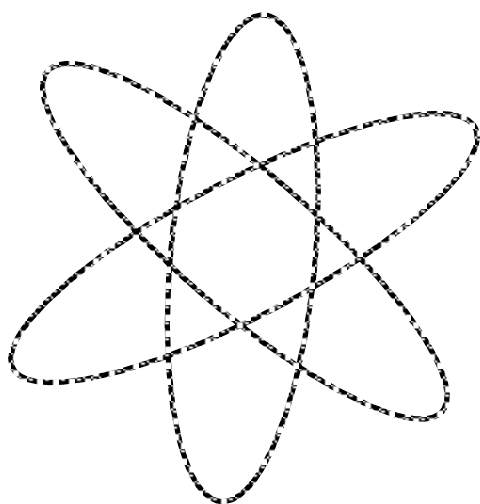


В.П. ПЛОТНИКОВ

**ФИЗИКА
ПРОВОДНИКОВ
И ДИЭЛЕКТРИКОВ**



ИЗДАТЕЛЬСТВО ТГТУ

Учебное издание

ПЛОТНИКОВ Владимир Павлович

ФИЗИКА ПРОВОДНИКОВ И
ДИЭЛЕКТРИКОВ

Учебное пособие

Редактор З.Г. Чернова
Компьютерное макетирование М.А. Филатовой

Подписано в печать 15.10.04
Формат 60 × 84 / 16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Гарнитура Times New Roman. Объем: 4,65 усл. печ. л.; 4,55 уч.-изд. л.
Тираж 100 экз. С. 673

Издательско-полиграфический центр
Тамбовского государственного технического университета,
392000, Тамбов, Советская, 106, к. 14

Министерство образования и науки Российской Федерации
Тамбовский государственный технический университет

В.П. ПЛОТНИКОВ

**ФИЗИКА
ПРОВОДНИКОВ
И ДИЭЛЕКТРИКОВ**

Рекомендовано Ученым советом университета
в качестве учебного пособия
для студентов электротехнических и
электроэнергетических специальностей высших
технических учебных заведений

Тамбов
Издательство ТГТУ
2004

УДК 537.3(075)
ББК В37я73
ПЗ9

Рецензенты:
Доктор физико-математических наук, профессор
В.А. Федоров,

Кандидат физико-математических наук

Плотников В.П.

ПЗ9 Физика проводников и диэлектриков: Учеб. пособие. Тамбов:
Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2004. 80 с.

Учебное пособие написано на основе курса лекций, читаемых автором в Тамбовском государственном техническом университете. В сжатой форме, но с привлечением математического аппарата физики твердого тела в объеме, достаточном для понимания описываемых физических процессов, анализируются взаимосвязи электрофизических свойств материалов с особенностями их внутреннего строения.

Предназначено для студентов электротехнических и электроэнергетических специальностей высших технических учебных заведений.

УДК 537.3(075)
ББК В37я73

ISBN 5-8265-0320-3

© Плотников В.П., 2004
© Тамбовский государственный
технический университет
(ТГТУ), 2004

ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемое учебное пособие предназначено для студентов высших технических учебных заведений, обучающихся по специальностям электротехнического и электроэнергетического, а также иных профилей, в учебные планы которых не входит изучение дисциплины «Физика твердого тела». Именно эта наука позволяет проследить взаимосвязи между внутренним строением материалов и их электрофизическими свойствами.

Для будущих инженеров-электриков различных специализаций, непосредственно связанных с различными электротехническими материалами, учебное пособие представляет несомненный интерес. Пособие написано на уровне, выходящем за рамки курса общей физики с использованием классических и квантовых представлений физики твердого тела. Изложенный в виде лекций материал направлен в основном на восприятие физической сущности описываемых явлений, но и в достаточной степени использован необходимый математический аппарат физики твердого тела.

ПОСОБИЕ СОСТОИТ ИЗ РАЗДЕЛОВ, ПОСВЯЩЕННЫХ ВОПРОСАМ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ ВЕЩЕСТВА, ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ МЕТАЛЛОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ. РАССМАТРИВАЮТСЯ КОНТАКТНЫЕ, ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ.

1 КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

ЛЕКЦИЯ 1

1.1 Роль современных представлений о структуре и физических свойствах проводников и диэлектриков в подготовке инженеров электротехнического и электроэнергетического профиля

Современный инженер-энергетик в своей практической деятельности непрерывно сталкивается с огромным количеством разнообразных электротехнических материалов. Диапазон их применения необъятен. Металлические провода передают электроэнергию на большие расстояния и используются в простейших устройствах. Другие материалы тока не проводят и находят применение в качестве не только простых изоляторов, но и могут значительно изменить параметры различных устройств или послужить основой для работы приборов – это диэлектрики. Третьи по способности проводить электрический ток занимают промежуточное положение между первыми двумя – это полупроводники, которые играют в жизни человека особую роль. Однако их зачастую не выделяют в отдельный класс и считают разновидностью диэлектриков. Как мы убедимся позже, тому есть серьезные основания.

Инженер-практик просто обязан досконально разбираться во всем разнообразии перечисленных материалов, знать их свойства и возможности эксплуатации в тех или иных реальных повседневных условиях.

Весь ход развития науки и техники показывает, что макроскопические характеристики вещества тесно связаны с его микроскопическими свойствами, определяемыми внутренним строением.

Подробно этими вопросами занимается наука «Физика твердого тела», которая в наиболее полном объеме изучается в высших учебных заведениях только будущими физиками. Студентам, осваивающим другие специальности, при необходимости читаются специальные курсы, представляющие собой отдельные разделы данной науки с той или иной степенью глубины и широты изложения.

Дисциплина «Физика проводников и диэлектриков» в этом плане не является исключением. Она основана на тех разделах «Физики твердого тела», которые посвящены изучению влияния внутренней структуры на электрические, диэлектрические и магнитные свойства твердых материалов. Здесь не рассматриваются механические, тепловые и некоторые другие свойства. Но разобраться в особенностях внутреннего строения необходимо для осмысления последующего материала курса. С этого и начнем наше повествование.

1.2 КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ И АМОРФНЫЕ ТЕЛА

По своему строению твердые тела делятся на кристаллические и аморфные.

Кристаллические тела наиболее изучены. Их структура отличается повторяемостью в пространстве. Группа атомов, молекул или ионов образует некоторую элементарную конфигурацию, которая периодически повторяется в трех измерениях без изменения своей ориентации. Таким образом может быть получен монокристалл макроскопических размеров с правильной внешней огранкой. При этом плоские грани пересекаются под определенными для каждого вида кристалла углами.

Однако чаще всего объем кристалла бывает разбит на отдельные разориентированные относительно друг друга области, в пределах которых ориентация элементарной конфигурации сохраняется. Такие тела называются поликристаллическими.

Кристаллы образуются (растут) из расплавов, паров, растворов исходных веществ как в природных условиях, так и в лабораторных.

В качестве примеров можно привести такие широко известные природные кристаллические материалы, как алмаз (C) и рубин (Al_2O_3), другие драгоценные камни, кварц (SiO_2), каменную соль (NaCl), различные металлы и их соединения.

Искусственно можно вырастить монокристаллы даже заданной ориентации. Для этого, например, в расплав каменной соли, цинка и т.д. необходимо поместить небольшой образец кристалла определенной ориентации (затравку) и медленно его из расплава вытягивать. В результате происходит кристаллизация и образуется монокристалл с ориентацией затравки.

Кристаллические материалы в отличие от многих других веществ могут обладать анизотропией физических свойств (механических, электрических, оптических и др.), заключающейся в том, что эти свойства зависят от выбранного в материале направления.

При независимости различных свойств от направления вещества изотропны. К ним относятся газы, жидкости и аморфные тела (в переводе с греческого – бесформенные).

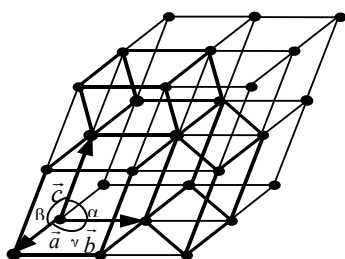
Аморфные тела представляют собой переохлажденные жидкости с большим коэффициентов вязкости, препятствующим принятию более упорядоченной формы. Типичные представители данного класса – стекло, различные полимеры, сажа и др. Они отличаются ближним порядком взаимодействия между образующими их частицами. У кристаллов же – дальний порядок из-за периодичности их структуры.

Приведем образное выражение Дж. Блейкмора: «Поскольку степень упорядоченности аморфных тел сильно зависит от условий их приготовления, можно предположить, что изучение аморфных тел в отличие от кристаллов относится скорее к искусству, чем к науке». Однако интерес ученых к аморфным телам весьма значителен в связи с наличием у них многих полезных свойств. Например, аморфный кремний обладает ценными электронными свойствами.

1.3 КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА. ТРАНСЛЯЦИОННАЯ СИММЕТРИЯ

В п.1.2 упоминалось о периодичности строения кристаллических тел. Назовем ту элементарную конфигурацию, которая образована некоторой группой частиц, элементарной кристаллической ячейкой. Тогда при ее многократных параллельных переносах (трансляциях) в трех различных направлениях получится пространственная кристаллическая решетка, т.е. вся решетка состоит из тождественных элементарных ячеек. Такая ячейка представляет собой параллелепипед, построенный на трех наименьших векторах: $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$, модули которых равны периодам идентичности (трансляции). А векторы, как известно, можно задать значениями их величин: a , b , c и углами между векторами и осями координат: α , β , γ .

