарушается. При этом блоховские волновые функции уже не описывают точно поведение электрона, и его состояние меняется. Поскольку тепловые колебания решётки интерпретируются как рождение фононов, то изменение состояния электрона можно рассматривать как результат взаимодействия с фононами: чем выше температура, тем больше фононов в системе и с тем большей вероятностью меняется состояние электрона в металле.

Дефекты кристалла и примеси также нарушают периодичность решётки. Поэтому блоховский электрон может рассеиваться также на дефектах и примесях.

Таким образом, длина свободного пробега электрона в металле ограничивается рассеянием на фононах, примесях и дефектах.

5.2.2. Квантовомеханическая теория теплопроводности металлов

Для нахождения температурной зависимости теплопроводности металла будем исходить из обычного выражения для теплопроводности:

$$\kappa = C_V \nu l / 3,$$

в котором следует учесть квантовомеханические закономерности.

Предположим, что основной вклад в теплопроводность металла дают электроны (поскольку они быстро движутся и их число велико). Тогда в качестве величины C_V следует подставить электронную теплоёмкость

$$C_V = \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{E_F} kN_1 \sim T$$

(считаем, что концентрация электронов и атомов одинакова и равна N_1).

Далее, учтём, что электронный газ в металле сильно вырожден. Это значит, что только электроны в узком слое вблизи поверхности Ферми могут рассеиваться и менять своё состояние. Для остальных же электронов нет близко расположенных свободных состояний, в которые они могли бы перейти. Поэтому следует положить $\nu \approx \nu_F$.

Наконец, считая, что ограничение теплопроводности возникает вследствие рассеяния электронов на фононах, оценим длину свободного пробега как

$$l \sim l_{э-ф} \approx \left(n_{\text{ф}} \sigma_{э-ф} \right)^{-1},$$

где $n_{\text{ф}}$ — концентрация фононов, а $\sigma_{э-ф}$ — сечение электрон-фононного рассеяния.

Пусть сначала температура не мала: $T \gg \Theta$. Тогда сечение $\sigma_{э-ф}$ для оценок можно считать постоянным. Качественно причина в том, что в рассматриваемой области температур наибольшее число фононов имеет импульс $p_{\text{ф}} \approx \pi \hbar / a$ и длину волны $\lambda = 2\pi \hbar / p \approx 2a$. Это значит, что масштаб нарушения периодичности решётки оказывается $\sim 2a$ и почти не зависит от температуры.

Число фононов при нормальных температурах растёт как $n_{\text{ф}} \sim N_1 T / \Theta$. В результате получаем

$$\kappa^{(\text{эл})} = \frac{1}{3} C_V^{(\text{эл})} \nu l_{э-ф} \sim kN_1 \frac{kT}{E_F} \nu_F \frac{1}{(N_1 T / \Theta) \sigma} \sim k \frac{k\Theta}{p_F \sigma} \approx \text{const.}$$

Таким образом, коэффициент теплопроводности при $T \gg \Theta$ практически не зависит от температуры. Это соотношение хорошо подтверждается в экспериментах в случае чистых металлов.

Если в металле присутствуют дефекты и примеси с концентрациями $n_{\text{деф}}$ и $n_{\text{пр}}$, то длина свободного пробега электрона ограничивается рассеянием не только на фононах, но и на этих неоднородностях:

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_{\text{э-ф}}} + \frac{1}{l_{\text{э-деф}}} + \frac{1}{l_{\text{э-пр}}} = n_{\text{ф}} \sigma_{\text{э-ф}} + n_{\text{деф}} \sigma_{\text{э-деф}} + n_{\text{пр}} \sigma_{\text{э-пр}},$$

где $l_{\text{э-ф}}$, $l_{\text{э-деф}}$ и $l_{\text{э-пр}}$ — длины свободного пробега, ограничиваемые соответственно электрон-фоонными взаимодействиями, взаимодействием электронов с дефектами кристаллической структуры и с примесями. Поскольку концентрации $n_{\text{деф}}$ и $n_{\text{пр}}$ от температуры не зависят, то для теплопроводности получаем уточнённое соотношение:

$$\kappa^{(\text{эл})} = \frac{\kappa_0}{1 + \beta T^{-1}},$$

в котором κ_0 — коэффициент теплопроводности, учитывающий только электрон-фоонные столкновения, а поправка βT^{-1} учитывает дополнительные механизмы рассеяния.

При понижении температуры число фоонов $n_{\text{ф}} \sim T^3$. Соответственно длина свободного пробега $l_{\text{э-ф}} \sim n_{\text{ф}}^{-1} \sim T^{-3}$. И поскольку теплоёмкость электронного газа $C_V^{(\text{эл})} \sim kT/E_F$, то электронная теплопроводность $\kappa^{(\text{эл})} = C_V^{(\text{эл})} v_F l_{\text{э-ф}} / 3 \sim T^{-2}$.

При дальнейшем понижении температуры длина пробега электронов ограничивается только рассеянием на дефектах и примесях и не зависит от температуры: $l \approx \text{const}$. Поэтому $\kappa^{(\text{эл})} = C_V^{(\text{эл})} v_F l / 3 \sim T$. Вместе с тем при таких температурах существенную роль начинает играть решёточная теплопроводность (разделы 3.4.3 и 3.4.4).

График зависимости электронной теплопроводности от температуры показан на рис. 5.2.1. Экспериментальные данные подтверждают эту зависимость в случае хороших металлов.

5.2.3. Электронная и решёточная теплопроводность

Выше мы рассмотрели теплопроводность металлов, обусловленную электронами. Вместе с тем существует и фоонный (решёточный)

механизм теплопроводности. Как мы видели раньше (см. раздел 3.4.3), решёточная теплопроводность при $T > \Theta$ зависит от температуры как

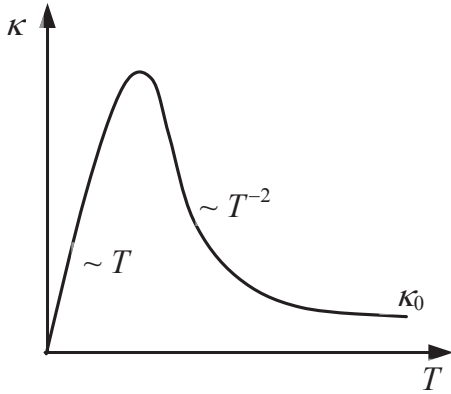


Рис. 5.2.1. Зависимость электронной теплопроводности металла от температуры

$\kappa^{(\text{реш})} \sim T^{-1}$. Соответственно полный коэффициент теплопроводности даётся суммой слагаемых, одно из которых отвечает электронному механизму теплопроводности, а другое — фононному. Покажем, что при $T > \Theta$ доминирует электронный механизм. Для этого вопрос оценим относительную роль этих механизмов.

Запишем выражение для коэффициента теплопроводности:

$$\kappa = \frac{1}{3} C v l,$$

где C — теплоёмкость вещества (обусловленная каким-либо видом переносчиков), приходящаяся на единицу объёма, v — скорость переносчиков, l — длина свободного пробега. Соответственно относительная роль двух указанных механизмов определяется отношением

$$\alpha = \frac{\kappa^{(\text{эл})}}{\kappa^{(\text{реш})}} = \frac{C^{(\text{эл})} v^{(\text{эл})} l^{(\text{эл})}}{C^{(\text{реш})} v^{(\text{реш})} l^{(\text{реш})}}.$$

Как было сказано выше, скорость электронов следует принять равной скорости Ферми v_F , поскольку электронный газ в металлах сильно вырожден, и только электроны вблизи поверхности Ферми участвуют в переносе тепла. Для скорости фононов следует взять скорость звука s .

Длина свободного пробега носителей оценивается формулой

$$l = (n_{\text{рас}} \sigma)^{-1},$$

где $n_{\text{рас}}$ — концентрация рассеивающих центров, σ — сечение рассеяния носителей на этих центрах, т.е. $n_{\text{рас}} = n_{\text{ф}}$. Считая, что роль дефектов и примесей мала, нужно учесть рассеяние как электронов, так и фононов только на фононах. Соответствующие сечения $\sigma_{\text{э-ф}}$ и $\sigma_{\text{ф-ф}}$ можно считать близкими по величине, поскольку они определяются де Бройлевской длиной волны фононов, которую при высоких температурах можно считать почти постоянной:

$$\sigma_{\text{э-ф}} \sim \sigma_{\text{ф-ф}} \sim a^2.$$

Соответственно оказывается $l^{(\text{реш})} \sim l^{(\text{эл})}$.

Наконец, учтём, что при температурах, превышающих температуру Дебая ($T > \Theta$), для электронной и решёточной теплоёмкостей можно воспользоваться выражениями

$$C^{(\text{эл})} = \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\varepsilon_F} nk, \quad C^{(\text{реш})} = 3N_1 k.$$

Эти выражения справедливы, поскольку электронный газ в металлах сильно вырожден, а решёточная теплоёмкость при $T \gg \Theta$ определяется законом Дюлонга–Пти. В приведённых формулах величины n и N_1 есть соответственно концентрации электронов и атомов (ионов) металла. Если металл имеет простую кубическую решётку, а каждый атом отдаёт по одному электрону, то $N_1 = n$.

Таким образом, получаем

$$\alpha = \frac{\kappa^{(\text{эл})}}{\kappa^{(\text{реш})}} = \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\varepsilon_F} \frac{nk}{3Nk} \frac{v_F}{s} \approx \frac{3}{2} \frac{kT}{\varepsilon_F} \frac{v_F}{s}.$$

Поскольку $\varepsilon_F = p_F^2/2m = p_F v_F/2$, то перепишем это выражение в виде

$$\alpha \sim 3kT/p_F s.$$

Далее выразим скорость звука через температуру Дебая:

$$k\Theta = \hbar\omega_D = \hbar k_D s \Rightarrow s = k\Theta/\hbar k_D.$$

Имея в виду, что $\hbar k_D \approx p_F \approx \pi\hbar/a$, окончательно получаем

$$\alpha \sim 3T/\Theta.$$

Поскольку рассматривается область высоких температур: $T \gg \Theta$, то оказывается $\alpha \gg 1$.

5.3. Электропроводность металлов

5.3.1. Закон Ома. Классическая теория Друде

Рассмотрим явление электропроводности металлов сначала на основе классической теории. Под действием электрического поля \mathbf{E} электрон приобретает ускорение $\mathbf{a} = e\mathbf{E}/m_e$. В течение времени свободного пробега t он набирает скорость $\mathbf{v} = e\mathbf{E}\tau/m$, после чего вследствие столкновения с рассеивающими центрами его скорость обращается в среднем в нуль (усреднение — по всем электронам, участвующим в производстве тока). Средняя скорость за это время составит $\mathbf{u} = e\mathbf{E}\tau/2m_e = b\mathbf{E}$, где $b = e\tau/2m_e$ — подвижность электрона. Поэто-

му для тока получаем выражение $\mathbf{j} = \rho \mathbf{u} = \left(ne^2 \tau / 2m \right) \mathbf{E}$, откуда в соответствии с законом Ома $\mathbf{j} = \lambda \mathbf{E}$ получаем выражение для проводимости:

$$\lambda = ne \cdot b = ne^2 \tau / 2m_e. \quad (5.3.1)$$

Здесь n — концентрация электронов, $\rho = ne$. Параметр τ имеет смысл *времени релаксации*, т.е. характерного времени, за которое устанавливается ток (стационарный дрейф электронов).

5.3.2. Закон Видемана–Франца. Классическая теория

Рассмотрим электронный газ, следующий законам классической физики. Его проводимость и коэффициент теплопроводности даются формулами

$$\lambda = \frac{ne^2 \tau}{2m_e} = \frac{ne^2 l}{2m_e v}, \quad \kappa = \frac{1}{3} C_V v l. \quad (5.3.2)$$

Здесь τ и l — время и длина свободного пробега, n — концентрация электронов, C_V — теплоёмкость (в расчёте на единицу объёма).

В рассматриваемом подходе длина свободного пробега ограничивается столкновениями электронов с атомами. Поскольку концентрация атомов $N_1 = \text{const}$, а сечение рассеяния определяется газокинетическим размером атома и практически неизменно: $\sigma = \text{const}$, то $l = (N_1 \sigma)^{-1} = \text{const}$. Скорость электронов в рассматриваемой модели есть тепловая скорость: $v \sim \sqrt{kT/m_e}$. Учитывая, что концентрация электронов в металле $n \approx \text{const}$, а их теплоёмкость (на основании теоремы классической физики о равномерном распределении энергии по степеням свободы) $C = (3/2)kn = \text{const}$, заключаем:

$$\lambda = \frac{ne^2 l}{2m_e v} \sim \frac{1}{\sqrt{T}}, \quad \kappa = \frac{1}{3} C_V v l \sim \sqrt{T}. \quad (5.3.3)$$

Найдём явно в использованных приближениях отношение коэффициентов теплопроводности и электропроводности. Используя формулы (5.3.2) для κ и λ , получим

$$\frac{\kappa}{\lambda} = \frac{2}{3} C_V \frac{m_e v^2}{ne^2}. \quad (5.3.4)$$

Считая электронный газ классическим и используя соотношения $C_V = (3/2)kn$ и $m_e v^2 = 3kT$, приходим к следующему равенству:

$$\kappa/\lambda \approx 3(k/e)^2 T. \quad (5.3.4)$$

Закон $\kappa/\lambda = C$, где C — константа, одинаковая для всех металлов при заданной температуре, был установлен Г. Видеманом и Р. Францем (1853 г.). Зависимость константы C от температуры: $C = LT$ получил Л. Лоренц (1882 г.), а выражение для константы Лоренца L нашёл П. Друде (1900 г.) на основе классической кинетической теории газов:

$$L = 3(k/e)^2.$$

Расчёт, выполненный А. Зоммерфельдом на основе квантовой статистики (1928 г.), дал вместо коэффициента «3» множитель « $\pi^2/3$ ».

Закон Видемана–Франца удовлетворительно выполняется при обычных температурах. Вместе с тем при его выводе использованы представления классической физики, а полученные на их основе выражения (5.3.3) для κ и λ противоречат эксперименту. В частности, как показано в разделе 5.2.2, согласно квантовой механике $\kappa \approx \text{const}$.

5.3.3. Квантовомеханическая теория проводимости металлов

Будем исходить из формулы Друде:

$$\lambda = \frac{ne^2\tau}{2m_e} = \frac{ne^2l}{2m_e\nu}.$$

Пусть длина свободного пробега электронов определяется их рассеянием только на фононах с концентрацией $n_\phi \sim T$. Положим

$$l = (n_\phi\sigma)^{-1} \sim T^{-1}.$$

Кроме того, примем, что торможение тока определяется только столкновениями электронов, имеющих скорость вблизи границы Ферми: $\nu \approx \nu_F$ (обоснованность этого допущения обсуждается в разделе 5.3.4). С учётом сказанного заключаем, что

$$\lambda = \frac{ne^2}{2m_en_\phi\sigma\nu_F} \sim \frac{1}{T}. \quad (5.3.5)$$

Поскольку согласно квантовой теории теплопроводность металлов $\kappa \approx \text{const}$, то мы приходим к прежнему закону Видемана–Франца: $\kappa/\lambda \sim T$. Заметим, что использованные в (5.3.5) температурные зависимости κ и λ теперь отличаются от тех, которые получены на основе классической физики (5.3.3).

В принятых допущениях для отношения κ/λ из формулы (5.3.3) находим

$$\frac{\kappa}{\lambda} = \frac{2}{3} C_V \frac{m_e v_F^2}{ne^2} \sim \frac{kT}{E_F} nk \cdot \frac{E_F}{ne^2} = \left(\frac{k}{e} \right)^2 T.$$

Для теплоёмкости электронного газа мы воспользовались формулой $C_V \sim (kT/E_F) nk$. Ввиду оценочного характера расчёта числовые множители отброшены. Таким образом, мы пришли к закону Видемана–Франца (5.3.4), но уже исходя из квантовомеханических представлений.

Рассмотрим теперь подробнее удельное сопротивление. Согласно (5.3.8) для чистого металла имеем

$$\rho = \frac{1}{\lambda} = \frac{2m\nu}{ne^2 l} \sim T.$$

Учёт дефектов кристаллической структуры и примесей позволяет, как и в случае теплопроводности, уточнить это соотношение:

$$\rho = \rho_1 T + \rho_0. \quad (5.3.13)$$

Это равенство известно как *правило Матиссена* об аддитивности удельного сопротивления. Оно было сформулировано в 1860 г. Слагаемое ρ_0 представляет остаточное сопротивление, обусловленное взаимодействием электронов с дефектами, и при нормальных условиях обычно является малой поправкой: $\rho_0 \ll \rho_T$, где $\rho_T = \rho_1 T$. Оно возникает вследствие нарушения периодичности структуры, приводящего к рассеянию «блуждающих» электронов. Напомним, что электрон-фононное рассеяние, дающее слагаемое $\rho_T = \rho_1 T$ в сопротивлении, также связано с нарушением периодичности, которое возникает благодаря тепловым колебаниям атомов растворителя (кристалла) относительно своих положений равновесия. При абсолютном нуле ($T = 0$) остается лишь остаточное сопротивление ρ_0 . Последнее обстоятельство применяется на практике для оценки чистоты металла по величине его остаточного сопротивления при абсолютном нуле.

5.3.4. Формула Друде в квантовой теории

Поясним, почему в формулу Друде для проводимости мы подставили *полную* концентрацию электронов, тогда как скорость приняли равной скорости Ферми.

Пусть электрическое поле \mathbf{E} направлено по оси X . Оно вызывает дрейф *всех* электронов против поля \mathbf{E} . Скорость дрейфа равна

$$\mathbf{u} = \frac{1}{n} \sum_i n_i \mathbf{v}_i, \quad \sum_i n_i = n,$$

где n — концентрация электронов (число частиц в единице объёма), n_i — число электронов, имеющих скорость \mathbf{v}_i (в том же объёме), а суммирование распространяется на все электроны в единице объёма. Соответственно плотность тока

$$\mathbf{j} = en\mathbf{u} = \frac{1}{n} \sum_i n_i \mathbf{v}_i.$$

Оценим типичные значения скорости дрейфа электронов. Пусть концентрация электронов $n \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$, а плотность тока $j \sim 10^3 \text{ А/см}^2 = 3 \cdot 10^{12} \text{ ед. СГСЭ}$. Тогда

$$u = \frac{j}{ne} \sim \frac{3 \cdot 10^{12}}{10^{23} \cdot 4,8 \cdot 10^{-10}} \sim 10^{-1} \text{ см/с}.$$

Как было показано ранее, скорость Ферми составляет $v_F \sim 10^8 \text{ см/с}$, так что всегда справедливо неравенство $u \ll v_F$.

Электронный газ в металлах в широком интервале температур является сильно вырожденным. Это значит, что его распределение Ферми размыто очень незначительно. Движению электронов с постоянной средней скоростью \mathbf{u} отвечает в импульсном пространстве смещённая сфера Ферми S_1 . Положение исходной сферы S_0 и смещённой S_1 определяется уравнениями

$$S_0 = \left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} = E_F \right\}, \quad S_1 = \left\{ \frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{u})^2}{2m_e} = E_F \right\}$$

и показано на рис. 5.3.1.

Как видно из рисунка, сфера S_1 состоит из слоя IV и области перекрытия $\Sigma = S_1 \cap S_0$. Слой IV представляет собой зеркальное отражение исчезнувшего в результате смещения сферы слоя I и в силу неравенства $m_e u \ll p_F$ является очень узким. Разобьём область Σ на две части: III + IV. На рис 5.3.1 подобласть III отделена штриховой линией, являющейся симметрично отражённой (относительно оси y) правой границей сферы S_1 , и столь же узкая, как и область II.

Дрейфовая (средняя) скорость электронов из области II равна нулю вследствие симметрии этой области относительно осей x и y и z (число

электронов, обладающих какой-либо скоростью \mathbf{v} , равно числу электронов со скоростью $(-\mathbf{v})$.

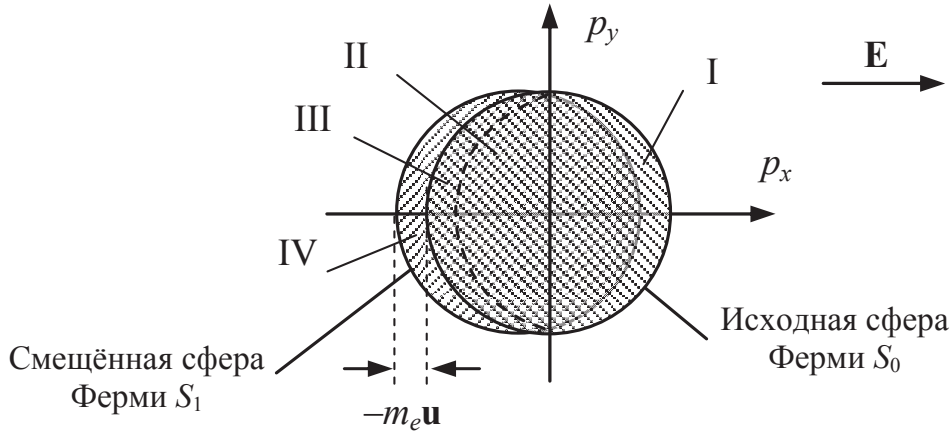


Рис. 5.3.1. Смещение сферы Ферми под действием внешнего электрического поля. Ток создаётся электронами из областей III и IV. Электроны из области II не производят тока

Таким образом, в создании тока участвуют только электроны из слоёв III + IV сферы S_1 . Скорости всех этих электронов близки по величине к скорости Ферми v_F . При этом

$$\mathbf{u} = \frac{1}{n} \sum_i n_i \mathbf{v}_i = \frac{1}{n} \sum_{(\text{III+IV})} n_i \mathbf{v}_i + \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{(\text{II})} n_i \mathbf{v}_i}_{=0} = \frac{1}{n} \sum_{(\text{III+IV})} n_i \mathbf{v}_i.$$

Хотя этих электронов мало: $\Delta n \sim (u/v_F)n$, но они обладают большой скоростью: $v \approx v_F$. Поэтому создаваемый ими ток совпадает с током, создаваемым всеми электронами: $e\Delta n \cdot v = enu = j$.

С учётом сказанного квантовомеханический вывод формулы Друде состоит в следующем. Согласно принципу Паули электроны внутри сферы Ферми не могут изменить своё состояние относительно электронов, находящихся вблизи поверхности (сферы Ферми), поскольку для них все соседние квантовые состояния заняты. Поэтому электрическое поле будет влиять только на электроны, находящиеся вблизи поверхности Ферми (т.е. имеющие скорость $v \approx v_F$). Поле вызывает ускорение $\mathbf{a} = e\mathbf{E}/m$ в течение времени свободного пробега $\tau \sim l/v_F$, где l — длина свободного пробега. В результате электроны приобретают дополнительную среднюю скорость $\mathbf{u} = e\mathbf{E}\tau/2m$, $u \ll v_F$. При этом в сфере Ферми освобождаются места для электронов в приповерхностном слое толщиной $\sim tu$, число которых составляет $\Delta n \approx n(tu/p_F) = n(u/v_F)$.

Поскольку скорость электронов, создающих ток, меняется незначительно: $v \approx v_F$, то возникающий ток оказывается равным

$$j = e\Delta n \cdot v_F \approx e \left(n \frac{u}{v_F} \right) \cdot v_F = \frac{ne^2\tau}{2m} E,$$

откуда следует выражение для проводимости: $\lambda \sim ne^2\tau/m$, в которое входит время свободного пробега $\tau = l/v_F$.

5.3.5. Закон Блоха–Грюнайзена

Установленная выше зависимость удельного сопротивления от температуры $\rho \sim T$ имеет место лишь при не слишком низких температурах, пока число фоонов с большими импульсами $p_{ph} \sim \pi\hbar/a \sim p_F$ велико (a — период решётки), и электрон-фоонное рассеяние достаточно эффективно тормозит движение электронов. При низких же температурах вероятность больших изменений импульса электрона мала (ввиду малости числа фоонов и их средней энергии). Найдём зависимость $\rho(T)$ металла при низких температурах.

Для оценки проводимости используем формулу Друде:

$$\lambda = n_e e^2 \tau / m_e,$$

где n_e — концентрация электронов, m_e — эффективная масса электрона. Сюда входит характерное время τ , за которое происходит существенное изменение импульса электрона. При малых передачах импульса это время значительно больше времени пробега от столкновения до столкновения. Оценим это время.

При температурах $T \ll \Theta$ в кристалле возбуждены фооны с энергиями $\hbar\omega \sim kT$ (относящиеся к акустическим ветвям). При испускании и поглощении такого фоона энергия электрона меняется на такую же величину: $\Delta E^{(1)} \sim kT$, т.е. на величину порядка размытости распределения Ферми для электронов. Импульс фоона $p_\phi = \hbar\omega/s \sim kT/s$, где s — скорость звука. Этот импульс мал по сравнению с импульсом Ферми. В самом деле,

$$\frac{p_\phi}{p_F} \sim \frac{kT}{sp_F} = \frac{kT}{s(\pi\hbar/a)} \sim \frac{kT}{\hbar\omega_m} = \frac{T}{\Theta} \ll 1,$$

Учтено, что граничная частота фоонного спектра по порядку величины определяется условием $\hbar\omega_m = k_m s \approx (\pi\hbar/a)s$.

В результате электрон-фоонных столкновений происходит релаксация по направлениям квазиимпульса электрона. Импульс электрона всегда находится вблизи поверхности Ферми и при каждом столкновении меняется за каждое столкновение на малую величину порядка

$$\Delta p_1 \sim kT/s \ll p_F.$$

Поскольку импульсы фоонов с равной вероятностью имеют любое направление, то весь процесс выглядит как броуновское движение (или диффузия) в импульсном пространстве по поверхности Ферми. Коэффициент диффузии в этом пространстве можно оценить по формуле

$$D_p \sim l_p \bar{v}_p \sim l_p^2 \nu_p.$$

Здесь l_p и v_p — длина свободного пробега и скорость частицы в p -пространстве, $v_p = l_p / \tau_p = l_p \nu_p$, τ_p — время свободного пробега, $\nu_p = \tau_p^{-1}$ — частота столкновений. В качестве оценки величины l_p можно взять $l_p \sim \Delta p_1 \sim kT/s$. Частота же электрон-фоонных столкновений пропорциональна концентрации фоонов. Поэтому при низких температурах получаем $\nu_p \sim n_{\text{фон}} \sim T^3$. Следовательно, температурная зависимость коэффициента диффузии определяется формулой

$$D_p \sim l_p^2 \nu_p \sim T^2 \cdot T^3 = T^5.$$

В соответствии с законом Эйнштейна–Смолуховского для броуновского движения среднее смещение за время τ составляет

$$L_p^2 \sim D_p \tau.$$

Полное «забывание» начального направления соответствует тому, что суммарное изменение импульса электрона составляет величину порядка исходного значения квазиимпульса: $\Delta p \equiv L_p \sim p_F$. Время τ , за которое происходит такое изменение, есть

$$\tau \sim L_p^2 / D_p \sim p_F^2 / D_p.$$

Поскольку импульс Ферми от температуры не зависит, то температурная зависимость τ имеет вид $\tau \sim T^{-5}$. Имея в виду, что концентрация электронов и их эффективная масса слабо зависят от температуры, получаем окончательно:

$$\lambda \sim T^{-5}, \quad \rho = \lambda^{-1} \sim T^5.$$

Полученная зависимость удельного сопротивления от температуры в области $T \ll \Theta$ носит название *закона Блоха–Грюнайзена* (1929 г.).

Глава 6. ПОЛУПРОВОДНИКИ

6.1. Свойства полупроводников

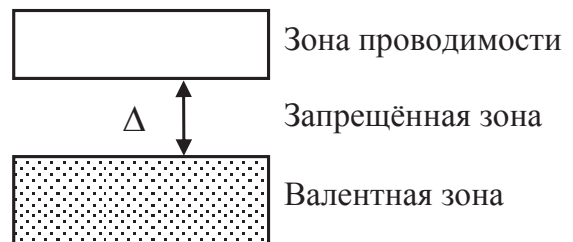
У полупроводников в самой нижней зоне проводимости нет электронов, т.е. эта зона свободна, и вещество не проводит электрический ток (если ток не слишком сильный). Действительно, чтобы возбудить небольшой ток, нужно немного увеличить энергию электронов. Однако все разрешённые состояния в валентной зоне заняты. Это значит, что ускорить электрон, находящийся в этой зоне, нельзя, и ток не возбуждается. Зонная схема полупроводников показана на рис. 6.1.1. Типичное значение ширины запрещённой зоны $\Delta \sim 1$ эВ. В частности, для германия $\Delta = 0,67$ эВ, для кремния $\Delta = 1,11$ эВ.

6.1.1. Собственные и примесные полупроводники

В *собственных* (чистых) полупроводниках система энергетических уровней состоит из зон (как на рис. 6.1.1).

Примесные полупроводники состоят из основного элемента (например, элементы IV группы Si, Ge), в который внедрены атомы примеси (например, элементы V группы P, As, Sb или элементы III группы B, Al, Ga, In). Концентрация примесных атомов в типичных случаях составляет $N_{\text{пр}} \sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$, хотя иногда используют полупроводники с

Рис. 6.1.1. Зонная схема собственного (чистого) полупроводника. Заштрихована полностью заполненная зона (валентная зона), пустым прямоугольником показана свободная зона (зона проводимости)



существенно более высоким содержанием примесей (до $10^{19} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$). В примесных полупроводниках, помимо системы зон, создаваемых атомами основного элемента, имеются дополнительно отдельные уровни, расположенные в запрещённой зоне (рис. 6.1.2).

Если примесный уровень расположен вблизи дна зоны проводимости, то он является донорным уровнем, т.е. с него электроны могут по-

падать в зону проводимости, увеличивая проводимость вещества. Если же уровень расположен вблизи вершины валентной зоны, то он может принимать (захватывать) электроны из валентной зоны, приводя к появлению свободных мест — вакансий — в валентной зоне.

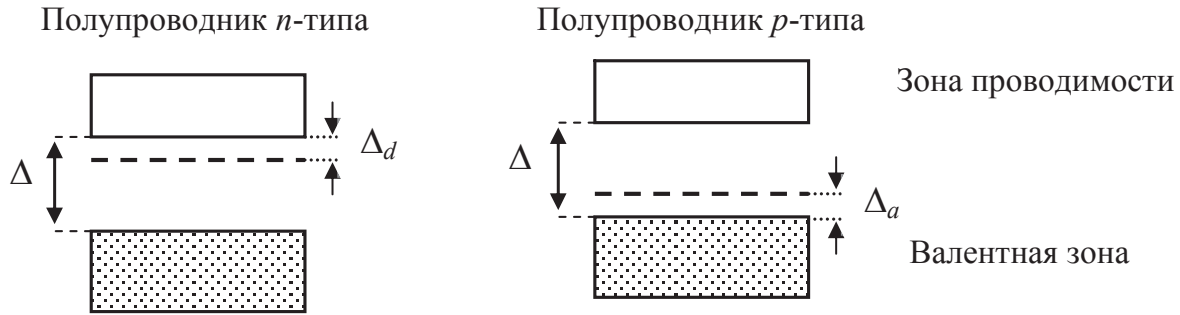


Рис. 6.1.2. Зонная схема примесных полупроводников. Слева — полупроводник n -типа, справа — полупроводник p -типа. Штриховой линией показано положение примесного уровня (донорного Δ_d и акцепторного Δ_a)

Примеси элементов V группы в полупроводнике IV группы являются *донорами* (отдают электроны в зону проводимости), а примеси элементов III группы в полупроводнике IV группы являются *акцепторами* (захватывают электроны из валентной зоны).

Оценим положение дополнительного уровня в примесном полупроводнике. Рассмотрим полупроводник n -типа, в котором присутствуют донорные примеси. Соответствующий уровень должен находиться близко ко дну зоны проводимости (рис. 6.1.2 слева). Энергия связи электрона с примесным центром (положительно заряженным ионом) можно оценить по теории Бора. Заменяя в выражении для энергии связи электрона в атоме водорода $E^{(0)} = m_e e^4 / 2\hbar^2$ массу электрона на эффективную массу и учитывая диэлектрическую проницаемость среды: $m_e \rightarrow m^*$, $e^2 \rightarrow e^2 / \varepsilon$, получим

$$E = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2} = \frac{m^*}{\varepsilon^2 m_e} E^{(0)}.$$

Принимая для оценки значения $m^* = 0,12m_e$, $\varepsilon = 16$, характерные для германия, найдём

$$E = \frac{0,12}{16^2} 13,6 \approx 0,006 \text{ эВ}.$$

Поскольку типичная ширина запрещённой зоны Δ порядка 1 эВ, то оказывается, что $\Delta_d \sim E \ll \Delta$.

Оценим также радиус локализации электрона примеси. По теории Бора радиус первой орбиты $r_B = \hbar^2 / m_e e^2 \approx 0,53 \text{ \AA}$. Произведя здесь замену $m_e \rightarrow m^*$, $e^2 \rightarrow e^2 / \varepsilon$, получим

$$r = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{m^* e^2} = r_B \frac{m_e \varepsilon}{m^*}.$$

В частности, для германия находим

$$r = 0,53 \frac{16}{0,12} \approx 70 \text{ \AA}.$$

Таким образом, $r \gg r_B$. Это означает, что примесный электрон может далеко (на много межатомных расстояний) удаляться от своего иона и легко делокализоваться.

Из сказанного следует, что среда для электрона может рассматриваться как сплошная (непрерывная). Это оправдывает введение диэлектрической проницаемости ε .

6.1.2. Электроны и дырки

Если все состояния в разрешённой зоне заняты, то суммарный импульс электронов в этой зоне равен нулю, поскольку все разрешённые направления импульсов равновероятны: $\sum_i \mathbf{p}_i = 0$.

