

Учебный материал по курсу  
«Физика конденсированного состояния»

Google Gemini 3      Андрей Можаров

25 января 2026 г.

# Оглавление

<b>1</b>	<b>Введение в электронную теорию твёрдого тела. Модель свободных электронов.</b>	<b>2</b>
1.1	Определение и общие свойства конденсированного состояния вещества . . . . .	2
1.2	Классификация твёрдых тел по структуре и электрофизическим свойствам . . . . .	3
1.3	Электро- и теплопроводность твёрдых тел . . . . .	4
1.4	Модель свободных электронов Друде . . . . .	5
1.5	Понятие о термоэлектрических эффектах . . . . .	7
1.6	Квантовая теория свободных электронов . . . . .	8
1.7	Теория металлической проводимости Зоммерфельда . . . . .	9
1.8	Магнетизм электронного газа . . . . .	10
1.9	Парамагнетизм свободных электронов (Парамагнетизм Паули)	11
1.10	Диамагнетизм свободных электронов (Диамагнетизм Ландау)	12
<b>2</b>	<b>Свойства кристаллических решеток</b>	<b>14</b>
2.1	Трансляционная симметрия кристаллов. . . . .	14
2.1.1	1. Трансляционная симметрия и решётка Бравэ . . . .	14
2.1.2	2. Типы кубических решёток . . . . .	14
2.1.3	3. Типы ячеек . . . . .	15
2.1.4	4. Кристаллические структуры и решётки с базисом . .	15

## Глава 1

# Введение в электронную теорию твёрдого тела. Модель свободных электронов.

### 1.1 Определение и общие свойства конденсированного состояния вещества

Конденсированное состояние вещества — это макроскопическая система, состоящая из огромного числа частиц ( $N \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$ ), между которыми существуют сильные взаимодействия, сопоставимые по величине с энергией теплового движения.

#### Основные признаки конденсированного состояния:

- **Высокая плотность:** В отличие от газов, межатомные расстояния в конденсированных средах соизмеримы с размерами самих атомов. Это делает их практически несжимаемыми[cite: 1, 3].
- **Сильное взаимодействие:** Потенциальная энергия взаимодействия частиц  $U$  значительно превышает их среднюю кинетическую энергию теплового движения  $k_B T$ . Это приводит к возникновению корреляций в пространственном расположении частиц[cite: 1, 3].
- **Наличие упорядоченности:**
  - *Дальний порядок:* Характерен для кристаллов, где структура строго периодична на макроскопических расстояниях[cite: 1, 3].
  - *Ближний порядок:* Характерен для жидкостей и аморфных тел, где упорядоченность сохраняется только для ближайших соседей[cite: 1, 3].

## Классификация по типу связи:

Ашкрофт и Мермин выделяют следующие основные типы связи, определяющие физические свойства состояния[cite: 1, 3]:

1. **Ионная связь:** Обусловлена кулоновским притяжением разноименно заряженных ионов (например,  $NaCl$ ).
2. **Ковалентная связь:** Возникает за счет обобществления электронных пар (например, алмаз, кремний).
3. **Металлическая связь:** Характеризуется наличием «электронного газа», удерживающего положительно заряженные ионы в узлах решетки.
4. **Ван-дер-ваальсова связь:** Слабое притяжение между нейтральными атомами или молекулами за счет флуктуаций дипольных моментов (например, твердые инертные газы).
5. **Водородная связь:** Специфический тип связи, важный для органических соединений и льда.

## Макроскопические свойства:

- **Механические:** Упругость, пластичность и твердость[cite: 1, 3].
- **Термические:** Теплоемкость и теплопроводность, определяемые как электронной подсистемой, так и колебаниями решетки[cite: 1, 2, 3].
- **Электрические:** Огромный диапазон удельной проводимости (от металлов до диэлектриков)[cite: 1, 3].

## 1.2 Классификация твёрдых тел по структуре и электрофизическим свойствам

Классификация твёрдых тел проводится по двум основным признакам: атомному упорядочению (структуре) и способности проводить электрический ток (электронным свойствам).