Для описания одной и той же кристаллической структуры элементарную ячейку можно выбрать различными способами. На рис. 1.1 жирными линиями выделены три возможных элементарных ячейки для данной структуры кристалла.



. 1.1

Кристаллическая решетка обладает трансляционной симметрией, т.е. совпадает сама с собой при перемещениях на величину периодов идентичности.

В случае трансляционной симметрии можно задать оператор трансляции

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}, \quad (1.1)$$

где n_1 , n_2 , n_3 – произвольные целые числа.

Оператор трансляции $\vec{T}$ соединяет две точки в кристалле, имеющие одинаковое атомное окружение.

Множество операторов трансляции $\vec{T}$ определяет кристаллическую решетку, полученную при параллельном переносе и называемую решеткой

Бравэ.

Решетка Бравэ является примитивной, если ее ячейки содержат частицы только в вершинах (узлах). Тогда на каждую такую ячейку приходится всего одна частица (одни и те же частицы принадлежат соседним ячейкам одновременно).

Но есть вещества, у которых вокруг узла группируется несколько частиц вполне определенным образом. Такие решетки называются решетками с базисом.

При трансляции должна сохраняться периодичность в пространстве как самих узлов, так и окружающего их базиса.

Кристаллические тела обладают не только трансляционной симметрией. Существует симметрия и по отношению к поворотам вокруг некоторых осей (1-го, 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядка). Порядок оси симметрии определяется количеством совпадений решетки с самой собой при повороте на угол 2π .

Существуют и другие виды симметрии, определяемые плоскостью симметрии, винтовой осью n -го порядка и т.д., рассмотрение которых выходит за пределы нашего курса.

Отметим лишь, что в зависимости от формы элементарной ячейки все кристаллы делятся на семь сингоний (кристаллических систем), обладающих определенными классами симметрии. Этим сингониям соответствует 14 возможных пространственных решеток Бравэ.

Далее приведем сингонии кристаллов в порядке возрастания симметрии и соответствующие им параметры и типы решеток Бравэ.

Триклинная сингония. Все параметры разные: $a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma$. Элементарная ячейка решетки Бравэ примитивная в форме косоугольного параллелепипеда.

Моноклинная сингония. $a \neq b \neq c$; $\alpha = \gamma = 90^\circ$; $\beta \neq 90^\circ$. Ячейка примитивная или базоцентрированная в форме прямой призмы с параллелограммом в основании.

Ромбическая сингония. $a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Ячейка примитивная, базоцентрированная, объемноцентрированная или гранецентрированная в форме прямоугольного параллелепипеда.

Тетрагональная сингония. $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Ячейка примитивная или объемноцентрированная в форме прямой призмы с квадратом в основании.

Тригональная (или ромбоэдрическая). $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$. Ячейка ромбоэдрическая примитивная в форме ромбоэдра (куба, деформированного вдоль диагонали) с гранями в виде ромбов.

Гексагональная сингония. $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$. Прimitивная ромбоэдрическая ячейка в форме прямых призм с ромбами в основании. Сложенные вместе три таких ячейки образуют правильную шестигранную призму.

Кубическая сингония. $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Ячейка примитивная (простая кубическая), объемно-центрированная или гранецентрированная в форме куба.

1.4 ФИЗИЧЕСКИЕ ТИПЫ КРИСТАЛЛОВ

Различают четыре типа кристаллов в зависимости от рода частиц в узлах кристаллической решетки.

Ионные кристаллы. В узлах кристаллической решетки расположены ионы противоположного знака. Типичные представители кристаллов данного типа являются каменная соль (NaCl), MgO и др.

В узлах кубической решетки NaCl чередуются положительные ионы натрия (Na^+) и отрицательные ионы хлора (Cl^-). Между разноименно заряженными ионами существует ионная (гетерополярная) связь, обусловленная их электростатическим взаимодействием. Если в газообразном состоянии NaCl состоит из отдельных молекул, то в кристаллическом весь объем представляет собой как бы одну молекулу.

Атомные кристаллы. В узлах решетки расположены нейтральные атомы, которые связывает между собой гомеополярная (ковалентная) связь квантово-механического происхождения. Эта связь объясняется взаимодействием пар электронов, которые обобществлены парами соседних атомов.

Типичными представителями данного класса являются алмаз и графит, а также полупроводниковые материалы германий (Ge) и кремний (Si).

Металлические кристаллы. В узлах решетки – положительные ионы металла, между которыми хаотически движутся свободные электроны, образующие довольно однородное распределение отрицательного заряда в решетке. Между одноименно заряженными ионами существуют силы электростатического отталкивания, которые нейтрализуются зарядами свободных электронов. В результате ионы металла оказываются на расстояниях друг от друга, соответствующих условию равновесия, и кристаллическая решетка становится стабильной (устойчивой).

Молекулярные кристаллы. В узлах решетки – нейтральные молекулы. Силы связи обусловлены ван-дер-ваальсовским взаимодействием, которое является слабым и имеет место между близко расположенными нейтральными атомами и молекулами, проявляется при отсутствии других, более сильных, видов взаимодействия.

Ван-дер-ваальсовское взаимодействие может иметь дисперсионный, ориентационный (деформационный) и индукционный характер.

Дисперсионные силы возникают в исходно неполярных атомах и молекулах вследствие согласованного движения электронов в соседних атомах при их сближении. Если электроны двух атомов оказываются по одну сторону от своих положительно заряженных ядер, то это эквивалентно образованию двух мгновенных притягивающихся электрических диполей. Если электроны при своем согласованном движении оказываются по разную сторону от ядра, то диполи отталкиваются. Механизм согласования основывается на том, что мгновенный диполь одного атома поляризует другой атом и создает, таким образом, наведенный диполь.

Ориентационный характер объясняется электростатическими силами взаимодействия между полярными молекулами, приводящими к их переориентации и деформации кристалла.

Индукционное взаимодействие происходит у полярных молекул с высокой степенью поляризуемости вследствие образования наведенного дипольного момента от поля постоянных диполей соседних молекул.

К молекулярным кристаллам относятся многие вещества, например, такие, как кристаллы инертных газов (Ne, Ar, Kr, Xe), многих насыщенных органических соединений, в твердом состоянии H_2 , N_2 , O_2 , F_2 , CO_2 , H_2O и др.

ЛЕКЦИЯ 2

2.1 Дефекты кристаллического строения.

Точечные дефекты:

ВАКАНСИИ, ПРИМЕСИ ВНЕДРЕНИЯ И ЗАМЕЩЕНИЯ

При росте кристаллов как в природных, так и в искусственно созданных условиях никогда не образуется идеальная кристаллическая решетка в силу влияния реальных внешних условий и различных внутренних факторов. Нарушается периодичность расположения ее элементов. В исходном материале могут оказаться примеси, которые внесут свои искажения и т.д. Решетка уже выращенного кристалла страдает в результате приложения внешних механических нагрузок и других воздействий.

Все дефекты в зависимости от их геометрии можно разделить на три группы: точечные, линейные и поверхностные.

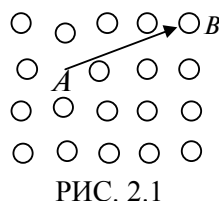
Точечные дефекты – это локальные нарушения решетки в изолированных друг от друга точках пространства. К ним относятся вакансии, междоузельные атомы, примеси атомов внедрения и замещения. Сюда же можно отнести и комплексы примесных атомов различных сортов, лишь бы не нарушалось общепринятое требование к размерам точечного дефекта – не более нескольких межатомных расстояний в любом направлении.

Линейные дефекты – это дислокации. О них мы расскажем ниже.

Поверхностные дефекты – наружные и различные внутренние границы в кристалле. Как и линейные они способны простираться в кристалле на миллионы межатомных расстояний.

Наиболее простым видом точечных дефектов является вакансия – узел атомной решетки, в котором нет атома. Вакансии имеются во всех кристаллах, зарождаются и исчезают под действием тепловых флуктуаций. Так внутренний атом может уйти из своего узла на поверхность кристалла. Расчет энергии, необходимой для такого перехода, затруднителен. Но порядок величины можно оценить следующим образом.

Рассмотрим плоскую картину (рис. 2.1). Атом разрывает четыре связи с ближайшими соседями в углу на поверхности (т. В), то А произошло искажение решетки. Необходимо совершить работу на равную энергии двух связей. Для восстановленных связей колеблется от 4 до



Атом при срывании с места (т. А) разрывает четыре связи с ближайшими соседями, а когда занимает место в восстанавливает только две связи. В т. Следовательно, в данном случае образование вакансии, численно трехмерного пространства число не 6. Так как на одну связь приходится

энергия $\approx \frac{1}{2}$ эВ, то оценка дает 2–3 эВ на вакансию. Если же учесть и релаксацию атомов вокруг вакансии, то получим величину энергии, необходимую для образования вакансии $E_v \approx 1$ эВ.