Пусть теперь в валентной зоне вблизи верхнего края образовалась вакансия (электрон либо переброшен в зону проводимости, либо захвачен на акцепторный уровень). Тогда импульс системы электронов в этой зоне окажется равным

$$\mathbf{p}_p = \mathbf{P}_{\text{кон}} - \mathbf{P}_{\text{нач}} = \sum_{i \neq 1} \mathbf{p}_i - \sum_i \mathbf{p}_i = -\mathbf{p}_1.$$

Аналогичная ситуация имеет место и с энергией: выбирая за начало отсчёта энергию полностью заполненной зоны: $\sum_i E_i = 0$, получаем,

что после образования вакансии энергия системы окажется равной

$$E_p = E_{\text{кон}} - E_{\text{нач}} = \sum_{i \neq 1} E_i - \sum_i E_i = -E_1.$$

Ток, создаваемый электронами полностью заполненной зоны, равен нулю: $\mathbf{j} = \sum_i e \mathbf{v}_i = 0$. Следовательно, после удаления одного электрона ток окажется равным $\mathbf{j}_p = \sum_{i \neq 1} e \mathbf{v}_i - \sum_i e \mathbf{v}_i = -e \mathbf{v}_1$. Таким образом,

при наличии вакансии оставшиеся электроны создают такой же ток, как одна частица, имеющая положительный заряд.

Сказанное означает, что движение системы электронов при наличии вакансии в валентной зоне можно рассматривать как движение квазичастицы с энергией и импульсом, равными по величине соответственно энергии и импульсу недостающего электрона, но имеющими противоположный знак. Эта квазичастица называется *дыркой* и обозначается как h = «hole» или p = «positive». В электрических и магнитных полях дырка ведет себя как частица с положительным зарядом и положительной массой. Действительно, эффективная масса электрона вблизи верхнего края валентной зоны $m_e^* < 0$. Уравнение движения этого электрона в электромагнитном поле имеет вид

$$m_e^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right).$$

Обозначая $m_p = -m_e^*$, $e_p = -e$, получим

$$m_p \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e_p \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right),$$

что соответствует частице с массой $m_p > 0$ и зарядом $e_p > 0$.

В полупроводниках электроны (в зоне проводимости) и дырки (в валентной зоне) участвуют в создании тока проводимости и называются носителями тока:

электроны — носители n -типа (negative),

дырки — носители p -типа (positive).

Соответственно полупроводники, в которых преобладают электроны, называются полупроводниками n -типа, а полупроводники с преобладанием дырок — полупроводниками p -типа.

Носители, преобладающие в данном полупроводнике, называются *основными*, а другие носители — *неосновными*.

6.1.3. Концентрация электронов и дырок

Рассмотрим невырожденный полупроводник, т.е. полупроводник, содержащий в зоне проводимости небольшое число электронов, а в валентной зоне — небольшое число дырок. Для этого необходимо, чтобы температура T превышала температуру вырождения T_B . Поскольку

$T_B = E_F / k_B \sim N_1^{2/3}$, а $T_B \sim 6 \cdot 10^4$ К при концентрации электронов $N_1 \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$, то температура вырождения понижается до $T_B \sim 6$ К

уже при $N_1 \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Таким образом, если температура $T \sim 10^2 \text{ К}$, то при тех концентрациях, которые обычно создаются в зоне проводимости полупроводников, оказывается $T \gg T_B$.

Будем отсчитывать энергию от верхнего края валентной зоны (рис. 6.1.3). Полагая энергию электронов в зоне проводимости равной

$$E_n(p) = \Delta + p^2/2m_n,$$

где m_n — эффективная масса электрона вблизи дна зоны проводимости, найдём концентрацию электронов в зоне проводимости:

$$\begin{aligned} N_n &= \int_0^\infty n_n(E_n) \cdot 2 \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \int_0^\infty \exp\left(\frac{\mu - E_n(p)}{kT}\right) 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= Q_n \exp\left(\frac{\mu - \Delta}{kT}\right), \quad Q_n = 2 \left(\frac{m_n kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}. \end{aligned} \quad (6.1.1)$$

Найдём концентрацию дырок в валентной зоне. Распределение Ферми для дырок даётся выражением

$$\begin{aligned} n_p(E) &= 1 - n_n(E) = 1 - \frac{1}{\exp[(E - \mu)/kT] + 1} = \\ &= \frac{1}{\exp[(\mu - E)/kT] + 1} \approx \exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right). \end{aligned}$$

Здесь $E = E_n$ — энергия электрона в том состоянии, где находится вакансия. Записывая энергию дырок как

$$E_p = p^2/2m_p = -E_n,$$

получим

$$\begin{aligned} N_p &= \int_0^\infty \exp\left(\frac{E_n(p) - \mu}{kT}\right) 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = Q_p \exp\left(-\frac{\mu}{kT}\right), \\ Q_p &= 2 \left(\frac{m_p kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}, \end{aligned} \quad (6.1.2)$$

где $m_p > 0$ — эффективная масса дырки ($m_e^* = -m_p < 0$ — эффективная масса электрона вблизи верхнего края валентной зоны).

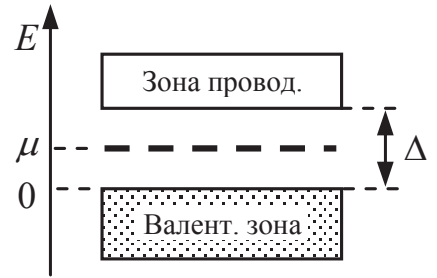


Рис. 6.1.3. Зонная схема собственного (чистого) полупроводника. Указаны начала отсчета энергии и положение уровня Ферми

Величины Q_n и Q_p называются *статистическими факторами* соответственно зоны проводимости и валентной зоны. Численные значения этих величин при $T \sim 300$ К составляют $Q_n \sim Q_p \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Для практических расчётов удобным является следующее их представление:

$$Q_{n,p} = Q_0 \left(m_{n,p} / m_e \right)^{3/2} (T/T_0)^{3/2}, \quad Q_0 = 2,51 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3},$$

где m_e — масса электрона, $T_0 = 300$ К.

Из приведённых формул следует

$$N_n N_p = Q_n Q_p e^{-\Delta/kT}.$$

В собственном полупроводнике¹ $N_n = N_p \equiv N_i$, так что

$$N_i = \sqrt{Q_n Q_p} e^{-\Delta/2kT}.$$

Соответственно получаем:

$$N_n N_p = N_i^2. \quad (6.1.3)$$

Это соотношение называют *правилом рычага*. Оно выполняется независимо от того, является полупроводник собственным или примесным.

Экспоненциальную зависимость концентрации носителей от температуры нетрудно установить из следующих простых рассуждений. В невырожденном полупроводнике вероятность перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости определяется больцмановским фактором: $P_1 \sim \exp(-\Delta/kT)$. Обратный переход происходит в результате столкновения электрона с дыркой, так что вероятность этого процесса пропорциональна произведению концентраций электронов и дырок: $P_2 \sim N_n N_p$. В состоянии равновесия вероятности прямых и обратных процессов равны: $P_1 = P_2$, откуда следует приведённый выше результат:

$$N_n N_p \sim \exp(-\Delta/kT), \text{ или } N_i = \sqrt{N_n N_p} \sim \exp(-\Delta/2kT).$$

6.1.4. Уровень Ферми в полупроводнике

Поскольку в собственном полупроводнике $N_n = N_p$, то, используя полученные выше выражения для N_n и N_p , получим

$$Q_n \exp\left(\frac{\mu - \Delta}{kT}\right) = Q_p \exp\left(-\frac{\mu}{kT}\right) \Rightarrow \mu = \frac{1}{2}\Delta + \frac{3}{4}kT \ln\left(\frac{m_p}{m_n}\right).$$

¹ Индекс i есть первая буква слова *intrinsic*, собственный.

Поскольку $kT \ll \Delta$, то в собственном полупроводнике уровень Ферми расположен почти посередине запрещённой зоны.

В полупроводниках n -типа при не слишком высоких температурах концентрация электронов значительно превышает концентрацию дырок (раздел 6.1.8). Поэтому

$$Q_n \exp\left(\frac{\mu - \Delta}{kT}\right) \gg Q_p \exp\left(-\frac{\mu}{kT}\right).$$

Отсюда следует, что уровень Ферми смещён вверх, к зоне проводимости. Зависимость $\mu(T)$ для полупроводника n -типа показана на рис. 6.1.4.

6.1.5. Уровень Ферми в двухуровневой системе

Рассмотрим модельную задачу. Пусть имеется «атом», в котором имеется один электрон, который может находиться в одном из двух квантовых состояний (рис. 6.1.5). Считаем, что система таких «атомов» имеет температуру T .

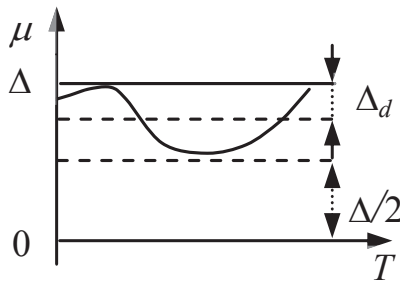


Рис. 6.1.4. Зависимость положения уровня Ферми μ в полупроводнике n -типа от температуры

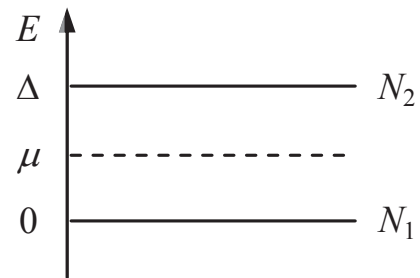


Рис. 6.1.5. Уровень Ферми в двухуровневой системе

Для электрона в «атоме» можно записать распределение Ферми–Дирака:

$$N_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1}, \quad i = 1, 2.$$

Значение химического потенциала μ может быть найдено из того условия, что всего в «атоме» находится один электрон. Это значит, что $N_1 + N_2 = 1$. Будем вести отсчёт энергии от нижнего уровня, положив $E_1 = 0$, $E_2 = \Delta$. Тогда для нахождения μ получаем уравнение

$$\frac{1}{\exp\left(-\frac{\mu}{kT}\right) + 1} + \frac{1}{\exp\left(\frac{\Delta - \mu}{kT}\right) + 1} = 1.$$

Обозначая для краткости $\exp(-\mu/kT) = x$ и $\exp(\Delta/kT) = \varepsilon$, получаем квадратное уравнение для величины x :

$$(x+1)(\varepsilon x+1) = (x+1) + (\varepsilon x+1).$$

Положительное решение этого уравнения есть $x = \varepsilon^{-1/2}$. Возвращаясь к исходным переменным, находим: $\mu = \Delta/2$. Это означает, что уровень Ферми лежит точно посреди запрещённой зоны.

Заметим, что в соответствии с полученным результатом числа электронов на уровнях 1 и 2 даются выражениями

$$N_1 = \frac{1}{\exp\left(-\frac{\Delta}{2kT}\right) + 1}, \quad N_2 = \frac{1}{\exp\left(\frac{\Delta}{2kT}\right) + 1}, \quad \frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{\Delta}{2kT}\right).$$

6.1.6. Релаксация носителей в полупроводниках

В результате внешних воздействий (светом, электрическими полями) носители заряда могут оказаться неравновесными, т.е. иметь распределение, отличающееся от равновесного — распределения Ферми. Однако в результате столкновений с неоднородностями — фононами, примесями, дефектами или с другими носителями — они переходят в состояние термодинамического равновесия. Этот процесс называется *релаксацией*. В качестве оценки характерного времени релаксации можно принять, что оно порядка времени свободного пробега.

Рассмотрим невырожденный примесный полупроводник. В этом случае распределение носителей по скоростям определяется распределением Максвелла, причём средняя скорость $v \sim \sqrt{kT/m}$.

Для нахождения температурной зависимости времени релаксации воспользуемся обычной формулой $\tau = l/v = 1/n\sigma v$, где l — длина свободного пробега носителя, n — концентрация рассеивающих центров, σ — эффективное сечение рассеяния носителя на центре.

1. *Область высоких температур* ($T > \Theta$). В этой области концентрация фононов $n \approx n_{\text{ф}} \sim T$, а сечение рассеяния носителей на фононах зависит от температуры слабо. Поскольку $v \sim \sqrt{T}$, то из приведённой формулы находим $\tau \sim T^{-3/2}$.

2. *Область низких температур* ($T \ll \Theta$). В этой области число фононов мало, и подвижность носителей ограничивается рассеянием на примесях, концентрация которых от температуры не зависит:

$n \approx n_{\text{пр}} = \text{const}$. Скорость носителей, как и выше, $v \sim \sqrt{T}$. Поэтому нужно установить температурную зависимость сечения рассеяния. Если бы примеси были электронейтральными, то оказалось бы $\sigma \approx \text{const}$, и мы получили бы $\tau = (n_{\text{пр}} \sigma v)^{-1} \sim T^{-1/2}$.

В действительности примеси, как правило, ионизированы, так что имеет место рассеяние заряженных носителей на кулоновских центрах. Формально сечение рассеяния в этом случае бесконечно в связи с медленностью убывания кулоновского поля с расстоянием. Однако в кристалле эффективное сечение σ оказывается конечным, поскольку на больших расстояниях действие поля иона ослабляется другими ионами.

Для оценки сечения можно воспользоваться тем, что если на некотором расстоянии $\sim r_0$ энергия теплового движения частицы окажется порядка её энергии в кулоновском поле примеси (с зарядом q), то на расстояниях $r > r_0$ действием поля можно пренебречь. Поэтому сечение составит $\sigma \sim \pi r_0^2$. Величина r_0 определится из условия

$$kT \sim qe/\epsilon r_0 \Rightarrow r_0 \sim qe/\epsilon kT.$$

В итоге получаем оценку сечения:

$$\sigma \sim \pi (qe/\epsilon kT)^2 \sim T^{-2}.$$

Возвращаясь к формуле $\tau = 1/n\sigma v$, получаем, что время релаксации зависит от температуры как $\tau \sim T^{3/2}$.

Качественно зависимость $\tau(T)$ показана на рис. 6.1.6.

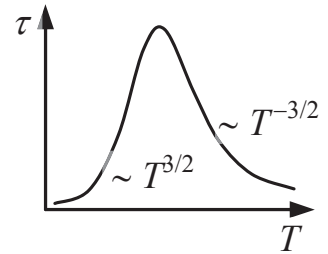


Рис. 6.1.6. Качественный вид зависимости времени релаксации носителей от температуры

6.1.7. Проводимость полупроводников

Проводимость полупроводников обусловлена движением электронов и дырок:

$$\lambda = \frac{N_n e^2 \tau_n}{2m_n} + \frac{N_p e^2 \tau_p}{2m_p} = |eb_n| N_n + |eb_p| N_p. \quad (6.1.4)$$

Здесь введены подвижности электронов и дырок:

$$b_n = e\tau_n/2m_n^*, \quad b_p = -e\tau_p/2m_p^*.$$

В случае собственного полупроводника

$$N_n = N_p = \sqrt{Q_n Q_p} \exp(-\Delta/2kT),$$

так что $\lambda \sim \exp(-\Delta/2kT)$: проводимость экспоненциально растёт с ростом температуры из-за увеличения числа носителей за счёт межзонных переходов (рис. 6.1.7 слева).

6.1.8. Проводимость примесных полупроводников

В случае примесных полупроводников зависимость проводимости λ от температуры показана на рис. 6.1.7 (справа). Рассмотрим для примера полупроводник n -типа. В области низких температур (правый участок кривой) увеличение λ с ростом T обусловлено перебросом электронов с донорных уровней в зону проводимости; межзонные переходы при этом существенной роли не играют.

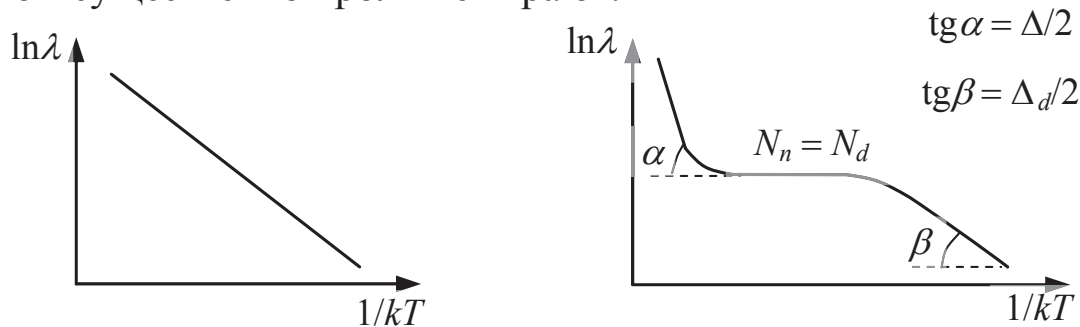


Рис. 6.1.7. Температурная зависимость проводимости собственного полупроводника (слева) и полупроводника n -типа (справа). Δ — ширина запрещённой зоны, Δ_d — расстояние от донорного уровня до дна зоны проводимости (рис. 6.1.2 слева)

Горизонтальный, или *рабочий*, участок, где проводимость почти постоянна, формируется тогда, когда все донорные уровни опустошены, а межзонные переходы ещё не дают существенного вклада. Число электронов в зоне проводимости приблизительно равно числу донорных примесей: $N_n \approx N_d$. Число дырок в соответствии с правилом рычага равно

$$N_p = N_i^2 / N_d = (Q_n Q_p / N_d) \exp(-\Delta/kT).$$

Наконец, в области высоких температур (левый участок кривой) рост числа носителей (как электронов, так и дырок) связан с межзонными переходами.

Для расчёта проводимости требуется найти концентрацию носителей. Ограничимся случаем полупроводников n -типа (рис. 6.1.8).

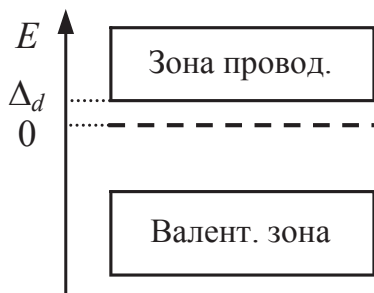


Рис. 6.1.8. Зонная схема полупроводника n -типа. Начало отсчёта энергии выбрано от донорного уровня ($E = 0$)

Примем за начало отсчёта энергии донорный уровень. Считая вначале температуру низкой: $kT \ll \Delta_d$, когда переходы из валентной зоны в зону проводимости маловероятны, учтём только переходы с примес-

ного уровня. Расчёт концентрации электронов выполняется так же, как и в разделе 6.1.3, но с заменой $\Delta \rightarrow \Delta_d$ (формула (6.1.1)), и даёт

$$N_n = Q_n \exp\left(\frac{\mu - \Delta_d}{kT}\right), \quad Q_n = 2\left(\frac{m_n kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}. \quad (6.1.5)$$

Далее нужно найти входящий в это выражение химический потенциал. Для этого учтём, что донорный уровень изолированный, но для него также выполняется распределение Ферми: вероятность того, что электрон имеет энергию E , равна

$$P_n(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/kT] + 1}.$$

В частности, вероятность того, что электрон остаётся на уровне $E = 0$, составляет

$$P_n(0) = \frac{1}{\exp(-\mu/kT) + 1}.$$

Отсюда находим вероятность ионизации атома, т.е. перехода электрона с донорного уровня в зону проводимости:

$$P^+ = 1 - P_n(0) = \frac{1}{\exp(\mu/kT) + 1}.$$

Если концентрация примесных атомов равна N_d , то в результате ионизации в зоне проводимости окажется число электронов, равное

$$N_n = N_d P^+ = \frac{N_d}{\exp(\mu/kT) + 1}. \quad (6.1.6)$$

Приравнивая два выражения для N_n (формулы (6.1.5) и (6.1.6)), находим

$$Q_n \exp\left(\frac{\mu - \Delta_d}{kT}\right) = \frac{N_d}{\exp(\mu/kT) + 1}, \quad Q_n = 2\left(\frac{m_n kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}. \quad (6.1.7)$$

Обозначим $x = \exp(\mu/kT)$. Тогда полученное уравнение примет вид

$$x(x+1) = \frac{N_d}{Q_n} \exp\left(\frac{\Delta_d}{kT}\right). \quad (6.1.8)$$

Выделяются два предельных случая.

1) *Низкие температуры:* $kT \ll \Delta_d$. В этих условиях левая часть уравнения (6.1.7) велика:

$$x(x+1) = (N_d/Q_n) \exp(\Delta_d/kT) \gg 1.$$

Поэтому оказывается $x = \exp(\mu/kT) \gg 1$, и мы находим

$$x = \sqrt{\frac{N_d}{Q_n}} \exp\left(\frac{\Delta_d}{2kT}\right) \Rightarrow \mu = \frac{1}{2}\Delta_d + \frac{1}{2}kT \ln\left(\frac{N_d}{Q_n}\right). \quad (6.1.9)$$

Таким образом, уровень Ферми находится примерно посередине между донорным уровнем и дном зоны проводимости.

Концентрацию электронов найдём с помощью формулы (6.1.6):

$$N_n = \frac{N_d}{x+1} \approx \frac{N_d}{x} = \sqrt{N_d Q_n} \exp\left(-\frac{\Delta_d}{2kT}\right). \quad (6.1.10)$$

2) *Промежуточные температуры:* $\Delta_d < kT \ll \Delta$. В этой области температур учтём, что статистический фактор Q_n зависит от температуры как $Q_n \sim T^{3/2}$. Поэтому правая часть уравнения (6.1.8) убывает с ростом температуры как $T^{-3/2} \exp(\Delta_d/kT)$. Поскольку в типичных случаях

$$Q_n \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}, \quad N_d \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}, \quad N_d \ll Q_n,$$

то существует область температур, когда

$$(N_d/Q_n) \exp(\Delta_d/kT) \ll 1.$$

Соответственно оказывается

$$x = \left(\frac{N_d}{Q_n}\right) \exp\left(\frac{\Delta_d}{kT}\right) \Rightarrow \mu = \Delta_d + kT \ln\left(\frac{N_d}{Q_n}\right).$$

Поскольку $x \ll 1$, то из (6.1.6) следует, что концентрация электронов в зоне проводимости достигает насыщения: $N_n \approx N_d$. Это значит, что все атомы примеси ионизованы — отдали электрон в зону проводимости.

При дальнейшем росте температуры концентрация электронов меняется мало до тех пор, пока переходы электронов из валентной зоны в зону проводимости не играют существенной роли. Когда же переходы становятся существенными, уровень Ферми сначала опускается примерно до середины запрещённой зоны, а в дальнейшем ведёт себя так же, как в собственном полупроводнике (рис. 6.1.4).

Проводимость примесных полупроводников даётся формулой (6.1.4). В случае невырожденного полупроводника концентрации электронов и дырок связаны соотношением (6.1.3)

$$N_n N_p = N_i^2 \Rightarrow N_p = N_i^2 / N_n.$$

Поэтому проводимость можно записать как

$$\lambda = |eb_n|N_n + |eb_p|N_p = |eb_n|N_n + |eb_p|\frac{N_i^2}{N_n}. \quad (6.1.11)$$

Согласно (6.1.11), с ростом концентрации электронов N_n проводимость меняется немонотонно и достигает минимума, если

$$\frac{d\lambda}{dN_n} = |eb_n| - |eb_p|\frac{N_i^2}{N_n^2} = |eb_n| - |eb_p|\frac{N_p}{N_n} = 0 \Rightarrow \frac{N_n}{N_p} = \frac{b_p}{b_n}.$$

Поскольку в типичных случаях подвижности электронов и дырок одного порядка: $b_n \sim b_p$, то проводимость достигает минимума в случае собственных полупроводников $N_n \approx N_p$. В примесных полупроводниках концентрации электронов и дырок отличаются (в рабочей области) на несколько порядков, так что проводимость примесных полупроводников оказывается намного большей, чем собственных.

6.1.9. Межзонное туннелирование

Строго говоря, полупроводник может проводить ток и при температурах $T \rightarrow 0$. Однако механизм появления носителей в зоне проводимости отличается от рассмотренного выше.

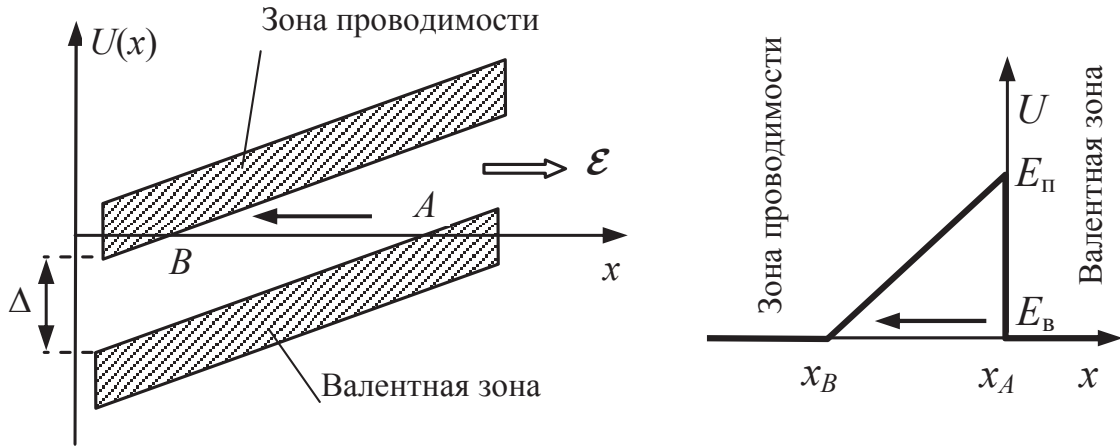


Рис. 6.1.9. Слева — наклон зон в полупроводнике, помещённом в однородное электрическое поле \mathcal{E} , направленное по оси x . Справа — качественный вид эффективного барьера для электронов для перехода из валентной зоны в зону проводимости. Отсчёт энергии ведётся от верха валентной зоны E_B . Электрон попадает в зону проводимости, когда энергия, отвечающая дну зоны проводимости, понижается до значения E_B

Пусть полупроводник помещён в однородное электрическое поле \mathcal{E} . Под действием этого поля энергетические зоны полупроводника наклоняются (рис. 6.1.9 слева). Запрещённая зона при этом играет роль

потенциального барьера, в котором потенциальная энергия электрона равна (рис. 6.1.9 справа)

$$U(x) = \Delta - e\mathcal{E}x, \quad \Delta = E_{\pi} - E_{\text{в}};$$

$$U(0) = \Delta, \quad U(\Delta/e\mathcal{E}) = 0.$$

Здесь $E_{\text{в}}$ — энергия верха валентной зоны, а E_{π} — энергия дна зоны. Считаем $e < 0$. В результате туннелирования электрон может перейти из валентной зоны в зону проводимости (как показано на рис. 6.1.9 (слева) стрелкой в направлении от точки A к точке B).

Будем вести отсчёт энергии от верхнего края валентной зоны, совпадающего с осью x на рис. 6.1.9 (полагая $E_{\text{в}} = 0$). Если классическая точка поворота A в валентной зоне имеет координату $x_A = 0$, то точка B выхода электрона из запрещённой зоны в зону проводимости определяется из равенства $U(x) = 0$, т.е. имеет координату $x_B = \Delta/e\mathcal{E}$.

Вероятность перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости можно оценить, используя квазиклассическое выражение для прозрачности барьера:

$$\begin{aligned} D &\approx D_0 \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_B}^{x_A} \sqrt{2mU(x)} dx \right] = \\ &= D_0 \exp \left[-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{\Delta/e\mathcal{E}}^0 \sqrt{\Delta - e\mathcal{E}x} dx \right] = D_0 \exp \left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}} \right), \end{aligned}$$

где введено обозначение $\mathcal{E}_0 = (2\sqrt{2m}/3\hbar|e|)\Delta^{3/2}$. Если принять $\Delta = 1$ эВ, $m = 0,1m_e$, то окажется $\mathcal{E}_0 \sim 10^7$ В/см.

Таким образом, в слабых полях ($\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_0$) вероятность туннелирования электронов мала, и ток в полупроводниках практически отсутствует. Однако в полях $\mathcal{E} \sim 0,1\mathcal{E}_0$ этот эффект уже может играть заметную роль в изменении проводимости.

Рассмотренное явление называется *межзонным туннелированием* или *пробоем Зинера*.

6.2. Контактные явления в полупроводниках

6.2.1. Электронно-дырочный переход (p – n -переход)

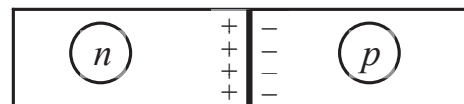
Если привести в контакт полупроводники n -типа и p -типа, то электроны будут перетекать в p -полупроводник, а дырки — в n -полупроводник

(рис. 6.2.1). В результате установления равновесия химический потенциал должен принять одно и то же значение во всех точках системы. Действительно, в состоянии равновесия вероятность заполнения какого-либо энергетического уровня не зависит от того, какая точка системы рассматривается — в n -полупроводнике или p -полупроводнике:

$$W = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_n}{kT}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_p}{kT}\right) + 1},$$

откуда и следует равенство $\mu_n = \mu_p \equiv \mu$ (величины μ_n и μ_p — химические потенциалы, рассчитанные с помощью распределения Ферми соответственно в n - и p -полупроводниках).

Рис. 6.2.1. Контакт полупроводников n -типа и p -типа: возникновение двойного слоя на границе раздела



Поскольку в n -полупроводнике уровень Ферми ближе к зоне проводимости, а в p -полупроводнике — к валентной зоне, то это приводит к изменению границ (искривлению) зон, как показано на рис. 6.2.2.

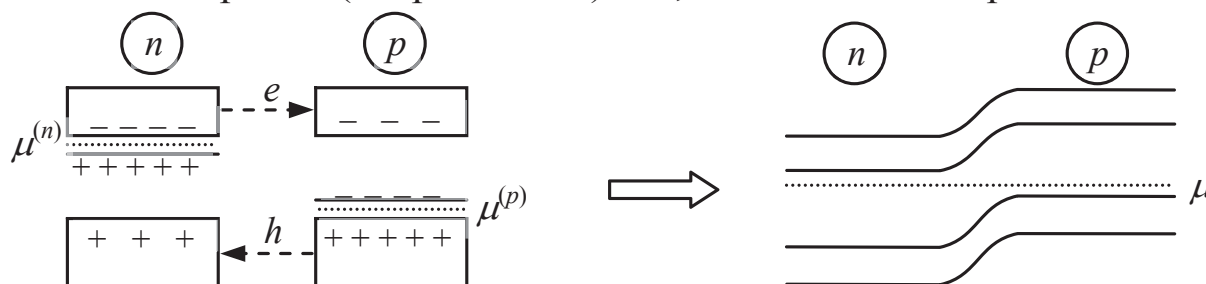


Рис. 6.2.2. Искривление зон в области контакта полупроводников n -типа и p -типа. Пунктирными горизонтальными линиями показано положение уровня Ферми μ (слева — различных уровней в каждом из полупроводников до контакта, справа — единого уровня после установления равновесия). В n -полупроводнике уровень Ферми ближе к зоне проводимости, а в p -полупроводнике — к валентной зоне

6.2.2. Распределение потенциала в области p – n -перехода

Перетекание носителей из одного полупроводника в другой приводит к возникновению двойного электрического слоя, препятствующего дальнейшему перетеканию носителей. Распределение потенциала в двойном слое показано на рис. 6.2.3 (слева). На том же рисунке справа показана зависимость напряжённости поля от координаты.

Найдём ширину двойного слоя в рабочей области полупроводника, когда все примесные уровни опустошены, а межзонные переходы ещё мало меняют концентрацию носителей.

Рассмотрим область полупроводника n -типа. Выберем начало отсчёта потенциала на границе раздела полупроводников, полагая $\varphi(0) = 0$. Тогда при $x \rightarrow -\infty$ следует положить $\varphi(-\infty) = \varphi_n$. В объёме полупроводника потенциал удовлетворяет уравнению Пуассона:

$$d^2\varphi/dx^2 = -4\pi\rho/\varepsilon,$$

где ε — диэлектрическая проницаемость.

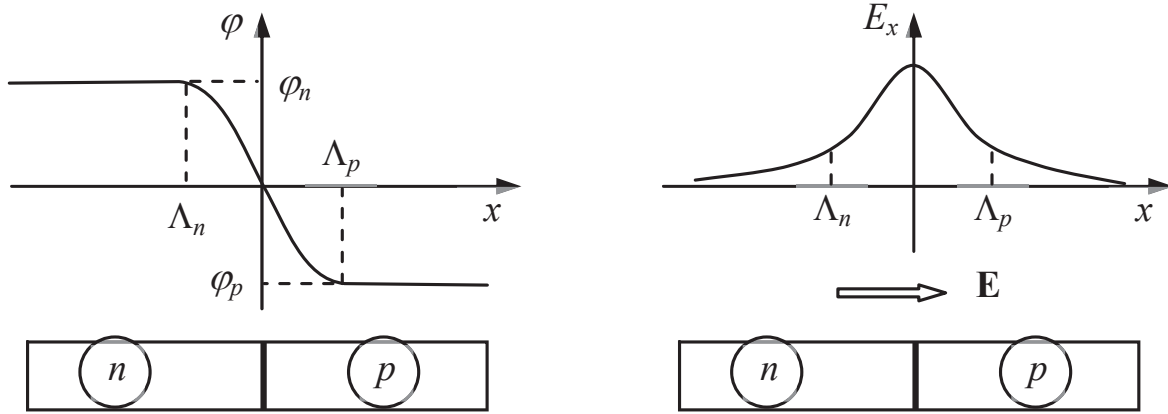


Рис. 6.2.3. Распределение потенциала (слева) и напряжённости (справа) электрического поля в двойном слое в области контакта полупроводников n -типа и p -типа. Направление электрического поля в двойном слое указано стрелкой на рисунке справа

Плотность зарядов в n -полупроводнике складывается из зарядов электронов и ионизированных примесей:

$$\rho = eN_n + (-e)N_d.$$

Здесь N_d — концентрация донорных примесей (положительных ионов).

Поскольку потенциальная энергия электрона в поле с потенциалом φ равна $e\varphi$, то концентрация электронов определяется распределением Больцмана:

$$N_n = N_d \exp\left(-\frac{e(\varphi - \varphi_n)}{kT}\right).$$

Значение предэкспоненциального множителя выбрано так, что на большом расстоянии от границы раздела полупроводников, где потенциал $\varphi \rightarrow \varphi_n$, должно выполняться условие квазинейтральности: $\rho \rightarrow 0$, или $N_n \rightarrow N_d$.