### 1. Классификация по структуре

С точки зрения пространственного расположения атомов выделяют:

- **Кристаллы:** Характеризуются наличием *дальнего порядка*. Атомы расположены в узлах периодической решетки Бравэ. Свойства часто анизотропны.
- **Аморфные тела:** Обладают только *ближним порядком* (упорядоченность только в ближайшем окружении атома). Макроскопически изотропны (например, стекла). [cite: 1, 3]
- **Квазикристаллы:** Обладают дальним порядком, но не имеют трансляционной симметрии (запрещенные для классической кристаллографии оси симметрии, например, 5-го порядка).

## 2. Классификация по электрофизическим свойствам

Основным критерием является величина удельного электрического сопротивления  $\rho$  или проводимости  $\sigma = 1/\rho$ . Ашкрофт и Мермин выделяют следующие группы: [cite: 2, 3]

- **Металлы:**

- Имеют высокую концентрацию свободных носителей ( $n \sim 10^{22}\text{--}10^{23} \text{ см}^{-3}$ ).
- Сопротивление растёт с температурой:  $\rho(T) \propto T$  при высоких температурах.
- Удельное сопротивление крайне мало:  $\rho \sim 10^{-8} \text{ Ом} \cdot \text{м}$ .

- **Диэлектрики (изоляторы):**

- Характеризуются полностью заполненными энергетическими зонами и большой шириной запрещенной зоны  $E_g > 3 \text{ эВ}$ .
- Проводимость практически отсутствует при нормальных условиях ( $\rho > 10^{10} \text{ Ом} \cdot \text{м}$ ).

- **Полупроводники:**

- Имеют узкую запрещенную зону ( $E_g < 3 \text{ эВ}$ ).
- Сопротивление *экспоненциально уменьшается* при росте температуры:  $\sigma \propto \exp(-E_g/2k_B T)$ .

- **Полуметаллы:**

- Имеют небольшое перекрытие валентной зоны и зоны проводимости, что дает малую, но отличную от нуля концентрацию носителей при  $T = 0 \text{ К}$  (например, висмут). [cite: 1, 3]

### Сводная таблица типичных значений $\rho$ при 300 К

Тип вещества	Удельное сопротивление $\rho$ , Ом·м	Пример
Металлы	$10^{-8} \div 10^{-6}$	Cu, Al, Ag
Полупроводники	$10^{-5} \div 10^7$	Si, Ge, GaAs
Диэлектрики	$10^8 \div 10^{18}$	Кварц, Алмаз

## 1.3 Электро- и теплопроводность твёрдых тел

Данный раздел рассматривает феноменологическое описание переноса заряда и энергии в твердых телах.

### і. Закон Ома

В дифференциальной форме закон Ома устанавливает линейную связь между плотностью тока  $\vec{j}$  и напряженностью приложенного электрического поля  $\vec{E}$ :

$$\vec{j} = \sigma \vec{E},$$

где  $\sigma$  — удельная электрическая проводимость [cite: 3]. Также часто используется удельное сопротивление  $\rho = 1/\sigma$  [cite: 3].

## ii. Температурная зависимость удельного электросопротивления

Для большинства металлов в широком диапазоне температур наблюдается характерная зависимость:

- **При высоких температурах** ( $T \gg \Theta_D$ ): сопротивление линейно растет с температурой  $\rho(T) \propto T$  из-за рассеяния электронов на фононах[cite: 3, 27].
- **При низких температурах** ( $T \rightarrow 0$ ): согласно правилу Матиссена, полное сопротивление складывается из остаточного сопротивления на примесях  $\rho_0$  и температурно-зависимой части  $\rho_{id}(T) \propto T^5$  (закон Блоха- $T^5$ )[cite: 27].

## iii. Закон Фурье

Перенос тепла в твердом теле описывается законом Фурье, согласно которому плотность теплового потока  $\vec{q}$  пропорциональна градиенту температуры:

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T,$$

где  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности[cite: 6, 9]. Отрицательный знак указывает на то, что тепло течет от горячих областей к холодным[cite: 9].