Из термодинамики известно, что относительная вероятность нахождения атома в состоянии с энергией, превышающей энергию основного состояния на E_v , равна $e^{-E_v/kT}$. Следовательно, и вероятность существования вакансии подчиняется этому же закону.

Если кристалл содержит N узлов, то количество вакансий можно определить как

$$n_v = Ne^{-E_v/kT}. \quad (2.1)$$

Обычное соотношение для металлов – одна вакансия на 10^3 атомов.

Возможна и обратная картина, когда атом с поверхности переходит внутрь кристалла. Такой атом называют *междоузельным*. Он вызывает искажение кристаллической решетки. Атом из внутренней области решетки может сорваться со своего узла и, преодолев потенциальный барьер соседних атомов, перескочить в другую ячейку между узлами решетки, для чего необходима достаточная энергия. В результате на месте ухода атома образуется вакансия, а на новом месте появляется междоузельный атом. Такая пара носит название *дефекта по Френкелю*.

В ионных кристаллах точечные дефекты могут быть анионными и катионными (*дефект Шоттки*). Здесь электростатическая нейтральность кристалла сохраняется при определенном стехиометрическом соотношении между вакансиями анионов и катионов. Например, для RbF число вакансий Rb^+ и F^- одинаково, а в Cu_2O число вакансий ионов меди в два раза больше, чем у кислорода.

При производстве кристаллических материалов в них всегда попадают примеси, которые играют двойную роль. В одних случаях их не должно быть, так как примеси могут изменять свойства основного материала в нежелательном направлении. В других – примеси специально добавляют, чтобы получить необходимые свойства кристаллов.

Атомы примеси могут располагаться в решетке двумя способами – либо *внедряться* между узлами решетки, либо *замещать* атомы основного материала непосредственно в узлах.

Примесь внедрения хорошо проникает в междоузлия, если размеры ее атомов небольшие. Так, атомы H_2 , O_2 , C , N_2 легко образуют дефекты внедрения в металлах.

При внедрении и замещении атомы примеси искажают кристаллическую решетку, приводя к возникновению внутренних напряжений.

2.2 Краевые и винтовые дислокации.

Механическое двойникование

Дислокация – это линейное несовершенство, образующее внутри кристалла границу зоны сдвига, которая отделяет ту часть *плоскости скольжения*, где сдвиг уже прошел, от той части, где он еще не начинался.

На рис. 2.2 показан кристалл, верхняя часть которого относительно нижней сдвинулась вдоль плоскости скольжения $CDEF$ влево на одно межатомное расстояние.

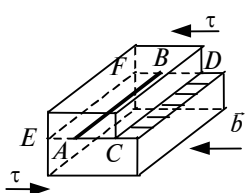


Рис. 2.2

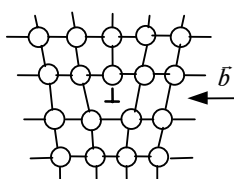


Рис. 2.3

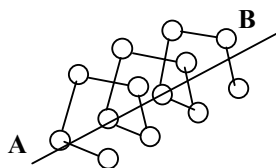
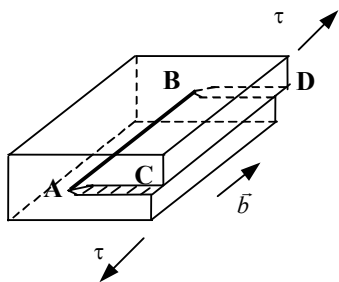
Область несовершенства кристаллической решетки вокруг линии AB , отделяющей часть плоскости скольжения $ABCD$, где сдвиг уже прошел, от части $ABEF$, еще не охваченной скольжением, называется *краевой дислокацией*.

Относительное смещение частей кристалла имеет определенную величину и направление, т.е. является вектором, который характеризует образованную дислокацию и называется вектором сдвига или *вектором Бюргерса* $\vec{b}$ (рис. 2.2).

Если вектор сдвига равен постоянной решетки, то дислокацию называют *единичной*. Такая дислокация, проходя через весь кристалл, приводит к относительному смещению его частей на величину b . Вектор Бюргерса краевой дислокации направлен перпендикулярно ее линии.

На рис. 2.3 показано образование краевой дислокации при введении в кубическую кристаллическую решетку дополнительной плоскости, называемой *экстраплоскостью*, которая расклинивает решетку, вызывая ее искажение. Дислокации принято обозначать значком $\perp$.

Если в кристалле произвести незавершенный сдвиг в направлении вектора Бюргерса $\vec{b}$, ориентированного вдоль линии AB (рис. 2.4), то вокруг последней возникает область несовершенства решетки, называемая *винтовой дислокацией*. Название связано с расположением атомов вокруг AB по винтовой линии (рис. 2.5).



В общем случае дислокация может иметь одновременно краевые и винтовые компоненты, тогда ее называют *смешанной дислокацией*.

Скольжение дислокаций приводит к пластической деформации кристаллов. Их наличие позволяет объяснить различие между теоретической и наблюдаемой реально прочностью.

По теории в бездефектном кристалле для относительного смещения его частей на одно межатомное расстояние необходимо одновременно разорвать все связи между соседними атомами смещаемых частей. В реальном же кристалле при последовательном перемещении дислокаций вдоль плоскости скольжения связи разрываются поочередно, что значительно снижает уровень касательных напряжений, необходимых для деформации.

Дислокации в кристаллических материалах могут быть ответственными и за начало разрушения. Существуют выдвинутые теоретически и подтвержденные многочисленными экспериментами дислокационные механизмы разрушения, основанные на факте накопления внутренних напряжений на различного рода скоплениях дислокаций и их взаимодействиях между собой. Наличие расклинивающей решетку экстраплоскости приводит к образованию микропоры, являющейся зародышем разрушения.

Пластическая деформация кристаллических материалов может осуществляться и посредством *механического (деформационного) двойникования*.

Данное явление заключается в образовании под действием механических нагрузок двойниковых прослоек, внутри которых материал расположен симметрично материалу основного кристалла (матрице) относительно некоторой плоскости (*плоскости двойникования*).

На рис. 2.6 представлен процесс развития одиночной двойниковой прослойки. В недеформированном кристалле показано положение плоскости двойникования *aa* (рис. 2.6, *a*). Если в ней в процессе деформации появляются касательные напряжения, то внутри кристалла возникает прослойка двойника (рис. 2.6, *б*) с *некогерентными границами* (не параллельными плоскости двойникования). На поверхности кристалла образуется характерная ступенька. При дальнейшем нагружении двойник прорастает до противоположной поверхности, тоже образуя на ней ступеньку (рис. 2.6, *в*). Границы двойника становятся когерентными.

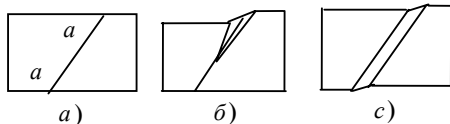
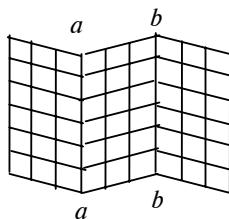
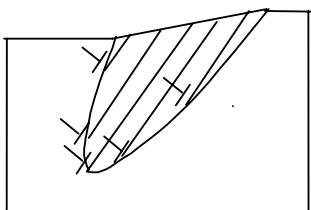


РИС. 2.6

По современным представлениям процесс двойникования осуществляется последовательными пробегами так называемых *двойникующих дислокаций* в плоскостях, параллельных плоскости двойникования с послойным переводом в симметричное состояние материала матрицы (рис. 2.7). Если двойник при этом оканчивается внутри кристалла, то двойникующие дислокации останавливаются каждая в своей плоскости на некогерентных границах.



На рис. 2.8 приводится область когерентной двойниковой прослойки между границами *aa* и *bb*. Слева от границы *aa* и справа от *bb* располагается материал матрицы. Решетки двойника и матрицы симметричны относительно плоскостей двойникового. Все показанные области лежат в одной плоскости.

Кроме двойников, образующихся в кристаллических материалах под действием внешних механических нагрузок, существуют двойники, возникающие в процессе роста кристаллов, быстрого теплового расширения или сжатия. Множественные двойниковые образования называют *полисинтетическими двойниками*.

Следует отметить, что двойниковые границы в кристаллах относятся к поверхностным дефектам так же, как и границы зерен, межфазные границы и т.д., которые зачастую моделируются определенным расположением дислокаций, и которые в данном курсе подробно не рассматриваются.

2.3 ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Перечисленные выше дефекты: точечные, дислокационные, двойниковые и другие, – играют существенную роль в формировании не только механических свойств кристаллов (прочность, пластичность, хрупкость), но и оказывают влияние на оптические, электрические и магнитные свойства.

В данном разделе мы лишь обратим внимание на взаимосвязь некоторых дефектов кристаллического строения с электрофизическими свойствами. Более подробно эти вопросы будут освещены при дальнейшем изложении, когда станут понятными причины возникновения тех или иных свойств материалов и даны их соответствующие теоретические обоснования.