Таким образом, заключаем, что объёмная плотность заряда связана с потенциалом соотношением

$$\rho = eN_d \left[\exp\left(-\frac{e(\varphi - \varphi_n)}{kT}\right) - 1 \right].$$

Рассмотрим случай небольших изменений потенциала:

$|e(\varphi - \varphi_n)| \ll kT$. Тогда $\rho = -\frac{e^2 N_d}{kT}(\varphi - \varphi_n)$, и уравнение Пуассона принимает вид

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \frac{\varphi - \varphi_n}{\Lambda_n^2}, \quad \Lambda_n = \sqrt{\frac{\varepsilon kT}{4\pi e^2 N_d}}.$$

Ограниченное (в области $x < 0$) решение этого уравнения, удовлетворяющее граничному условию $\varphi(0) = 0$, есть

$$\varphi = \varphi_n (1 - e^{x/\Lambda_n}).$$

Аналогично рассматривается область p -полупроводника. Соответственно в области $x > 0$ находим

$$\varphi = \varphi_p (1 - e^{-x/\Lambda_p}), \quad \Lambda_p = \sqrt{\frac{\varepsilon kT}{4\pi N_a e^2}},$$

где N_a — концентрация акцепторных примесей.

Как видно из приведённых расчётов, ширина двойного слоя есть дебаевская длина экранирования и составляет в n - и p -полупроводниках соответственно Λ_n и Λ_p , а полная ширина оказывается равной

$$\Lambda = \Lambda_n + \Lambda_p.$$

Скачок потенциала $\Phi = \varphi_n - \varphi_p$ в двойном слое можно оценить следующим образом. Ограничимся случаем рабочей области полупроводника. Рассмотрим поток дырок между полупроводниками.

Дырочный ток из n -полупроводника в p -полупроводник есть ток *неосновных* носителей, и, как видно из рисунков 6.2.1 и 6.2.3, двойной слой не тормозит этот ток. Величина тока пропорциональна концентрации дырок в n -полупроводнике: $J_{n \rightarrow p}^{(h)} \sim N_h^{(n)} = N_i^2 / N_d$.

Дырочный ток в обратном направлении (из p -полупроводника в n -полупроводник) есть ток *основных* носителей, и двойной слой создает барьер для этого тока (рис. 6.2.3 слева). Величина тока пропорциональна концентрации дырок в p -полупроводнике ($\sim N_a$) и больцмановскому фактору, определяющему вероятность преодоления барьера:

$$J_{p \rightarrow n}^{(h)} \sim N_h^{(p)} = N_a \exp(-e_h \Phi / kT) = N_a \exp(e\Phi / kT).$$

Учтено, что $e_h = -e$. В состоянии равновесия оба потока сравниваются:

$$J_{n \rightarrow p}^{(h)} = J_{p \rightarrow n}^{(h)} \Rightarrow \frac{N_i^2}{N_d} = N_a \exp\left(-\frac{e\Phi}{kT}\right) \Rightarrow \Phi = \frac{kT}{e} \ln\left(\frac{N_a N_d}{N_i^2}\right).$$

Для типичных полупроводников при $N_i \sim 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $N_a \sim N_d \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и $T \sim 300 \text{ К}$ находим $\Phi \sim 0,5 \text{ В}$.

6.2.3. Выпрямляющие свойства p – n -перехода

Система двух контактирующих примесных полупроводников различных типов образует *диод*. На электрических схемах диод изображается, как показано на рис. 6.2.4.

Если к диоду приложить внешнее напряжение (рис. 6.2.5), то величина барьера, создаваемого двойным слоем, будет меняться. Если напряжение приложено в положительном направлении (как показано на рис. 6.2.5, $V > 0$), то барьер понижается, а в обратном случае ($V < 0$) — повышается.

Для нахождения вольт-амперной характеристики p – n -перехода воспользуемся сказанным выше о скачке потенциала.

Рис. 6.2.4. Диод, расположение на схеме полупроводников n - и p -типа. Показано прямое подключение диода к внешнему источнику — «диод открыт»

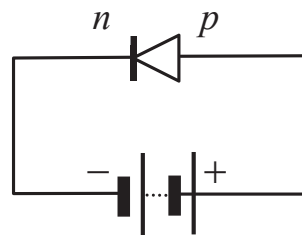
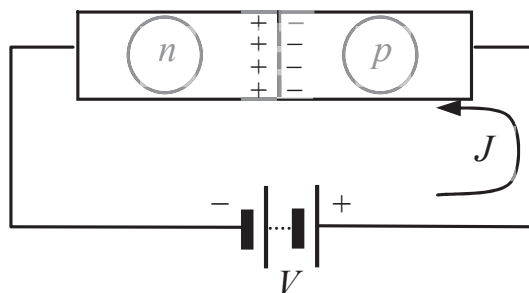


Рис. 6.2.5. Внешнее напряжение приложено к p – n -переходу. Показан случай, когда напряжение приложено в прямом направлении, и диод обладает малым сопротивлением



Рассмотрим сначала дырочный ток: $J^{(h)} = J_{p \rightarrow n}^{(h)} - J_{n \rightarrow p}^{(h)}$. Ток дырок из p -полупроводника в n -полупроводник

$$J_{p \rightarrow n}^{(h)} \sim N_h^{(p)} = N_a \exp[e(\Phi - V)/kT].$$

Ток в обратном направлении

$$J_{n \rightarrow p}^{(h)} \sim N_h^{(n)} = N_i^2 / N_d.$$

Поскольку скачок потенциала Φ таков, что при $V = 0$ ток обращается в нуль, то

$$J_{p \rightarrow n}^{(h)} - J_{n \rightarrow p}^{(h)} \sim N_a \exp\left(\frac{e(\Phi - V)}{kT}\right) - \frac{N_i^2}{N_d} = \frac{N_i^2}{N_d} \left(\exp\left(-\frac{eV}{kT}\right) - 1 \right).$$

В результате находим суммарный дырочный ток (в направлении, показанном на рис. 6.2.5):

$$J^{(h)} = J_{p \rightarrow n}^{(h)} - J_{n \rightarrow p}^{(h)} = J_0^{(h)} \left(\exp\left(\frac{|e|V}{kT}\right) - 1 \right).$$

Здесь учтено, что $-e = |e|$. Аналогичное выражение получается и для тока электронов. В итоге приходим к выражению для полного тока через p - n -переход:

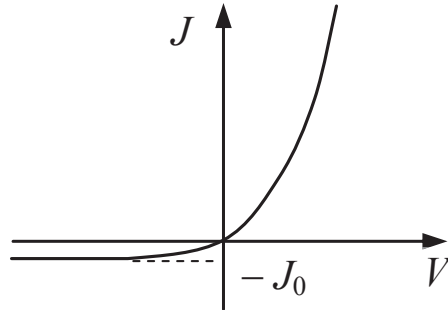
$$J = J_0 \left(e^{|e|V/kT} - 1 \right)$$

(формула Шокли). Здесь $J_0 = J_0^{(h)} + J_0^{(n)}$. Очевидно, что при $V \rightarrow -\infty$ остаётся только ток насыщения:

$$(-J_0) \sim N_i^2 \left(N_d^{-1} + N_a^{-1} \right) \sim \exp(-\Delta/kT),$$

обусловленный неосновными носителями. Поскольку число этих носителей мало, то мал и ток $(-J_0)$. Вольт-амперная характеристика p - n -перехода показана на рис. 6.2.6.

Рис. 6.2.6. Вольт-амперная характеристика p - n -перехода. При отрицательном напряжении ток практически целиком определяется током неосновных носителей



Таким образом, диод хорошо проводит ток в прямом направлении, но обладает большим сопротивлением в обратном направлении. На этом основано применение p - n -переходов для выпрямления переменного тока.

Наконец, отметим, что диод теряет выпрямляющие свойства, когда температура столь велика, что число неосновных носителей (родившихся при межзонном переходе) сравнивается с числом основных носителей: $N_i \sim N_d$, $N_i \sim N_a$. Поскольку

$$N_i = Q_0 e^{-\Delta/2kT}, \quad Q_0 = \sqrt{Q_n Q_p},$$

то, например, условие $N_i \sim N_d$ даёт

$$T_{\text{кр}} \sim \frac{\Delta}{2k \ln(Q_0/N_d)}.$$

Полагая

$$\Delta \sim 0,6 \text{ эВ}, \quad N_d \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}, \quad Q_0 \sim 10^{18} \text{ см}^{-3},$$

находим: $T_{\text{кр}} \sim 500\text{--}600 \text{ К}$. Этой величиной ограничивается типичный температурный диапазон, в котором полупроводниковые устройства обладают выпрямляющими свойствами.

Глава 7. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

7.1. Основные свойства сверхпроводников

7.1.1. Сверхпроводимость

Явление сверхпроводимости открыл в 1911 г. Гейке Камерлинг-Оннес. Он обнаружил, что при охлаждении ртути до температуры ниже 4,2 К её сопротивление падает до нуля. Измерения показали, что удельное сопротивление ртути в этом состоянии $\rho < 10^{-23}$ Ом·см (для меди в нормальном состоянии $\rho \approx 1,7 \cdot 10^{-6}$ Ом·см).

Сверхпроводимость — это свойство проводников, состоящее в скачкообразном уменьшении до нуля их сопротивления при понижении температуры ниже некоторого значения (рис. 7.1.1) Температура T_c , ниже которой вещество находится в сверхпроводящем состоянии, называется *критической температурой*.

Переход вещества в сверхпроводящее состояние есть фазовый переход, связанный с перестройкой электронной подсистемы.

Существование сверхпроводящего состояния обнаружено у половины металлов и нескольких сотен сплавов. Критические температуры составляют от долей до трёх десятков кельвина. В частности, для алюминия $T_c = 1,2$ К, свинца $T_c = 7,2$ К, сплава Ni–Ti $T_c = 9,8$ К. Максимальная критическая температура получена у интерметаллического соединения Nb₃Ge — $T_c = 23$ К.

В 1986 г. Г. Беднорц и К. Мюллер получили высокотемпературную сверхпроводимость¹: критическая температура металлокерамического

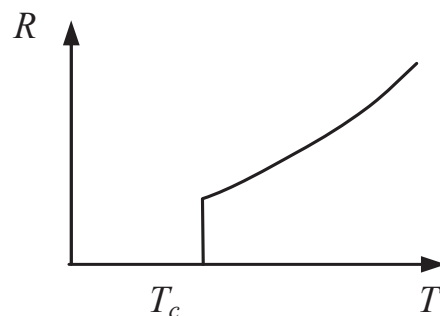


Рис. 7.1.1. Зависимость сопротивления образца от температуры при его переходе из нормального состояния в сверхпроводящее

¹ За это открытие авторы получили Нобелевскую премию в 1987 г.

соединения $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ оказалась равной $T_c \approx 30 \text{ К}$. В 1987 г. была получена сверхпроводимость у соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,8}$ при температуре $T_c \approx 92 \text{ К}$, превышающей температуру кипения азота (77 К). Наибольшее (на настоящий момент) значение критической температуры получено на соединении $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+x}$ и составляет $T_c = 138 \text{ К}$ (при атмосферном давлении).

7.1.2. Разрушение сверхпроводимости магнитным полем

Сверхпроводимость разрушается как при повышении температуры, так и при помещении сверхпроводника в достаточно сильное магнитное поле (рис. 7.1.2). Зависимость величины критического магнитного поля от температуры удовлетворительно передаётся формулой

$$H_c(T) \approx H_c(0) \left(1 - T^2/T_c^2\right). \quad (7.1.1)$$

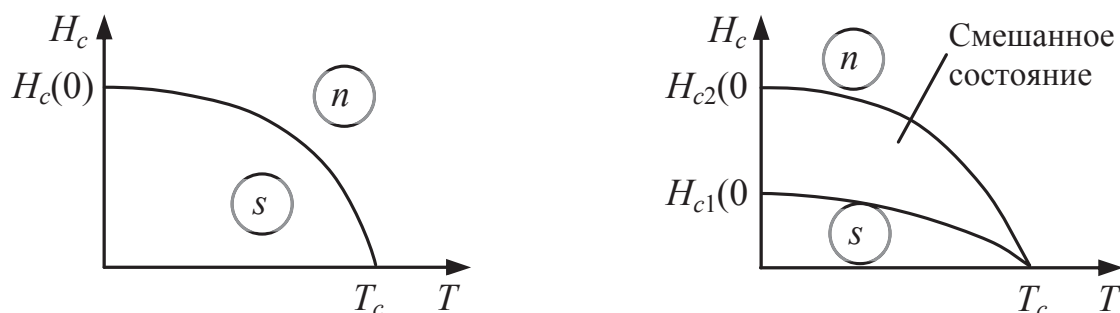


Рис. 7.1.2. Зависимость критического магнитного поля от температуры для сверхпроводников I рода (слева) и II рода (справа). Символы n и s обозначают соответственно нормальную и сверхпроводящую фазы. В случае сверхпроводников II рода (справа) имеется смешанное состояние, в котором сосуществуют обе фазы

7.1.3. Эффект Мейсснера. Диамагнетизм сверхпроводников

Эффект Мейсснера (1933 г.) состоит в том, что при температуре ниже критической магнитное поле полностью выталкивается из объёма сверхпроводника (рис. 7.1.3) независимо от момента перевода вещества в сверхпроводящее состояние: до или после наложения магнитного поля.

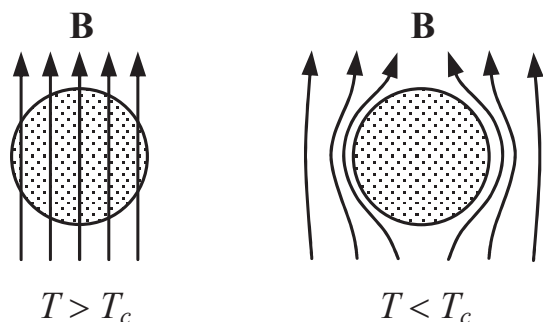


Рис. 7.1.3. Эффект Мейсснера — выталкивание внешнего магнитного поля из сверхпроводника. Слева — проводник в нормальном состоянии, справа — сверхпроводник

Эффект Мейсснера означает, что в объёме сверхпроводника магнитное поле $\mathbf{B} = 0$. Введём формально напряжённость магнитного поля в объёме сверхпроводника: $\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{I}$, где \mathbf{I} — намагниченность. Поскольку $\mathbf{B} = 0$, то $\mathbf{I} = -(1/4\pi)\mathbf{H}$. Следовательно, магнитная восприимчивость $\kappa = -1/4\pi < 0$, т.е. сверхпроводник является диамагнетиком.

В экспериментах В. Мейсснера и Р. Оксенфельда исследовалось поведение длинного (цилиндрического) образца в магнитном поле, ориентированном параллельно оси цилиндра. В силу граничных условий напряжённость поля внутри вещества совпадала с индукцией внешнего поля: $H = B_e$. В результате образец приобретал намагниченность $I = -B_e/4\pi$. Плотность энергии равна $u = -\int \mathbf{I} d\mathbf{B}_e = B_e^2/8\pi$. Поэтому сила (на единицу объёма) $f = -\nabla u = -(1/8\pi)\nabla B_e^2$ направлена в сторону убывания поля — образец выталкивался из области, занятой магнитным полем, как и положено диамагнетикам.

На рис. 7.1.4 и 7.1.5 показаны зависимости намагниченности образца I и магнитного поля в его объёме B_i при изменении внешнего магнитного поля H .

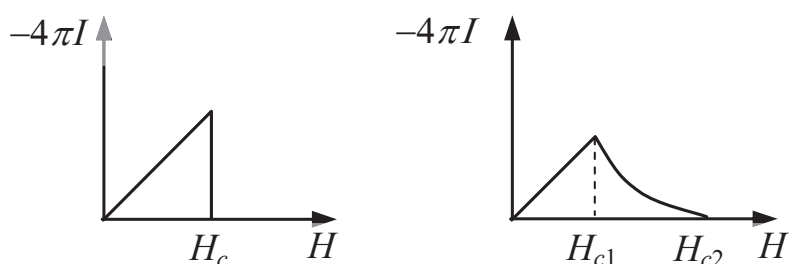


Рис. 7.1.4. Зависимость намагниченности образца от внешнего магнитного поля для сверхпроводников I рода (слева) и сверхпроводников II рода (справа)

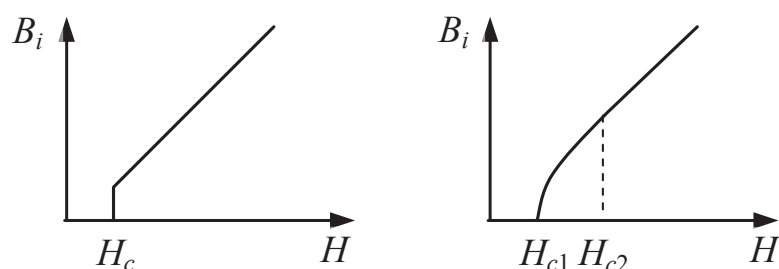


Рис. 7.1.5. Зависимость магнитного поля в объёме образца от внешнего магнитного поля для сверхпроводников I рода (слева) и сверхпроводников II рода (справа)

7.1.4. Теория Лондонов

Для объяснения эффекта Мейсснера Фриц и Хайнц Лондоны построили в 1935 г. феноменологическую теорию, явившуюся важным

шагом в понимании сущности сверхпроводимости. Теория не объясняла природы обращения сопротивления в нуль, но позволяла объяснить механизм выталкивания магнитного поля из объёма сверхпроводника.

В отсутствие трения электрон движется под действием электрического поля \mathbf{E} по закону $m\dot{\mathbf{v}} = e\mathbf{E}$. Поскольку плотность тока равна $\mathbf{j} = en_s\mathbf{v}$, где n_s — плотность числа сверхпроводящих электронов, то $\partial\mathbf{j}/\partial t = en_s\mathbf{E}/m$, или $\mathbf{E} = (m/e^2n_s)(\partial\mathbf{j}/\partial t)$. Подстановка найденного выражения \mathbf{E} в уравнение Максвелла $\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$ даёт

$$\frac{m}{e^2n_s} \text{rot} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}.$$

С учетом начальных условий $\mathbf{B}|_{t=0} = 0$, $\mathbf{j}|_{t=0} = 0$ находим

$$\text{rot } \mathbf{j} = -\frac{e^2n_s}{mc} \mathbf{B}. \quad (7.1.1)$$

Исключая отсюда ток с помощью уравнения Максвелла $\text{rot } \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}$, получаем

$$\frac{c}{4\pi} \text{rot rot } \mathbf{B} = -\frac{e^2n_s}{mc} \mathbf{B}.$$

Учтём далее тождество $\text{rot rot } \mathbf{B} = \text{grad div } \mathbf{B} - \Delta \mathbf{B}$ и уравнение Максвелла $\text{div } \mathbf{B} = 0$. Это приводит к уравнению для магнитного поля:

$$\Delta \mathbf{B} = \frac{4\pi n_s e^2}{mc^2} \mathbf{B}. \quad (7.1.2)$$

Обозначим

$$\Lambda = \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi n_s e^2}}. \quad (7.1.3)$$

Эта величина называется *лондоновской длиной*.

Пусть поле \mathbf{B} параллельно поверхности образца, занимает область $z > 0$ и зависит только от координаты z , отсчитываемой от поверхности вглубь вещества (рис. 7.1.6). Тогда из (7.1.2) следует

$$\frac{d^2 \mathbf{B}}{dz^2} = \frac{1}{\Lambda^2} \mathbf{B}. \quad (7.1.4)$$

Ограниченное при $z > 0$ решение этого уравнения имеет вид

$$\mathbf{B}(z) = \mathbf{B}(0) \exp(-z/\Lambda).$$

Таким образом, поле проникает в сверхпроводник на глубину $z \sim \Lambda$. Полагая $n_s \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $e = 4,8 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ, $c = 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}$, получаем $\Lambda \sim 5 \cdot 10^{-6} \text{ см} = 500 \text{ \AA}$.

Из уравнения (7.1.1) вытекает ещё одно важное следствие. Учтём, что $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$, где \mathbf{A} — векторный потенциал. Тогда

$$(7.1.1) \text{ принимает вид } \text{rot} \left(\mathbf{j} + \frac{e^2 n_s}{mc} \mathbf{A} \right) = 0.$$

Поскольку в объёме сверхпроводника вдали от поверхности $\mathbf{j} = 0$, а магнитное поле отсутствует, то приходим к равенству

$$\mathbf{j} = -\frac{e^2 n_s}{mc} \mathbf{A}. \quad (7.1.5)$$

Это соотношение заменяет собой обычный закон Ома ($\mathbf{j} = \lambda \mathbf{E}$) на случай тока в сверхпроводнике.

7.1.5. Сверхпроводники I и II рода

Оказалось, что существуют сверхпроводники I и II рода — в зависимости от их поведения в магнитном поле. В частности, в случае сверхпроводников II рода имеется область значений магнитного поля $H_{c1} < H < H_{c2}$, в которой эффект Мейсснера не полный: магнитное поле частично проникает в объём сверхпроводника. Это — *смешанное состояние* (или *фаза Шубникова*). Поля H_{c1} и H_{c2} называются соответственно первым и вторым критическими полями. При $H < H_{c1}$ эффект Мейсснера полный, магнитное поле полностью выталкивается из объёма сверхпроводника. При $H > H_{c2}$ вещество полностью находится в нормальном состоянии, магнитное поле проникает в объём вещества.

В зависимости от типа сверхпроводника материалы ведут себя по-разному во внешнем магнитном поле (рис. 7.1.4 и 7.1.5).

7.2. Природа сверхпроводимости

7.2.1. Куперовское спаривание

Первая микроскопическая теория сверхпроводимости была предложена в 1957 г. Дж. Бардиным, Л. Купером и Дж. Шриффером (теория

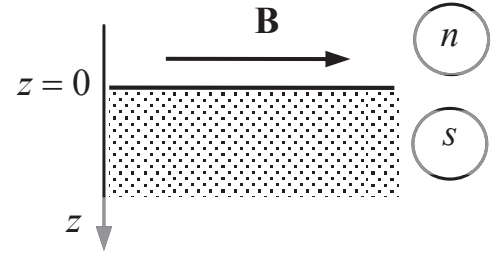


Рис. 7.1.6. Магнитное поле $\mathbf{B}(z)$ направлено параллельно поверхности сверхпроводника. Символы n и s указывают нормальную и сверхпроводящую фазы

БКШ)¹. Теория основана на идее, выдвинутой (независимо) Дж. Бардиным и Г. Фрелихом в 1950 г. и состоящей в том, что благодаря наличию кристаллической решётки электроны могут притягиваться (а не отталкиваться). Это взаимодействие можно интерпретировать как обмен фононами. В результате электроны будут образовывать связанные состояния, названные *куперовскими парами*.

Тот факт, что притяжение электронов (с образованием связанного состояния — куперовских пар) обусловлено взаимодействием с кристаллической решёткой, подтверждается существованием так называемого *изотопического эффекта* — зависимости критической температуры T_c от массы ионов M :

$$T_c \sqrt{M} = \text{const},$$

или, что эквивалентно,

$$kT_c \sim \hbar \omega_D \sim 1/\sqrt{M}.$$

Куперовские пары обладают нулевым спином. Действительно, вследствие слабости электрон-электронного взаимодействия с наибольшей вероятностью будут образовываться пары с орбитальным моментом, равным нулю, т.е. в s -состоянии. Поэтому координатная часть волновой функции электронов пары симметрична. Однако, поскольку полная волновая функция антисимметрична, то антисимметричной оказывается их спиновая волновая функция. Но это и означает, что спин пары равен нулю.

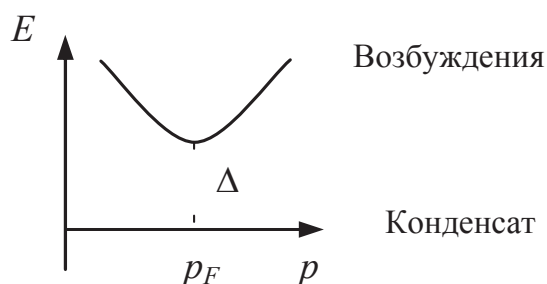


Рис. 7.2.1. Спектр возбуждений электронов при наличии куперовского спаривания. Возбужденные состояния отвечают разрыву пар

Поскольку куперовские пары являются бозонами, то они могут образовывать конденсат из частиц в квантовом состоянии с минимальной энергией. При спаривании выделяется энергия, равная энергии связи 2Δ (по Δ на каждый электрон пары). За счёт спаривания в спектре электронов появляется щель ширины Δ , в результате чего для их возбуждения требуется затратить энергию, не

меньшую, чем Δ (рис. 7.2.1). Вблизи минимума спектр *одноэлектронных* возбуждений передаётся формулой

¹ За создание этой теории авторы удостоены Нобелевской премии в 1972 г. Заметим, что Дж. Бардин (совместно с У. Шокли и У. Браттейном) ранее (в 1956 г.) получил ещё одну Нобелевскую премию по физике (за изобретение транзисторов).

$$E(p) = \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2(p)}, \quad \varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m}.$$

Поскольку именно с разрывом куперовских пар связано разрушение сверхпроводимости, то получаем связь критической температуры и ширины щели: $kT_c \sim \Delta$. Теория БКШ дает следующее равенство:

$$2\Delta = 3,52kT_c$$

(в этой формуле величина Δ есть ширина щели при $T = 0$).

7.2.2. Термодинамическое критическое поле

Рассмотрим поведение сверхпроводников I рода во внешнем магнитном поле. Если поле растёт, то сверхпроводимость исчезает скачком при повышении поля до критического значения H_c (рис. 7.1.2).

Пусть длинный цилиндр из сверхпроводника I рода помещён в однородное продольное поле H . Найдём значение этого поля H_c , при котором произойдёт разрушение сверхпроводимости.

При $H < H_c$ имеет место эффект Мейсснера, т.е. $\mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{I} = 0$, и магнитный момент единицы объёма цилиндра равен $\mathbf{I} = -\mathbf{H}/4\pi$. При изменении внешнего магнитного поля на $d\mathbf{H}$ источник магнитного поля совершит работу над единицей объёма сверхпроводника, равную $-\mathbf{I}d\mathbf{H} = \mathbf{H}d\mathbf{H}/4\pi$. Следовательно, при изменении поля от 0 до \mathbf{H} источник поля совершает работу $H^2/8\pi$.

Если плотность свободной энергии сверхпроводника в отсутствие магнитного поля равна F_{s0} , то при наличии магнитного поля окажется

$$F_s(H) = F_s(0) + H^2/8\pi.$$

Переход в нормальное состояние произойдет, если эта величина достигнет (и превысит) значение плотности свободной энергии нормального металла:

$$F_s(H) = F_n(H) \quad \text{при} \quad H = H_c.$$

Здесь $F_n(H)$ — плотность свободной энергии металла в нормальном состоянии во внешнем поле H . Однако вследствие малости магнитной восприимчивости металла в нормальном состоянии окажется $F_n(H) \approx F_n(0) \equiv F_n$. В результате приходим к соотношению:

$$F_n - F_s(0) = H_c^2/8\pi,$$

выражающему критическое магнитное поле через свободные энергии нормальной и сверхпроводящей фаз. Из этой формулы следует, что кри-

тическое поле является мерой того, насколько сверхпроводящее состояние является энергетически более выгодным, чем нормальное.

Поле, при котором вещество переходит из сверхпроводящего состояния в нормальное, называют *термодинамическим критическим полем* и часто обозначают H_{cm} . В случае сверхпроводников II рода так называют поле, при котором вещество переходит из сверхпроводящего состояния (в котором имеет место полный эффект Мейсснера) в нормальное.

Значение поля H_{cm} связано с величиной щели Δ . Действительно, разрушение сверхпроводимости происходит тогда, когда выигрыш энергии за счёт спаривания W_s сравнивается с магнитной энергией $W_H = H_c^2 / 8\pi$. Оценим величину W_s . Электроны, участвующие в спаривании, находятся в слое толщиной $\sim \Delta$ вблизи поверхности Ферми, так что их концентрация есть $n_s \sim n(\Delta/E_F)$, где n — полная концентрация электронов в сверхпроводнике. Поскольку при спаривании энергия понижается на Δ в расчёте на один электрон, то всего выигрывается энергия $W_s \sim \Delta \cdot n(\Delta/E_F) = n(\Delta^2/E_F)$. Приравнявая эту величину энергии W_H , получаем искомую оценку термодинамического критического поля:

$$\frac{H_c^2}{8\pi} \sim n \frac{\Delta^2}{E_F}.$$

7.2.3. Экспериментальное подтверждение существования щели

Наличие щели в энергетическом спектре сверхпроводника подтверждено в ряде экспериментов. В частности, теплоёмкость и теплопроводность, как и в случае полупроводников, зависят от температуры как $\sim \exp(-\text{const}/kT)$.

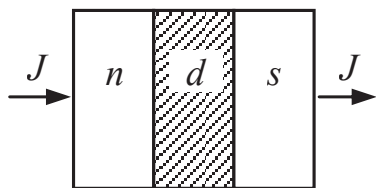


Рис. 7.2.2. Трёхслойная система (МДС-структура), состоящая из нормального металла (n), диэлектрика (d) и сверхпроводника (s)

Остановимся подробнее на экспериментах по туннелированию тока (И. Гиавер, 1960 г.). Исследовалась система (рис. 7.2.2), состоящая из трёх слоёв: нормальный металл (n), диэлектрик (d) и металл в сверхпроводящем состоянии (s) — так называемая *МДС-структура*.

Когда металлы с обеих сторон находятся в нормальном состоянии, то их уровни Ферми совпадают (рис. 7.2.3), а над ними имеются разрешённые состояния зоны проводимости. При приложении напряжения уровень Ферми в одном из металлов повышается, а в другом понижает-

ся. Поэтому в результате туннелирования электроны с занятых состояний одного металла могут переходить в свободные состояния другого — возникает ток, величина которого зависит как от приложенного напряжения, так и от толщины слоя диэлектрика.

Если один из металлов перевести в сверхпроводящее состояние, то вблизи уровня Ферми возникнет щель в энергетическом спектре ширины 2Δ , в которой отсутствуют разрешённые состояния для электронов (рис. 7.2.4 слева). Как следствие, если приложенное напряжение V мало, то ток в направлении $1 \rightarrow 2$ (рис. 7.2.4) не потечёт.

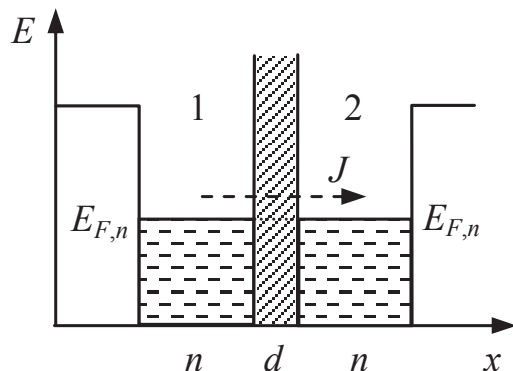


Рис. 7.2.3. Если металлы с обеих сторон системы находятся в нормальном состоянии, то при приложении напряжения ток возникает вследствие туннелирования через слой диэлектрика

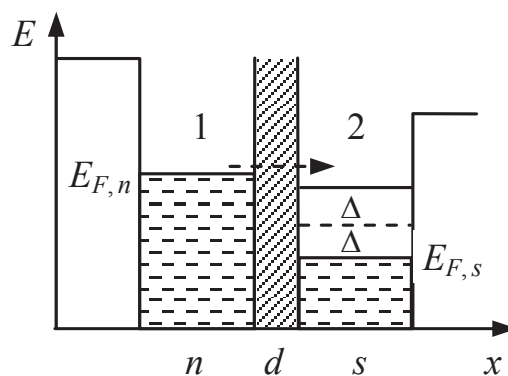
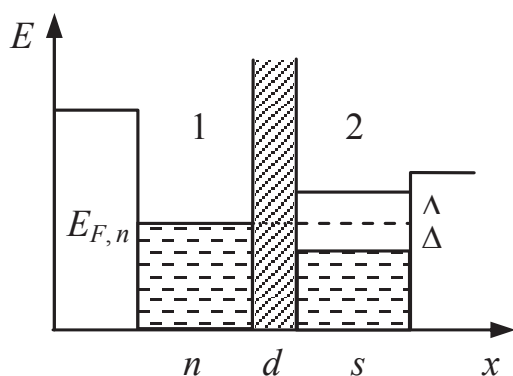


Рис. 7.2.4. Слева — энергетический спектр структуры «металл–диэлектрик–сверхпроводник» в отсутствие внешнего напряжения, справа — то же, но после приложения напряжения, создающего ток в направлении $1 \rightarrow 2$

Однако если окажется $eV > \Delta$, то туннелирование электронов через диэлектрик уже возможно, и в системе возникает ток $1 \rightarrow 2$. Если приложить такое же напряжение, но противоположного знака, то уровень Ферми в нормальном металле на ту же величину понизится, что вызовет ток в обратном направлении: электроны будут переходить из сверхпроводника на свободные

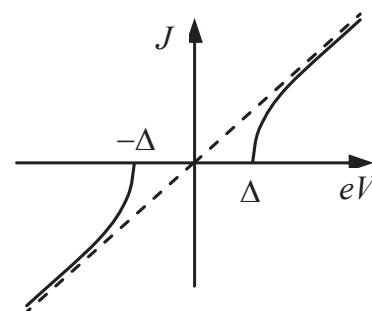


Рис. 7.2.5. Вольт-амперная характеристика МДС-структуры

состояния нормального металла. Качественный вид вольт-амперной характеристики МДС-структуры показан на рис. 7.2.5. Следует иметь в виду, что заметный ток возникает, только если толщина h слоя диэлектрика достаточно мала: $h < 20\text{--}50 \text{ \AA}$.

7.2.4. О механизме притяжения электронов в решётке

Приведём рассуждения, поясняющие механизм возникновения притяжения электронов, обусловленный их взаимодействием с фононами. Эти рассуждения принадлежат В. Вайскопфу (1981 г.).