## iv. Коэффициент теплопроводности

В твердых телах общая теплопроводность  $\kappa$  складывается из вклада электронной подсистемы  $\kappa_e$  и вклада кристаллической решетки (фононов)  $\kappa_{ph}$ :

$$\kappa = \kappa_e + \kappa_{ph}$$

В хороших металлах доминирует электронный вклад  $\kappa_e$ , в то время как в диэлектриках тепло переносится исключительно фононами[cite: 6, 10, 15].

## v. Закон Видемана-Франца для металлов

Эмпирический закон, связывающий электронную теплопроводность  $\kappa$  и электрическую проводимость  $\sigma$  металла:

$$\frac{\kappa}{\sigma T} = L,$$

где  $L$  — число Лоренца[cite: 11, 34]. Экспериментально установлено, что для большинства металлов при комнатной температуре  $L \approx 2.44 \times 10^{-8}$  Вт·Ом/К<sup>2</sup>[cite: 11]. Это свидетельствует о том, что в металлах одни и те же носители (электроны) отвечают за перенос как заряда, так и тепла[cite: 15].

## 1.4 Модель свободных электронов Друде

Модель Друде (1900 г.) — это классическая кинетическая теория электронов в металлах, основанная на представлении об электронном газе[cite: 1, 12, 13].

### i. Электроны проводимости как идеальный газ классических частиц

- Электроны проводимости рассматриваются как классический идеальный газ, подчиняющийся статистике Максвелла-Больцмана[cite: 1, 13].
- Валентные атомы металла полностью ионизированы, и их электроны становятся свободными носителями заряда[cite: 1, 13].
- Между столкновениями электроны движутся прямолинейно, а их взаимодействие друг с другом и с ионами решётки (за исключением мгновенных столкновений) игнорируется[cite: 1, 13].

### ii. Электрон-ионные столкновения и среднее время свободного пробега

- Основным механизмом изменения импульса электрона являются столкновения с ионами решётки[cite: 1, 14].
- Вводится параметр  $\tau$  — *время релаксации* (среднее время между столкновениями)[cite: 1, 14].
- Вероятность столкновения за малый интервал времени  $dt$  полагается равной  $dt/\tau$ [cite: 1, 14].
- Среднее время свободного пробега связано со средней скоростью теплового движения  $\langle v \rangle$  соотношением  $l = \langle v \rangle \tau$ [cite: 1, 14].

### iii. Расчёт статической электропроводности и теплопроводности

В рамках элементарной кинетической теории получены ключевые макроскопические коэффициенты[cite: 1, 15]:

**1. Статическая электропроводность ( $\sigma$ ):** Уравнение движения электрона в поле  $\vec{E}$  с учётом силы трения:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E} - \frac{m\vec{v}}{\tau}$$

В стационарном случае ( $d\vec{v}/dt = 0$ ) дрейфовая скорость  $\vec{v}_d = -\frac{e\vec{E}\tau}{m}$ . Плотность тока  $\vec{j} = -en\vec{v}_d = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E}$ . Отсюда:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

где  $n$  — концентрация электронов,  $e$  — заряд,  $m$  — масса электрона[cite: 1, 15].

**2. Теплопроводность ( $\kappa$ ):** Используя результат кинетической теории газов для коэффициента теплопроводности  $\kappa = \frac{1}{3}v^2\tau c_v$ , где  $c_v = \frac{3}{2}nk_B$  — классическая теплоёмкость, Друде получил:

$$\kappa = \frac{1}{2}nv^2\tau k_B = \frac{3}{2}\frac{nk_B^2 T\tau}{m}$$

(Примечание: в классическом расчёте допущена ошибка в коэффициенте 2, которую позже исправил Зоммерфельд) [cite: 1, 15].

## 1.5 Понятие о термоэлектрических эффектах

Термоэлектрические эффекты описывают взаимосвязь между электрическим током и переносом тепла в проводниках.

### i. Эффект Зеебека

Эффект Зеебека заключается в возникновении термоэлектродвижущей силы (термо-э.д.с.) в замкнутой цепи, состоящей из разнородных проводников, контакты между которыми поддерживаются при разных температурах[cite: 16, 17, 31].