Влияние дефектов на основные электрические и магнитные свойства обусловлено наличием некоторых зарядовых состояний самих дефектов, либо искажением дефектами регулярного распределения электрических зарядов кристаллической решетки. Все это приводит к изменению, например, такой характеристики, как электропроводность.

Так к искажению зарядового состояния может привести возникновение вакансии (удаление положительного или отрицательного иона), появление междоузельного атома или атома замещения с другой валентностью. Перераспределение зарядов вызывают и дислокации, деформируя кристалл.

При двойниковании, если расстояния между соседними атомами изменяются (когда углы двойникового имеют большие значения), возникают электростатические силы отталкивания, тоже приводящие к деформации решетки и изменению ее зарядового состояния.

В полупроводниках наличие примеси формирует так называемую примесную проводимость, при которой образуются дополнительные энергетические уровни.

Наиболее сильно наличие дефектов влияет на электрические свойства в ионных кристаллах. В металлах же искажения в распределении зарядов частично нивелируются из-за экранирования, возникающего в результате перераспределения в объеме свободных электронов проводимости.

В заключение отметим, что влияние дефектов на электрофизические свойства кристаллических материалов весьма разнообразно и для своего объяснения требует, как правило, привлечения квантовых представлений.

2 ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ

ЛЕКЦИЯ 3

3.1 Классическая электронная теория проводимости металлов. Предпосылки создания

Представление о дискретном строении электричества начало складываться во второй половине XIX века. Впервые об этом упоминали в своих работах Фехнер и Вебер, которые представляли электрический ток как движение дискретных электрических зарядов.

Идея атомарного строения электричества вытекала и из законов электролиза Фарадея. Максвелл тоже говорил о «молекулах электричества», но считал, что это понятие будет отброшено с развитием теории поля.

В 1874 году ирландский физик Стоней, используя законы электролиза и основные положения молекулярной теории нашел, что один атом водорода при прохождении тока через электролит несет заряд, примерно, 10^{-19} Кл. В 1891 году Стоней предложил назвать элементарный электрический заряд электроном.

Однако приоритет открытия электрона принадлежит английскому физiku Дж. Дж. Томсону (1897 год). Он определил значение удельного заряда электрона, наблюдая воздействие на поток электронов электрического и магнитного полей. Но ни заряд, ни масса электрона еще не были известны. Наиболее точно они были измерены позже в опытах Милликена (в 1909–1914 годах).

В начале XX века работами немецкого физика Друде и голландского физика Лоренца была создана электронная теория металлов, позволившая получить теоретически многие ранее открытые законы. К числу разработчиков теории относят и Дж. Дж. Томсона.

Таким образом, созданная классическая теория электропроводности явилась закономерным итогом, обобщающим многочисленные экспериментальные наблюдения, накопившиеся к началу XX века.

3.2 ОСНОВНЫЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ

Любая теория создается на базе экспериментальных наблюдений, затем экспериментом же и подтверждается или отвергается. И служит теория для объяснения тех же экспериментальных фактов, т.е. применительно к металлам все теории так или иначе объясняют их свойства. Поэтому целесообразно в данный момент выделить наиболее присущие металлам свойства, а затем уже перейти собственно к теоретическим обоснованиям.

Из курса общей физики известно, что металлы являются хорошими проводниками электрического тока, благодаря наличию свободных электронов. Их *удельная электропроводность* σ при комнатной температуре составляет $10^6 \dots 10^8 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$. Для сравнения – у полупроводников $\sigma = 10^{-4} \dots 10^5 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$, а у практически не проводящих электрический ток диэлектриков значение σ достигает минимальной величины $10^{-16} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$. порядка

Величина, обратная электропроводности, носит название *удельного электрического сопротивления* $\rho = \frac{1}{\sigma}$. Причиной возникновения электрического сопротивления является рассеяние электронов проводимости на различных нарушениях кристаллической решетки (фононах – квазичастицах тепловых колебаний решетки, точечных дефектах, дислокациях и т.д.).

Наиболее характерным свойством металлов является выполнение закона Ома в несверхпроводящем состоянии, т.е. линейная зависимость между плотностью тока j и напряженностью электрического поля E :

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

Существует нелинейная температурная зависимость проводимости металлов. Удельное сопротивление уменьшается с понижением температуры, и с приближением к абсолютному нулю многие металлы переходят в *сверхпроводящее состояние*, т.е. теряют электрическое сопротивление.

Металлы наряду с высокой электропроводностью обладают и хорошей электронной теплопроводностью. Связь между этими величинами устанавливается *законом Видемана-Франца*.

В металлах под воздействием электрического, магнитного или температурного градиентов наблюдаются различные *термоэлектрические и гальвано-магнитные явления*.

3.3 МОДЕЛЬ ДРУДЕ

Друде в 1900 году построил первую классическую теорию проводимости металлов, основанную на представлении о газе свободных электронов.

3.3.1 Основные положения теории

1 Электропроводность металлов обусловлена большим количеством носителей зарядов – электронов. Их совокупность рассматривают как электронный газ, подчиняющийся законам идеального газа.

Вследствие сильного взаимодействия между атомами металла при соединении последних в кристаллическое твердое тело, самые внешние их электроны перестают быть связанными с отдельными атомами и легко переходят от одного атома к соседнему и далее через всю кристаллическую решетку. В узлах кристаллической решетки располагаются положительные ионы металла, а между ними хаотически движутся свободные электроны.

2 Вводится характеристика $\bar{\lambda}$ – средняя длина свободного пробега электронов, которая по порядку величины равна периоду кристаллической решетки металла 10^{-10} м.

3 Пользуясь закономерностями кинетической теории газов, можно определить среднюю кинетическую энергию теплового движения электронов

$$\frac{1}{2} m v_{\text{кв}}^2 = \frac{3}{2} kT, \quad (3.1)$$

где m – масса электрона; $v_{\text{кв}}$ – средняя квадратичная скорость, определяемая классическим распределением Максвелла электронов по скоростям.

При $T = 273 \text{ К}$ $v_{\text{кв}} \approx 10^5$ м/с, таков же порядок средней арифметической скорости.

Тепловое движения электронов хаотично, как и молекул газа, поэтому оно не может привести к возникновению электрического тока.

4 Упорядоченное движение электронов, т.е. электрический ток, создается лишь под действием внешнего электрического поля. При этом скорость направленного движения (дрейфа) электронов $v \approx 8 \cdot 10^{-4}$ м/с очень мала по сравнению со скоростями теплового движения при обычных температурах, что объясняется частыми столкновениями электронов с ионами кристаллической решетки.

5 Практически одновременное начало движения электронов по проводнику объясняется мгновенным (со скоростью света $c = 3 \cdot 10^8$ м/с) распространением вдоль проводника электромагнитного поля.

3.3.2 Объяснение с позиций классической теории проводимости основных законов постоянного тока

Важнейшим результатом классической электронной теории проводимости металлов явился вывод основных законов электрического тока – законов Ома и Джоуля-Ленца, ранее установленных экспериментально.

Закон Ома. Друде считал, что сразу после очередного столкновения электрона с ионом кристаллической решетки скорость упорядоченного движения электрона равна нулю.

Под действием поля напряженностью E электрон получит ускорение

$$a = \frac{F}{m} = \frac{eE}{m} . \quad (3.2)$$

В конце свободного пробега через время $\bar{\tau}$ скорость упорядоченного движения с учетом (3.2) достигнет значения

$$v = a\tau = \frac{eE}{m} \bar{\tau} . \quad (3.3)$$

Скорость v изменяется линейно, поэтому ее среднее значение

$$\bar{v} = \frac{v}{2} = \frac{eE}{2m} \bar{\tau} . \quad (3.4)$$

Друде не учитывал распределения электронов по скоростям и приписывал всем электронам одинаковое значение скорости теплового движения, равное средней квадратичной скорости

$$v_T = v_{KB} . \quad (3.5)$$

В этом приближении, т.е. с учетом (3.5)

$$\bar{\tau} = \frac{\bar{\lambda}}{v_T} = \frac{\bar{\lambda}}{v_{KB}} , \quad (3.6)$$

где $\bar{\lambda}$ – средняя длина свободного пробега.

Точнее, $\bar{\tau} = \frac{\bar{\lambda}}{\sqrt{v_T^2 + \bar{v}^2}}$, но так как $v_T \gg \bar{v}$, то значением скорости упорядоченного движения v можно пренебречь.

Плотность тока равна заряду всех электронов, проходящих через единицу площади за одну секунду. Если в единице объема содержится n_0 электронов, то плотность тока

$$j = n_0 e \bar{v} . \quad (3.7)$$

Из выражения (3.7), с учетом (3.4), (3.5) и (3.6), получим

$$j = n_0 e \frac{eE}{2m} \frac{\bar{\lambda}}{v_T} = \frac{n_0 e^2 \bar{\lambda}}{2m v_T} E .$$

$$\text{Обозначим} \quad \frac{n_0 e^2 \bar{\lambda}}{2m v_T} = \sigma , \quad (3.8)$$

тогда $j = \sigma E$ или в векторной форме $\vec{j} = \sigma \vec{E}$, что соответствует закону Ома в дифференциальной форме.