Пусть электрон движется через ионную решётку металла. Интерес представляют только электроны, импульс которых лежит вблизи поверхности Ферми. Действительно, электроны вдали от этой поверхности ($\varepsilon < \varepsilon_F$) не могут менять своё состояние, поскольку отсутствуют близлежащие свободные состояния, в которые они могли бы переходить в результате взаимодействия с фононами. Тогда

$$\varepsilon \approx \varepsilon_F, \quad v \approx v_F.$$

«Пролетая» мимо иона, электрон взаимодействует с ним с силой $f \sim e^2/a^2$, где a — постоянная решётки. Длительность взаимодействия $\tau \sim a/v_F$. Полагая для оценки $a \sim 10^{-8}$ см, $v_F \sim 10^8$ см/с, получаем $\tau \sim 10^{-16}$ с. Это время много меньше характерного периода колебаний атома в решётке $\omega_D^{-1} \sim (10^{-12} - 10^{-13})$ с. Однако за это время ион приобретает импульс $p_{\perp} \sim f\tau \sim \frac{e^2}{a^2} \cdot \frac{a}{v_F} = \frac{e^2}{av_F}$. Поскольку $e^2/a \sim \varepsilon_B \sim \varepsilon_F$, то

$p_{\perp} \sim \varepsilon_F/v_F \sim p_F$. Таким образом, ион приобретает импульс p_{\perp} порядка фермиевского импульса электрона, направленный к траектории электрона. Максимальное смещение иона массой M можно оценить из соотношения

$$\frac{p_{\perp}^2}{2M} \sim \frac{\kappa x^2}{2} \Rightarrow x \sim \frac{p_F}{\sqrt{M\kappa}}.$$

Эффективная жёсткость связи κ иона в решётке оценивается из тех соображений, что смещение иона на величину порядка межатомного расстояния существенно меняет энергию электронной конфигурации, т.е.

$$\frac{\kappa a^2}{2} \sim \varepsilon_B \sim \varepsilon_F \Rightarrow \kappa \sim \frac{\varepsilon_F}{a^2}.$$

С учётом этого получаем оценку результирующего смещения иона:

$$x \sim \frac{p_{\perp}}{\sqrt{M\kappa}} \sim \frac{p_F}{\sqrt{M\varepsilon_F/a^2}} \sim a\sqrt{\frac{m}{M}},$$

где $\varepsilon_F = p_F^2/2m$, m — масса электрона. Следовательно, смещение иона мало: $x \sim 10^{-2}a \ll a$. В процессе своего движения электрон вызывает смещение ионов, мимо которых он пролетает, возникает «хвост». Длина этого «хвоста» L определяется тем, что смещение ионов существует в течение конечного промежутка времени $\sim T/2 = \pi/\omega_D$. Учитывая, что $\omega_D \sim \sqrt{\kappa/M} \sim \sqrt{\varepsilon_F/Ma^2}$, находим длину «хвоста»:

$$L \sim \frac{v_F}{\omega_D} \sim v_F \sqrt{\frac{Ma^2}{\varepsilon_F}} \sim a \sqrt{\frac{Mv_F^2}{\varepsilon_F}} \sim a \sqrt{\frac{M}{m}} \sim 10^2 a \gg a.$$

Заметим, что оценке величины L можно придать иной вид:

$$L \sim \frac{v_F T}{2} = \frac{\pi v_F}{\omega_D} = \frac{\pi v_F}{(\pi s/a)} \approx \frac{\pi v_F}{s(p_F/\hbar)} = \frac{\pi \hbar}{ms}.$$

Полагая $m = m_e$, $s \sim 3 \cdot 10^5$ см/с, получим $L \sim 10^3$ Å.

Смещение ионов приводит к повышению плотности положительных зарядов вдоль траектории электрона на нейтральном фоне, присутствующем «в среднем» в металле. Оценим полный заряд «хвоста». На участке длиной a прирост заряда, обусловленный смещением одного иона, составляет

$$\Delta q \sim |e| \frac{x}{a} \sim |e| \sqrt{\frac{m}{M}},$$

а на участке длиной L полный заряд составляет

$$q \sim \Delta q \frac{L}{a} \sim |e| \sqrt{\frac{m}{M}} \sqrt{\frac{M}{m}} = |e|.$$

Таким образом, этот заряд приблизительно равен заряду электрона, но имеет положительный знак. К сформировавшемуся «хвосту» уже может притягиваться второй электрон. При этом электроны сильно разнесены в пространстве, и вследствие дебаевского экранирования их прямое кулоновское отталкивание уже практически отсутствует.

7.2.5. Импульс куперовских пар

Найдём характерный импульс куперовских пар. Учтём, что максимальная энергия фононов есть $\hbar\omega_D = k\Theta$. Электроны в металле сильно

вырождены. Поэтому взаимодействовать могут только те из них, энергия которых $p^2/2m$ отличается от E_F не более чем на $\hbar\omega_D$.

Найдём соответствующий разброс импульсов δp :

$$\delta E = \frac{p\delta p}{m} \approx \frac{p_F\delta p}{m} \sim \hbar\omega_D \Rightarrow \delta p \sim \frac{m\hbar\omega_D}{p_F} = p_F \frac{\hbar\omega_D}{2E_F} \ll p_F.$$

Два электрона с импульсами \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 при спаривании дают бозон с импульсом $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ (рис. 7.2.5 слева). Импульс каждого спариваемого электрона лежит в тонком сферическом слое толщиной $\sim \delta p$ (рис. 7.2.5 справа). Пара с каким-либо значением импульса может быть образована электронами, имеющими различные импульсы. Импульсы отдельных электронов должны начинаться и заканчиваться в области перекрытия сферических слоёв толщиной $\sim \delta p$. Как видно из рис. 7.2.5, эта область представляет собой тор, поперечное сечение которого на рис. 7.2.5 (справа) закрашено. Соответственно, чем больше область перекрытия, тем большее число электронов может образовать куперовские пары с импульсом \mathbf{p} . Область перекрытия максимальна, если центры сфер совпадают (тогда эта область совпадает со всем сферическим слоем). Но полному перекрытию отвечает нулевой импульс пары: $\mathbf{p} = 0$. Таким образом, максимальное число куперовских пар имеют нулевой импульс (т.е. электроны одной пары движутся в противоположных направлениях с импульсами, близкими к импульсу Ферми p_F).

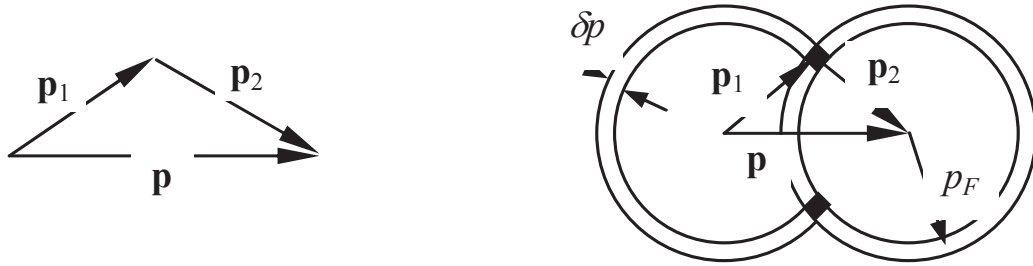


Рис. 7.2.5. Сложение импульсов отдельных электронов в импульсы куперовских пар. Импульсы электронов, дающие суммарный импульс \mathbf{p} , должны начинаться и кончаться в торе, поперечное сечение которого на рисунке справа закрашено

7.2.6. Длина когерентности

Оценим характерный размер куперовской пары. Так как энергия электрона равна $E = p^2/2m$, то её неопределённость есть $\delta E = p\delta p/m \approx v_F\delta p$. Этот разброс не должен превышать энергии спаривания: $\delta E \sim \Delta$, иначе куперовская пара развалится. Поэтому

$\delta p \sim \Delta / v_F$. Согласно соотношению неопределённостей разбросу импульсов δp отвечает разброс расстояний $\delta x \sim \hbar / \delta p \sim \hbar v_F / \Delta$.

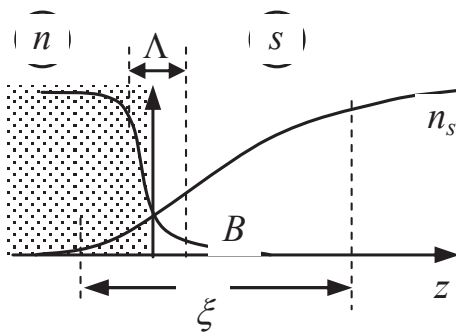
Найденная величина $\xi \sim \hbar v_F / \Delta$ называется *длиной когерентности* и представляет собой максимальное расстояние, на которое могут расходиться электроны куперовской пары, чтобы эта пара не развалилась. Полагая $\Delta \sim 10^{-3}$ эВ, $v_F \sim 10^8$ см/с, получим $\xi \sim 10^{-4}$ см.

Длина когерентности ξ и лондоновская длина Λ представляют собой два характерных масштаба для сверхпроводников:

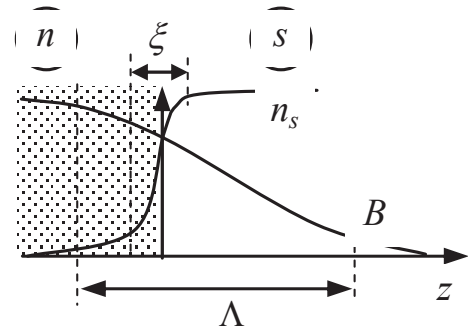
для сверхпроводников I рода $\xi \gg \Lambda$,

для сверхпроводников II рода $\xi \ll \Lambda$.

Соответственно, зависимость концентрации сверхпроводящих электронов и магнитного поля от координаты различаются (рис. 7.2.6). Как видно, теория Лондонов применима по отношению к сверхпроводникам II рода, поскольку она строилась в предположении о том, что граница раздела фаз существенно уже, чем область, в которой убывает магнитное поле. В случае же сверхпроводников I рода лондоновская длина уже не определяет глубину проникновения магнитного поля в объём вещества. Расчёт показывает, что соответствующая глубина даётся формулой: $L \approx (\Lambda^2 \xi)^{1/3} > \Lambda$.



Сверхпроводник I рода



Сверхпроводник II рода

Рис. 7.2.6. Распределение концентрации сверхпроводящих электронов n_s и магнитного поля B вблизи границы раздела нормальной и сверхпроводящей фаз в случае сверхпроводников I рода (слева) и II рода (справа). Заштрихована область нормальной фазы

При переходе в сверхпроводящее состояние выигрывается энергия, равная энергии магнитного поля, вытесненного из объёма сверхпроводника $\Delta E = H_c^2 / 8\pi$ (в расчёте на единицу объёма). Кроме того, на границе раздела фаз имеется поверхностная энергия, которая, в расчёте на

единицу площади поверхности, оценивается как $\Delta E_S = \Delta E_p^{(+)} - \Delta E_H^{(-)}$, где $\Delta E_p^{(+)} \sim \xi(H_c^2/8\pi)$ — выигрыш в энергии за счёт спаривания, $\Delta E_H^{(-)} \sim \Lambda(H_c^2/8\pi)$ — проигрыш в энергии магнитной поля. Для сверхпроводников I рода $\Delta E_S > 0$, а для сверхпроводников II рода $\Delta E_S < 0$.

7.2.7. Сверхтекучесть. Критерий Ландау

Явление сверхтекучести открыл в 1938 г. П.Л. Капица. Он обнаружил, что при понижении температуры до 2,2 К жидкий гелий теряет вязкость — начинает течь без трения. Переход гелия из нормального состояния в сверхтекучее есть фазовый переход 2-го рода He I \rightarrow He II.

Состояние He II представляет собой квантовую жидкость. Такая жидкость не может получать или отдавать энергию непрерывным образом. Для перехода в ближайшее возбуждённое состояние должен появиться квант элементарного возбуждения.

Найдём критерий возникновения сверхтекучести. Пусть в неподвижной жидкости могут возникать возбуждения с импульсом \mathbf{p} и энергией $\varepsilon(\mathbf{p})$. Рассмотрим течение жидкости со скоростью \mathbf{V} по капилляру массы M . Перейдём в систему отсчёта, связанную с жидкостью. Тогда капилляр будет двигаться со скоростью $(-\mathbf{V})$. При рождении возбуждения в жидкости законы сохранения импульса и энергии записываются в виде

$$\begin{aligned} -M\mathbf{V} &= -M\mathbf{V}' + \mathbf{p}, \\ \frac{1}{2}M\mathbf{V}^2 &= \frac{1}{2}M\mathbf{V}'^2 + \varepsilon(\mathbf{p}). \end{aligned}$$

Считая капилляр тяжёлым, а изменение его скорости малым, перепишем второе равенство в виде

$$E(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}M(\mathbf{V} + \mathbf{V}')(\mathbf{V} - \mathbf{V}') \approx M\mathbf{V}(\mathbf{V} - \mathbf{V}').$$

Исключая отсюда $\mathbf{V} - \mathbf{V}'$ с помощью закона сохранения импульса, получим $\varepsilon(\mathbf{p}) = -\mathbf{V}\mathbf{p}$. Отсюда $\varepsilon(p) \leq Vp$, или

$$V \geq V_c = \min(\varepsilon(p)/p). \quad (7.2.1)$$

Таким образом, возбуждения могут возникать, только если скорость течения жидкости превышает критическое значение. Неравенство (7.2.1) называется *критерием сверхтекучести Ландау*.

Сверхтекучесть могла бы существовать при законе дисперсии $\varepsilon(p) = sp$, поскольку возбуждения рождались бы только при движении жидкости со скоростью, не меньшей скорости звука s . При этом теплоёмкость C_V определялась бы фононами, причём при низких температурах оказалось бы $C_V \sim T^3$. Эксперимент же указывает на зависимость $C_V \sim \exp(-\text{const}/T)$, характерную для спектров с щелью. Поэтому для объяснения сверхтекучести необходимо, чтобы при достаточно низких температурах спектр возбуждений имел вид, показанный на рис. 7.2.4.

При малых импульсах спектр аппроксимируется линейной зависимостью $\varepsilon(p) \approx sp$, где s — скорость звука. Это означает, что в жидкости, текущей со скоростью звука, могут рождаться кванты длинноволновых звуковых колебаний (фононы). Возбуждения же, отвечающие области вблизи минимума спектра ($p \approx p_0$) на рис. 7.2.4, названы *ротонами*. Название этих возбуждений отражает их вихревой характер.

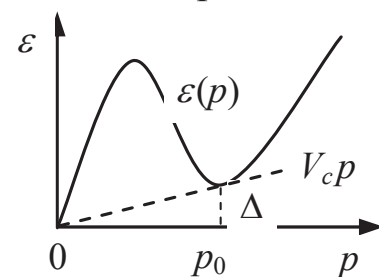


Рис. 7.2.4. Спектр возбуждений $\varepsilon(p)$ в жидкости, объясняющий возникновение сверхтекучести

Рассмотрим, как возникает сверхтекучесть в квантовой жидкости, текущей с докритической скоростью $V < V_c$. В этих условиях ротоны рождаться не могут.

Пусть температура $T = 0$. Тогда какие-либо возбуждения в жидкости отсутствуют. Это значит, что такая жидкость при своём течении не меняет импульса и энергии, т.е. течёт без трения.

Если температура $T > 0$, то в жидкости присутствует некоторое количество фононов. В этом случае присутствующие возбуждения будут отражаться от стенок канала, передавая им часть своего импульса. Благодаря этому часть жидкости, увлекаемая этими возбуждениями, будет терять импульс и начнёт тормозиться — возникает трение жидкости о стенки канала. Однако другая часть жидкости, которая не испытывает действия возбуждений, будет протекать без потери импульса и энергии — как сверхтекучая.

Сказанное означает, что при $T > 0$ квантовая жидкость состоит как бы из двух компонент: нормальной и сверхтекучей, движущихся независимо друг от друга, каждая — со своей скоростью: v_n и v_s . Полная плотность жидкости складывается из плотности нормальной и сверхтекучей компонент: $\rho = \rho_n + \rho_s$, а плотность потока равна

$$\mathbf{j} = \rho_n \mathbf{v}_n + \rho_s \mathbf{v}_s.$$

В отсутствие внешних сил с течением времени нормальная компонента останавливается вследствие трения о стенки капилляра, тогда как сверхтекучая будет продолжать движение. Сверхтекучая компонента исчезает, если скорость течения и (или) температура превысят критическое значение.

Двухжидкостная модель сверхтекучего гелия предложена в 1938 г. Л. Тисой (L. Tisza).

Остановимся на двух опытах по наблюдению сверхтекучести, выполненных П.Л. Капицей.

В первом эксперименте сделана попытка измерить вязкость Не II. Схема установки показана на рис. 7.2.5. Прибор включал капилляр — два тщательно отшлифованных кварцевых диска, расположенных на малом расстоянии друг от друга. В верхнем диске сделано отверстие, в которое вставлена трубка-резервуар. С помощью подвеса прибор можно было поднимать или опускать. Давление регулировалось путём изменения количества гелия в резервуаре, после чего измерялась скорость протекания гелия через капилляр. Внешний сосуд, также заполненный гелием, обеспечивал одинаковую температуру гелия снаружи и внутри трубки.

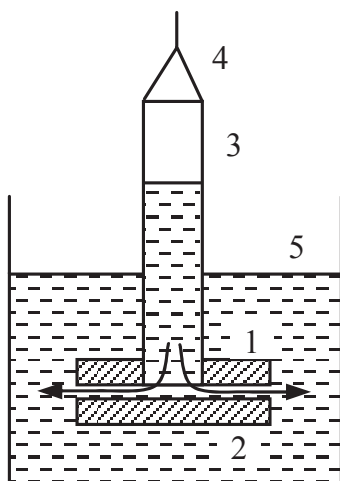


Рис. 7.2.5. Схема прибора П.Л. Капицы по измерению вязкости жидкого гелия. 1 и 2 — кварцевые пластины, 3 — трубка с гелием, 4 — подвес, 5 — сосуд с гелием

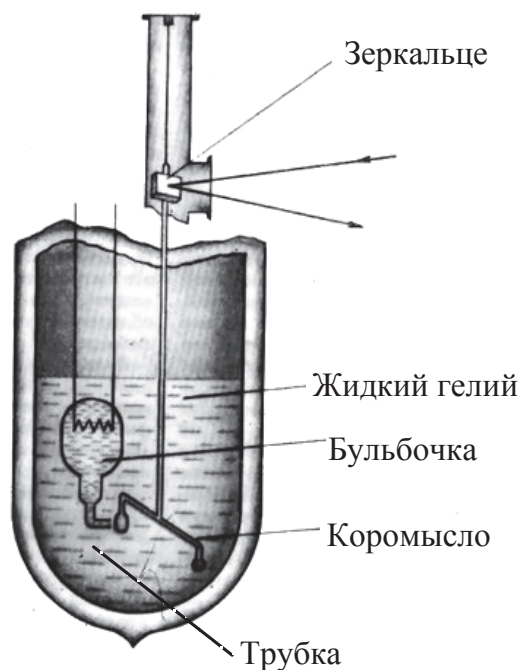


Рис. 7.2.6. Схема опыта П.Л. Капицы по наблюдению течения жидкого гелия

Сверхтекучий гелий быстро вытекал из трубки через узкую щель между двумя пластинками. В опытах Капицы наблюдалось вытекание

He II даже тогда, когда расстояние между дисками уменьшалось до 0,5 мкм. Более того, течение могло приобретать вихревой характер (т.е. характеризовалось большими значениями числа Рейнольдса $Re = \rho v l / \eta$). Это позволило установить, что если вязкость у He II и имеется, то она очень мала, по крайней мере, в 1500 раз меньше, чем у He I.

Второй эксперимент был поставлен следующим образом (рис. 7.2.6). В большой сосуд с He II, в котором поддерживалась неизменная температура, была погружена бульбочка с идущей от неё открытой трубкой-капилляром. В бульбочке гелий слегка подогревался. Напротив отверстия капилляра помещалось лёгкое крылышко. По движению крылышка было видно, что из отверстия капилляра бьёт струя гелия. При этом уровень гелия в бульбочке оставался неизменным: гелий вытекал из неё, но его количество не менялось.

Наблюдавшийся эффект объяснялся тем, что из трубки вытекал слегка подогретый гелий (He I) — жидкость, находящаяся в нормальном состоянии (с ненулевой вязкостью), тогда как ей навстречу, в трубку, втекал сверхтекучий He II, не испытывая торможения потоком He I. В результате поток He I приводил крылышко в движение, а поток He II восстанавливал уровень жидкости в трубке.

7.2.8. Критический ток в сверхпроводниках

Сверхпроводимость можно рассматривать как сверхтекучесть электронной жидкости. Эта аналогия позволяет, в частности, оценить предельные токи, разрушающие сверхпроводимость.

При температуре $T \neq 0$ в сверхпроводнике электронная жидкость состоит из двух компонент: «нормальной» и «сверхпроводящей» (так называемая *двухкомпонентная модель*). Первая обладает вязкостью, тогда как для второй вязкость равна нулю. При изменении температуры соотношение между количеством этих двух компонент меняется: при $T \rightarrow 0$ все электроны переходят в сверхпроводящее состояние, а при $T \rightarrow T_c$ — в нормальное. Если в сверхпроводнике возбуждён ток, то в отсутствие внешнего электрического поля этот ток будет переноситься только сверхпроводящими электронами, поскольку вследствие трения движение «нормальных» электронов затухает.

Приложим внешнее электрическое поле. Если это поле мало, то состояние сверхпроводящей жидкости измениться не может: она будет течь как целое (до тех пор, пока её скорость не станет достаточно большой, чтобы могли рождаться возбуждения). Возбуждения проявляются

в виде разрыва куперовских пар и перехода образующих их электронов в нормальное, несвязанное, состояние. В результате часть энергии электронной жидкости тратится на изменение её внутреннего состояния — появляется конечное трение (сопротивление).

По мере роста температуры число состояний, занимаемых куперовскими парами, уменьшается за счёт заполнения их обычными (нормальными) электронами. Поэтому они уже не участвуют в формировании щели в энергетическом спектре электронов, и, как следствие, оказывается, что $\Delta(T) \rightarrow 0$ при $T \rightarrow T_c$.

Имея в виду аналогию сверхпроводимости и сверхтекучести, можно воспользоваться критерием Ландау, чтобы связать критический ток с величиной щели в энергетическом спектре электронов. Действительно, плотность тока равна $j = en_s V$, где V — средняя скорость движения электронов, n_s — плотность числа сверхпроводящих электронов (при $T = 0$ эта величина равна плотности числа электронов проводимости металла). Вещество приобретает конечное сопротивление, когда могут рождаться возбуждения. Согласно критерию Ландау для этого необходимо, чтобы скорость течения удовлетворяла условию $V \geq V_c = \Delta/p$. Соответственно критическая плотность тока, приводящая к разрушению сверхпроводимости, составляет

$$j \geq j_c = n_s e \Delta / p = n_s e \Delta / m v_F.$$

Здесь учтено, что скорость электронов, участвующих в переносе тока, практически равна скорости Ферми. Полагая для оценки

$$n_s \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}, \quad \Delta \sim 10^{-4} \text{ эВ}, \quad v_F \sim 10^8 \text{ см/с},$$

получаем $j_c \sim 3 \cdot 10^6 \text{ А/см}^2$. Критический ток, приводящий к разрушению куперовских пар, называют часто *током распаривания*.

7.3. Квантование магнитного потока

7.3.1. Квант магнитного потока

Рассмотрим сверхпроводящее кольцо L радиуса R . Предположим, что ток в кольце осуществляется носителями с зарядом q . «Включим» магнитное поле. По закону индукции в кольце будет индуцироваться вихревое электрическое поле, величина которого определяется уравнением Максвелла:

$$\oint_L \mathbf{E} d\mathbf{l} = -\frac{1}{c} \frac{d\Phi}{dt} \Rightarrow E = -\frac{1}{2\pi R c} \frac{d\Phi}{dt}.$$

Здесь $\Phi = \int_S \mathbf{B} d\mathbf{S}$ — магнитный поток, пронизывающий кольцо. Это поле приводит заряды в движение, так что к моменту окончания процесса t_0 импульс носители приобретут импульс

$$p = \int_0^{t_0} qE dt = -\frac{q}{2\pi Rc} \Phi.$$

Момент импульса носителя при этом оказывается равным $L = pR = -q\Phi/2\pi c$. Поскольку момент импульса частицы принимает дискретный набор значений: $L = Rp = n\hbar$, $n = 1, 2, \dots$, то получаем

$$q\Phi/2\pi c = n\hbar \Rightarrow \Phi = n\Phi_0, \quad \Phi_0 = ch/q. \quad (7.3.1)$$

Здесь $\hbar = 2\pi\hbar$. Таким образом, магнитный поток через сверхпроводящий контур может принимать только значения, кратные кванту Φ_0 .

Измерения со сверхпроводниками показали, что заряд q равен $q = 2e$, так что сверхпроводящий ток переносится не отдельными электронами, а парами. Соответственно, в случае сверхпроводников квант магнитного потока равен $\Phi_0 = ch/2e$. Численно $\Phi_0 = 2,07 \cdot 10^{-7}$ Гс·см².

7.3.2. Другой вывод закона квантования магнитного потока

Обобщённый импульс \mathbf{P} частицы с зарядом q выражается через обычный импульс \mathbf{p} и векторный потенциал поля \mathbf{A} формулой

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A}.$$

Гамильтониан частицы в магнитном поле записывается в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}).$$

Оператор обобщённого импульса даётся выражением $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla$. Воспользуемся правилом квантования Бора:

$$\oint \mathbf{P} d\mathbf{r} = \oint \left[m\mathbf{v} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right] d\mathbf{r} = n\hbar.$$

Имея в виду связь скорости частицы и создаваемого тока $\mathbf{v} = \mathbf{j}/nq$ и выбирая контур интегрирования, проходящий целиком в области, где $\mathbf{j} = 0$ (т.е. в объёме сверхпроводника), получаем

$$\frac{q}{c} \oint \mathbf{A} d\mathbf{r} = n\hbar.$$

Преобразуем контурный интеграл с помощью формулы Стокса:

$$\oint \mathbf{A} d\mathbf{r} = \int \text{rot } \mathbf{A} d\mathbf{S} = \int \mathbf{B} d\mathbf{S}.$$

Это даёт

$$\Phi \equiv \int \mathbf{B} d\mathbf{S} = \frac{ch}{q} n \equiv n\Phi_0.$$

Поскольку в сверхпроводнике носитель тока (куперовская пара) имеет заряд $q = 2e$, мы приходим к полученному выше правилу квантования магнитного потока: $\Phi = n\Phi_0$, $\Phi_0 = ch/2e$.

7.4. Оценка критических магнитных полей

7.4.1. Вихревая структура сверхпроводников II рода

В смешанном состоянии магнитное поле частично проникает в объём сверхпроводника II рода. Это проникновение осуществляется в виде отдельных нитей, пронизывающих насквозь объём образца (рис. 7.4.1). В результате среднее поле в объёме оказывается уже ненулевым. Нити, по которым поле проходит через образец, представляют собой участки нормальной фазы вещества, по боковым поверхностям которых циркулирует ток. Эти нити называются вихрями Абрикосова; они образуют правильную треугольную решётку. Каждая нить пропускает один квант магнитного потока. Кольцевой ток, текущий по боковой поверхности нити, близок по величине к критическому, что и приводит к переходу вещества в её объёме в нормальное состояние.

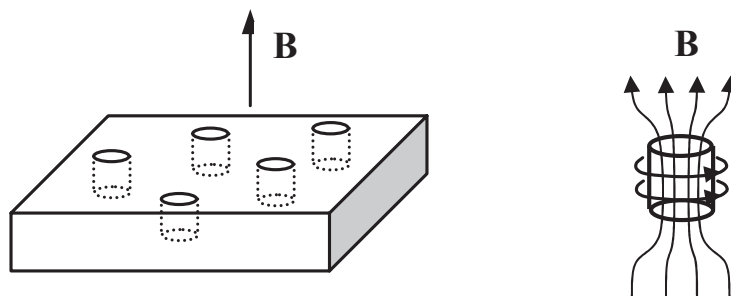


Рис. 7.4.1. Слева — образец из сверхпроводника II рода во внешнем магнитном поле \mathbf{B} в промежуточном состоянии. Цилиндрики иллюстрируют абрикосовские вихревые нити, пронизывающие объём образца. Справа — силовые линии магнитного поля в нити

Образование нитей энергетически выгодно, поскольку для сверхпроводников II рода поверхностная энергия отрицательна. При образовании вихревой нити потери объёмной энергии (при переводе части вещества из сверхпроводящего состояния в нормальное) компенсируются выигрышем за счёт поверхностной энергии.

7.4.2. Оценка первого и второго критических полей

Рассмотрим сверхпроводник II рода в смешанном состоянии. Когда внешнее поле близко к H_{c1} , через образец проходит один квант магнитного потока (рис. 7.4.1 справа). Поле проникает в объём сверхпроводника на глубину порядка лондоновской длины, так что $\Phi_0 \sim H_{c1}\pi\Lambda^2$, откуда находим

$$H_{c1} \sim \Phi_0 / \pi\Lambda^2.$$

Когда поле близко к H_{c2} , отдельные вихревые нити начинают перекрываться, так что один квант потока приходится на ядро нити. Радиус ядра можно оценить из тех соображений, что при меньшем размере куперовские пары с противоположных боков трубки начинают перекрываться. Поскольку характерный размер пары есть ξ , то именно этой величиной можно оценить радиус ядра. Соответственно магнитный поток через ядро вихря есть $\Phi_0 \sim H_{c2}\pi\xi^2$, откуда следует

$$H_{c2} \sim \Phi_0 / \pi\xi^2.$$

Если внешнее магнитное поле не слишком велико и вихревые нити не перекрываются, то вблизи оси нити величина магнитного поля оказывается порядка H_{c1} .

Оценим среднее расстояние между нитями. Поскольку одна нить пропускает через себя один квант магнитного потока, то при наличии магнитного поля B должно возникнуть число нитей, равное $N = BS/\Phi_0$, где S — площадь поверхности образца. Один квант потока будет приходиться на площадь $S_1 = S/N = \Phi_0/B$, а расстояние между соседними вихрями составит $d \sim \sqrt{\Phi_0/B}$.

Полученные оценки для критических полей позволяют установить зависимости лондоновской длины Λ и длины когерентности ξ от температуры. Действительно, поскольку критические поля меняются с температурой как

$$H_c(T) \approx H_c(0)\left(1 - T^2/T_c^2\right),$$

то находим

$$\Lambda(T) \approx \sqrt{\frac{\Phi_0}{\pi H_{c1}(T)}} \approx \frac{\Lambda(0)}{\sqrt{1 - T^2/T_c^2}}, \quad \xi(T) \approx \sqrt{\frac{\Phi_0}{\pi H_{c2}(T)}} \approx \frac{\xi(0)}{\sqrt{1 - T^2/T_c^2}}.$$

Вспоминая определение лондоновской длины: $\Lambda = \sqrt{mc^2/4\pi n_s e^2}$, получаем также зависимость концентрации сверхпроводящих электронов от температуры:

$$n_s \approx n_s(0) \left(1 - T^2/T_c^2\right).$$

Имея в виду определение длины корреляции куперовской пары: $\xi = \hbar v_F / \Delta$, получаем зависимость ширины щели от температуры:

$$\Delta(T) \approx \Delta(0) \sqrt{1 - T^2/T_c^2}.$$

7.5. Эффект Ааронова–Бома

В 1949 г. В. Эренберг и Р. Сайди предсказали эффект бессилового воздействия магнитного поля на частицу: оказывается, вследствие законов квантовой механики заряженная частица может «чувствовать» магнитное поле, локализованное в области, недоступной для её классического движения. Позже и независимо, в 1956 г., Я. Ааронов и Д. Бом пришли к аналогичным выводам.

Пусть электрон движется по некоторой траектории. Приращение фазы волны де Бройля на участке $d\mathbf{r}$ даётся выражением

$$d\varphi = \frac{1}{\hbar} \mathbf{P} d\mathbf{r}, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$$

(\mathbf{P} — обобщённый импульс, \mathbf{p} — обычный импульс, \mathbf{A} — векторный потенциал, $e < 0$). Изменение фазы на траектории AB равно

$$\varphi_{AB} = \frac{1}{\hbar} \int_{(A)}^{(B)} \mathbf{P} d\mathbf{r} = \varphi_{AB}^{(0)} + \frac{e}{c\hbar} \int_{(A)}^{(B)} \mathbf{A} d\mathbf{r}.$$

Это значит, что при наличии магнитного поля волновая функция приобретает дополнительный фазовый множитель

$$\exp \left(\frac{ie}{c\hbar} \int_{(A)}^{(B)} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right). \quad (7.5.1)$$

Пусть теперь электронная волна падает на экран с двумя щелями (рис. 7.5.1). Между щелями находится тонкий соленоид S , в котором создаётся магнитное поле с индукцией \mathbf{B} .

Как известно, магнитное поле длинного идеального соленоида практически целиком локализовано в объёме этого соленоида. Если эксперимент организован так, что электроны не могут попасть внутрь соленоида, то они не могут испытать прямого силового воздействия со

стороны поля, поскольку во внешнем (по отношению к соленоиду) пространстве сила Лоренца $\mathbf{F}_\text{Л} = \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} = 0$.

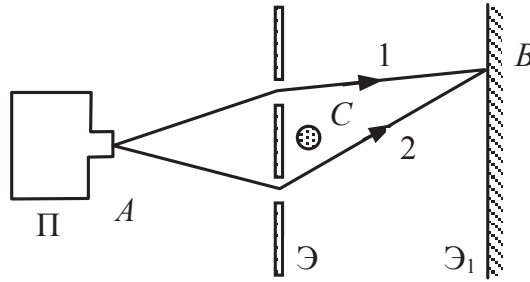


Рис. 7.5.1. Электронная волна, посылаемая пушкой П, проходит через две щели в экране Э, огибая соленоид С, и создаёт интерференционную картину на экране Э₁

В соответствии со сказанным выше фазы волн, доходящих от точки А до точки В на экране Э₁ по путям 1 и 2 (рис. 7.5.1), равны

$$\varphi_1(\mathbf{B}) = \varphi_1(0) + \frac{e}{c\hbar} \int_{(1)} \mathbf{A} d\mathbf{r}, \quad \varphi_2(\mathbf{B}) = \varphi_2(0) + \frac{e}{c\hbar} \int_{(2)} \mathbf{A} d\mathbf{r}.$$

Отсюда находим разность фаз:

$$\Delta\varphi(\mathbf{B}) = \Delta\varphi(0) + \frac{e}{c\hbar} \left(\int_{(2)} \mathbf{A} d\mathbf{r} - \int_{(1)} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right) = \Delta\varphi(0) + \frac{e}{c\hbar} \oint_{\Lambda} \mathbf{A} d\mathbf{r}.$$

Здесь $\Delta\varphi(0) = \varphi_2(0) - \varphi_1(0)$ — сдвиг фаз волн для случая, когда поле в соленоиде отсутствует, $\Lambda = \left\{ A \xrightarrow{(2)} B \xrightarrow{(1)} A \right\}$ — замкнутый контур

(рис. 7.5.1): Преобразуя по теореме Стокса последний интеграл с учётом равенства $\text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{B}$, получим

$$\Delta\varphi(\mathbf{B}) = \Delta\varphi(0) + \frac{e}{c\hbar} \oint_S \mathbf{B} d\mathbf{S}.$$

Входящий сюда интеграл есть магнитный поток через сечение соленоида. Таким образом, «включение» магнитного поля приводит к сдвигу фаз волн на величину

$$\delta(\mathbf{B}) = \frac{e}{c\hbar} \Phi = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}. \quad (7.5.2)$$

Здесь $\Phi_0 = ch/e$ — квант магнитного потока, связанный с зарядом электрона, равным e .

