

Учебный материал по курсу
«Физика конденсированного состояния»

Google Gemini 3 Андрей Можаров

25 января 2026 г.

Оглавление

1 Введение в электронную теорию твёрдого тела. Модель свободных электронов.	2
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
2 Свойства кристаллических решеток	14
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 ($N \sim 10^{23}$ 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 строгого 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 ρ 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 растет 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 ρ при 300 К

Тип вещества	Удельное сопротивление ρ , 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.

i. 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 σ — 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 ρ_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 κ — 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 κ складывается из вклада электронной подсистемы κ_e и вклада кристаллической решетки (фононов) κ_{ph} :

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

В хороших металлах доминирует электронный вклад κ_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 κ и электрическую проводимость σ 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/К²[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 τ — время релаксации (среднее время между столкновениями)[cite: 1, 14].
- Вероятность столкновения за малый интервал времени dt полагается равной dt/τ [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 (σ): 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 (κ): 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 ∇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 Π_{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 Шредингера 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 ε дается **распределением Ферми-Дирака:**

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

[cite: 25]

- **Температура Ферми:** $T_F = \epsilon_F/k_B$. 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. Интраграл 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** τ_{tr} учитывает угол рассеяния θ через множитель $(1 - \cos \theta)$, что эффективно подавляет вклад малогоуглового 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 τ берется при энергии ε_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:

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

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 χ 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 μ 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:** χ_P в металлах примерно в T/T_F раз меньше, чем предсказывала бы классическая теория при комнатной температуре.

1.10 Диамагнетизм свободных электронов (Диамагнетизм Ландау)

В то время как парамагнетизм Паули связан со спином электрона, диамагнетизм 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 диамагнетизма

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 диамагнитный 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 χ_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 решеток

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 объём, не перекрываясь, и содержит ровно **одну** точку решётки. Её объём 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, обладающей 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 τ_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 $(\frac{a}{2}, 0, 0)$.