- Если вдоль проводника существует градиент температуры  $\nabla T$ , то носители заряда на «горячем» конце обладают большей кинетической энергией и диффундируют к «холодному» концу.
- Это приводит к разделению зарядов и возникновению внутреннего электрического поля  $\vec{E}$ , которое в разомкнутой цепи компенсирует поток носителей[cite: 31, 33].
- Соотношение определяется формулой:

$$\vec{E} = Q \nabla T$$

где  $Q$  (или  $S$ ) — коэффициент Зеебека (дифференциальная термо-э.д.с.)[cite: 31].

### ii. Эффект Пельтье

Эффект Пельтье является обратным по отношению к эффекту Зеебека: при прохождении электрического тока через контакт двух различных проводников, в зависимости от направления тока, происходит выделение или поглощение тепла[cite: 16, 18].

- Количество выделяемого/поглощаемого тепла  $dQ$  пропорционально протекающему заряду  $dq$ :

$$dQ = \Pi_{ab} dq = (\Pi_a - \Pi_b) dq$$

где  $\Pi_{ab}$  — коэффициент Пельтье для контакта проводников  $a$  и  $b$ [cite: 18].

- Физическая причина заключается в том, что средняя энергия электронов, участвующих в переносе тока, различна в разных материалах. При переходе через контакт электрон либо отдает избыточную энергию решетке (нагрев), либо забирает её (охлаждение)[cite: 31, 33].

### Связь между коэффициентами (Соотношение Томсона)

Коэффициенты Зеебека и Пельтье связаны вторым соотношением Кельвина (Томсона), вытекающим из принципа симметрии кинетических коэффициентов Онзагера[cite: 28, 31]:

$$\Pi = QT$$

где  $T$  — абсолютная температура[cite: 31].



## 1.6 Квантовая теория свободных электронов

Квантовая теория, разработанная Зоммерфельдом, учитывает волновые свойства электронов и принцип запрета Паули. [cite: 19, 22]

### i-ii. Принцип Паули и структура волновой функции

- Электроны являются **фермионами** (частицами с полуцелым спином  $s = 1/2$ ) и описываются антисимметричной волновой функцией. [cite: 20, 21]
- **Принцип запрета Паули:** в каждом квантовом состоянии может находиться не более одного электрона. [cite: 21]
- Волновая функция системы  $N$  невзаимодействующих электронов представляется в виде определителя Слэтера из одноэлектронных функций. [cite: 21]

### iii. Модель Зоммерфельда и граничные условия

Электроны рассматриваются как частицы в потенциальном ящике объемом  $V = L^3$ . [cite: 22]

- Применяются **периодические граничные условия Борна-Кармана:**  $\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$ . [cite: 22]
- Решением уравнения Шрёдингера являются плоские волны  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$  с энергией  $\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . [cite: 22, 23]

### iv. Свойства основного состояния (при $T = 0$ )

В основном состоянии электроны заполняют все уровни с наименьшей энергией внутри **сферы Ферми** в  $k$ -пространстве. [cite: 23]

- **Волновой вектор Ферми:**  $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ , где  $n = N/V$ . [cite: 23]
- **Энергия Ферми:**  $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ . [cite: 23]
- **Плотность состояний** (количество уровней на единицу энергии):

$$g(\varepsilon) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m\varepsilon} = \frac{3}{2} \frac{n}{\varepsilon_F} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}}$$

[cite: 23]

### v-vi. Термодинамические свойства при $T > 0$

- Вероятность заполнения уровня энергией  $\varepsilon$  дается **распределением Ферми-Дирака:**

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1}$$

[cite: 25]

- **Температура Ферми:**  $T_F = \varepsilon_F / k_B$ . Для металлов  $T_F \sim 10^4$  К, поэтому при комнатных температурах электронный газ является *вырожденным*. [cite: 26]
- **Теплоемкость:** В отличие от классической модели ( $C_v = \frac{3}{2}nk_B$ ), квантовая теория предсказывает линейную зависимость от  $T$ , так как в возбуждении участвуют только электроны вблизи поверхности Ферми:

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{2}nk_B \left( \frac{T}{T_F} \right)$$

[cite: 26]

## 1.7 Теория металлической проводимости Зоммерфельда

В рамках теории Зоммерфельда классическое описание Друде дополняется квантовой статистикой и кинетическим уравнением Больцмана.