Как следует из сказанного, по мере роста магнитного поля в соле-ноиде интерференционная картина должна смещаться, восстанавлива-ясь каждый раз, когда магнитный поток увеличивается на квант Φ_0 .

Первую экспериментальную проверку эффекта Ааронова–Бома выполнил Р. Чамберс в 1960 г. В качестве источника магнитного поля он использовал однородно намагниченный железный вискер (нитевид-ный монокристалл) конусообразной формы длиной 0,5 мм и диаметром около 1 мкм. Магнитный поток вдоль его длины менялся со скоростью $d\Phi/dz \sim 1 \Phi_0/\text{мкм}$. Возникающая в результате неравномерность сдвига фаз $\delta\varphi \sim \Phi$ вдоль вискера эквивалентна появлению наклона интерфе-ренционных полос (при $d\Phi/dz = 0$ полосы были бы параллельны вис-керу). Расстояние между полосами составляло $\Delta x \sim 0,2 \text{ мкм}$. Ожидался наклон полос на угол $\alpha = (\Delta x/\Phi_0)(d\Phi/dz) \approx 10^\circ$, что и было зарегист-рировано в эксперименте.

В 1986 г. Н. Осакабе с сотрудниками выполнили прецизионные эксперименты, в которых измерялся сдвиг фаз электронных волн, про-шедших вне тороидального магнита и через него (рис. 7.5.2). Магнитное поле использовавшегося магнита полностью локализовано в его объёме. Магнит покрывался слоем сверхпроводящего материала. Измерения проводились при температурах выше и ниже критической. Было под-тверждено возникновение фазового сдвига в соответствии с (7.5.2).

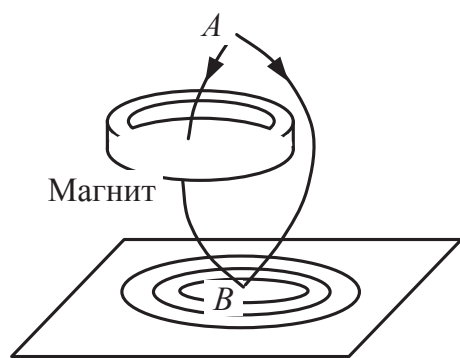


Рис. 7.5.2. Опыт Н. Осакабе: электронные волны проходят вне тороидального магнита и через него и интерферируют на экране

Если покрытие магнита перевести в сверхпроводящее состояние, то магнитный поток в нём должен быть кратным кванту $\Phi_0^{(с.п.)} = ch/2e = \Phi_0/2$ (носители заряда в сверхпроводнике — это куперовские пары с зарядом $2e$). Поэтому сдвиг фаз может составлять только $n\pi$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Этот факт был подтверждён в опытах Осакабе.

Принципиальное значение эффекта Ааронова–Бома состоит в следующем. В рассмотренных опытах электроны находились в области, где магнитное поле $\mathbf{B} = 0$. Поэтому прямое (силовое) действие поля исключалось. Это указывает на то, что в квантовой механике взаимодействие электронов с электро-магнитным полем носит нелокальный характер.

Глава 8. КВАНТОВЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА

В твёрдом проводнике с током плотностью \mathbf{j} , помещенном в магнитное поле \mathbf{B} , возникает разность потенциалов в направлении, перпендикулярном \mathbf{j} и \mathbf{B} . Этот эффект был открыт в 1879 г. Э.Г. Холлом и назван его именем. В 1980 г. К. фон Клитцинг с сотрудниками открыли *целочисленный* квантовый эффект Холла¹. В 1982 г. Д. Цуи, Х. Л. Штёрмер обнаружили новый тип квантового эффекта Холла, названный *дробным*².

8.1. Двумерный электронный газ

8.1.1. Полевой транзистор

До сих пор мы рассматривали системы, в которых носители тока (электроны, дырки) обладали тремя степенями свободы. Новые явления наблюдаются, если движение ограничено одной или двумя степенями. Такая ситуация реализуется в некоторых гетероструктурах.

Одним из устройств, в которых реализуется двумерное движение электронов, является *полевой транзистор*. Мы ограничимся вариантом транзистора, схема которого показана на рис. 8.1.1.

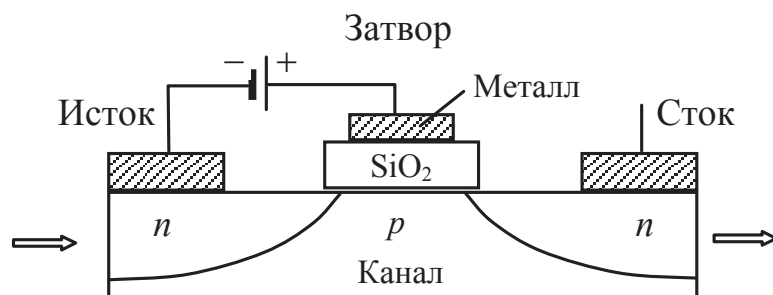


Рис. 8.1.1. Одна из схем полевого транзистора с МОП-структурой

В общем случае транзисторы представляют собой систему двух последовательно соединённых p - n -переходов: n - p - n или p - n - p , из ко-

¹ За открытие квантового эффекта Холла К. фон Клитцингу присуждена Нобелевская премия 1985 г.

² За открытие дробного квантового эффекта Холла Х. Л. Штёрмеру, Д. Цуи и Р. Б. Лафлину присуждена Нобелевская премия 1998 г.

торых один включён в прямом направлении, а другой — в обратном (рис. 8.1.2). Они имеют три электрода: эмиттер, базу и коллектор, играющие ту же роль, что и соответственно катод, сетка и анод в трёх-электродной лампе: поток электронов от катода к аноду регулируется подходящим изменением напряжения на сетке.



Рис. 8.1.2. Транзистор типа $n-p-n$. Справа — изображение транзистора на схемах

В полевом транзисторе (рис. 8.1.1) электродами являются исток (эмиттер), затвор (база) и сток (коллектор). Металлический затвор (выполненный из тантала) отделён от канала диэлектрической прослойкой (SiO_2). Часть канала транзистора под затвором изготавливается из слаболегированного полупроводникового материала (Si) с проводимостью p -типа. Исток и сток контактируют с областями с n -проводимостью, сильно легированными донорными примесями¹. Такое легирование полупроводника увеличивает концентрацию основных носителей, но обычно приводит к появлению большого числа дефектов и ловушек, снижающих подвижность электронов. Поэтому в полевом транзисторе эти области используются в качестве источников большого числа электронов в основной части канала (p -полупроводнике), в которой подвижность электронов велика (как в чистом полупроводнике).

Напряжение между затвором и истоком, а также между затвором и стоком приводит к появлению электрического поля в канале. Это поле меняет число носителей вблизи затвора и, следовательно, сопротивление канала.

8.1.2. Гетероструктуры. МДП-структуры

Показанный на рис. 8.1.1 транзистор представляет собой пример *гетероструктуры* — неоднородной структуры, образованной материалами с разными электрическими свойствами.

Область транзистора, содержащая затвор, изолятор и примыкающую к нему часть канала, называется МДП-структурой, включающей металл–диэлектрик–полупроводник (рис. 8.1.3). В случае, показанном на рис. 8.1.1, роль диэлектрика (изолятора) играет оксид (SiO_2), и система называется МОП-структурой.

¹ Для этого используется метод ионной имплантации.

8.1.3. Двумерный электронный газ

Рассмотрим область канала вблизи затвора (рис. 8.1.3). Если напряжение на затворе равно нулю: $V_{\text{затв}} = 0$, то в транзисторе один из двух последовательно соединённых p – n -переходов всегда включён в обратном направлении. В результате сопротивление цепи велико, ток в цепи исток–сток (рис. 8.1.1) практически отсутствует.

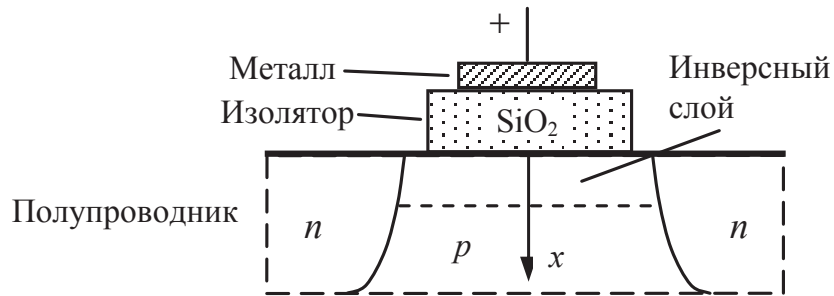


Рис. 8.1.3. Фрагмент полевого транзистора в окрестности затвора — МДП-структура. Показано положение инверсного слоя вблизи затвора

При включении поля ($V_{\text{затв}} > 0$) электроны из n -полупроводников притягиваются к затвору, но остаются в p -полупроводнике, поскольку их выходу препятствует слой изолятора. В результате в p -полупроводнике появляется область (вблизи затвора) с повышенной концентрацией электронов, и при достаточно большом поле тип проводимости может смениться: в p -полупроводнике возникнет участок с n -проводимостью. В этом случае говорят, что возникает *инверсный слой*. Толщина слоя порядка дебаевского радиуса экранирования ($\sim 10^2$ Å). Типичная концентрация электронов в этой области составляет $\sim 10^{12}$ см $^{-2}$.

С точки зрения зонной теории данное явление состоит в следующем. В отсутствие поля зонная структура полупроводника показана на рис. 8.1.4: энергия U , отвечающая границам зон, не зависит от расстояния x до затвора. При включении поля ($V_{\text{затв}} > 0$) зоны искривляются, как показано на рис. 8.1.5. Искривление тем сильнее, чем больше приложенное напряжение. В результате дно зоны проводимости может оказаться ниже уровня Ферми (данный случай отражён на рис. 8.1.5). Но при этом вблизи затвора появляются дополнительные электроны, туннелировавшие из валентной зоны.

Вблизи затвора электроны находятся в электрическом поле, создающем для них потенциальную яму вдоль оси x (рис. 8.1.6). Вдоль других направлений (параллельных плоскости затвора) движение сво-

бодное. Поскольку для движения в яме энергетические состояния дискретны, то энергию можно записать в виде

$$E = E_{x,n} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}.$$

Переход между состояниями с различными значениями $E_{x,n}$ требует больших затрат энергии. Поэтому электроны, принадлежащие одному из состояний $E_{x,n}$, ведут себя как двумерный газ.

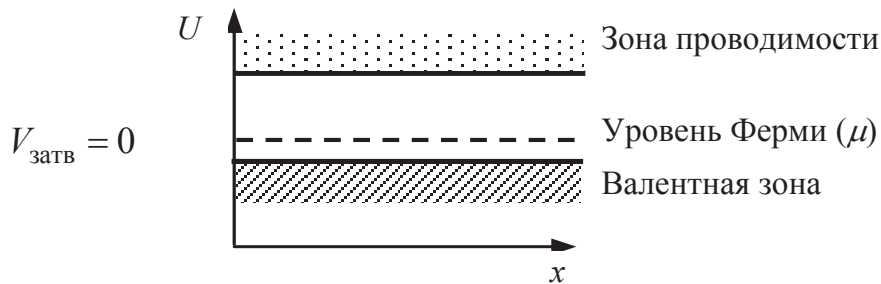


Рис. 8.1.4. Зонная схема полупроводника вблизи затвора, когда напряжение на затворе отсутствует. Координата x отсчитывается от затвора вглубь полупроводника (как показано на рис. 8.1.3)

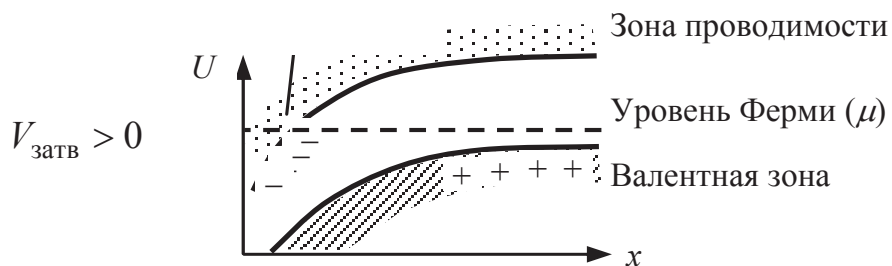


Рис. 8.1.5. Искривление зон при включении поля в зависимости от расстояния x до затвора. Формирование инверсного слоя вблизи затвора

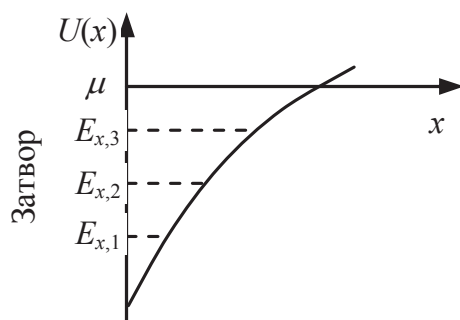


Рис. 8.1.6. Энергетические уровни электрона вблизи затвора. Координата x отсчитывается от затвора вглубь полупроводника. Штриховыми линиями показаны энергетические уровни $E_{x,n}$

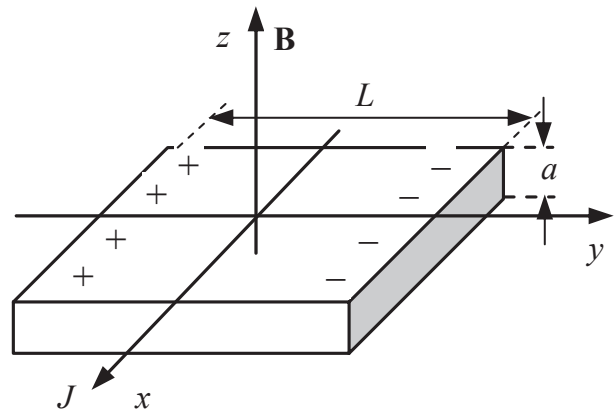
8.2. Классический эффект Холла

Пусть через образец толщиной a и шириной L течет ток J (рис. 8.2.1). Плотность тока равна

$$j = neu = J/aL. \quad (8.2.1)$$

Здесь u — средняя скорость упорядоченного движения (дрейфа) электронов вдоль образца ($\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{u}$), n и e — концентрация (частиц/см³) и заряд электронов.

Рис. 8.2.1. Через образец толщиной a течет ток J вдоль оси x . Под действием магнитного поля \mathbf{B} электроны отклоняются к боковым сторонам образца



На электроны действует сила Лоренца:

$$\mathbf{F}_{\text{Л}} = \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad \bar{F}_{\text{Л}} = \frac{e}{c} u B.$$

Выражая скорость дрейфа u через ток J , имеем

$$\bar{F}_{\text{Л}} = \frac{JB}{ncaL}.$$

Отклонение электронов прекращается, когда сила, действующая со стороны электрического поля $\mathcal{E}_{\text{Н}}$, возникающего между краями образца, сравнивается с $\bar{F}_{\text{Л}}$:

$$e\mathcal{E}_{\text{Н}} = \bar{F}_{\text{Л}}, \quad \text{или} \quad \mathcal{E}_{\text{Н}} = \frac{JB}{necaL}.$$

Считая электрическое поле пространственно однородным вдоль оси y , найдём разность потенциалов, возникающую в направлении, перпендикулярном току:

$$V_{\text{Н}} = L\mathcal{E}_{\text{Н}} = \frac{JB}{neca}. \quad (8.2.2)$$

Это равенство позволяет ввести поперечное сопротивление:

$$R_{\text{Н}} = \frac{V_{\text{Н}}}{J} = \frac{B}{neca}. \quad (8.2.3)$$

Величины $\mathcal{E}_{\text{Н}}$, $V_{\text{Н}}$ и $R_{\text{Н}}$ называются соответственно *холловскими напряжённостью, напряжением (разностью потенциалов) и сопротивлением* (индекс «Н» — это первая буква фамилии Hall).

8.3. Квантующее магнитное поле

8.3.1. Уровни Ландау

Рассмотрим двумерный электронный газ в инверсном слое полупроводника. Пусть на газ накладывается сильное однородное магнитное поле, перпендикулярное слою. Тогда гамильтониан электрона записывается в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + g_s \mu_B \hat{\mathbf{s}} \mathbf{B}. \quad (8.3.1)$$

Здесь $g_s = 2$ — спиновый g -фактор, $\mu_B = |e| \hbar / 2mc$ — магнетон Бора, $\hat{\mathbf{s}}$ — оператор спина. Оператор $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla$ — это оператор обобщённого импульса, $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}} + (e/c) \mathbf{A}$.

Пусть магнитное поле \mathbf{B} однородно и направлено по оси z . В этом случае векторный потенциал \mathbf{A} можно выбрать следующим образом:

$$\mathbf{A} = \{-By, 0, 0\}, \quad \mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}.$$

Соответственно уравнение Шредингера $\hat{H}\Psi = E\Psi$ принимает вид

$$\left[\frac{1}{2m^*} \left(\hat{P}_x + \frac{e}{c} By \right)^2 + \frac{1}{2m^*} \hat{P}_y^2 + g_s \mu_B \hat{s}_z B \right] \Psi = E\Psi. \quad (8.3.2)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде

$$\Psi(x, y) = \chi(y) \exp(iP_x x / \hbar). \quad (8.3.3)$$

Величина P_x представляет собой собственное значение оператора \hat{P}_x и является сохраняющейся, поскольку гамильтониан коммутирует с оператором \hat{P}_x : $[\hat{H}, \hat{P}_x] = 0$. Учтём, что проекция спина s_z принимает определённые значения ($s_z = \pm 1/2$), поскольку оператор \hat{s}_z коммутирует с гамильтонианом \hat{H} : $[\hat{H}, \hat{s}_z] = 0$. Тогда, заменяя $\hat{s}_z \rightarrow s_z$, получаем

$$\frac{d^2 \chi}{dy^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} \left[E - g_s \mu_B s_z B - \frac{m^*}{2} \left(\frac{eB}{m^* c} \right)^2 (y - y_0)^2 \right] \chi = 0. \quad (8.3.4)$$

Здесь введены величины

$$\omega_c = eB / m^* c, \quad y_0 = -cP_x / eB. \quad (8.3.5)$$

В классической электродинамике первая из них (ω_c) представляет собой циклотронную частоту, а вторая, $(-y_0)$, совпадает с радиусом орбиты

электрона с импульсом P_x , находящегося в магнитном поле \mathbf{B} , направленном по оси z .

Уравнение (8.3.4) совпадает по форме с уравнением Шредингера для гармонического осциллятора. Поэтому можно сразу записать выражение для уровней энергии:

$$E_j = (j + 1/2)\hbar\omega_c + g_s\mu_B s_z B, \quad s_z = \pm 1/2, \quad j = 0, 1, 2... \quad (8.3.6)$$

Первое слагаемое описывает эквидистантную систему уровней осцилляторного типа, называемую *уровнями Ландау*. Второе слагаемое даёт *зеemanовское расщепление* уровней Ландау, обусловленное наличием спина у электронов (рис. 8.3.1).

Расстояние между спиновыми подуровнями одного уровня Ландау равно

$$\Delta E_j = 2\mu_B B = \frac{|e|\hbar}{mc} B = \frac{m^*}{m} \hbar\omega_c. \quad (8.3.7)$$

Поскольку эффективная масса электрона m^* в полупроводниках обычно примерно на порядок меньше массы электрона m , то $\Delta E_j \ll \hbar\omega_c$.

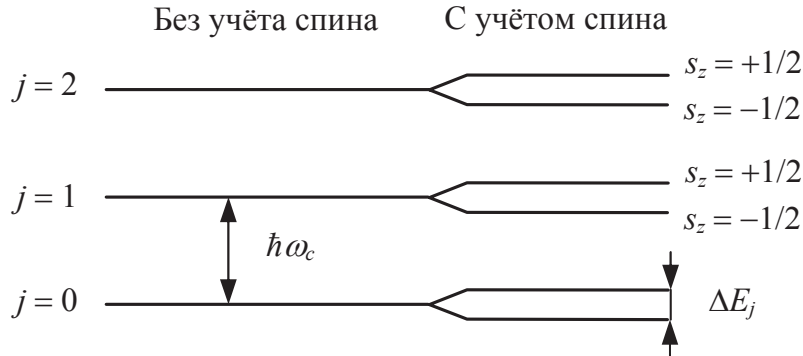


Рис. 8.3.1. Уровни Ландау (слева) и их расщепление на спиновые подуровни (справа)

Если расстояние между подуровнями $\Delta E_j \gg k_B T$, то магнитное поле B называется *квантующим*. Это значит, что вероятность тепловых переходов между подуровнями (и тем более — между уровнями) мала, $w \sim \exp(-\Delta E_j / 2k_B T) \ll 1$. В качестве примера отметим, что магнитное поле $B \sim 10^4$ Гс оказывается квантующим при температурах $T \sim 1$ К.

8.3.2. Заполнение уровней Ландау

В квантующем магнитном поле на каждом подуровне Ландау все электроны оказываются в одинаковом спиновом состоянии (ортосостоянии). Так как электроны — это фермионы, то их полная волновая функция является антисимметричной относительно перестановок час-

тиц. Следовательно, её спиновая часть оказывается симметричной, а пространственная (координатная) — антисимметричной. Последнее означает, что электроны должны быть разнесены в пространстве.

Пусть L_x — длина слоя по оси x . Тогда согласно (8.3.3) величина P_x может принимать лишь дискретный набор значений:

$$P_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x, \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

При этом из (8.3.5) следует, что координата центра орбиты y_0 также может принимать лишь дискретный набор значений:

$$y_0 = -\frac{c}{eB} \cdot \frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x.$$

Расстояние между двумя соседними центрами ($\Delta n_x = 1$) составляет

$$\Delta y_0 = \frac{2\pi\hbar c}{eBL_x}. \quad (8.3.8)$$

Если размер слоя по оси y равен L_y , то на этой длине уместится число центров орбит, равное

$$G = \frac{L_y}{\Delta y_0} = L_x L_y \cdot \frac{eB}{2\pi\hbar c}. \quad (8.3.9)$$

Это соотношение можно переписать в виде

$$G = \Phi / \Phi_0, \quad (8.3.10)$$

где мы ввели величину

$$\Phi_0 = ch/e \quad (8.3.11)$$

— *квант магнитного потока*, связанный с зарядом e .

Величина G имеет смысл кратности вырождения рассматриваемого подуровня Ландау, т.е. максимального числа электронов, которое может быть размещено на данном подуровне. Существенно, что все электроны на одном подуровне имеют одинаковую энергию и отличаются только положением в пространстве.

Согласно (8.3.9) число разрешённых состояний, приходящихся на единицу площади слоя, равно

$$g = \frac{eB}{2\pi\hbar c} = \frac{B}{\Phi_0}. \quad (8.3.12)$$

Полученный результат означает, что по мере увеличения числа электронов в слое сначала заполняется нижний уровень. Затем, по достижении числа электронов, равного G , начинает заполняться следую-

щий уровень и т.д. Заполнение более высоких уровней происходит и тогда, когда при неизменном числе электронов в слое уменьшается магнитное поле, поскольку при этом, согласно (8.3.12), уменьшается кратность вырождения (ёмкость) уровня (рис. 8.3.2).

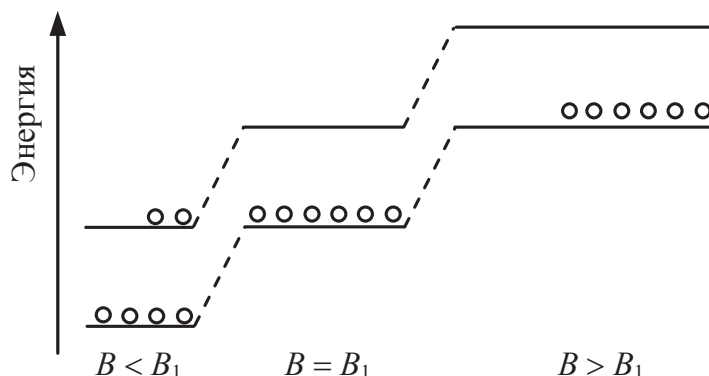


Рис. 8.3.2. Заполнение энергетических уровней при уменьшении магнитного поля. При $B > B_1$ на уровне имеются свободные места; при $B = B_1$ электроны заполняют все свободные места; при $B < B_1$ на нижнем уровне свободных мест недостаточно, и электроны начинают заполнять следующий (более высокий) уровень

Заметим, что при заданном магнитном поле ёмкость всех уровней одинакова и определяется формулами (8.3.10), (8.3.12).

8.4. Квантовый эффект Холла (КЭХ)

8.4.1. Целочисленный квантовый эффект Холла (ЦКЭХ)

В разделе 8.2. мы нашли, что зависимость холловского сопротивления от величины приложенного магнитного поля даётся формулой

$$R_H = \frac{V_H}{J} = \frac{B}{nec}. \quad (8.4.1)$$

В экспериментах группы М. фон Клитцинга 1980 г. было обнаружено, а позже подтверждено в различных лабораториях, что при низких температурах в сильных магнитных полях зависимость холловского (т.е. поперечного) сопротивления резко отличается от закона (8.4.1). Найденная ими зависимость показана на рис. 8.4.1. Наиболее существенным является наличие серии плато на кривой $R_H(B)$ и убывание практически до нуля величины продольного (обычного) сопротивления $R_l(B)$ в точках плато первой кривой.

Оказалось, что значения холловского сопротивления на плато выражаются через фундаментальные постоянные:

$$R_H = \frac{h}{\nu e^2}, \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, \quad (8.4.2)$$

где $h = 2\pi\hbar$ — постоянная Планка, e — заряд электрона.

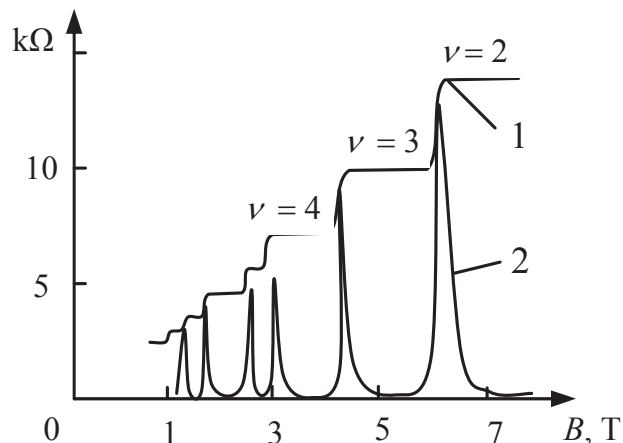


Рис. 8.4.1. Экспериментальные зависимости поперечного R_H (кривая 1) и продольного R_L (кривая 2) сопротивлений от величины приложенного магнитного поля при температуре ~ 10 мК

Для объяснения этого закона перепишем формулу (8.4.1) для холловского сопротивления, учитывая, что в слое вещества толщиной a электроны образуют двумерный газ с поверхностной плотностью $n_s = na$, где n — их объёмная плотность. Тогда

$$R_H = \frac{B}{n_s e c}. \quad (8.4.3)$$

Заметим, что геометрические размеры слоя вещества в эту формулу не входят.

Далее нужно учесть, что физической причиной возникновения обычного сопротивления является рассеяние на неоднородностях (примесях, дефектах, фононах), приводящее к изменению импульса электронов и установлению дрейфовой скорости u . Если уровень Ландау заполнен полностью, то вследствие принципа Паули электрон, оставаясь на данном уровне, не может изменить свое положение относительно других электронов. Поэтому, чтобы произошло рассеяние, электрон должен перейти на следующий уровень. Однако в квантующем магнитном поле вероятность такого перехода мала: $\exp(-\hbar\omega_c/2k_B T) \ll 1$. Следовательно, продольное сопротивление слоя оказывается практически нулевым. Если же на энергетическом уровне имеются свободные места, то рассеяние электронов оказывается возможным без переходов на следующий уровень и сопротивление должно быть конечным. При этом по мере уменьшения магнитного поля число вакансий на уровне убывает и, следовательно, должно убывать сопротивление слоя.

Значение холловского сопротивления легко найти, если учесть, что в случае полностью заполненных ν уровней ($\nu = 1, 2, \dots$) поверхностная плотность электронов, согласно (8.3.12), равна

$$n_s = \nu \cdot B / \Phi_0 = \nu \cdot eB / hc. \quad (8.4.4)$$

Подставляя это значение n_s в формулу (8.4.3), приходим к результату (8.4.2).

В действительности продольное сопротивление оказывается малым, а поперечное сопротивление сохраняет почти постоянную величину в целых интервалах значений магнитного поля (рис. 8.4.1). Этот эффект объясняется тем, что реальные кристаллы несовершенны, имеется довольно большое число дефектов. Последние меняют рельеф изоэнергетических поверхностей: появляются «вершины» и «впадины» потенциала. Находясь во «впадине», электрон не может далеко уйти из этой потенциальной ямы. Аналогично, в окрестности «вершины» возникают замкнутые эквипотенциальные линии, по которым электрон также не может далеко уйти от неоднородности. О таких электронах говорят как о *локализованных*. Локализованные электроны не участвуют в переносе заряда. По мере заполнения впадин отдельные «лужицы» объединяются в непрерывные «полоски», по которым ток уже может течь (рис. 8.4.2). Электроны, участвующие в переносе тока, называются *делокализованными*. Существенно, однако, что при добавлении новых электронов (или уменьшении магнитного поля) сначала заполняются неполные ямы, тогда как концентрация делокализованных электронов не меняется. Но именно по полоскам течёт ток. Это означает, что продольное сопротивление вещества остается почти нулевым, поскольку концентрация делокализованных электронов отвечает *полному* заполнению уровня Ландау, при котором рассеяние электронов не происходит.

Поперечное (холловское) сопротивление сохраняет постоянное значение, поскольку его величина определяется концентрацией делокализованных носителей. Такая ситуация сохраняется до тех пор, пока все полоски не сольются в один сплошной канал. Так формируется ступенька на кривой $R_H(B)$. Затем начинает заполняться следующий уровень Ландау.

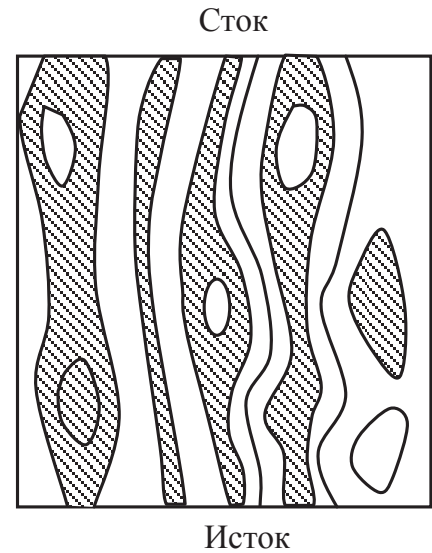


Рис. 8.4.2. Рельеф распределения плотности электронов в слое вещества. Линиями показаны изоэнергетические поверхности. Заштрихованы области, где плотность электронов максимальна. По каналам, соединяющим исток и сток, протекает ток

Наконец, отметим, что величина $R_H^{(1)} = h/e^2$ (т.е. холловское сопротивление на первом плато) составляет 25'812,8 Ом. Квантованные значения R_H в экспериментах воспроизводятся с погрешностью $< 10^{-7}$. Это дало возможность создать эталон сопротивления. Именно, в качестве такового принято значение R_H на четвертой ступеньке:

$$R_{\text{эталон}} = R_H^{(4)} = \frac{1}{4} R_H^{(1)} = 6453,2 \text{ Ом.}$$

8.4.2. Дробный квантовый эффект Холла (ДКЭХ)

В 1982 г. было обнаружено, что плато на холловском сопротивлении существуют и при значениях величины ν в формуле $R_H = h/\nu e^2$ (см. (8.4.2)), являющихся рациональными числами:

$$\nu = \frac{p}{2k+1}, \quad (8.4.5)$$

где p и k — целые неотрицательные числа.

Для объяснения этого эффекта оказалось необходимым учесть кулоновское взаимодействие электронов. Это взаимодействие играет тем более существенную роль, чем более разреженным является газ. В самом деле, импульс Ферми электрона есть $p_F \sim \pi \hbar/a$, где a — период решетки. Кинетическая энергия электронов порядка энергии Ферми и

составляет $E_F = \frac{p_F^2}{2m} \sim \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$. Кулоновская энергия электрона есть

$U_{\text{кул}} \sim e^2/a$. Поэтому $\frac{U_{\text{кул}}}{E_F} \sim \frac{2me^2a}{\pi^2 \hbar^2} \sim n^{-1/3}$. Следовательно, для на-

блюдения ДКЭХ нужны образцы с более низкой концентрацией электронов.

В одном из вариантов теории ДКЭХ используется идея, состоящая в том, что благодаря кулоновскому взаимодействию возникают так называемые *композитные фермионы* (КФ). Эти образования можно интерпретировать как связанные состояния электрона и чётного числа $2p$ ($p = 1, 2, \dots$) квантов магнитного потока $2p\Phi_0$. Как результат, если на единицу площади приходится n_s электронов, то композитный фермион испытывает воздействие эффективного магнитного поля

$$B_{\text{КФ}} = B - 2pn_s\Phi_0, \quad (8.4.6)$$

которое меньше внешнего поля B . Но это означает, что ёмкость соответствующих уровней Ландау, заполняемых теперь композитами, тоже оказывается меньше. Соответственно при уменьшении магнитного поля заполнение следующих уровней начнётся раньше, чем в случае ЦКЭХ.