Выражение (3.8) можно преобразовать, подставив значение тепловой скорости в соответствии с (3.5) и (3.1), к виду

$$\sigma = \frac{n_0 e^2 \bar{\lambda}}{2(3mkT)^{1/2}} . \quad (3.9)$$

Выражения (3.8) и (3.9) получены в приближении, что все электроны имеют одинаковое время свободного пробега.

Учет статистического распределения электронов по временам свободного пробега приводит к следующему значению электропроводности:

$$\sigma = \frac{n_0 e^2 \bar{\lambda}}{m v_T} \quad \text{или} \quad \sigma = \frac{n_0 e^2 \bar{\lambda}}{(3mkT)^{1/2}} . \quad (3.10)$$

Из значения σ , полученного по теории проводимости видно, что при отсутствии столкновений с ионами решетки $\bar{\lambda}$, а, следовательно, и σ были бы бесконечно велики, т.е. сопротивление проводника обусловлено этими столкновениями.

Закон Джоуля-Ленца. При столкновении с ионом кристаллической решетки металла электрон пере-

дает последнему кинетическую энергию, приобретенную на длине свободного пробега за счет работы электрического поля:

$$W = \frac{mv^2}{2}, \quad (3.11)$$

где v – скорость дрейфа электрона в конце пробега.

Эта энергия идет на увеличение внутренней энергии металла, проявляющееся в его нагреве.

За единицу времени электрон испытывает в среднем Z соударений. С учетом (3.11) количество энергии, которое передает электрон узлам решетки за единицу времени в единице объема

$$w = n_0 Z \frac{mv^2}{2}, \quad (3.12)$$

где n_0 – число электронов в единице объема.

Число соударений в единицу времени можно выразить как отношение скорости теплового движения к средней длине свободного пробега:

$$Z = \frac{v_T}{\bar{\lambda}}. \quad (3.13)$$

Подставив в (3.12) значения Z , v и $\bar{\lambda}$ по формулам (3.13), (3.3) и (3.6), получим

$$w = \frac{n_0 e^2 \bar{\lambda}}{2m v_T} E^2$$

$$\text{или} \quad w = \sigma E^2, \quad (3.14)$$

где удельная электрическая проводимость

$$\sigma = \frac{n_0 e^2 \bar{\lambda}}{2m v_T}. \quad (3.15)$$

Полученное выражение (3.14) является записью закона Джоуля-Ленца в дифференциальной форме. Выражение (3.15) для σ соответствует полученному выше (3.8).

В качестве примера применения теории Друде приведем и закон Видемана-Франца.

В 1853 году Видеман и Франц экспериментально установили, что отношение коэффициентов теплопроводности K и удельной электрической проводимости σ для всех металлов при одной и той же температуре одинаково и пропорционально их абсолютной температуре

$$\frac{K}{\sigma} = CT. \quad (3.16)$$

Электронная теория проводимости металлов позволила получить этот закон и определить значение константы C в выражении (3.16):

$$C = 3 \frac{k^2}{e^2}. \quad (3.17)$$

Формула (3.16) с учетом (3.17) принимает вид

$$\frac{K}{\sigma} = 3 \frac{k^2}{e^2} T, \quad (3.18)$$

что хорошо согласуется с экспериментом.

3.4 МОДЕЛЬ ЛОРЕНЦА

В теории Друде всем свободным электронам приписана одинаковая скорость теплового движения, что является довольно грубым упрощением.

В классической статистике, основы которой изложены в курсе общей физики, согласно распределению Максвелла-Больцмана, при термодинамическом равновесии количество электронов в единичном объеме, скорости которых лежат в интервале $dv_x dv_y dv_z$ с центром в точке $v_x v_y v_z$, равно

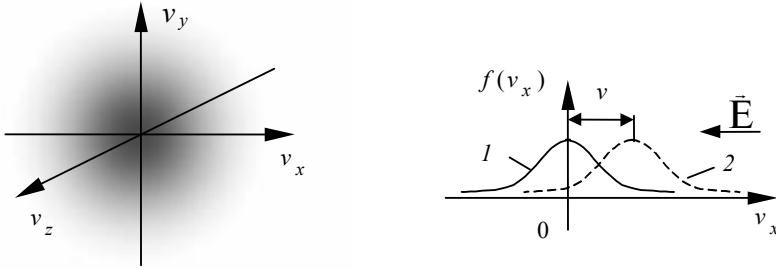
$$f_0 dv_x dv_y dv_z = n_0 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2kT} \right] dv_x dv_y dv_z, \quad (3.19)$$

где f_0 – равновесная функция распределения, показывающая долю электронов от их общего числа, ско-

рости которых лежат в указанном диапазоне скоростей; n_0 – число электронов в единице объема.

Равновесное распределение симметрично в пространстве скоростей v_x, v_y, v_z (рис. 3.1, а). На рис. 3.1, б (кривая 1) показана функция распределения, при одномерном движении электронов со скоростью v_x (вдоль оси x).

Данное распределение используется в физике при описании различных явлений переноса.



а)

б)

Рис. 3.1

В модели Лоренца рассматривается перенос электрических зарядов под воздействием электрического поля в однородных металлах.

Пусть однородное поле напряженностью $\vec{E}$ создает направленное движение электронов. Будем считать, что f – функция распределения в однородном поле, а производная разности функций $f - f_0$ равна нулю. Тогда в любое время в металле скорость изменения f запишется как

$$\left(\frac{df}{dt}\right) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{поля}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{рассеян.}} \quad (3.20)$$

Здесь первое слагаемое в правой части уравнения учитывает воздействие электрического поля на изменение функции равновесного распределения, а второе – влияние рассеяния электронов на ее восстановление.

Преобразуем первое слагаемое, умножив и разделив на ∂v (v – скорость дрейфа электронов),

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{поля}} = \left(\frac{\partial v}{\partial t}\right) \left(\frac{\partial f}{\partial v}\right) = \left(\frac{-eE}{m}\right) \left(\frac{\partial f}{\partial v}\right), \quad (3.21)$$

с учетом того, что $\frac{\partial v}{\partial t} = a$ – ускорение, которое можно выразить из второго закона Ньютона как $a = \frac{F}{m}$,

где $F = -eE$ – сила, действующая на электрон со стороны электрического поля (знак минус показывает, что вектор силы $\vec{F}$ направлен противоположно вектору напряженности $\vec{E}$).

Отсюда следует, что на изменение функции распределения влияет ее производная по скорости $\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)$.

Ускоряющее действие поля уничтожается рассеянием электронов, прежде всего, на фононах, что и учитывает второе слагаемое уравнения (3.20).

Лоренц предполагал, что процесс восстановления f_0 полностью происходит на длине пробега перед столкновением, т.е. за время релаксации τ_r (время уменьшения скорости направленного движения в $e \approx 2,7$ раза при отключении поля, здесь e – основание натуральных логарифмов). Эта величина определяется для каждой точки пространства скоростей, поэтому она связана со средним временем свободного пробега $\bar{\tau}$ в модели Друде (интегральным соотношением).

В таком приближении величина $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{рассеян.}}$ должна быть пропорциональна разности функций рас-

пределения $(f_0 - f)$, и ее можно выразить через время релаксации:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{рассеян.}} = \frac{f_0 - f}{\tau_r}. \quad (3.22)$$

Подставив в уравнение (3.20) выражения (3.21) и (3.22), получим *уравнение непрерывности*, связывающее функции распределения, возмущенную f и невозмущенную f_0 электрическим полем:

$$\left(\frac{df}{dt}\right) + \frac{eE}{m} \left(\frac{\partial f}{\partial v}\right) + \frac{f - f_0}{\tau_r} = 0. \quad (3.23)$$

На рис. 3.1, б показана функция распределения для одномерного случая, смещенная по оси x (штриховая кривая 2). Расстояние по горизонтали между максимумами кривых 1 и 2 численно равно скорости направленного движения (дрейфа) электронов.

Для стационарного состояния, достигаемого при длительном действии электрического поля (время велико по сравнению с τ_r) в уравнении (3.23) первое слагаемое обращается в нуль, а второе и третье оказываются равными по величине и противоположными по знаку.

Тогда из уравнения (3.23) следует, что

$$f = f_0 + \left(\frac{\tau_r e E}{m}\right) \left(\frac{\partial f}{\partial v}\right), \quad (3.24)$$

где f – возмущенная функция распределения в стационарном состоянии.

Выражая с учетом (3.24) плотность тока и проводя соответствующие интегрирования, Лоренц получил электропроводность

$$\sigma = \frac{4n_0 e^2 \bar{\lambda}}{3(2\pi m k T)^{1/2}}, \quad (3.25)$$

отличающуюся от соответствующей формулы Друде (3.10) лишь небольшим числовым множителем порядка 1,09, т.е. в определение электропроводности уточненный подход Лоренца практически ничего не дал.

3.5 НЕДОСТАТКИ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПРОВОДИМОСТИ

Классическая электронная теория хорошо объясняет существование электрического сопротивления металлов, законы Ома и Джоуля-Ленца, позволяет выразить удельную электрическую проводимость, понять связь между теплопроводностью и электропроводностью.

Однако во многих вопросах классическая электронная теория приводит к выводам, находящимся в противоречии с опытом. Приведем некоторые из основных противоречий.