### i. Квазиклассическое уравнение Больцмана

Для описания неравновесного состояния электронного газа используется функция распределения  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  [cite: 31]. Уравнение Больцмана в приближении времени релаксации имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

где  $f_0$  — равновесное распределение Ферми-Дирака, а  $\vec{F} = -e(\vec{E} + \frac{1}{c}[\vec{v} \times \vec{H}])$  — сила Лоренца [cite: 31, 32]. Условие применимости уравнения: внешние поля должны медленно меняться на расстояниях порядка длины свободного пробега и временах порядка времени релаксации [cite: 28, 31, 32].

### ii-iii. Интеграл столкновений и транспортное время

- **Интеграл столкновений** учитывает принцип Паули: электрон может рассеяться из состояния  $\vec{k}$  в  $\vec{k}'$  только если последнее свободно [cite: 29].
- **Принцип детального баланса** утверждает, что в равновесии число переходов  $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$  равно числу переходов  $\vec{k}' \rightarrow \vec{k}$  [cite: 29].
- **Транспортное время релаксации**  $\tau_{tr}$  учитывает угол рассеяния  $\theta$  через множитель  $(1 - \cos \theta)$ , что эффективно подавляет вклад малоуглового рассеяния в сопротивление [cite: 30].

### iv. Электропроводность и теплопроводность

При упругом рассеянии на дефектах и ионах в вырожденном электронном газе ток переносят только электроны вблизи поверхности Ферми [cite: 31, 32].

- **Статическая проводимость:**  $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$  (формально совпадает с Друде, но  $\tau$  берется при энергии  $\varepsilon_F$ ) [cite: 31, 32].
- **Теплопроводность:**  $\kappa = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2 \sigma T$ . В отличие от модели Друде, здесь используется квантовая теплоемкость [cite: 31, 32].
- **Дифференциальная термо-э.д.с. (S):** пропорциональна  $T$  и определяется логарифмической производной проводимости по энергии:  $S = -\frac{\pi^2}{3e} k_B^2 T \frac{d \ln \sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon} \Big|_{\varepsilon_F}$  [cite: 31, 32].

## v-vi. Электрохимический потенциал и число Лоренца

- **Электрохимический потенциал**  $\bar{\mu} = \mu - e\phi$  является истинным драйвером тока в неоднородных системах [cite: 33].
- **Число Лоренца** в квантовой теории имеет универсальное теоретическое значение:

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2 \approx 2.44 \times 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{Ом/К}^2$$

Это значение гораздо лучше согласуется с экспериментом, чем классическое значение Друде [cite: 34].

## 1.8 Магнетизм электронного газа

Магнитные свойства электронного газа определяются наличием у электронов собственного (спинового) и орбитального магнитных моментов, а также их реакцией на внешнее магнитное поле  $\vec{H}$ .

### i. Собственный и орбитальный магнитные моменты

- **Собственный (спиновый) магнитный момент:** Обусловлен наличием у электрона спина  $\vec{s}$  [cite: 35]. Он направлен противоположно вектору спина:

$$\vec{\mu}_s = -g\mu_B \vec{s}/\hbar$$

где  $g \approx 2$  — g-фактор свободного электрона, а  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$  — магнетон Бора [cite: 35].

- **Орбитальный магнитный момент:** Возникает при движении электрона по замкнутой или искривленной траектории под действием силы Лоренца [cite: 35]. В квантовомеханическом описании он связан с оператором орбитального углового момента  $\vec{L}$  [cite: 35].

### ii. Магнитная восприимчивость

Магнитная восприимчивость  $\chi$  характеризует способность вещества намагничиваться во внешнем поле и определяется как отношение намагниченности  $\vec{M}$  (суммарного магнитного момента единицы объема) к напряженности магнитного поля  $\vec{H}$  [cite: 35]:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$$

- Для **парамагнетиков**  $\chi > 0$ : вектор намагниченности сонаправлен с внешним полем[cite: 36].
- Для **диамагнетиков**  $\chi < 0$ : намагниченность направлена против внешнего поля[cite: 36].