Максимальная плотность композитных фермионов на одном уровне Ландау равна $n_{\text{КФ}, \text{max}}^{(1)} = B_{\text{КФ}}/\Phi_0$ (по аналогии со случаем электронов — см. (8.3.12)). Поскольку плотность композитных фермионов совпадает с плотностью электронов: $n_{\text{КФ}} = n_s$, то степень заполнения уровней Ландау оказывается равной

$$\nu_{\text{КФ}} = \frac{n_{\text{КФ}}}{n_{\text{КФ}, \text{max}}^{(1)}} = \frac{n_s \Phi_0}{B_{\text{КФ}}}. \quad (8.4.7)$$

Отсюда следует, что

$$n_s = \frac{B_{\text{КФ}}}{\Phi_0} \nu_{\text{КФ}} = \frac{B - 2pn_s \Phi_0}{\Phi_0} \nu_{\text{КФ}} \Rightarrow n_s = \frac{B}{\Phi_0} \frac{\nu_{\text{КФ}}}{1 + 2p\nu_{\text{КФ}}}. \quad (8.4.8)$$

Вспоминая, что величина $\nu = n_s \Phi_0/B$ есть степень заполнения электронных уровней Ландау, получаем окончательно:

$$\nu = \frac{\nu_{\text{КФ}}}{1 + 2p\nu_{\text{КФ}}}. \quad (8.4.9)$$

Таким образом, условием (8.4.9) мы осуществили одно из возможных отображений ДКЭХ в случае системы взаимодействующих электронов на ЦКЭХ системы невзаимодействующих композитных фермионов при $\nu_{\text{КФ}} = n$ с целым числом n занятых композитами уровней Ландау. Подстановка (8.4.9) в формулу для сопротивления Холла и даёт значения R_H на новой системе плато:

$$R_H = \frac{h}{\nu e^2} = \frac{1 + 2pn}{n} \frac{h}{e^2}, \quad n = 1, 2, 3. \quad (8.4.10)$$

8.4.3. О квазичастицах в КЭХ

Следует иметь в виду, что в твёрдом теле рассматриваются не обычные электроны, а квазичастицы — квазиэлектроны, поскольку они формируются в результате взаимодействия обычных электронов с атомными остовами и другими электронами. Поэтому их свойства могут иногда весьма существенно отличаться от свойств свободных частиц. Например, в отличие от обычной массы m эффективная масса m^* может оказаться отрицательной.

На плато зависимости $R_H(B)$ в случае ЦКЭХ квазиэлектроны представляют собой фактически обычные электроны с зарядом e . На каждом плато это электроны, заполняющие соответствующий уровень Ландау. В случае ДКЭХ роль квазиэлектронов принимают на себя композитные фермионы. На плато, где R_H принимает значения (8.4.10), композитные фермионы заполняют $(\nu_{\text{КФ}} + 1)$ -й уровень Ландау.

Интересным следствием теории ДКЭХ, предложенной Лафлиным, оказалось то, что квазичастицы, соответствующие низкоэнергетическим возмущениям электронной жидкости, обладают дробным зарядом:

$$q = \frac{e}{2pn + 1}. \quad (8.4.11)$$

Фрагментация заряда — это фундаментальное свойство электронной жидкости в случае ДКЭХ. Существенно, однако, что речь не идёт о *реальном* делении заряда — это лишь удобный способ описания возбужденных состояний электронной подсистемы в магнитном поле, т.е. переход от настоящих частиц к квазичастицам.

Глава 9. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА

9.1. Парамагнетики, диамагнетики, ферромагнетики

Индукция \mathbf{B} магнитного поля связана с напряжённостью \mathbf{H} равенством $\mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{I}$. Если магнитное поле слабое и в среде нет изначальной намагниченности, то полагают, что намагниченность \mathbf{I} пропорциональна напряжённости \mathbf{H} магнитного поля: $\mathbf{I} = \kappa\mathbf{H}$, где κ — магнитная восприимчивость. При этом магнитная проницаемость μ оказывается связанной с κ соотношением $\mu = 1 + 4\pi\kappa$.

Среды, у которых $\mu = \text{const}$, называются линейными магнитными средами. Однако во многих случаях $\mu = \mu(H) \neq \text{const}$.

В зависимости от магнитных свойств выделяют следующие типы сред.

1) Если $\kappa > 0$, $\mu > 1$, то такое вещество называется *парамагнетиком*.

Парамагнитными свойствами обладают, например, Al, Pt, FeCl₂, O₂, щёлочные и щёлочноземельные металлы.

2) Если $\kappa < 0$, $\mu < 1$, то такое вещество называется *диамагнетиком*.

Диамагнетиками являются Bi, Sb, Si, H₂O, H₂, N₂ и другие.

Деление веществ на парамагнетики и диамагнетики предложил М. Фарадей в 1845 г.

3) Некоторые вещества могут сохранять намагниченность $\mathbf{I} \neq 0$ в отсутствие внешнего магнитного поля. Такие вещества называются *ферромагнетиками*. Ферромагнитными свойствами они обладают при температурах T ниже *точки Кюри* T_K , а при $T > T_K$ они переходят в парамагнитное состояние.

В ферромагнетиках магнитные моменты атомов ориентированы преимущественно в одном направлении, даже если отсутствует внешнее магнитное поле.

Ферромагнитными свойствами обладают Fe, Co, Ni.

4) Выделяют класс веществ, называемых *антиферромагнетиками*. Это такие вещества, в которых магнитные моменты соседних атомов направлены так, что суммарный магнитный момент элементарной ячейки равен нулю (рис. 9.1.1). При этом антиферромагнитно-упорядоченные моменты направлены вдоль некоторой оси, называемой *осью антиферромагнетизма*. Такое упорядочение можно рассматривать как совокупность вдвинутых друг в друга подрешёток, каждая из

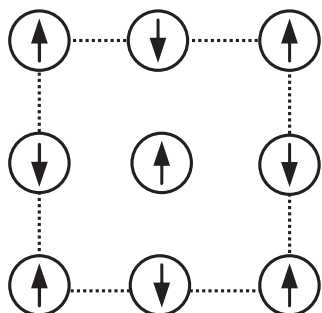


Рис. 9.1.1. Пример антиферромагнитного упорядочения. Стрелки в кружках указывают направление магнитного атома, расположенного в соответствующем узле кристаллической решётки

которых имеет определённую намагниченность I_i , причём $\sum_i I_i = 0$.

Антиферромагнитное состояние реализуется при температуре T ниже *точки Нееля* T_N , а при $T > T_N$ вещество переходит в парамагнитное состояние.

Антиферромагнитными свойствами обладают, в частности, элементы Cr, Mn, Ce, Tb, твёрдый кислород (при $T < 24$ K), соединения MnO, MnSO₄, FeSO₄, FeCl₂, FeO, Cr₂O₃.

5) Если магнитные моменты подрешёток некомпенсированы, то вещество обладает большим магнитным моментом и называется *ферромагнетиком*. Если, к тому же, это вещество обладает полупроводниковыми свойствами, то оно называется *ферритом*.

Ферромагнетики сочетают в себе свойства ферромагнетиков и антиферромагнетиков. При высоких температурах ($T > T_K$) они также переходят в парамагнитное состояние.

Ферромагнетиками являются соединения RbNiF₃, CsNiF₃, TlNiF₃, CsFeF₃.

Ферритами являются химические соединения окиси железа Fe₂O₃ с окислами других металлов (с общей формулой MeFe₂O₄, где Me — Ni²⁺, Co²⁺, Fe²⁺, Mn²⁺, Mg²⁺, Li⁺, Cu²⁺).

Типичные значения магнитной восприимчивости для диа- и парамагнетиков составляют $|\kappa| \sim 10^{-7} - 10^{-5}$. Вместе с тем вещества в парамагнитном состоянии могут иметь и большую магнитную проницаемость: $\mu \gg 1$. Как правило, эти же вещества могут при определённых условиях переходить в ферромагнитное состояние.

Парамагнетизм и ферромагнетизм связаны с выстраиванием, переориентацией магнитных моментов электронных оболочек и ядер.

Диамагнетизм связан с возникновением магнитного момента под действием внешнего магнитного поля у атомов (молекул), которые в отсутствие поля собственным магнитным моментом не обладают.

Если между векторами \mathbf{B} и \mathbf{H} имеется связь $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$, то теорему о циркуляции можно записать в виде

$$\oint_L \mathbf{B} d\mathbf{l} = \frac{4\pi\mu}{c} J, \quad \text{rot } \mathbf{B} = \frac{4\pi\mu}{c} \mathbf{j}.$$

Эти равенства показывают, что при $\mu > 1$ (в парамагнетиках) поле в среде усиливается по сравнению с полем в вакууме, а при $\mu < 1$ (в диамагнетиках) — ослабляется.

Из характерных свойств магнетиков отметим следующие.

1) Во внешнем неоднородном магнитном поле парамагнетики втягиваются в область сильного поля, а диамагнетики выталкиваются из области сильного поля.

2) Если рассматривать поведение вытянутых образцов в магнитном поле, то окажется, что парамагнетики и ферромагнетики ориентируются вдоль силовых линий поля, а диамагнетики — перпендикулярно силовым линиям.

9.2. Диамагнетизм

9.2.1. Ларморова прецессия

Рассмотрим систему частиц, имеющих одинаковые массы (m_e) и заряды (e). Магнитный момент \mathbf{m} этой системы связан с её моментом импульса \mathbf{L} соотношением

$$\mathbf{m} = \gamma \mathbf{L}, \quad (9.2.1)$$

где $\gamma = e/2m_e c$ — гиромагнитное отношение.

Пусть система находится в однородном магнитном поле \mathbf{B} . Тогда на неё действует момент силы

$$\mathbf{M} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}.$$

Запишем уравнение динамики вращательного движения:

$$d\mathbf{L}/dt = \mathbf{M},$$

или, после подстановки сюда выражения для \mathbf{M} ,

$$d\mathbf{L}/dt = \mathbf{m} \times \mathbf{B}.$$

Учитывая связь магнитного момента с моментом импульса (9.2.1), получаем

$$d\mathbf{m}/dt = \gamma \mathbf{m} \times \mathbf{B}, \quad \text{или} \quad d\mathbf{m}/dt = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{m}.$$

Отсюда следует, что магнитный момент прецессирует относительно направления магнитного поля \mathbf{B} с угловой скоростью

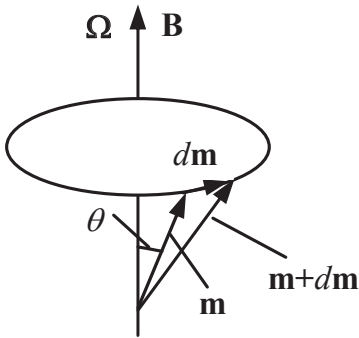


Рис. 9.2.1. Ларморова прецессия в случае частицы с зарядом $e < 0$

$$\Omega = -\gamma \mathbf{B} = -\frac{e}{2m_e c} \mathbf{B}, \quad (9.2.2)$$

как показано на рис. 9.2.1. Частота $\Omega = eB/2m_e c$ называется *ларморовой*.

Если заряд частицы $e < 0$ (как у электрона), то прецессия осуществляется в положительном направлении ($\Omega \uparrow \uparrow \mathbf{B}$). Если же заряд частиц положительный, то прецессия осуществляется в противоположном направлении ($\Omega \uparrow \downarrow \mathbf{B}$).

9.2.2. Диамагнитная восприимчивость

Под действием внешнего магнитного поля \mathbf{B} возникает ларморова прецессия магнитных моментов, причём электрон в атоме приобретает дополнительную угловую скорость

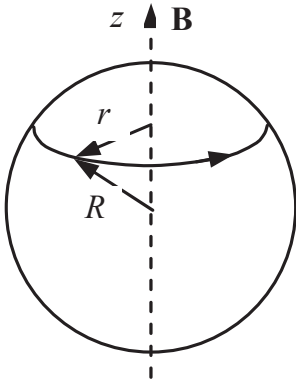


Рис. 9.2.2. Электрон в атоме под действием внешнего магнитного поля \mathbf{B} приобретает дополнительное вращение вокруг направления \mathbf{B}

$$\Omega = -\frac{e}{2m_e c} \mathbf{B},$$

как показано на рис. 9.2.2. Обозначим радиус соответствующей окружности как r . Вращение заряда с периодом T и частотой $\Omega = 2\pi/T$ означает наличие дополнительного кругового тока:

$$\Delta J = \frac{e}{T} = \frac{e\Omega}{2\pi}, \quad \Omega = -\frac{eB}{2m_e c}.$$

Ему соответствует магнитный момент

$$m = \frac{\Delta J}{c} \pi r^2 = \frac{e\Omega}{2\pi} \pi r^2 = -\frac{e^2 r^2}{4m_e c^2} B.$$

Если радиус атома есть R , то

$$R^2 = x^2 + y^2 + z^2 \Rightarrow R^2 = \overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2}.$$

Усреднение выполняется по всем атомам, где электрон захватывается в дополнительное вращение в различных исходных положениях (x, y, z) .

Ввиду равной вероятности различных начальных положений электрона можно положить

$$\overline{x^2} = \overline{y^2} = \overline{z^2} = \frac{1}{3}R^2, \quad \overline{r^2} = \overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2} = \frac{2}{3}R^2.$$

В результате получаем дополнительный магнитный момент, приобретаемый атомом, содержащим Z электронов:

$$\mathbf{m}_Z = Z\overline{\mathbf{m}} = -\frac{Ze^2\overline{r^2}}{4m_e c^2} \mathbf{B} = -\frac{Ze^2 R^2}{6m_e c^2} \mathbf{B}.$$

В слабом поле намагниченность среды мала, так что в последней формуле можно приближённо заменить $\mathbf{B} \approx \mathbf{H}$. Поэтому получаем выражение для намагниченности среды с концентрацией атомов n (см⁻³) $\mathbf{I} = n\mathbf{m}_Z$:

$$\mathbf{I} = \kappa \mathbf{H}, \quad \kappa = -\frac{nZe^2 R^2}{6m_e c^2}. \quad (9.2.3)$$

Таким образом, магнитная восприимчивость оказывается отрицательной, а магнитная проницаемость $\mu = 1 + 4\pi\kappa < 1$.

Иногда приводят значения *удельной* магнитной восприимчивости (т.е. восприимчивости в расчёте на единицу массы):

$$\kappa_{\text{уд}} = \kappa/\rho, \quad [\kappa_{\text{уд}}] = \text{см}^3/\text{г},$$

где ρ — плотность вещества. Эта величина не зависит от плотности вещества и потому более удобна для практических целей. Например, при комнатной температуре

$$\text{для серебра } \kappa_{\text{уд}} = -0,18 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{г},$$

$$\text{для висмута } \kappa_{\text{уд}} = -1,34 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{г}.$$

9.3. Парамагнетизм

9.3.1. Теория Бриллюэна

Явление парамагнетизма допускает качественное объяснение в рамках классической физики. Соответствующую теорию разработал П. Ланжевен в 1905 г. Однако объяснение этого явления, количественно согласующееся с экспериментальными данными, может быть получено только с применением законов квантовой механики. Последовательную квантовомеханическую теорию парамагнетизма построил Л. Бриллюэн в 1926 г.

Электрон имеет спин \mathbf{s} , проекция которого на выделенное направление (s_z) может принимать два значения:

$$s_z = -1/2, \quad s_z = +1/2.$$

Магнитный момент электрона \mathbf{m} , будучи направленным антипараллельно спину: $\mathbf{m} = -g_s \mu_B \mathbf{s}$, $g_s = 2$, также может ориентироваться только двумя способами:

$$m_z = -\mu_B, \quad m_z = +\mu_B,$$

где $\mu_B = |e| \hbar / 2mc = 9,27 \cdot 10^{-21}$ эрг/Гс — магнетон Бора. Соответственно потенциальная энергия $U = -\mathbf{m} \mathbf{B}$ электрона в магнитном поле \mathbf{B} может принимать два значения:

$$U_1 = -\mu_B B, \quad U_2 = +\mu_B B,$$

отвечающие ориентации момента по полю (U_1) и против поля (U_2).

Предположим сначала, что магнитные моменты частиц (атомов), образующих магнетик, определяются магнитным моментом электрона. Кроме того, пренебрежём взаимодействием частиц друг с другом. Согласно распределению Больцмана: $n = A \exp(-U/kT)$ концентрация частиц в состоянии с энергией U_i , $i = 1, 2$, равна

$$n_{1,2} = A \exp(\pm \mu_B B / kT), \quad (9.3.1)$$

где A — нормировочная постоянная. Введём обозначение

$$a = \mu_B B / kT.$$

Тогда получаем

$$\begin{aligned} n_1 &= A e^a \quad \text{при } \mathbf{m} \uparrow \uparrow \mathbf{B}, \\ n_2 &= A e^{-a} \quad \text{при } \mathbf{m} \uparrow \downarrow \mathbf{B}. \end{aligned}$$

Условие нормировки $n_1 + n_2 = n_0$ даёт

$$A = n_0 / 2 \operatorname{ch} a$$

(n_0 — концентрация атомов в веществе). С учётом этого находим намагниченность вещества:

$$I = n_1 \mu_B + n_2 (-\mu_B) = \mu_B \cdot 2A \operatorname{sh} a = n_0 \mu_B \operatorname{th} a,$$

или

$$I = n_0 \mu_B \operatorname{th}(\mu_B B / kT). \quad (9.3.2)$$

Величина $I_{\text{нас}} = n_0 \mu_B$ есть намагниченность насыщения, отвечающая состоянию, в котором магнитные моменты всех частиц ориентированы по направлению поля.

Рассмотрим частные случаи.

1) *Низкие температуры*: $a = \mu_B B / kT \gg 1$. Поскольку в этом пределе $\tanh a \rightarrow 1$, то получаем

$$I \rightarrow I_{\text{нас}} = n_0 \mu_B.$$

2) *Высокие температуры*: $a = \mu_B B / kT \ll 1$. В этом пределе $\tanh a \approx a$. Соответственно находим

$$I \approx I_{\text{нас}} \frac{\mu_B B}{kT} = \frac{n_0 \mu_B^2}{kT} B \approx \frac{n_0 \mu_B^2}{kT} H = \kappa H$$

(учтено, что, как правило, величина $\kappa = n_0 \mu_B^2 / kT \ll 1$, что позволило положить $B \approx H$). Таким образом, приходим к следующему выражению для магнитной восприимчивости:

$$\kappa = n_0 \mu_B^2 / kT. \quad (9.3.3)$$

Найденное значение κ хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Зависимость $\kappa = C/T$, где C — константа, установлена П. Кюри в 1895 г. и называется *законом Кюри*.

Если магнитный момент атома определяется не одним, а несколькими электронами, то формула (9.3.3) должна быть видоизменена.

Пусть атом имеет полный момент импульса \mathbf{J} , а фактор Ланде равен g . Тогда для магнитного момента атома имеем выражение $\langle \mathbf{m} \rangle = -g \mu_B \mathbf{J}$. В магнитном поле намагниченность направлена по магнитному полю \mathbf{B} (вдоль оси z). Далее учтём, что при высоких температурах

$$n_i = A \exp\left(-\frac{U_i}{kT}\right) = A \exp\left(\frac{m_{z,i} B}{kT}\right) \approx A \left(1 + \frac{m_{z,i} B}{kT}\right).$$

Здесь индекс i нумерует значения проекции момента. Поскольку число различных проекций J_z момента равно $2J+1$, причём

$$\sum_i m_{z,i} = -\sum_i g \mu_B J_{z,i} = 0, \quad \text{то в данном приближении нормировочная}$$

константа A выражается через полное число частиц $n_0 = \sum_i n_i$ формулой:

$A = n_0 / (2J+1)$. Как следствие, намагниченность определяется квантовомеханическим средним значением квадрата проекции момента импульса на направление поля:

$$I = \sum_i m_{z,i} n_i = \frac{n_0}{2J+1} \left(- \sum_i g \mu_B J_{z,i} + \frac{1}{kT} \sum_i g^2 \mu_B^2 J_{z,i}^2 B \right) =$$

$$= n_0 \frac{1}{kT} g^2 \mu_B^2 \overline{J_z^2} B.$$

Поскольку $\overline{J_z^2} = \left(\sum_{J_z=-J}^J J_z^2 \right) / (2J+1) = J(J+1)/3$, то вместо (9.3.3) получаем следующую формулу:

$$\kappa = n_0 \overline{m_z^2} / kT, \quad \overline{m_z^2} = g^2 \mu_B^2 J(J+1)/3. \quad (9.3.4)$$

В частном случае, когда $J = S = 1/2$, имеем $g = g_s = 2$, и мы возвращаемся к прежней формуле (9.3.3).

9.3.2. Адиабатическое размагничивание

При помещении парамагнетика в магнитное поле в условиях постоянства температуры происходит упорядочивание магнитных моментов. Этот процесс сопровождается понижением энтропии. Если после этого выключить магнитное поле, удерживая неизменной энтропию спиновой подсистемы магнетика, то температура понизится.

Данный метод предложили П. Дебай и У. Джиок в 1926 г. В настоящее время таким путём удаётся получать очень низкие температуры — до $10^{-3} - 10^{-7}$ К.

Рассмотрим подробнее механизм охлаждения. Считаем объём вещества (парамагнетика) неизменным. Тогда в соответствии с законами термодинамики изменение внутренней энергии системы даётся формулой

$$dU = TdS + dU_M, \quad dU_M = \frac{1}{4\pi} H dB. \quad (9.3.5)$$

Здесь dU_M — изменение магнитной энергии. Соответственно для приращения свободной энергии находим

$$dF = -SdT + \frac{1}{4\pi} H dB. \quad (9.3.6)$$

Отсюда следует

$$\left(\frac{\partial S}{\partial B} \right)_T = - \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_B. \quad (9.3.7)$$

Рассматривая энтропию как функцию температуры и индукции магнитного поля, запишем условие адиабатичности процесса:

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_B dT + \left(\frac{\partial S}{\partial B} \right)_T dB = 0 \Rightarrow dT = - \frac{(\partial S / \partial B)_T}{(\partial S / \partial T)_B} dB. \quad (9.3.8)$$

Если ввести теплоёмкость $C_B = T(\partial S / \partial T)_B$ при неизменном поле, то последнее выражение примет вид

$$dT = - \frac{T}{C_B} \left(\frac{\partial S}{\partial B} \right)_T dB. \quad (9.3.9)$$

С учётом (9.3.7) отсюда находим

$$dT = \frac{T}{4\pi C_B} \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_B dB. \quad (9.3.10)$$

Наконец, имея в виду связь

$$B = \mu H \Rightarrow \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_B = - \frac{B}{\mu^2} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_B,$$

а также то, что $\mu = 1 + 4\pi\kappa$, получим из (9.3.10)

$$dT = - \frac{TB}{\mu^2 C_B} \left(\frac{\partial \kappa}{\partial T} \right)_B dB. \quad (9.3.11)$$

Поскольку магнитная восприимчивость убывает с ростом температуры: $(\partial \kappa / \partial T)_B < 0$, то, как видно из полученной формулы, при уменьшении магнитного поля температура системы понижается.

Рассмотрим область температур, в которой выполняется закон Кюри $\kappa = \text{const}/T$. Тогда формула (9.3.11) примет вид

$$dT = \frac{\kappa B}{\mu^2 C_B} dB. \quad (9.3.12)$$

В частности, если изменения температуры невелики: $\Delta T \ll T$, то при уменьшении магнитного поля от значения $B = B_0$ до $B = 0$ изменение температуры составит

$$\Delta T = - \frac{\kappa B_0^2}{2\mu^2 C_B}. \quad (9.3.13)$$

9.4. Электронный парамагнетизм

Металлы, способные переходить в ферромагнитное состояние, обладают парамагнитными свойствами: $\kappa > 0$. В то же время такой парамагнетизм имеет свои особенности, резко отличающие его от парамаг-

нетизма газов и ионов, хорошо описываемого теорией Бриллюэна. В частности, магнитная восприимчивость почти не зависит от температуры. Дело в том, что магнитные свойства металлов в значительной степени формируются электронами проводимости, подчиняющимися статистике Ферми. Соответствующую теорию построил В. Паули в 1927 г.

Рассмотрим подробнее, как формируется электронный парамагнетизм (его называют *парамагнетизмом Паули*).

В металлах электроны образуют вырожденный ферми-газ, в котором электроны с равной вероятностью имеют проекции спина $s_z = -1/2$ и $s_z = +1/2$ и соответствующие магнитные моменты $\mu_z = -g\mu_B s_z$.

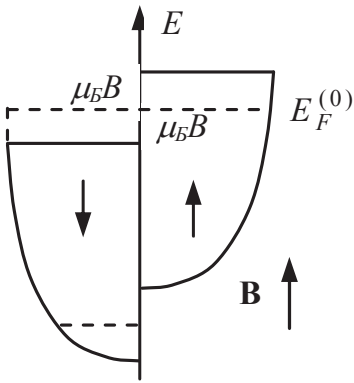


Рис. 9.4.1. Понижение энергии у группы электронов со спинами $s_z = -1/2$ и повышение — у группы со спинами $s_z = +1/2$

При включении магнитного поля \mathbf{B} происходит расщепление каждого из уровней согласно формуле

$$E = E_0 + g_s \mu_B B s_z = E_0 \pm \mu_B B. \quad (9.4.1)$$

Здесь $g_s = 2$ — спиновый g -фактор, а поле \mathbf{B} предполагается направленным вдоль оси z . В результате энергия электронов со спином $s_z = +1/2$ возрастёт, а электронов со спином $s_z = -1/2$ понизится, как показано на рис. 9.4.1. На этом рисунке направление спинов у групп электронов показано стрелкой.

В результате установления равновесия часть электронов с «невыгодным» направлением спинов («вверх») изменит ориентацию спина так, чтобы уровни Ферми обеих подсистем сравнялись. Как следствие, число электронов со спинами против поля («вниз») увеличится, а со спинами по полю — уменьшится. Поскольку магнитный момент электрона направлен против спина ($\mu_z = -g\mu_B s_z$), то суммарный магнитный момент электронов возрастёт. Но это и означает, что электронный газ обладает парамагнитными свойствами.

Найдём величину магнитной восприимчивости. Пусть концентрация электронов равна n . Электроны с одной ориентацией спина (число которых равно $n/2$) занимают состояния до уровня энергии

$$E_F = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{2m} n^{2/3}. \quad (9.4.2)$$

Число электронов $G_1(E)$ с определённым направлением спина в единичном интервале энергий определяется формулой

$$G_1(E)dE = \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} dE. \quad (9.4.3)$$

Вблизи границы Ферми эта величина составляет

$$G_1(E_F) = 3n/4E_F. \quad (9.4.4)$$

После наложения магнитного поля граничная энергия (9.4.2) изменится на $\mu_B B$. Число электронов с энергиями в этом интервале равно

$$\Delta n \approx G_1(E_F) \mu_B B = \frac{3}{4} \frac{\mu_B B}{E_F} n. \quad (9.4.5)$$

После установления равновесия это количество электронов изменит направление спина, в результате чего электронный газ приобретёт магнитный момент (намагниченность)

$$I = 2\mu_B \Delta n \approx \frac{3}{2} \frac{\mu_B^2 B}{E_F} n. \quad (9.4.6)$$

Полагая $I = \kappa_P B$, находим магнитную восприимчивость:

$$\kappa_P = \frac{3}{2} \frac{\mu_B^2 n}{E_F}. \quad (9.4.7)$$

Индекс « P » указывает на парамагнетизм Паули.

В магнитном поле электроны не только могут менять ориентацию спина, но и совершают вращение вокруг силовых линий. Этот эффект, как говорилось выше (в разделе 9.2), приводит к появлению диамагнитной поправки κ_L к полной магнитной восприимчивости. Данное явление известно как *диамагнетизм Ландау*. Качественно оценить величину κ_L можно следующим образом.

Под действием магнитного поля электрон приходит в круговое (орбитальное) движение с циклотронной частотой $\omega_c = eH/m_e c$. Вследствие квантования момента импульса магнитный момент принимает дискретный набор значений, причём минимальное значение есть $\mu_z = (e/2m_e c) l_z = -\mu_B$, где $\mu_B = |e|\hbar/2m_e c$ — магнетон Бора. В результате вращения энергия электронов меняется на $\mu_B B$. Но вследствие вырождения изменить энергию могут только электроны вблизи поверхности Ферми, концентрация которых $\Delta n \sim (\mu_B B/E_F) n$. В результате электронная подсистема приобретает намагниченность

$I \sim -(\mu_B^2 n / E_F) B$, которой отвечает диамагнитная восприимчивость $\kappa_L \sim -\mu_B^2 n / E_F$. Точный расчёт даёт

$$\kappa_L = -\mu_B^2 n / 2E_F. \quad (9.4.8)$$

Таким образом, величина (9.4.7) должна быть уменьшена на одну треть, что приводит к следующему значению κ :

$$\kappa = \kappa_P + \kappa_L = \mu_B^2 n / E_F. \quad (9.4.9)$$

Найденная величина удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными. В частности, видно, что от температуры она практически не зависит.

9.5. Ферромагнетизм

9.5.1. Гистерезисные явления

Ферромагнетики — это вещества, которые могут обладать отличной от нуля намагниченностью в отсутствие внешнего поля.

Если образец из ферромагнетика поместить во внешнее магнитное поле и плавно периодически менять направление этого поля, то периодически будет меняться и намагниченность образца, а также поле в образце, как показано на рис. 9.5.1 и 9.5.2. Как видно, кривая намагничивания неоднозначна. Это явление называется *гистерезисом*.

На рис. 9.5.1 и 9.5.2 показаны следующие характеристики ферромагнетика:

B_r — остаточная намагниченность, H_s , B_s — поле насыщения, I_s — намагниченность насыщения, H_c — коэрцитивная сила.

Постоянные магниты существуют вследствие наличия остаточной намагниченности $B = B_r \neq 0$, т.е. намагниченности, сохраняющейся при уменьшении до нуля внешнего поля ($H = 0$).

Существование намагниченности насыщения связано с тем, что, как и в случае парамагнетиков, в одном и том же направлении ориентируется максимально возможное число магнитных моментов атомов, и при дальнейшем увеличении внешнего поля $H > H_s$ рост намагниченности практически прекращается.

Размеры гистерезисной петли ограничиваются полем насыщения. При $|H| > H_s$ зависимость $B(H)$ однозначная и практически линейная.

Коэрцитивная сила — это такое внешнее магнитное поле, которое требуется приложить к образцу, чтобы в его объёме обратить в нуль магнитное поле. Более точно: коэрцитивная сила определяется в про-

цессе перемагничивания образца, намагниченность которого в цикле достигает насыщения (т.е. в условиях, когда внешнее поле в какие-то моменты превышает значение H_s). У разных ферромагнетиков коэрцитивная сила может принимать значения от 10^{-3} эрстед до 10^4 эрстед.

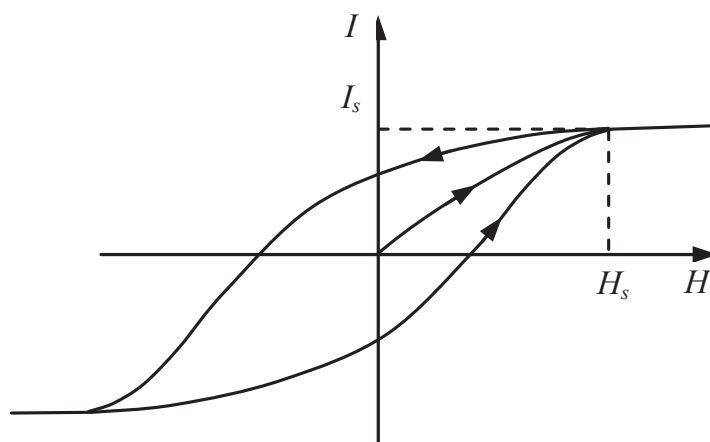


Рис. 9.5.1. Зависимость намагниченности I ферромагнетика от внешнего магнитного поля H . Стрелки на кривых показывают направление изменения внешнего магнитного поля

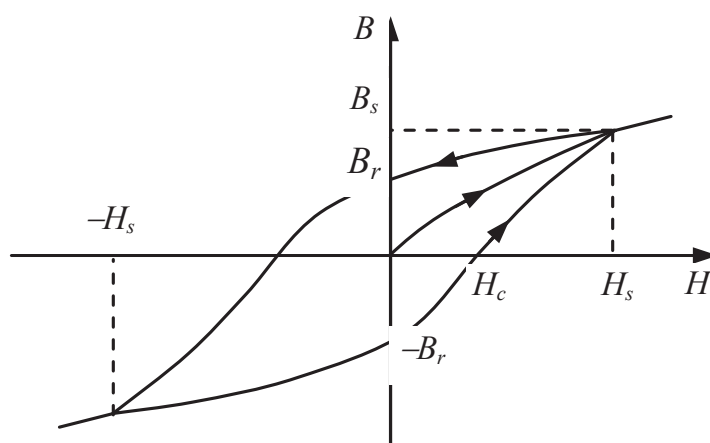


Рис. 9.5.2. Кривая намагничивания ферромагнетика — зависимость магнитного поля в веществе B от внешнего магнитного поля H . Стрелки на кривых показывают направление изменения внешнего магнитного поля

Вещества называются *магнитомягкими*, если гистерезисная петля узкая, а значения коэрцитивной силы и поля насыщения малы. Поэтому магнитомягкие материалы относительно легко перемагнитить, изменить направление намагниченности на противоположное.

Если значение коэрцитивной силы велико, а гистерезисная петля широкая, то материал называется *магнитожёстким*. Из таких материалов делают хорошие магниты, поскольку их труднее перемагнитить.

9.5.2. Закон Кюри–Вейсса

Вещество может находиться в ферромагнитном состоянии, если его температура не превышает критического значения $T = T_K$, называе-

мого *точкой Кюри*. Если же $T > T_K$, то образец ведёт себя как парамагнетик, для которого связь B и H однозначная: $I = \kappa H$, $B = \mu H$.

На рис. 9.5.3 показана зависимость магнитной восприимчивости от температуры. Зависимость $\kappa(T)$ в окрестности точки Кюри при $T > T_K$ удовлетворительно передаётся формулой

$$\kappa \approx \frac{\text{const}}{T - T_K}. \quad (9.5.1)$$

Это соотношение называется *законом Кюри–Вейсса*. При $T < T_K$ величина κ не определена однозначно, а вещество может спонтанно (самопроизвольно) приобретать намагниченность.