Так, например, теория дала качественное объяснение закона Видемана-Франца. Приведенное выше выражение (3.15) хорошо согласуется с опытом. Но Лоренц, учтя распределение электронов по скоростям, получил

$$\frac{K}{\sigma} = 2 \frac{k^2}{e^2} T,$$

что хуже согласуется с опытными результатами.

Классическая теория не объясняет температурной зависимости удельного сопротивления металлов:

– теоретически

$$\rho \sim \sqrt{T},$$

так как ρ зависит от скорости теплового движения электронов, которая в свою очередь $\sim \sqrt{T}$;

– экспериментально

$$\rho \sim T.$$

Электронный газ должен обладать теплоемкостью $\frac{3}{2}R$, добавляя это значение к теплоемкости решетки $3R$, получим $\frac{9}{2}R$, т.е., согласно классической теории, теплоемкость металла, должна быть в 1,5 раза больше, чем у диэлектриков, в которых нет свободных электронов. На опыте же они практически не отличаются.

Средняя длина свободного пробега по электронной теории $\bar{\lambda} \approx 10^{-10}$ м. Для того, чтобы по формулам электронной теории получить значение проводимости, близкое к реальному, $\bar{\lambda}$ должна быть в сотни раз больше. То есть приходится предполагать, что электрон проходит без соударений с ионами решетки сотни межузельных расстояний. Это непонятно в рамках классической теории.

Классическая электронная теория проводимости металлов не свободна от недостатков. Ее выводы расходятся с рядом экспериментальных наблюдений. Одной из причин расхождений является то, что движение электронов в металлах подчиняется не законам классической механики, а более сложным законам квантовой механики, на основе которой построена современная квантовая теория проводимости.

В классической теории не учитывается взаимодействие электронов друг с другом, а их взаимодействие с решеткой металла описывается как кратковременное соударение. Но при очень низких температурах взаимодействие между электронами может играть решающую роль.

Однако классическая электронная теория не утратила своего значения. Она позволяет во многих случаях быстро найти правильные качественные результаты в наглядной форме. Расхождения между теорией и опытом уменьшаются при снижении концентрации электронов проводимости и увеличении температуры. В ряде случаев, когда концентрация электронов мала (электронные явления в газах), электронная теория применима и количественно. В металлах же с большой концентрацией электронов различия более существенны.

ЛЕКЦИЯ 4

4.1 Квантовая теория свободных электронов.

Вырожденный и невырожденный электронный газ

Совокупность свободных электронов в металлах (электронный газ) представляет собой коллектив частиц, поведение которого качественно отличается от поведения отдельных частиц и описывается статистическими закономерностями.

По характеру поведения в коллективе микрочастицы делятся на *фермионы* и *бозоны*.

Фермионы – это частицы с полуцелым (в единицах $\hbar$, где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h – постоянная Планка) спином: $\frac{\hbar}{2}$; $\frac{3}{2}\hbar$ и т.д. К ним относятся электроны, протоны, нейтроны и др.

Бозоны имеют целочисленный спин: 0 ; $\hbar$; $2\hbar$ и т.д.

Фермионы подчиняются принципу Паули, согласно которому в одном и том же квантовом состоянии не может находиться более одного однотипного фермиона, т.е. эти частицы в коллективе являются «индивидуалистами», стремятся к «уединению».

Бозоны, наоборот, стремятся к объединению в одном и том же состоянии.

Пусть на N частиц приходится G состояний, которые может занимать отдельная частица. Тогда вероятность встречи частиц в одном состоянии будет мала, если

$$\frac{N}{G} \ll 1, \quad (4.1)$$

т.е. число свободных состояний гораздо больше числа самих частиц:

$$G \gg N.$$

В данном случае каждая частица имеет «полную свободу» выбора состояния, и отличить фермионы от бозонов практически невозможно.

При условии

$$\frac{N}{G} \approx 1 \quad (4.2)$$

(т.е. $N \approx G$) проблема выбора появляется, и проявляется специфика частиц. Такие коллективы называют *вырожденными*. Они могут возникать в квантовых объектах, для которых количество состояний G конечно в связи с дискретным характером изменения параметров состояния.

Параметры состояния классических объектов изменяются непрерывно, и для них число состояний G бесконечно велико. Здесь нет проблемы выбора. Это *невырожденные* коллективы.

Однако и квантовые системы могут быть невырожденными при соблюдении условия (4.1).

Свойства невырожденных коллективов описывает классическая статистика Максвелла-Больцмана, с некоторыми положениями которой мы уже познакомились при описании классической электронной теории проводимости.

Свойства вырожденных коллективов изучает *квантовая статистика*. Для фермионов – это *статистика Ферми-Дирака*, для бозонов – *статистика Бозе-Эйнштейна*.

4.2 СТАТИСТИКА ФЕРМИ-ДИРАКА ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

4.2.1 Функция распределения и полная статистическая функция распределения

Электроны проводимости в металле, являясь фермионами, подчиняются квантовой статистике Ферми-Дирака, в которой функция распределения

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \quad (4.3)$$

это среднее число частиц в квантовом состоянии с энергией E или вероятность заполнения данного квантового состояния. Для фермионов оба понятия совпадают, так как в соответствии с принципом Паули в одном и том же состоянии может быть только один фермион. Физический смысл величины E_F поясним несколько позже.

Коллектив же частиц как единое целое можно описать *полной статистической функцией распределения*

$$N(E)dE, \quad (4.4)$$

которая показывает число частиц с энергией в диапазоне от E до $E + dE$.

Полную функцию (4.4) можно получить, перемножив число частиц в квантовом состоянии (4.3) на количество возможных состояний.

Обозначим число квантовых состояний с энергией в интервале dE как

$$g(E)dE. \quad (4.5)$$

Тогда, перемножив выражения (4.3) и (4.5), запишем полную функцию статистического распределения в виде

$$N(E)dE = f(E)g(E)dE. \quad (4.6)$$

Для определения данной функции необходимо сначала найти функцию (4.5).

4.2.2 Фазовое пространство. Число и плотность состояний

В классической механике для описания состояний частиц используются координаты (x, y, z) и составляющие импульса по трем осям (p_x, p_y, p_z) .

Шестимерное пространство с осями координат x, y, z, p_x, p_y, p_z называется *фазовым*, а точки, определяемые данными шестью координатами, – *фазовыми точками*.

В фазовом пространстве определенному состоянию частиц соответствует уже не отдельная точка, а *ячейка элементарного объема*

$$\Delta\Gamma = \Delta\Gamma_v \Delta\Gamma_p = dx dy dz dp_x dp_y dp_z, \quad (4.7)$$

где $\Delta\Gamma_v = dx dy dz$ – *элемент объема пространства координат*; $\Delta\Gamma_p = dp_x dp_y dp_z$ – *элемент объема пространства импульсов*.

Для классических частиц, свойства которых меняются непрерывно, указанные объемы могут иметь любые значения, в том числе и бесконечно малые.

При рассмотрении совокупности (газа) *свободных* электронов, потенциальная энергия которых равна нулю, то есть не зависит от положения (координат) частицы во внешнем поле, пользуются трехмерным пространством импульсов (p), скоростей (v) или волновых векторов (k). Тогда электрон может быть

определен вектором, проведенным из начала координат соответствующего пространства в определенную его точку или самой этой точкой. Здесь элемент

$$\Delta \Gamma_v = V, \quad (4.8)$$

где V – объем, в котором движутся частицы.

В случае, когда частица кроме корпускулярных свойств обладает и волновыми (как электрон и другие микрочастицы) свойствами, согласно принципу неопределенностей Гейзенберга, невозможно различить два состояния

$$(x, y, z, p_x, p_y, p_z) \text{ и } (x + dx, y + dy, z + dz, p_x + dp_x, p_y + dp_y, p_z + dp_z),$$

если произведение

$$dx dy dz dp_x dp_y dp_z < h^3. \quad (4.9)$$

В соответствии со сказанным выше в квантовой статистике элементарной в фазовом пространстве является ячейка объемом не менее h^3 . Тогда выражение (4.7) принимает вид

$$\Delta \Gamma = \Delta \Gamma_v \Delta \Gamma_p = h^3. \quad (4.10)$$

У свободных частиц, для которых выполняется равенство (4.8), элемент объема пространства импульсов, с учетом (4.10), равен

$$\Delta \Gamma_p = \frac{h^3}{V}. \quad (4.11)$$

Элементом объемов, определенных выражениями (4.10) и (4.11.), соответствуют определенные квантовые состояния. Деление же фазового пространства на ячейки объемом h^3 или $\frac{h^3}{V}$ называют его квантованием.

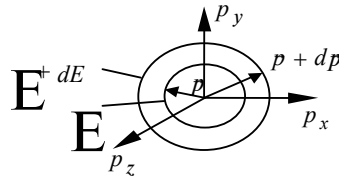
Для определения числа квантовых состояний с энергией в интервале dE , определяемого функцией (4.5), в пространстве импульсов выделим шаровой слой толщиной dp (рис. 4.1).