### iii. Теорема Бора — ван Леевен

Классическая статистическая механика предсказывает отсутствие магнетизма у системы заряженных частиц[cite: 36]. Согласно теореме Бора — ван Леевен, при любых конечных температурах и в любом магнитном поле статистическая сумма классического газа заряженных частиц не зависит от магнитного поля, следовательно[cite: 36]:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = 0, \quad \chi = 0$$

Этот результат подчеркивает, что магнетизм является чисто квантовым эффектом: без учета постоянной Планка  $\hbar$  (и принципа Паули) существование пара- и диамагнетизма невозможно[cite: 36, 38].

## 1.9 Парамагнетизм свободных электронов (Парамагнетизм Паули)

Парамагнетизм Паули обусловлен наличием у электронов собственного магнитного момента (спина) и их подчинением статистике Ферми-Дирака.

### i. Механизм намагничивания

Во внешнем магнитном поле  $\vec{H}$  энергия электрона со спином, направленным по полю ( $\uparrow$ ) и против поля ( $\downarrow$ ), изменяется на величину  $\pm\mu_B H$ :

$$\varepsilon_{\pm} = \varepsilon(\vec{k}) \pm \mu_B H$$

Это приводит к относительному сдвигу энергетических подзон с разными проекциями спина. Чтобы химический потенциал  $\mu$  оставался единым для обеих подзон, часть электронов «перетекает» из состояния с энергией, увеличившейся во внешнем поле, в состояние с меньшей энергией. В результате создается избыток электронов со спином, направленным вдоль поля.

### ii. Расчет намагниченности и восприимчивости

Намагниченность  $M$  определяется разностью концентраций электронов с противоположными спинами:

$$M = \mu_B (n_+ - n_-)$$

Для вырожденного электронного газа ( $T \ll T_F$ ) расчет дает:

$$M \approx \mu_B^2 g(\varepsilon_F) H$$

где  $g(\varepsilon_F)$  — плотность состояний на уровне Ферми. Подставляя значение  $g(\varepsilon_F) = \frac{3n}{2\varepsilon_F}$ , получаем парамагнитную восприимчивость Паули:

$$\chi_P = \frac{3n\mu_B^2}{2\varepsilon_F} = \frac{n\mu_B^2}{k_B T_F}$$

### iii. Свойства парамагнетизма Паули

- **Слабая температурная зависимость:** В отличие от классического парамагнетизма (закон Кюри  $\chi \propto 1/T$ ), восприимчивость Паули практически не зависит от температуры при  $T \ll T_F$ . Это объясняется тем, что только электроны в узком слое толщиной  $\sim k_B T$  вблизи поверхности Ферми могут изменить ориентацию своего спина.
- **Малость эффекта:**  $\chi_P$  в металлах примерно в  $T/T_F$  раз меньше, чем предсказывала бы классическая теория при комнатной температуре.

## 1.10 Диамagnetизм свободных электронов (Диамagnetизм Ландау)

В то время как парамагнетизм Паули связан со спином электрона, диамagnetизм Ландау обусловлен квантованием его орбитального движения во внешнем магнитном поле.

### i. Квантование орбитального движения (Уровни Ландау)

В классической физике электрон в магнитном поле  $\vec{H} \parallel z$  движется по спирали, а его проекция на плоскость  $(xy)$  представляет собой окружность. В квантовой механике это движение квантуется, превращая непрерывный энергетический спектр в набор дискретных уровней — **уровней Ландау**:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

где  $n = 0, 1, 2, \dots$  — орбитальное квантовое число, а  $\omega_c = \frac{eH}{mc}$  — циклотронная частота.

### ii. Физическая природа диамagnetизма

Согласно теореме Бора — ван Леевен, в классическом пределе орбитальный магнетизм отсутствует. Однако квантование уровней энергии приводит к тому, что при изменении магнитного поля общая энергия системы изменяется.

- В отличие от парамагнетизма, этот эффект стремится уменьшить внутреннее поле в образце.
- Для свободного электронного газа диамagnetитный вклад всегда противоположен парамагнитному.

### iii. Магнитная восприимчивость Ландау

Для вырожденного электронного газа в слабых полях ( $\hbar\omega_c \ll k_B T$ ) теоретический расчет (впервые выполненный Л.Д. Ландау в 1930 г.) дает следующее значение диамагнитной восприимчивости:

$$\chi_L = -\frac{1}{3}\chi_P$$

где  $\chi_P$  — парамагнитная восприимчивость Паули.