Ниже точки Кюри намагниченность зависит от температуры, как показано на рис. 9.5.4. При $T > T_K$ спонтанная намагниченность пропадает, и вещество переходит в парамагнитное состояние.

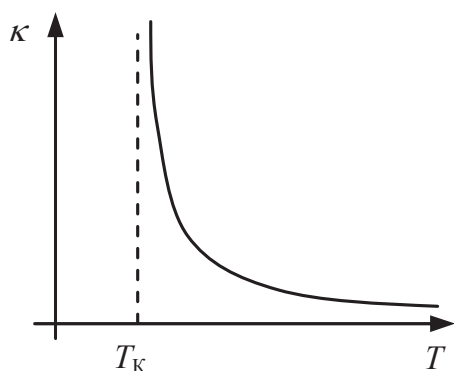


Рис. 9.5.3. Зависимость магнитной восприимчивости ферромагнетика от температуры (при $T > T_K$)

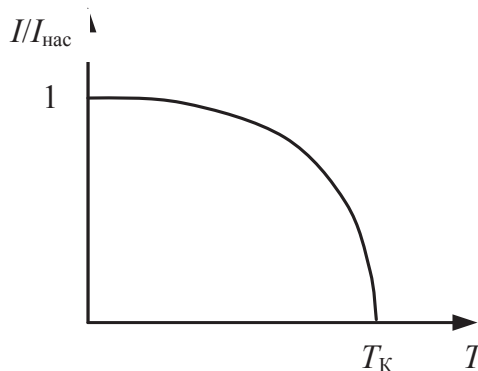


Рис. 9.5.4. Зависимость намагниченности ферромагнетика от температуры (при $T < T_K$)

Приведём некоторые значения температуры Кюри:

$$T_K(\text{Ni}) = 627,4 \text{ К}; \quad T_K(\text{Fe}) = 1044 \text{ К}; \quad T_K(\text{Co}) = 1388 \text{ К}. \quad (9.5.2)$$

9.5.3. Теория Вейсса

Возникновение намагниченности образца при $T < T_K$ происходит в результате фазового перехода второго рода и связано с тем, что это состояние оказывается энергетически более выгодным, чем состояние с нулевой намагниченностью.

Как и парамагнетики, вещества с ферромагнитными свойствами состоят из частиц (атомов), имеющих собственный магнитный момент. При рассмотрении намагничивания обычных парамагнетиков пренебрегалось взаимодействием магнитных моментов частиц между собой.

Вместе с тем в некоторых случаях это взаимодействие может быть существенным. Действительно, если возникает некоторая намагниченность, то поле в среде усиливается. А это в свою очередь стимулирует ориентацию, поворачивание магнитных моментов в том же направлении. Если ориентирующее действие такого взаимодействия преодолевает разориентирующее действие тепловых колебаний, то вещество переходит в состояние с ненулевой намагниченностью.

Одна из первых теорий ферромагнетизма была предложена П. Вейссом в 1907 г., предположившим, что в ферромагнетиках возникает сильное поле, называемое *молекулярным полем Вейсса*, которое осуществляет ориентацию моментов. Это поле по предположению пропорционально намагниченности.

Обозначим поле Вейсса как H_W и положим

$$H_W = \lambda I, \quad (9.5.3)$$

где λ — некоторая константа.

Поле Вейсса играет роль, подобную реальному магнитному полю, в выражениях для энергии и момента сил, действующего на магнитный момент. Однако оно не входит в уравнения Максвелла и с ним не связаны какие-либо токи.

С учётом (9.5.3) при наличии внешнего магнитного поля H для намагниченности можно записать выражение:

$$I = \kappa_0 (H + H_W). \quad (9.5.4)$$

Здесь, согласно Вейссу, величина κ_0 есть обычная парамагнитная восприимчивость. С учётом (9.5.3) отсюда следует:

$$I = \kappa H, \quad \kappa = \frac{\kappa_0}{1 - \kappa_0 \lambda}.$$

Согласно закону Кюри имеем $\kappa_0 = C/T$, что даёт

$$\kappa = \frac{C}{T - T_K}. \quad (9.5.5)$$

Здесь введено обозначение

$$T_K = \lambda C. \quad (9.5.6)$$

Мы получили закон Кюри–Вейсса (9.5.1), причём для температуры Кюри T_K найдено выражение (9.5.6).

Согласно закону Кюри (9.3.3) константа C даётся выражением

$$C = n_0 \mu_B^2 / k. \quad (9.5.7)$$

Из классической электродинамики известно, что напряжённость поля внутри шара с намагниченностью \mathbf{I} равна $\mathbf{H} = -(4\pi/3)\mathbf{I}$. Поэтому если бы поле Вейсса было связано с магнитным полем, то константа λ в (9.5.3) оказалась бы порядка единицы. Но тогда оценки по формулам (9.5.6), (9.5.7) давали бы значения температуры Кюри T_K в $10^3 - 10^4$ раз меньше наблюдаемых, типичные значения которых даны в (9.5.2).

К последнему результату приводит следующая простая оценка. Если атомы находятся на расстоянии a , то энергия взаимодействия их магнитных моментов $\Delta E \approx \mu_B^2 / a^3$. Для того чтобы могло возникать магнитное упорядочение, необходимо, чтобы $\Delta E > kT$. Отсюда следует, что переход в состояние со спонтанной намагниченностью за счёт указанного механизма возможен при температурах $T < \Delta E / k \approx \mu_B^2 / ka^3$. Подставляя сюда для оценки характерное межатомное расстояние $a = 3 \text{ \AA}$, получим $T < 3 \cdot 10^{-2} \text{ К}$.

Сказанное означает, что $\lambda \gg 1$, т.е. поле Вейсса значительно превышает магнитное поле в веществе.

Соотношение (9.5.5) выполняется при температурах $T > T_K$. Если же $T < T_K$, то возникает спонтанная намагниченность. Найдём её зависимость от температуры. Считаем, что внешнее поле отсутствует.

Учтём, что поле Вейсса велико по сравнению с магнитным полем, так что

$$B_W \approx H_W = \lambda I. \quad (9.5.8)$$

Воспользуемся далее формулой (9.3.2), в которой заменим $B \rightarrow B_W$:

$$I = n_0 \mu_B \operatorname{th}(\mu_B B_W / kT).$$

Подстановка сюда выражения для поля B_W из (9.5.8) приводит к трансцендентному уравнению для намагниченности:

$$x = \operatorname{th}(\gamma x), \quad x = I / I_{\text{нас}}, \quad \gamma = T_K / T. \quad (9.5.9)$$

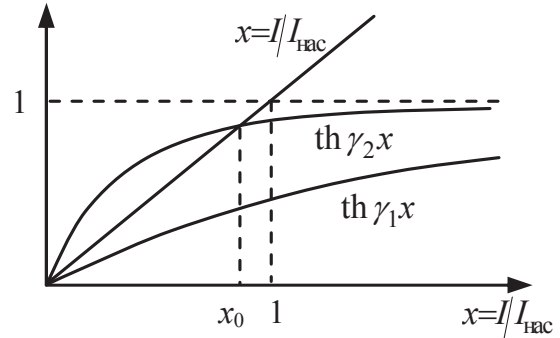
Использованы введённые ранее обозначения:

$$I_{\text{нас}} = n_0 \mu_B, \quad T_K = \lambda C = \lambda n_0 \mu_B^2 / k.$$

Графики левой и правой частей равенства (9.5.9) показаны на рис. 9.5.5. Нетрудно заметить, что рассматриваемое уравнение имеет ненулевые решения, если $\gamma > 1$, или $T < T_K$, т.е. в области температур, где присутствует спонтанная намагниченность. Если же температура

мала, то $\gamma \gg 1$, и точка пересечения x_0 кривых x и $\text{th } \gamma x$ лежит близко к $x = 1$, что отвечает значениям намагниченности, близким к максимальному: $I \approx I_{\text{нас}}$.

Рис. 9.5.5. Графическое решение уравнения (9.4.9). $\gamma_1 < 1$, $\gamma_2 > 1$. Приведённые на рисунке кривые рассматриваются в диапазоне $0 \leq x \leq 1$



Пусть $\gamma > 1$, но $\gamma - 1 \ll 1$ (область температур $T < T_K$, близких к точке Кюри). В этом случае кривые x и $\text{th } \gamma x$ пересекаются при $x \ll 1$, что отвечает состоянию с малой намагниченностью. Получим приближённое решение, для чего разложим в (9.4.9) $\text{th } \gamma x$ по степеням x :

$$x \approx \gamma x - \frac{1}{3}(\gamma x)^3.$$

Отсюда находим: $x \approx \sqrt{3(\gamma - 1)}$, или

$$I \approx I_{\text{нас}} \sqrt{3(T_K - T)/T_K}. \quad (9.5.10)$$

Таким образом, при приближении к точке Кюри намагниченность убывает по закону $I \sim (T_K - T)^{1/2}$, характерному для фазовых переходов второго рода.

В обратном предельном случае низких температур: $\gamma = T_K/T \gg 1$ из (9.5.9) нетрудно получить асимптотику:

$$I = I_{\text{нас}} [1 - 2 \exp(-2 T_K/T)]. \quad (9.5.11)$$

9.5.4. О квантовомеханической теории ферромагнетизма

Теория Вейсса, предложенная ещё до создания квантовой механики, качественно правильно описывает поведение ферромагнитных материалов. Однако имеются определённые количественные расхождения. Кроме того, теория не давала объяснения природы поля Вейсса.

Квантовомеханическую теорию ферромагнетизма предложили независимо В. Гейзенберг и Я.И. Френкель (1927–1928 годы). Исходным пунктом теории было предположение, что ферромагнетизм связан с взаимодействием спинов электронов. На это указывали, в частности, опыты Эйнштейна–де Газа с ферромагнитными материалами.

Ранее на примере молекулы водорода В. Гайтлер и Ф. Лондон установили, что энергия взаимодействия электронов сильно зависит от взаимной ориентации спинов и определяется обменным взаимодействием. Это взаимодействие представляет собой кулоновское взаимодействие, видоизменённое вследствие того, что электроны являются фермионами, и их волновая функция антисимметрична относительно перестановок частиц. Поскольку кулоновское взаимодействие значительно сильнее магнитного взаимодействия спинов, упорядочивающее действие обменного взаимодействия («поля Вейсса») оказывается на три-четыре порядка эффективнее чисто магнитного упорядочения.

Формально гамильтониан обменного взаимодействия электронов, находящихся в двух соседних атомах, можно записать в следующем виде

$$\hat{U}_{12} = -2J_{12}\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2, \quad (9.5.12)$$

где \mathbf{s}_1 и \mathbf{s}_2 — векторы спинов электронов (в единицах постоянной Планка). Коэффициент J_{12} зависит от координат электронов: $J_{12} = J(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ и называется *обменным интегралом*. Эта величина быстро убывает с ростом расстояния между электронами.

Обобщение формулы (9.5.12) на случай системы с произвольным числом атомов имеет вид

$$\hat{U}_{\text{обм}} = -2 \sum_{i < k} J_{ik} \hat{\mathbf{s}}_i \hat{\mathbf{s}}_k, \quad J_{ik} = J(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|), \quad (9.5.13)$$

где суммирование производится по всем узлам решётки, в которых находятся атомы¹. Условие $i < k$ введено с тем, чтобы каждая пара атомов учитывалась в сумме только один раз.

Рассмотрим гамильтониан (9.5.12). Поскольку

$$2\overline{\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2} = \overline{(\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2} - \overline{\hat{\mathbf{s}}_1^2} - \overline{\hat{\mathbf{s}}_2^2} = S(S+1) - \frac{3}{2} = \begin{cases} 1/2 & \text{при } S = 1, \\ -3/2 & \text{при } S = 0, \end{cases}$$

то из (9.4.12) следует, что разность энергий двух относительных ориентаций спинов (при $S = 1$ и $S = 0$) составляет

$$U_{12}|_{S=1} - U_{12}|_{S=0} = -2J_{12}. \quad (9.5.14)$$

Отсюда видно, что при $J < 0$ более выгодным является синглетное состояние ($S = 0$), а при $J > 0$ — триплетное ($S = 1$).

¹ В такой форме гамильтониан обменного взаимодействия предложен ван Флеком (1931 г.). Он, однако, традиционно называется *гейзенберговским*, поскольку описывает модель ферромагнетика, предложенную В. Гейзенбергом.

На рис. 9.5.6 показана зависимость обменного интеграла от расстояния между атомами решётки. В случае ферромагнетиков $J > 0$. Поэтому согласно сказанному минимум энергии достигается тогда, когда все спины выстраиваются в одном направлении, создавая спонтанную намагниченность вещества.

Наконец, отметим, что для поля Вейсса можно получить явное выражение, если воспользоваться моделью Гейзенберга–Френкеля (9.5.13). Именно, введём эффективное поле \mathbf{B}_W формулой

$$U_{\text{обм}} = -\sum_i \mathbf{m}_i \mathbf{B}_{W,i} = g_s \mu_B \sum_i \mathbf{s}_i \mathbf{B}_{W,i}.$$

Тогда, сравнивая это выражение с (9.5.12), получим поле, действующее на i -й спин:

$$\mathbf{B}_{W,i} = -\frac{2}{g_s \mu_B} \sum_{k, k \neq i} J_{ik} \mathbf{s}_k. \quad (9.5.15)$$

Последняя формула позволяет получить численную оценку обменного интеграла. Действительно, учитывая связь поля Вейсса с намагниченностью ($B_W = \lambda I \sim \lambda n_0 \mu_B s$), находим магнитную энергию единицы объёма ферромагнетика:

$$U^{(1)} = -2\mu_B \sum_i \mathbf{s}_i \mathbf{B}_{W,i} \sim \lambda \mu_B^2 n_0^2 s^2,$$

где суммирование проведено по всем атомам в единице объёма (число которых n_0). С другой стороны, согласно (9.5.13), имеем $U^{(1)} \sim J n_0 s^2$.

Из сравнения двух представлений $U^{(1)}$ находим: $J \sim \lambda \mu_B^2 n_0$. Наконец, имея в виду выражение $T_K = \lambda n_0 \mu_B^2 / k$ для температуры Кюри (см. (9.5.6), (9.5.7)), получаем следующую оценку: $J \sim k T_K$. Этот результат, впрочем, заранее очевиден. Дело в том, что магнитное упорядочение разрушается при температуре Кюри, когда энергия связи атомов $U_{\text{обм}}$ меньше их тепловой энергии ($k T_K$). Поскольку величина первой определяется обменным интегралом J , то приходим к оценке: $J \sim k T_K$.

Следует подчеркнуть, что рассмотренная модель Гейзенберга–Френкеля является довольно грубой, хотя её основные идеи о спиновой природе ферромагнетизма и об определяющей роли обменного взаимодействия являются правильными. В то же время существенную роль

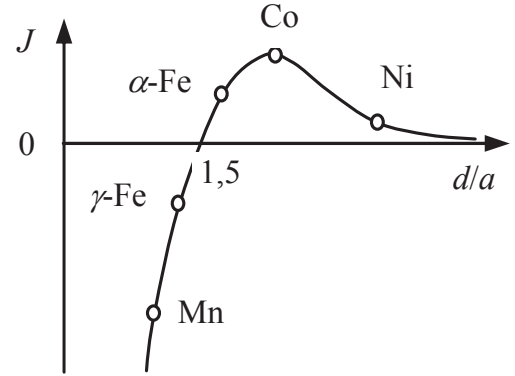


Рис. 9.5.6. Зависимость обменного интеграла J от межатомного расстояния d . Параметр a есть радиус недостроенной внутренней оболочки

может играть не только прямое взаимодействие спинов, но и не учтённое в модели не прямое взаимодействие, осуществляемое посредством среды.

9.5.5. Спиновые волны

Рассмотрим одномерную цепочку упорядоченных спинов. Если её возбудить, т.е. изменить направление каких-то спинов, то в такой системе благодаря обменному взаимодействию могут возникнуть волны. Найдём закон дисперсии таких волн. Будем рассматривать прецессию спинов в классическом приближении.

Учтём тот факт, что обменное взаимодействие двух спинов быстро убывает при увеличении расстояния между ними. Поэтому достаточно учесть взаимодействие только с ближайшими соседями. Тогда выражение для эффективного поля (9.5.15) упрощается:

$$\mathbf{B}_{W,n} = -\frac{2J}{g_s \mu_B} (\mathbf{s}_{n-1} + \mathbf{s}_{n+1}). \quad (9.5.16)$$

Это поле создаёт вращающий момент, вызывающий прецессию спина:

$$\frac{d(\hbar \mathbf{s}_n)}{dt} = \mathbf{M}_n; \quad \mathbf{M}_n = \mathbf{m}_n \times \mathbf{B}_{W,n}, \quad \mathbf{m}_n = -g_s \mu_B \mathbf{s}_n. \quad (9.5.17)$$

С учётом (9.5.16) это уравнение принимает вид

$$\frac{d\mathbf{s}_n}{dt} = \frac{2J}{\hbar} \mathbf{s}_n \times (\mathbf{s}_{n-1} + \mathbf{s}_{n+1}). \quad (9.5.18)$$

Это система нелинейных уравнений. Мы ограничимся малыми колебаниями, что позволяет упростить решение, линеаризовав систему.

В состоянии равновесия все спины направлены вдоль одной оси, которую примем за ось z . При малых отклонениях от этой оси z -компонента спинов меняется мало:

$$s^z = s \cos \theta \approx s \left(1 - \theta^2/2\right); \quad s^x, s^y \sim s\theta \Rightarrow \Delta s^z \sim (\Delta s^x)^2, (\Delta s^y)^2$$

(здесь и ниже в этом разделе проекция на координатные оси обозначена верхним индексом). Это значит, что в низшем приближении можно считать $s^z = \text{const} \equiv s$ и рассматривать только изменения компонент s^x и s^y . Поскольку

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_k &= \mathbf{i} \left(s_i^y s_k^z - s_i^z s_k^y \right) + \mathbf{j} \left(s_i^z s_k^x - s_i^x s_k^z \right) + \mathbf{k} \left(s_i^x s_k^y - s_i^y s_k^x \right) \approx \\ &\approx s \left[\mathbf{i} \left(s_i^y - s_k^y \right) - \mathbf{j} \left(s_i^x - s_k^x \right) \right], \quad i = n, \quad k = n-1, n+1, \end{aligned}$$

то уравнения (9.5.18) сводятся к следующим:

$$\begin{aligned}\frac{ds_n^x}{dt} &= \frac{2Js}{\hbar} (2s_n^y - s_{n-1}^y - s_{n+1}^y), \\ \frac{ds_n^y}{dt} &= -\frac{2Js}{\hbar} (2s_n^x - s_{n-1}^x - s_{n+1}^x).\end{aligned}\tag{9.5.19}$$

Решение этой системы будем искать в виде

$$s_n^x = ae^{i(kna - \omega t)}, \quad s_n^y = be^{i(kna - \omega t)},\tag{9.5.20}$$

где a — расстояние между спинами. Подстановка этих выражений в (9.5.19) даёт систему линейных уравнений для коэффициентов a и b :

$$\begin{aligned}-i\omega a &= \frac{2Js}{\hbar} (2 - e^{-ika} - e^{ika})b, \\ -i\omega b &= -\frac{2Js}{\hbar} (2 - e^{-ika} - e^{ika})a.\end{aligned}\tag{9.5.21}$$

Отсюда находим закон дисперсии волн:

$$\hbar\omega = 4Js(1 - \cos ka).\tag{9.5.22}$$

Поскольку фазы x - и y -компонент спина сдвинуты относительно друг друга на $\pi/2$, решение (9.5.20) описывает прецессию спинов вокруг оси z . В результате возникают волны, как показано на рис. 9.4.7.

Как следует из (9.5.22), в пределе длинных волн ($ka \ll 1$) получаем квадратичный закон дисперсии:

$$\omega = Dk^2, \quad D = 2Jsa^2/\hbar.\tag{9.5.23}$$



Рис. 9.5.7. Спиновая волна (9.4.19) в некоторый момент времени. Стрелки в кружках изображают проекцию спина соответствующих атомов на плоскость $\{x, y\}$

9.5.6. Магноны, их вклад в спонтанную намагниченность и теплоёмкость ферромагнетиков

Кванты спиновых волн называются *магнонами*. Магноны введены в физику Ф. Блохом в 1930 г.

Рассмотрим влияние магнонов на свойства ферромагнетика при низких температурах.

Магноны, подобно фононам, являются бозонами. Поэтому их среднее число заполнения даётся распределением Планка:

$$n = \left(e^{\hbar\omega/kT} - 1 \right)^{-1}, \quad (9.5.24)$$

а полное число в пределе низких температур — формулой

$$N_{\text{mag}} = V \int_0^\infty n(\omega) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}. \quad (9.5.25)$$

Интегрирование распространено до бесконечности, поскольку в существенной области частот $\hbar\omega \gg kT$. Магноны, в отличие от фононов, обладают только одной поляризацией, отвечающей единственно возможному направлению прецессии спинов вокруг выделенной оси (z).

Как было установлено в разделе 9.5.5, закон дисперсии для магнонов квадратичный: $\omega = Dk^2$. Имея это в виду, находим из (9.5.25):

$$N_{\text{mag}} \sim \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{e^{(D\hbar/k_B T)k^2} - 1} \sim \left(\frac{k_B T}{D\hbar} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^{x^2} - 1} \sim T^{3/2}. \quad (9.5.26)$$

Появление каждого магнона приводит к уменьшению магнитного момента ферромагнетика на $g\mu_B$. Поэтому рост числа магнонов означает уменьшение намагниченности. Таким образом, из (9.5.26) следует, что при низких температурах

$$I = I_{\text{нас}} \left(1 - \beta T^{3/2} \right). \quad (9.5.27)$$

Здесь $I_{\text{нас}}$ — намагниченность насыщения при $T = 0$.

Зависимость (9.5.27) называется *законом Блоха* (или *законом 3/2*). Она выполняется для изотропных ферромагнетиков при температурах $T < 0,5 T_K$. При больших температурах зависимость меняется, поскольку растёт число магнонов с законом дисперсии, отличающимся от квадратичного $\omega = Dk^2$. Заметим, что модель (9.5.9) даёт при $T \rightarrow 0$ зависимость (9.5.11) намагниченности от температуры, не подтверждавшуюся экспериментом.

Найдём теперь вклад магнонов в теплоёмкость. Плотность энергии в том же пределе низких температур даётся формулой

$$\rho_{\text{mag}} = \int_0^\infty n(\omega) \hbar\omega \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \quad (9.5.28)$$

Отсюда получаем

$$\rho_{\text{mag}} = \int_0^\infty \frac{D\hbar k^2}{e^{(D\hbar/k_B T)k^2} - 1} \cdot \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} \sim \left(\frac{k_B T}{D\hbar} \right)^{5/2} \int_0^\infty \frac{x^4 dx}{e^{x^2} - 1} \sim T^{5/2}. \quad (9.5.29)$$

Таким образом, магнетонный вклад в теплоёмкость при низких температурах ведёт себя по закону

$$C_{\text{mag}} = d\rho_{\text{mag}}/dT \sim T^{3/2}. \quad (9.5.30)$$

9.5.7. Доменная структура ферромагнетиков

Доменом называется макроскопическая область, имеющая только одно направление намагниченности. В ферромагнитном состоянии (при температуре ниже точки Кюри) домены имеют намагниченность насыщения. Типичные размеры доменов составляют несколько микрон.

Если весь образец намагничен в одну сторону, то возникает сильное внешнее магнитное поле, несущее большую энергию. Но это состояние невыгодно, и образец разбивается на намагниченные участки (домены). При этом намагниченность разных доменов направлена так, чтобы минимизировать полную энергию.

Если тело не подвергалось намагничиванию, то намагниченность отдельных доменов во всём теле компенсируется, давая суммарную среднюю намагниченность вещества $I = 0$.

В простейшем случае доменную структуру тонкого образца можно представить, как на рис. 9.5.8. Домены с противоположной намагниченностью чередуются. Кроме того, могут появляться так называемые замыкающие домены — треугольные домены сверху и снизу образца (рис. 9.5.8), передающие магнитный поток от одного домена к другому и уменьшающие магнитное поле вне вещества.

Рис. 9.5.8. Чередование доменов с противоположной намагниченностью. Стрелки указывают направление намагниченности домена

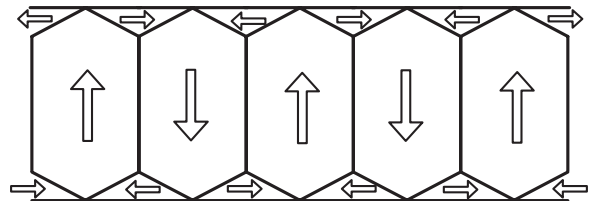
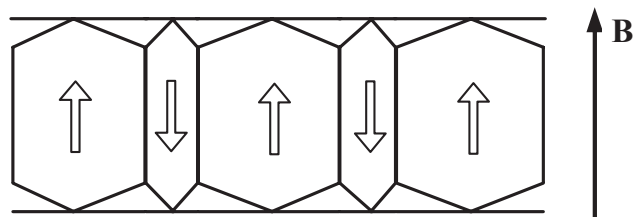


Рис. 9.5.9. Перемагничивание ферромагнетика путём движения доменных стенок



Процесс перемагничивания для случая доменной структуры на рис. 9.5.8 состоит в том, что доменные стенки начинают смещаться,

приводя к «поглощению» доменов с «неправильной» намагниченностью и росту доменов с «правильной» намагниченностью, как показано на рис. 9.5.9. Разумеется, движение стенок не сопровождается макроскопическими движениями вещества и состоит только в изменении ориентации магнитных моментов атомов.

В общем случае ферромагнетик представляет собой набор хаотически ориентированных доменов, в каждом из которых намагниченность имеет определённое направление (рис. 9.5.10). Размер домена не может быть произвольным, поскольку в его формировании участвуют несколько конкурирующих факторов:

1) выигрыш в обменной энергии за счёт формирования намагниченности в домене (ориентационная энергия),

2) проигрыш в энергии за счёт возникновения сильных магнитных полей,

3) проигрыш в энергии за счёт формирования доменных стенок — границ соседних доменов с противоположно направленными намагниченностями. В этих стенках происходит переход от одной ориентации намагниченности к другой. В результате теряется выигрыш в ориентационной энергии.

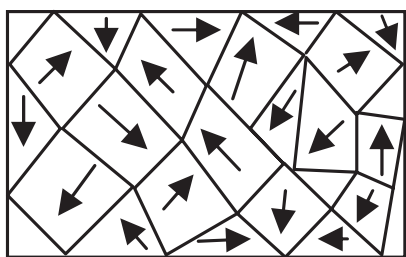


Рис. 9.5.10. Доменная структура ферромагнетика — множество доменов со случайным направлением намагниченности

Само по себе обменное взаимодействие изотропно. Поэтому если учитывать только его, то намагниченность в ферромагнетике может быть направлена в произвольном направлении. В действительности кристаллические твердые тела являются анизотропными, и при одинаковых условиях намагничивания величина намагниченности в разных направлениях оказывается различной: в направлениях *лёгкого намагничивания* намагниченность больше, чем в других направлениях. Это и определяет те направления, в которых спонтанная намагниченность возникает в первую очередь. В одноосных кристаллах таким направлением может быть, например, ось анизотропии (ферромагнетик типа «лёгкая ось»).

Анизотропия ферромагнетика определяет толщину доменных стенок. Энергия анизотропии $U_{\text{ан}}$ представляет собой разность энергий на-

магничивания вдоль лёгкой и трудной осей. В случае железа эта величина составляет $U_{\text{ан}} = 1,4 \cdot 10^5 \text{ эрг/см}^3$.

Оценим толщину доменной стенки в одноосном кристалле типа «лёгкая ось», считая, что вектор намагниченности параллелен оси в одном домене и меняет направление на противоположное — в соседнем. Учтём, что в стенке векторы спинов постепенно меняют своё направление, что приводит к увеличению обменной энергии. Если два соседних магнитных момента образуют угол α , то энергия возрастает на

$$2Js^2(1 - \cos \alpha) \approx Js^2\alpha^2.$$

Пусть межатомное расстояние в кристалле ферромагнетика равно a , а всего доменная стенка содержит N периодов, так что её полная толщина есть $h = Na$. Поворот спина на одном шаге составит $\alpha = \pi/N$, а суммарное увеличение обменной энергии цепочки окажется равным

$$\Delta E_{\text{обм}}^{(1)} \approx N \cdot Js^2 (\pi/N)^2 = \pi^2 Js^2 / N.$$

Всего на единице площади стенки начинается $1/a^2$ цепочек, и возрастание обменной энергии в расчёте на единицу площади составит

$$\Delta E_{\text{обм}} = \Delta E_{\text{обм}}^{(1)} / a^2 = \pi^2 Js^2 / Na^2.$$

С другой стороны, отклонение направлений спинов от оси лёгкого намагничивания увеличивает энергию анизотропии на величину $\Delta E_{\text{ан}} \sim NaU_{\text{ан}}$. В результате энергия возрастает на

$$\Delta E = \Delta E_{\text{обм}} + \Delta E_{\text{ан}} \approx \pi^2 Js^2 / Na^2 + NaU_{\text{ан}} = \pi^2 Js^2 / ah + hU_{\text{ан}}.$$

Эта величина минимальна, если $h \approx \sqrt{\pi^2 Js^2 / aU_{\text{ан}}}$.

Оценим толщину доменной стенки h для железа, учитывая, что спин атома $s = 1$, а температура Кюри $T_K \approx 10^3 \text{ К}$. Обменный интеграл оценим как

$$J \sim kT_K \sim 1,38 \cdot 10^{-16} \cdot 10^3 \text{ эрг} = 1,38 \cdot 10^{-13} \text{ эрг}.$$

Отсюда находим

$$h \sim 3\sqrt{J/aU_{\text{ан}}} \sim 3\sqrt{1,4 \cdot 10^{-13} / (3,6 \cdot 10^{-8} \cdot 1,4 \cdot 10^5)} \sim 1,6 \cdot 10^{-5} \text{ см}.$$

Глава 10. ВЕЩЕСТВО В ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ

Одним из интереснейших направлений современной физики является исследование свойств вещества в экстремальных условиях — при высоких плотностях и давлениях. Такие состояния реализуются в звёздах, в частности, в нейтронных звёздах и белых карликах. Оказывается, законы квантовой физики позволяют объяснить многие свойства этих объектов. Разумеется, очень многое остаётся неизвестным, поскольку законы, определяющие поведение вещества при плотностях, сравнимых с плотностью ядерной материи и, тем более, превышающих её, пока ещё нельзя считать надёжно установленными. Поэтому многие расчёты строятся на основе экстраполяции известных законов в ту область, где их применимость не вполне обоснована¹.

10.1. Некоторые сведения о звёздах

10.1.1. Определения

Спектральные классы — это классификация звёзд по спектру излучения, определяемому температурой фотосферы. Основная классификация разработана в гарвардской обсерватории (1890–1924 г.) и основана на виде спектров звёзд. Выделяют следующие основные классы: *O, B, A, F, G, K, M*. Самые горячие звёзды (класса *O*) имеют температуру поверхности примерно 30'000–60'000 К, а «холодные» звёзды (класса *M*) — 2000–3500 К. Внутри одного класса звёзды делятся на 10 подклассов — от самых горячих (0-й подкласс) до самых холодных (9-й подкласс). Солнце имеет спектральный класс *G2* и эквивалентную температуру фотосферы 5780 К.

¹ Как удачно подмечено в книге: Я.Б. Зельдович, И.Д. Новиков. Теория тяготения и эволюция звёзд. М.: Наука, 1971 — ситуация здесь напоминает ту, что описана в пародии А. Аверченко: «История мидян темна и непонятна. Ученые делят её, тем не менее, на три периода: первый, о котором ровно ничего не известно. Вторым, который последовал за первым. И, наконец, третий период, о котором известно столько же, сколько и о первых двух».

Звёздная величина (или *видимая звёздная величина*) m — безразмерная числовая характеристика яркости объекта на небе, говорящая о том, сколько света приходит от него в точку, где находится наблюдатель. Эта величина определяется по формуле

$$m = -2,5 \lg(\Phi/\Phi_0),$$

где Φ — световой поток от объекта. Начало отсчёта выбрано таким образом, что $m = 0$ у звезды, световой поток от которой (во всём видимом диапазоне) равен 10^6 квантов/(см² · с · Å). Видимая звёздная величина Солнца равна $m_{\odot} = -26,74$.

Традиционно звездную величину обозначают буквой « m » (от лат. *magnitudo*, величина) в виде верхнего индекса справа от числа. В частности, для Солнца имеем символ $-26,74^m$.

Абсолютная звёздная величина M для звёзд определяется как видимая звёздная величина объекта, если бы он находился на расстоянии 10 парсек от наблюдателя. Абсолютная звёздная величина Солнца, учитывающая весь спектр электромагнитных волн, $M_{\odot} = +4,83$.

Если известна видимая звёздная величина m и расстояние до объекта d , можно вычислить абсолютную звёздную величину по формуле

$$M = m - 5 \lg(d/d_0), \quad d_0 = 10 \text{ пк} \approx 32,6 \text{ св. лет.}$$

В этой формуле расстояние d измеряется в парсеках (пк).

Абсолютная звёздная величина M связана со светимостью следующим соотношением:

$$\lg(L/L_{\odot}) = 0,4(M_{\odot} - M).$$

Светимость Солнца $L_{\odot} = 3,86 \cdot 10^{33}$ эрг/с.

10.1.2. Диаграмма Герцшпрунга–Рассела

В начале 20-го века Э. Герцшпрунг (1910 г.) и (независимо) Г. Рассел (1913 г.) составили диаграмму, в которой по горизонтальной оси были отложены спектральные классы в порядке понижения температур: слева — звёзды класса O , справа — класса M . По вертикальной оси были отложены светимости или абсолютные звездные величины. Каждая звезда представлена точкой в определенном месте диаграммы. Такая диаграмма называется *диаграммой Герцшпрунга–Рассела* (рис. 10.1.1).

Оказалось, что «в среднем» чем горячее звезда, тем она ярче. Иными словами, большинство звезд, нанесённых на диаграмму, расположилось по диагонали от верхнего левого угла к нижнему правому. Они

образуют так называемую *главную последовательность*. На эту последовательность попадает более 99% всех известных звезд. Солнце также лежит на главной последовательности и находится в части, соответствующей жёлтым звездам.