Объем слоя между сферами
ячеек в этом объеме

$$\frac{4\pi p^2 dp}{\Delta \Gamma_p} = \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp. \quad (4.12)$$

Каждой такой ячейке частицы. Тогда число состояний в ячейке, выраженному правой

$$g(p)dp = \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp.$$



. 4.1

равен $4\pi p^2 dp$, а число элементарных

соответствует одно состояние слое толщиной dp равно количеству частью (4.12):

$$(4.13)$$

Однако для электронов каждой фазовой ячейке соответствует не одно состояние, а два, отличающиеся направлением спина. То есть для электронов число состояний в формуле (4.13) необходимо удвоить:

$$g(p)dp = \frac{8\pi V}{h^3} p^2 dp. \quad (4.14)$$

Полная энергия свободных частиц совпадает с кинетической, и частица со скоростью v и импульсом $p = mv$ имеет энергию

$$E = \frac{p^2}{2m} \text{ или } dE = \frac{p}{m} dp. \quad (4.15)$$

С учетом (4.15), из уравнения (4.14) получим число квантовых состояний электронов уже в интервале энергий dE :

$$g(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} E^{1/2} dE. \quad (4.16)$$

И, наконец, поделив обе части (4.16) на dE , получим число состояний электронов в единичном интервале энергий или *плотность состояний*

$$g(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} E^{1/2}. \quad (4.17)$$

4.2.3 Распределение электронов в металле. Энергия Ферми

В выражение (4.3), определяющее функцию распределения в квантовой статистике Ферми-Дирака, входит величина E_F , которую называют *уровнем или энергией Ферми*.

Рассмотрим свойства функции (4.3) при абсолютном нуле ($T = 0K$):

$$f(E) = 1, \quad (4.18)$$

если $E < E_F$ (так как в этом случае выражение в знаменателе $e^{\frac{E-E_F}{kT}} \rightarrow 0$).

$$f(E) = 0, \quad (4.19)$$

если $E > E_F$ (так как $e^{\frac{E-E_F}{kT}} \rightarrow \infty$), т.е. при абсолютном нуле все состояния с энергией, меньшей энергии Ферми, заняты электронами (вероятность их заполнения равна единице), а состояния с энергией, большей энергии Ферми, – свободны (вероятность заполнения равна нулю). Отсюда следует, что энергия Ферми – это максимальная энергия, которую могут иметь электроны в металле при $T = 0K$.

На рис. 4.2, а приведен ступенчатый график функции распределения $f(E)$ при $T = 0K$. При значении энергии электрона, равном E_F , функция $f(E)$ скачком обращается в ноль.

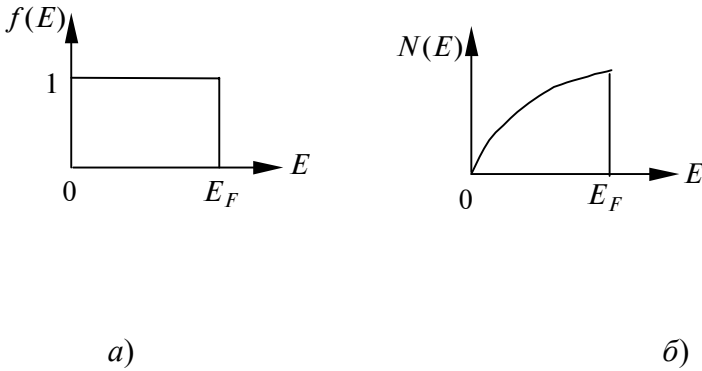


Рис. 4.2

Далее запишем полную функцию распределения Ферми-Дирака при абсолютном нуле, подставив в (4.6) выражения (4.18) и (4.16):

$$N(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} E^{1/2} dE. \quad (4.20)$$

График функции $N(E)$ представлен на рис. 4.2, б. Площади под графиками на рис. 4.2 соответствуют заполненным электронами энергетическим состояниям.

Проинтегрировав выражение (4.20) в пределах от 0 до E_F , получим полное число электронов N , заполняющих уровни до уровня Ферми, а так как других электронов на более высоких уровнях просто нет, то N будет равно и полному числу свободных электронов в металле

$$N = \frac{8\pi V}{3h^3} E_F^{3/2} (2m)^{3/2}. \quad (4.21)$$

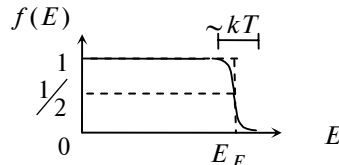
Поделив обе части (4.21) на объем V , найдем концентрацию свободных электронов

$$n = \frac{8\pi}{3h^3} E_F^{3/2} (2m)^{3/2}, \quad (4.22)$$

откуда определим энергию Ферми

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (4.23)$$

Функция распределения $f(E)$ очень слабо зависит от температуры. Ее вид при $T \neq 0K$ представлен на рис. 4.3. Спад зависимости от интервале энергий порядка kT с температурой, тем более полого



единицы до нуля происходит в узком центре в точке E_F . Чем выше идет данный участок кривой.

Из выражения (4.3) следует, что при $E = E_F$ для любой температуры, отличной от абсолютного нуля ($T \neq 0K$), функция распределения $f(E) = \frac{1}{2}$, т.е. вероятность заполнения уровня Ферми равна 50 %.

Тепловому возбуждению подвержено небольшое количество электронов с $E < E_F$, располагающихся на уровнях, прилегающих к уровню Ферми и в результате переходящих на уровни с $E > E_F$.

Теоретически можно показать, что число таких электронов составляет при комнатной температуре менее 1 % от общего числа свободных электронов.

Расчеты показывают, что и энергия Ферми слабо зависит от температуры. Поэтому в большинстве случаев для описания электронного газа металлов принимают ее значение при абсолютном нуле.

Следует помнить, что электронный газ в металлах в реальных условиях всегда является вырожденным и должен описываться квантовой статистикой Ферми-Дирака. Для снятия вырождения необходима температура $\sim 10^5$ K, при которой металл в конденсированном состоянии существовать не может.

4.3 МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ МЕТАЛЛОВ ЗОММЕРФЕЛЬДА

А. Зоммерфельдом в 1928 году на основе квантовой статистики Ферми-Дирака была разработана квантовая электронная теория проводимости металлов, в которой, в частности, использовались выражения (4.3) функции распределения и (4.17) плотности состояний.

Выше было отмечено, что тепловому возбуждению подвергается только малая часть свободных электронов с энергией, близкой к энергии Ферми. Зоммерфельдом это положение было отнесено и к электронам, ответственным за электропроводность. В остальном использовались те же основные положения теории Друде-Лоренца и рассматривался электронный перенос, аналогичный проанализированному Лоренцем (см. п.3.4).

В результате применения квантовой статистики Зоммерфельд получил выражение для электропроводности

$$\sigma = \frac{n_0 e^2 \bar{\lambda}_F}{m v_F}, \quad (4.24)$$

где $\bar{\lambda}_F$ и v_F — средняя длина свободного пробега электронов, обладающих энергией Ферми и их скорость соответственно.

Формула (4.24) аналогична формуле (3.10) классической теории Друде, но по смыслу существенно от нее отличается. В знаменателе вместо средней скорости теплового движения электронов стоит не зависящая от температуры скорость электронов, обладающих энергией Ферми

$$v_F = (2E_F / m)^{1/2} \sim 10^6 \text{ м/с}. \quad (4.25)$$

Величина этой скорости весьма велика, что совершенно не объяснимо с позиций классической теории, согласно которой при абсолютном нуле температуры всякое движение замирает.

Данный факт подчеркивает, что энергия Ферми имеет чисто квантовый характер и не является энергией теплового движения электронов.

В формуле (4.24) величиной, зависящей от температуры, оказывается только средняя длина свободного пробега электронов $\bar{\lambda}_F$. И для получения реальных значений электропроводности необходимо, как и в теории Друде, предположить, что ее величина составляет сотни межатомных расстояний в кристаллической решетке.

Температурную зависимость и большое значение $\bar{\lambda}_F$ и, соответственно, σ можно объяснить, предположив что электроны не рассеиваются неподвижным упорядоченным распределением ионов решетки металла.

Тогда $\bar{\lambda}_F$ будет обусловлена рассеянием на дефектах кристаллического строения (атомах примесей, междоузельных атомах и вакансиях, дислокациях, границах зерен и двойниковых прослоек и т.д.), не зависящем от температуры, и рассеянием на фононах, зависящем от температуры.

Первый из указанных факторов определяет постоянное значение проводимости (удельного сопротивления) при низких температурах (менее 20 K). С повышением же температуры возрастает роль фононного рассеяния, уменьшающего $\bar{\lambda}_F$ и σ .

Правомерность отказа от рассеяния электронов на неподвижных ионах доказывается в квантовой физике при учете волновых свойств электронов. Их движение в периодическом поле кристаллической решетки рассматривается как процесс распространения электронных волн де Бройля.

ЛЕКЦИЯ 5

5.1 Зонная теория твердого тела. Энергетические зоны в кристаллах. Движение электронов в периодическом поле. Функции Блоха

Зонная теория металлов является дальнейшим развитием квантовой теории проводимости и позволяет объяснить электрические свойства кристаллических материалов, зависящие от их внутреннего строения.