### iv. Полная восприимчивость электронного газа

Суммарная восприимчивость газа свободных электронов складывается из двух вкладов:

$$\chi = \chi_P + \chi_L = \chi_P \left(1 - \frac{1}{3}\right) = \frac{2}{3}\chi_P$$

Таким образом, свободный электронный газ в целом остается **парамагнитным**, но его восприимчивость на треть меньше из-за эффекта Ландау.

- *Примечание:* В реальных металлах из-за отличия эффективной массы электрона  $m^*$  от массы свободного электрона  $m$ , вклад Ландау может значительно усиливаться ( $\chi_L \propto (m/m^*)^2$ ), что иногда делает металл диамагнитным (например, висмут).

## Глава 2

# Свойства кристаллических решёток

### 2.1 Трансляционная симметрия кристаллов.

#### 2.1.1 1. Трансляционная симметрия и решётка Бравэ

Основным свойством идеального кристалла является трансляционная симметрия: при смещении на определенный вектор  $\mathbf{R}$  окружение любой точки кристалла остается неизменным. **Решётка Бравэ** — это бесконечная совокупность точек, положение которых задается вектором:

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

где:

- $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  — **основные векторы трансляций** (базисные векторы), которые должны быть линейно независимыми.
- $n_1, n_2, n_3$  — любые целые числа.

Решётка Бравэ выглядит одинаково из любой своей точки.

#### 2.1.2 2. Типы кубических решёток

В кубической системе выделяют три типа решёток Бравэ (параметр решётки обозначим через  $a$ , орты осей —  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ ):

1. **Простая кубическая (ПК / SC):** Точки только в вершинах куба.

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x}, \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{y}, \quad \mathbf{a}_3 = a\hat{z}$$

2. **Объёмно-центрированная кубическая (ОЦК / ВСС):** Точки в вершинах и в центре куба. Примитивные векторы:

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x}, \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{y}, \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \quad (\text{один из вариантов})$$

Симметричный набор:  $\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x})$ ,  $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y})$ ,  $\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$ .

3. **Гранецентрированная кубическая (ГЦК / FCC):** Точки в вершинах и центрах всех граней. Примитивные векторы:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

ShutterstockОткрыть

### 2.1.3 3. Типы ячеек

- **Примитивная (элементарная) ячейка:** Область пространства, которая при трансляциях на векторы решётки Бравэ заполняет весь объем, не перекрываясь, и содержит ровно **одну** точку решётки. Её объем равен  $V_p = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|$ .
- **Условная ячейка:** Выбирается больше примитивной для наглядного отображения симметрии (например, куб в ОЦК или ГЦК). Она содержит целое число точек решётки (в ОЦК — 2, в ГЦК — 4). Трансляционная симметрия кристаллов.
- **Ячейка Вигнера — Зейтца:** Особый тип примитивной ячейки, обладающий полной симметрией решётки. *Построение:* вокруг выбранной точки проводятся отрезки ко всем ближайшим соседям. Через середины этих отрезков проводятся перпендикулярные плоскости. Ячейка — это наименьший многогранник, ограниченный этими плоскостями.

### 2.1.4 4. Кристаллические структуры и решётки с базисом

Не все кристаллы являются чистыми решётками Бравэ (например, алмаз или соль NaCl). **Кристаллическая структура** — это решётка Бравэ, в каждой точке которой помещена группа атомов, называемая **базисом**. Положение любого атома в кристалле:

$$\mathbf{r} = \mathbf{R}_n + \tau_j$$

где  $\mathbf{R}_n$  — вектор решётки Бравэ, а  $\tau_j$  — вектор, задающий положение  $j$ -го атома внутри базиса относительно узла решётки. **Примеры:**

- **Структура алмаза:** ГЦК решётка с базисом из двух атомов в позициях  $(0, 0, 0)$  и  $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$ .
- **Структура NaCl:** ГЦК решётка с базисом: Na в  $(0, 0, 0)$  и Cl в  $(\frac{a}{2}, 0, 0)$ .