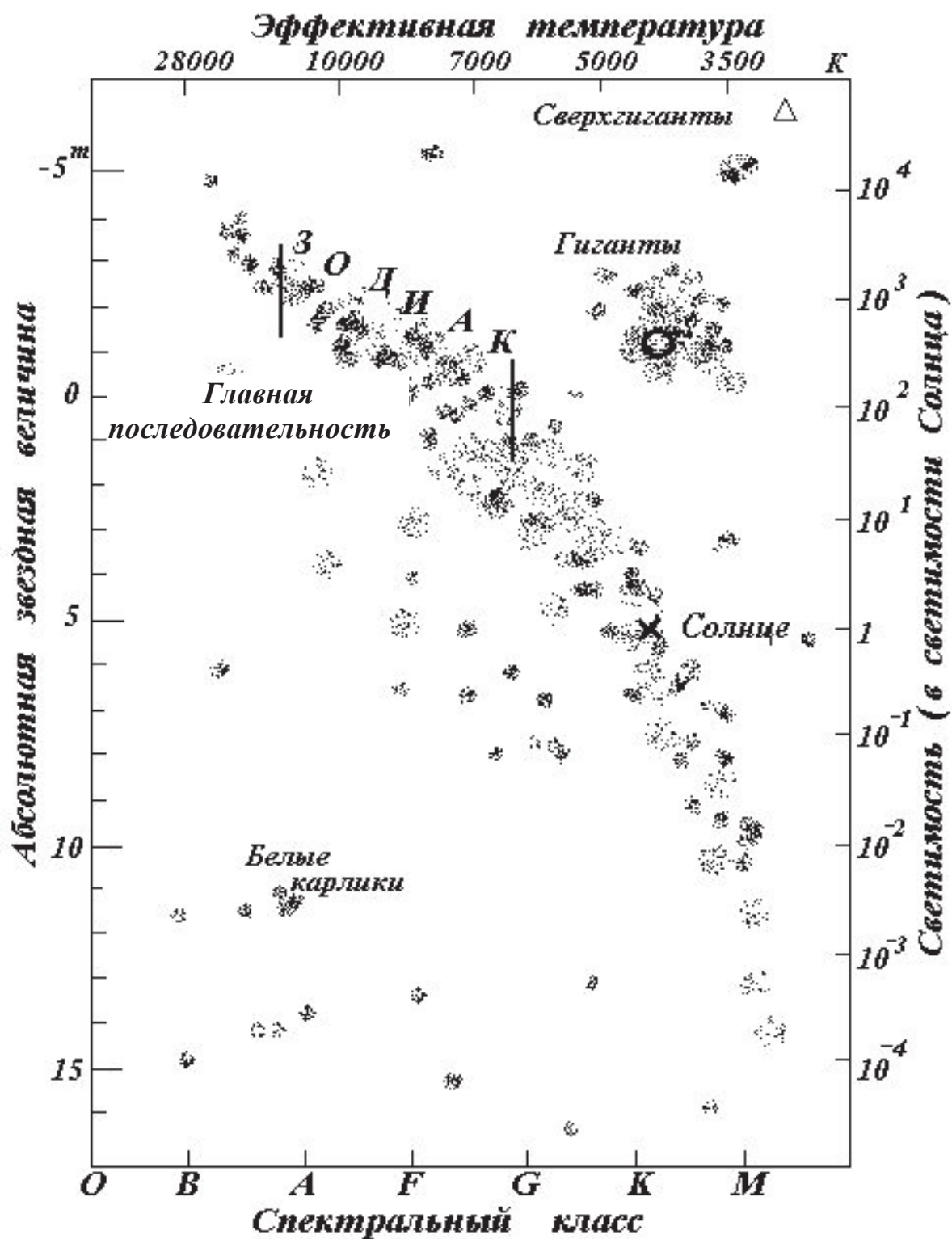


Рис. 10.1.1. Диаграмма Герцшпрунга–Рассела

Вместе с тем имеется несколько исключений. Одним из них являются красные гиганты, принадлежащие к спектральному классу M и обладающие огромной светимостью. Они находятся в стороне от главной последовательности — в верхнем правом углу диаграммы.

Ещё одно исключение — это группа *белых карликов*, очень горячих белых звезд, отражённых на той же диаграмме внизу слева. Светимость звёзд данной группы мала, поскольку они имеют размеры примерно в 100 раз меньше Солнца.

10.1.3. Солнце

Солнце — типичная жёлтая звезда из главной последовательности. Оно имеет следующие параметры: масса $M_{\odot} = 1,99 \cdot 10^{33}$ г, радиус $R_{\odot} = 6,96 \cdot 10^5$ км, средняя плотность вещества $\rho_{\odot} = 1,42$ г/см³, эффективная температура поверхности $T = 5778$ К.

В центре Солнца плотность достигает величины $\rho \approx 120$ г/см³, а температура — $T \approx 1,35 \cdot 10^7$ К, $kT \approx 1,2$ кэВ. Вещество представляет собой полностью ионизованную электронейтральную плазму.

Солнце состоит из водорода (~ 73 % массы), гелия (~ 25 % массы) и других элементов с меньшей концентрацией (в частности, железа, никеля, кислорода, азота, кремния).

10.2. Нейтронные звёзды

10.2.1. Общие сведения

Нейтронные звёзды могут образовываться в результате вспышки сверхновых звёзд. Считается, что эти объекты образуются, если их масса не превышает некоторого предела. Если же масса звезды превышает этот предел, то наиболее вероятной её судьбой является коллапс с образованием чёрной дыры.

Существование нейтронных звёзд теоретически предсказали астрономы В. Бааде и Ф. Цвикки в 1933 г. В 1939 г. Р. Оппенгеймер и Дж. Волков получили оценку предельной массы нейтронной звезды (*предел Оппенгеймера–Волкова*), свыше которой звезда уже не может быть устойчивой и должна коллапсировать. Первым объектом, идентифицированным как нейтронная звезда, является пульсар PSR B1919+21, открытый в 1967 году Д. Белл. Предполагается, что пульсары быстро вращаются и излучают узконаправленные пучки радиоволн, что проявляется в виде пульсирующего излучения. Периоды вращения известных пульсаров составляют от сотых долей секунды до нескольких секунд. К на-

стоящему моменту самой массивной из известных нейтронных звёзд является пульсар PSR J1614-2230, удалённый от Земли примерно на 3000 световых лет. Его масса $M \approx 1,97M_{\odot}$.

Нейтронные звезды — это объекты с массой $M \sim M_{\odot}$ и радиусом $R \sim 10$ км. Средняя плотность нейтронных звёзд составляет $\rho \sim 10^{15}$ г/см³, что втрое превышает ядерную ($\rho_0 = 2,8 \cdot 10^{14}$ г/см³). Надёжных сведений о строении нейтронных звёзд на настоящий момент нет, поскольку поведение вещества при столь высоких плотностях изучено недостаточно. Тем не менее считается установленным, что внутреннее устройство звезды таково, как показано на рис. 10.2.1.

Твёрдая кора имеет кристаллическую структуру и состоит из ядер атомов с атомной массой 26–39 и 58–133. Плотность вещества в этом слое возрастает на 3 порядка по мере приближения к центру. В слое, где присутствует нейтронная жидкость, плотность возрастает примерно в 5 раз. В ядре звезды, имеющем радиус в несколько километров, плотность возрастает ещё в 1,5 раза.



Рис. 10.2.1. Строение нейтронной звезды

10.2.2. Радиус нейтронной звезды

Оценим радиус нейтронной звезды на основе простой модели, в которой учитываются только гравитационное сжатие и давление нерелятивистского вырожденного ферми-газа нейтронов.

Запишем условие равновесия. Выделим в звезде сферический слой радиуса r , толщины dr (рис. 10.2.2). Если распределение плотности вещества по радиусу звезды есть $\rho(r)$, то на расстоянии r от центра ускорение силы тяжести равно

$$g(r) = \frac{GM(r)}{r^2}, \quad M(r) = \int_0^r \rho(r_1) 4\pi r_1^2 dr_1, \quad (10.2.1)$$

где $G = 6.67 \cdot 10^{-8} \text{ дин} \cdot \text{см}^2 / \text{г}^2$ — гравитационная постоянная, $M(r)$ — масса вещества, заключённого в сфере радиуса r . Полагая, что в слое dr действует давление $P(r)$, запишем условие равновесия слоя:

$$4\pi r^2 dP = -g(r)dM, \quad dM = 4\pi r^2 \rho dr,$$

или

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{G\rho(r)M(r)}{r^2}. \quad (10.2.2)$$

Считая, что давление $P(r)$ вызывается вырожденным ферми-газом нейтронов, запишем уравнение состояния:

$$P = \frac{2}{5} N_1 E_F, \quad E_F = \left(3\pi^2 N_1\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_n}. \quad (10.2.3)$$

Здесь m_n — масса нейтрона, а N_1 — концентрация нейтронов, связанная с плотностью равенством $\rho = m_n N_1$. Следовательно, используемое уравнение состояния есть

$$P = \alpha \rho^{5/3}, \quad \alpha = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{5m_n^{8/3}} \approx 5,38 \cdot 10^9 \frac{\text{см}^4}{\text{г}^{2/3} \text{с}^2}. \quad (10.2.4)$$

Заметим, что при плотности, равной ядерной, концентрация нейтронов составляет $N_1 = 1,7 \cdot 10^{38} \text{ см}^{-3}$, чему отвечает энергия Ферми $E_F \approx 60 \text{ МэВ}$. Эта величина мала по сравнению с энергией покоя нейтрона (938 МэВ), что и оправдывает использование уравнения состояния нерелятивистского ферми-газа.

Соотношение (10.2.4) следует подставить в уравнение равновесия (10.2.2) и решить полученное дифференциальное уравнение. Его нетривиальное ограниченное решение с граничными условиями $P'(0) = 0$, $P(R) = 0$ определяет искомый радиус звезды R . Мы, однако, приведём упрощённый расчёт. Именно, не будем учитывать изменения плотности вещества по глубине, введя среднее значение: $\rho \rightarrow \bar{\rho} = \text{const}$. Тогда из (10.2.1) имеем

$$M(r) = 4\pi \bar{\rho} r^3 / 3, \quad g(r) = 4\pi \bar{\rho} r / 3.$$

В данном приближении уравнение (10.2.2) с граничным условием $P(R) = 0$, где R — радиус звезды, даёт

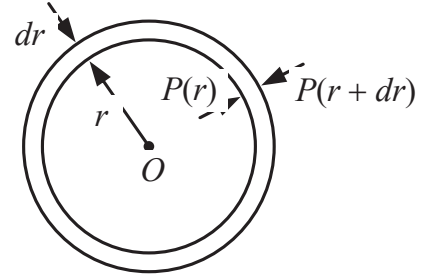


Рис. 10.2.2. К выводу условия равновесия нейтронной звезды

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{4}{3}\pi G \bar{\rho}^2 r \Rightarrow P(r) = \frac{2}{3}\pi G \bar{\rho}^2 (R^2 - r^2).$$

Таким образом, в центре звезды гравитационное давление составляет

$$P_0 = (2/3)\pi G \bar{\rho}^2 R^2.$$

Это сжимающее давление должно уравновешивать давление нейтронного ферми-газа. Имея в виду уравнение состояния (10.2.4), находим

$$(2/3)\pi G \bar{\rho}^2 R^2 = \alpha \bar{\rho}^{5/3} \Rightarrow R = \sqrt{\frac{3\alpha}{2\pi G \bar{\rho}^{1/3}}}. \quad (10.2.5)$$

Оценка по этой формуле даёт при ядерной плотности ($\bar{\rho} \approx 3 \cdot 10^{14} \text{ г/см}^3$) значение радиуса нейтронной звезды $R \approx 7,6 \text{ км}$, что близко к оценкам, получаемым более точным расчётом. Из (10.2.5) мы можем также найти массу этой звезды:

$$M_{\text{кр}} \approx (4\pi/3)\bar{\rho}R^3 \sim 5 \cdot 10^{32} \text{ г}.$$

Смысл найденной величины состоит в том, что при $M < M_{\text{кр}}$ звезда может быть устойчивой, а в обратном случае ($M > M_{\text{кр}}$) силы гравитационного сжатия превышают давление нейтронов, и звезда будет коллапсировать.

10.3. Белые карлики

10.3.1. Общие сведения

Белый карлик — это конечная стадия эволюции многих звёзд, начальная масса которых не превосходит так называемого *предела Чандрасекара*:

$$M_{\text{Ch}} = \frac{0,1967}{(m_n \mu_e)^2} \left(\frac{hc}{G} \right)^{3/2} = \frac{5,83}{\mu_e^2} M_{\odot}. \quad (10.3.1)$$

Здесь μ_e — число нуклонов, приходящихся на один электрон.

Типичная масса белого карлика порядка массы Солнца: $M \sim M_{\odot}$, радиус порядка $R \sim 10^{-2} R_{\odot}$, плотность вещества белых карликов составляет $\rho \sim 10^5 - 10^9 \text{ г/см}^3$. Эти объекты имеют температуру поверхности того же порядка, что и у Солнца: $T \sim 8000 \text{ К}$, но радиус значительно меньший: $R \ll R_{\odot}$. Вследствие этого их светимость оказалась в $10^2 - 10^3$ раз меньше, чем у аналогичных по массе звёзд.

Первой звездой, идентифицированной как белый карлик, явился Sirius-B, входящий как тусклая компонента в двойную систему Сириуса. Его открыл в 1862 году американский астроном А. Кларк. Вторая компонента системы (Sirius-A) — это «нормальная» звезда, со светимостью порядка солнечной. Первую модель, удовлетворительно описывающую свойства белых карликов, построил в 1926 году Р. Фаулер. Он применил открытую незадолго до этого статистику Ферми–Дирака, приняв, что силы гравитационного сжатия уравниваются давлением вырожденных электронов. В 1931 г. С. Чандрасекар показал, что существует верхний предел массы, при превышении которого звезда оказывается неустойчивой.

Белые карлики возникают из звёзд главной последовательности после того, как истощаются запасы водорода. Начинаящее сжатие приводит к повышению температуры и плотности в ядре, что в свою очередь активирует термоядерные реакции горения гелия, сопровождающиеся большим энерговыделением. Звезда превращается в красный гигант и интенсивно сбрасывает оболочку, теряя значительную часть вещества. Конечной стадией эволюции оказывается белый карлик.

Белый карлик представляет собой электронейтральную электрон-ядерную плазму. В этой смеси силы гравитационного сжатия создаются ядерной компонентой, тогда как противодействие, удерживающее звезду от коллапса, формируется электронным ферми-газом.

Для вырожденного электронного газа импульс Ферми равен $p_F = (3\pi^2 N_1)^{1/3} \hbar$. Если окажется $p_F \sim mc$, или

$$N_1 \sim N_{\text{рел}} = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^3 \approx 6 \cdot 10^{29} \text{ см}^{-3}.$$

то газ уже не может рассматриваться как нерелятивистский. Рассмотрим электрон-ядерную плазму. Пусть на каждый электрон приходится в среднем $\mu_e = 2$ нуклона (по одному протону и нейтрону), так что в среднем плазма электронейтральна. Тогда при $N_1 \sim N_{\text{рел}}$ её массовая плотность

$$\rho_{\text{рел}} \sim 2m_n N_{\text{рел}} \approx 2 \cdot 10^6 \text{ г/см}^3.$$

В звёздах с плотностью $\rho < \rho_{\text{рел}}$ электронный газ можно считать нерелятивистским, тогда как при $\rho > \rho_{\text{рел}}$ релятивистскими эффектами пренебрегать уже нельзя. Заметим, что для типичных белых карликов с параметрами $M \sim M_\odot$, $R \sim 10^{-2} R_\odot$ плотность $\rho \sim 10^6 \rho_\odot \sim \rho_{\text{рел}}$.

Поскольку температура вырождения при плотностях $\rho \sim \rho_{\text{рел}}$ составляет $T_B \sim E_F/k_B \sim 5 \cdot 10^5$ К, а типичные значения температуры белых карликов $T \sim 10^4$ К, то электронный газ в них является вырожденным.

10.3.2. Идеальный газ электронов

В разделе 4.1.8 мы получили уравнение состояния нерелятивистского вырожденного электронного газа (4.1.7), пренебрегая кулоновским взаимодействием частиц, то есть считали, что электроны образуют идеальный газ. Найдём, при каких условиях такое приближение оправдано. Среднее расстояние между частицами составляет $r \sim N_1^{-1/3}$. На таких расстояниях потенциальная энергия взаимодействия частиц есть $U \sim e^2/r \sim e^2 N_1^{1/3}$. Электронный газ можно считать идеальным, если эта величина мала по сравнению с кинетической энергией частиц $\sim E_F$. Поэтому из условия $U \ll E_F$ следует:

$$e^2 N_1^{1/3} \ll (3\pi^2 N_1)^{2/3} \hbar^2 / 2m \Rightarrow N_1 \gg \xi (me^2/\hbar^2)^3, \quad (10.3.2)$$

где числовой множитель $\xi \sim 8/(3\pi^2)^2 \approx 7 \cdot 10^{-3}$.

Таким образом, чем выше концентрация электронов, тем более идеальным является газ. Ситуация прямо противоположна тому, что имеет место в случае газа заряженных частиц, следующего классическому распределению Максвелла. Действительно, условие идеальности классического электронного газа состоит в том, что потенциальная энергия взаимодействия электронов $U \sim e^2/r \sim e^2 N_1^{1/3}$ должна быть малой по сравнению с их кинетической энергией kT :

$$e^2 N_1^{1/3} \ll kT \Rightarrow N_1 \ll (kT/e^2)^3.$$

Входящая в (10.3.2) величина $\hbar^2/me^2 = r_B \approx 0,5 \cdot 10^{-8}$ см — это боровский радиус, и мы заключаем, что газ с концентрацией $N_1 > 5,6 \cdot 10^{22}$ см⁻³ (и средним расстоянием между частицами $a \sim N_1^{-1/3} < 5r_B \approx 2,5 \cdot 10^{-8}$ см) может считаться идеальным.

10.3.3. Белые карлики с плотностью $\rho < \rho_{\text{рел}}$

Уравнение состояния нерелятивистского электронного газа получено в разделе 4.1.8. Имея в виду, что давление в белом карлике вызывается именно электронами, а плотность вещества $\rho = \mu_e m_n N_1$, где

μ_e — число нуклонов на один электрон, определяется нуклонами, запишем уравнение состояния вещества белого карлика:

$$P_e = K_0 \rho^{5/3}, \quad K = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{5m_e(\mu_e m_n)^{5/3}} \approx 3 \cdot 10^{12} \frac{\text{дин}}{\text{см}^2} \frac{1}{\left(\text{г/см}^3\right)^{5/3}} \quad (10.3.3)$$

(при $\mu_e = 2$). Если M и R — масса и радиус звезды, $\rho \sim M/R^3$, то уравнению состояния можно придать следующий вид:

$$P_e \sim K (M/R^3)^{5/3}. \quad (10.3.4)$$

Гравитационное давление обусловлено только нуклонами. Найдём это давление в центре звезды, предполагая, что плотность постоянна по объёму:

$$\frac{dP_{\text{гр}}}{dr} = -\frac{G\rho M(r)}{r^2} \Rightarrow P_{\text{гр}}(0) \sim G\rho^2 R^2$$

(расчёт полностью аналогичен тому, который выполнен в разделе 10.2.2). Переходя от плотности к массе, получаем

$$P_{\text{гр}} \sim GM^2/R^4. \quad (10.3.5)$$

Наконец, приравнявая P_e и $P_{\text{гр}}$, находим соотношение

$$MR^3 \sim (K/G)^3 = \text{const}, \quad (10.3.6)$$

связывающее массу и радиус звёзд в состоянии равновесия. Эта связь резко отличает свойства белых карликов от свойств обычных звёзд, у которых по мере увеличения массы растёт и радиус: $M \sim R^3$ (вследствие относительно слабой зависимости плотности от массы).

10.3.4. Вырожденный релятивистский ферми-газ

Как следует из (10.3.6), плотность белого карлика зависит от его массы как

$$\rho \sim M/R^3 \sim M^2.$$

Поэтому в более тяжёлых звёздах концентрация электронов растёт, и электронный газ становится релятивистским. При этом, оказывается, существует критическая плотность $\rho_{\text{кр}}$ (и, что эквивалентно, критическая масса $M_{\text{кр}}$), такая, что белые карлики с $\rho > \rho_{\text{кр}}$ теряют устойчивость: силы гравитационного сжатия оказываются больше, чем противодействующее им давление электронного газа.

Найдём сначала уравнение состояния вырожденного релятивистского ферми-газа. В данном случае связь энергии и импульса имеет вид $E = pc$. Импульс Ферми определится из условия

$$N_1 = \int_0^{p_F} 2 \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3} \Rightarrow p_F = (3\pi^2 N_1)^{1/3} \hbar.$$

Отсюда находим энергию Ферми:

$$E_F = cp_F = (3\pi^2 N_1)^{1/3} \hbar c. \quad (10.3.7)$$

Определим среднюю энергию электрона:

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{p_F} E(p) \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}}{\int_0^{p_F} \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}} = \frac{\int_0^{p_F} pc \cdot 4\pi p^2 dp}{\int_0^{p_F} 4\pi p^2 dp} = \frac{3}{4} p_F c.$$

Соответственно плотность энергии оказывается равной

$$u = N_1 \bar{E} = \frac{3}{4} N_1 E_F = \frac{3}{4} (3\pi^2)^{1/3} \hbar c \cdot N_1^{4/3}.$$

Уравнение состояния релятивистского газа имеет вид $P = u/3$, откуда получаем

$$P = \frac{1}{4} (3\pi^2)^{1/3} \hbar c \cdot N_1^{4/3}. \quad (10.3.8)$$

Оказывается, релятивистский газ электронов можно считать идеальным. Действительно, условие идеальности $e^2/r \sim e^2 N_1^{1/3} \ll E_F$ согласно (10.3.7) сводится к неравенству

$$e^2 \ll (3\pi^2)^{1/3} \hbar c \Rightarrow e^2/\hbar c \ll 3,$$

заведомо выполняющемуся вследствие того, что постоянная тонкой структуры $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137 \ll 1$.

10.3.5. Предельная масса белого карлика

Электронный газ в тяжёлых белых карликах является вырожденным и релятивистским. Его уравнение состояния имеет вид (10.3.8), где N_1 — концентрация электронов. Пусть μ_e — число нуклонов, приходящихся на один электрон. Тогда плотность вещества связана с концентрацией электронов соотношением

$$N_1 = \rho/(m_n \mu_e),$$

где m_n — масса нуклона (атомная единица массы). В соответствии с (10.3.8) уравнение состояния вещества белого карлика принимает вид

$$P = K \rho^{4/3}, \quad K = \frac{(3\pi^2)^{1/3} \hbar c}{4(m_n \mu_e)^{4/3}} \approx \frac{1,224 \cdot 10^{15}}{\mu_e^{4/3}} \frac{\text{см}^3}{\text{с}^2 \cdot \Gamma^{1/3}}. \quad (10.3.9)$$

Для оценки массы белого карлика поступим так же, как в случае нейтронной звезды. Именно, учтя, что в центре гравитационное давление равно $P_0 = (2/3)\pi G \bar{\rho}^2 R^2$, и приравнивая его давлению электронного газа (10.3.9), находим

$$(2/3)\pi G \bar{\rho}^2 R^2 = K \rho^{4/3} \Rightarrow (\rho R^3)^{2/3} = \frac{3K}{2\pi G}.$$

Вводя массу звезды $M = (4\pi/3)\rho R^3$, получаем соотношение

$$M = \frac{\text{const}}{(m_n \mu_e)^2} \left(\frac{\hbar c}{G} \right)^{3/2}, \quad \text{const} \sim 1. \quad (10.3.10)$$

Более точный расчёт приводит к формуле (10.3.1).

Остановимся на смысле соотношений (10.3.5) и (10.3.9). Запишем уравнение состояния газа в виде политропы:

$$P_e = K_n \rho^n.$$

В частных случаях нерелятивистского и релятивистского газа число n принимает значения соответственно $n = 5/3$ и $n = 4/3$. Переходя от плотности к массе, имеем

$$P_e = K_n (M/R^3)^n.$$

Полагая $P_e \sim P_{\text{гп}} \sim GM^2/R^4$, получаем условие равновесия:

$$P_{\text{гп}} - P_e \sim GM^2/R^4 - K_n (M/R^3)^n = 0,$$

или

$$P_{\text{гп}} - P_e \sim \frac{GM^2}{R^4} \left(1 - \frac{K_n}{G} \frac{R^{4-3n}}{M^{2-n}} \right) = 0. \quad (10.3.11)$$

Отсюда находим

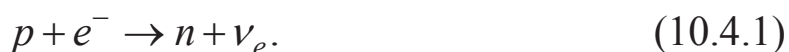
$$M^{2-n} R^{3n-4} \sim K_n/G = \text{const}. \quad (10.3.12)$$

В случае нерелятивистского газа ($n = 5/3$) из последней формулы следует соотношение $MR^3 \approx \text{const}$. При увеличении массы мы попадаем в релятивистскую область ($n = 4/3$), и из (10.3.12) получаем $M \sim M_{\text{кр}} \approx (K_n/G)^{3/2}$. Смысл этой величины непосредственно виден из

(10.3.9): при $M > M_{\text{кр}}$ окажется $P_{\text{гр}} > P_e$, то есть давление электронного газа не может противостоять силам гравитационного притяжения, и звезда начинает сжиматься. Если же $M < M_{\text{кр}}$, то звезда сжимается до равновесного размера, определяемого зависимостью $R \sim M^{-1/3}$. Таким образом, величина $M_{\text{кр}}$ представляет собой предельное значение массы звёзд белых карликов (предел Чандрасекара).

10.4. Нейтронизация вещества

При высоких плотностях вещества количество электронов может уменьшаться вследствие явления *нейтронизации*, то есть превращения части протонов в нейтроны в реакции



Поскольку нейтроны имеют массу большую, чем протоны:

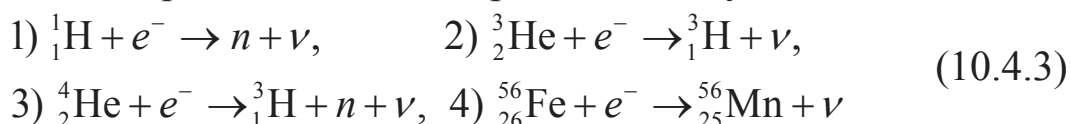
$$(m_n - m_p - m_e)c^2 = 0,782 \text{ МэВ}, \quad (10.4.2)$$

то для осуществимости реакции (10.4.1) необходимо, чтобы кинетическая энергия сталкивающихся частиц превысила пороговое значение: в системе центра инерции

$$T_p + T_e > (m_n - m_p - m_e)c^2.$$

Другими словами, электроны должны стать релятивистскими. Это, однако, возможно, если плотность вещества превысит значение $\rho_{\text{кр}} \sim 2 \cdot 10^6 \text{ г/см}^3$ (раздел 10.3.1).

Нейтронизация происходит за счёт реакций следующего типа:



и аналогичных им с более тяжёлыми элементами. Эти процессы приводят к увеличению количества нейтронов в веществе и соответствующему уменьшению числа протонов и электронов и называются нейтронизацией. Первая из реакций совпадает с (10.4.1). Заметим, что в обычных условиях реакция 2 невозможна, поскольку выигрыш в кулоновской энергии ядра не компенсирует проигрыша в массе (10.4.2).

Имея в виду, что в ядрах (кроме водорода ${}^1_1\text{H}$) нуклоны находятся в связанном состоянии, порог реакции в общем случае не совпадает с (10.4.2). Например, для второй реакции в (10.4.3) порог нейтронизации составляет 18 кэВ, для третьей — 20 МэВ, а для четвёртой — 4 МэВ. В

результате оказывается, что вторая реакция может идти уже при $\rho < 10^6 \text{ г/см}^3$, а третья и четвёртая — только при $\rho > 10^{11} \text{ г/см}^3$.

В качестве примера рассмотрим холодную нейтральную электрон-протонную плазму. Оценим, при какой концентрации начинается нейтронизация, т.е. реакция, аналогичная K -захвату. Как уже было сказано, эта реакция эндотермическая и может идти в системе центра масс только за счёт кинетической энергии сталкивающихся частиц.

Поскольку количества электронов и протонов равны, то равны и их фермиевские импульсы, которые определяются только концентрацией. Таким образом, для наиболее благоприятного встречного («лобового») столкновения лабораторная система отсчёта является и системой центра масс. Так как масса протона в 1836 раз больше массы электрона, то кинетической энергией протона можно пренебречь и записать:

$$\Delta E = T = \sqrt{(pc)^2 + (m_e c^2)^2} - m_e c^2.$$

Отсюда находим импульс:

$$pc = \sqrt{(\Delta E + m_e c^2)^2 - (m_e c^2)^2} = \sqrt{\Delta E (\Delta E + 2m_e c^2)} = 1,19 \text{ МэВ}.$$

Поскольку $p = p_F = (3\pi^2 N_1)^{1/3} \hbar$, то соответствующая концентрация составляет

$$N_1 = (pc/\hbar c)^3 / 3\pi^2 = 7,37 \cdot 10^{30} \text{ см}^{-3}.$$

Это соответствует плотности плазмы порядка 10^7 г/см^3 , что примерно на 7 порядков превышает среднюю плотность Солнца $\rho_{\odot} = 1,42 \text{ г/см}^3$.

Ядерная эволюция в недрах звёзд сопровождается увеличением относительного содержания нейтронов: если в начале эволюции в веществе, состоящем на 75% из водорода и 25% из гелия, на 7 протонов приходится примерно 1 нейтрон, то после сгорания водорода и образования гелия это соотношение уменьшается до 1:1. С ростом плотности и началом вырождения электроны приобретают из-за принципа Паули релятивистские скорости, и становится возможной нейтронизация. Её следствием является то, что электроны, которые обеспечивают упругость вещества, как бы «вдавливается» в ядра, их число уменьшается. В результате упругость вещества уменьшается, что может привести к потере устойчивости при меньших плотностях.

Некоторые физические константы

Атомная единица массы = 1/12 массы изотопа углерода ^{12}C ,

$$m_{\text{атом}} = 1,6605 \cdot 10^{-24} \text{ г}$$

1 моль (грамм-молекула) — это количество вещества, содержащее столько же молекул (атомов), сколько атомов содержится в 12 г изотопа углерода ^{12}C

Число Авогадро

$$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ молекул}$$

Число Лошмидта

$$n_L = 2,687 \cdot 10^{19} \text{ молекул/см}^3$$

Постоянная Больцмана

$$k = 1,38066 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К} = 1,38066 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/К}$$

Универсальная газовая постоянная

$$R = 8,31451 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1} = 1,9872 \text{ кал} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$$

Нормальные условия

$$T = 273,15 \text{ К}, \quad P = 1 \text{ атм}$$

Масса электрона

$$m_e = 9,1085 \cdot 10^{-28} \text{ г}$$

Масса протона

$$m_p = 1,6726 \cdot 10^{-24} \text{ г}$$

Постоянная Стефана–Больцмана

$$\sigma = 5,670 \cdot 10^{-5} \text{ эрг} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{К}^{-4}$$

Постоянная Планка

$$\hbar = 1,05459 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с} = 6,582 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{с}$$

Электронвольт

$$1 \text{ эВ} = 1,602 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$$

Скорость света

$$c = 2,998 \cdot 10^{10} \text{ см/с}$$

Магнетон Бора

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс}$$

Гравитационная постоянная

$$G = (6.673 \pm 0,001) \cdot 10^{-8} \text{ дин} \cdot \text{см}^2 / \text{г}^2$$

Литература

1. Белонучкин В.Е., Заикин Д.А., Ципенюк Ю.М. Основы физики. Курс общей физики. Т. 2. М.: Физматлит, 2001.
2. Ципенюк Ю.М. Квантовая микро- и макрофизика. М.: Физматкнига, 2006.
3. Иванов А.А. Введение в квантовую физику систем многих частиц. М.: МФТИ, 2007.
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
5. Савельев И.В. Курс физики. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. М.: Наука, 1989.
6. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику. М.: Наука, 1988.
7. Ципенюк Ю.М. Физические основы сверхпроводимости. М.: Физматкнига, 2003.
8. Игошин Ф.Ф., Самарский Ю.А., Ципенюк Ю.М. Лабораторный практикум по общей физике. Т. 3. Квантовая физика. М.: Физматкнига, 2005.
9. Овчинкин В.А., Раевский А.О., Ципенюк Ю.М. Сборник задач по общему курсу физики. Ч. 3. М.: Физматкнига, 2009.
10. Вонсовский С.В. Магнетизм. М.: Наука, 1971.
11. Кринчик Г.С. Физика магнитных явлений. М.: МГУ, 1976.
12. Бонч-Бруевич В.Л., Калашиников С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977.
13. Мейлихов Е.З. Вектор-потенциал и эффект Ааронова–Бома. М.: МФТИ, 2004.
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния. М.: Наука, 1978.
15. Воронов В.К., Подоплелов А.В. Современная физика. М.: КомКнига, 2005.
16. Фортон В.Е. Экстремальные состояния вещества. М.: Физматлит, 2010.
17. Зельдович Я.Б., Новиков И.Д. Теория тяготения и эволюция звезд. М.: Наука, 1971.

Учебное издание

Кириченко Николай Александрович

**КВАНТОВАЯ ФИЗИКА
КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ**

Редактор *Л. В. Себова*. Корректор *О. П. Котова*

Подписано в печать 26.06.2012. Формат $60 \times 84^{1/16}$. Усл. печ. л. 12,5.
Уч.-изд. л. 12,0. Тираж 250 экз. Заказ 192.

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего профессионального образования «Московский
физико-технический институт (государственный университет)»
141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

E-mail: rio@mail.mipt.ru

Отдел оперативной полиграфии «Физтех-полиграф»
141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9
E-mail: polygraph@miptic.ru

***Кириченко Николай Александрович* – физик-теоретик, доктор физико-математических наук, профессор МФТИ, автор более 200 научных работ, в том числе ряда монографий и учебных пособий.**

***Область научных интересов:* нелинейная динамика, физика взаимодействия лазерного излучения с веществом, квантовая теория, физика конденсированного состояния.**

ISBN 5-7417-0431-X



9 785741 704318