В рассмотренной ранее квантовой теории, предполагающей наличие свободных электронов, подчиняющихся статистике Ферми-Дирака, невозможно было объяснить появление этих свободных электронов. И к наиболее существенному ее недостатку следует отнести тот факт, что при рассмотрении движения электронов проводимости не учитывалась реальная периодическая структура металлов, определяемая их кристаллической решеткой, и наличие электрического поля, тоже периодического характера, создаваемого положительно заряженными ионами металла, находящимися в узлах решетки.

В зонной теории эти факторы учитываются и доказывается, что дискретные энергетические уровни электронов в отдельно взятых атомах при объединении их в кристаллическую решетку расщепляются на ряд близко лежащих подуровней, образующих энергетические зоны с разрешенными значениями энергии. Эти зоны разделяются зонами запрещенных значений энергии. Разрешенные зоны могут и перекрывать друг друга.

Для доказательства используются два способа – *приближения сильной и слабой связи*.

В первом из них принимается, что энергия связи электронов с атомами много больше их кинетической энергии движения в кристалле (сильная связь с атомом).

На рис. 5.1, *а* представлены расстояния друг от друга, кристаллической решетки. изображена в виде двух воронок-внутри которых показаны энергетических уровней

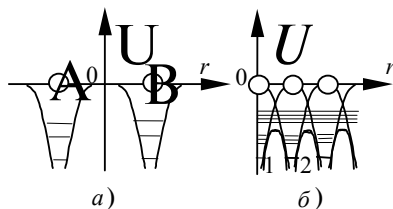


Рис. 5.1

Высота барьеров для уровнях, тоже разная. Барьеры между соседними атомами. Кроме того барьеры достаточно широки, чтобы мог наблюдаться эффект туннелирования электронов через них.

Если же расстояние между атомами уменьшить до значений порядка величины постоянной кристаллической решетки, то за счет взаимодействия между атомами происходит частичное наложение потенциальных кривых, отделяющих атомы друг от друга. При этом образуются новые потенциальные кривые типа 1 и 2 на рис. 5.1, *б*. На рисунке видно, что при этом происходит уменьшение высоты и толщины потенциальных барьеров.

Более тонким барьер оказывается для валентных электронов. Кроме того, на рис. 5.1 показано расщепление энергетических уровней электронов с образованием энергетических зон, о чем говорилось выше.

В результате энергетическая зона валентных электронов оказывается над потенциальным барьером, что говорит о полном их обобществлении в решетке. Они становятся свободными.

Внутренние же (более близкие к ядру) электронные уровни расщепляются меньше. Находящиеся в этих зонах электроны прочно связаны с ядром. Для них потенциальный барьер оказывается и выше и толще. Эти электроны в образовании проводимости практически не участвуют. Хотя некоторая вероятность их туннелирования сквозь барьер имеется.

два изолированных атома A и B на значительно превышающем период Энергетическая схема атомов кообразных потенциальных ям, несколько из существующих электронов.

электронов, находящихся на разных препятствуют обмену электронов

В приближении слабой связи считают, что энергия взаимодействия электронов с атомами решетки значительно меньше их кинетической энергии. Тогда можно считать электроны свободными и использовать для их описания уравнение Шредингера, но с учетом периодичности поля кристаллической решетки.

В данном случае также обнаруживается зонная энергетическая структура, которая следует непосредственно из решения уравнения Шредингера.

Для электрона, движущегося в периодическом силовом поле, данное уравнение, в случае одномерного движения вдоль оси x , запишется в виде

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0, \quad (5.1)$$

где $U(x)$ – потенциальная энергия электрона, периодически изменяющаяся в соответствии с периодом кристаллической решетки.

Соответственно периодически изменяется и амплитуда волновой функции $\psi(x)$.

Блох доказал, что решение уравнения Шредингера в данном случае имеет вид

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx}, \quad (5.2)$$

где $u(x)$ – функция с периодичностью потенциала; k – волновой вектор $\left(k = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$.

Решения вида (5.2) называются *функциями Блоха*.

Дальнейший теоретический анализ позволил получить так называемые *дисперсионные соотношения* для свободных электронов и электронов, движущихся в периодическом поле. Это зависимости энергии электронов от импульса $E(p)$ или от волнового вектора $E(k)$.

На рис. 5.2, а графически показана дисперсионная кривая для свободных электронов. Энергия в данном случае изменяется квазинепрерывно, кривая состоит из близко расположенных отдельных точек, на рисунке сливающихся друг с другом.

На рис. 5.2, б дисперсионная зависимость движения электрона в периодическом поле, на которой явно прослеживается зонная энергетическая структура. Сплошными линиями показаны зоны квазинепрерывного изменения энергии, т.е. разрешенные зоны, чередующиеся с которыми не может быть называемые *зоны Бриллюэна* – это области k -пространства, в которых энергия электронов изменяется квазинепрерывно. На границах этих зон энергия испытывает разрыв. На рисунке представлена одномерная картина. В трехмерном же пространстве зоны Бриллюэна ограничены замкнутыми многогранными поверхностями, вложенными друг в друга.

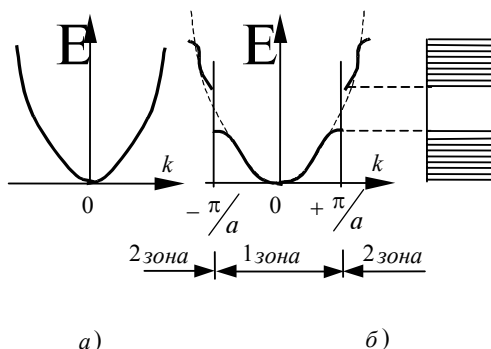


Рис. 5.2

Здесь же показаны и так называемые *зоны Бриллюэна* – это области k -пространства, в которых энергия электронов изменяется квазинепрерывно. На границах этих зон энергия испытывает разрыв. На рисунке представлена одномерная картина. В трехмерном же пространстве зоны Бриллюэна ограничены замкнутыми многогранными поверхностями, вложенными друг в друга.

Важной характеристикой металла является также *поверхность Ферми* – изоэнергетическая поверхность в k - или p -пространстве с энергией, равной энергии Ферми. Для свободных электронов – это сферическая поверхность, для электронов проводимости металлов – имеет сложную форму.

Оба приближения сильной и слабой связи электронов со своими атомами дают аналогичные результаты. В обоих случаях возникают разрешенные и запрещенные энергетические зоны. Различие только в их ширине. В модели сильной связи – узкие разрешенные зоны и широкие запрещенные. Во второй модели – наоборот.

В реальных кристаллах можно обнаружить как данные предельные случаи, так и промежуточные.

5.2 Заполнение зон электронами.

Металлы, диэлектрики и полупроводники

Одним из важнейших достижений зонной теории явилось объяснение различий электрических свойств твердых тел.

Более ранние теории пытались объяснить наличие и отсутствие электропроводности высокой или низкой подвижностью электронов. Однако в реальных диэлектриках могут существовать электроны с

достаточно высокой подвижностью, что подтверждается, например, наблюдаемым экспериментально явлением фотопроводимости, когда под действием света многие диэлектрики приобретают значительную электропроводность.

Зонная теория объясняет наличие твердых тел, проводящих электрический ток (проводники) и его не проводящих (диэлектрики), различием в ширине запрещенных зон и характером заполнения электронами разрешенных энергетических зон.



. 5.3

На рис. 5.3 представлены схемы энергетических зон металлов (проводников), диэлектриков (изоляторов) и полупроводников.

Валентной называют зону, возникшую из уровня, на котором находятся валентные электроны в основном состоянии изолированного атома.

Рассмотрим все три схемы, приведенные на рис. 5.3.

В случае а) электроны заполняют валентную зону не полностью, что характерно для *металлов*. Электронам необходимо сообщить небольшую энергию (порядка $10^{-23} \dots 10^{-22}$ эВ), чтобы перевести их на более высокие свободные уровни в той же самой валентной зоне.

Для этого достаточно энергии теплового движения при температуре немного выше абсолютного нуля, или энергии даже слабого электрического поля. В результате в кристалле появляется направленное движение электронов, т.е. металлы теоретически должны быть хорошими проводниками, что и наблюдается на самом деле.

У металлов валентная зона одновременно является и зоной проводимости.

В случаях б) и в) уровни валентной зоны полностью заняты электронами, а сама зона отделена от выше расположенной свободной энергетической зоны запрещенным интервалом энергий (запрещенная зона) величиной ΔE (ширина запрещенной зоны).

По величине ширины запрещенной зоны такие кристаллы делят на *диэлектрики* с относительно большим значением $\Delta E > 3$ эВ и полупроводники, у которых сравнительно узкая запрещенная зона с $\Delta E < 1$ эВ.

У диэлектриков внешнее электрическое поле не может сообщить электронам энергию, достаточную для перехода в свободную зону. Скорее происходит пробой или плавление кристалла.

Ширина запрещенной зоны в полупроводниках позволяет электрическому полю перебросить электроны в свободную зону, которая является в этом случае и зоной проводимости. Электроны ведут себя в ней подобно электронам проводимости в валентной зоне металлов.

В связи с широким применением полупроводниковых материалов в науке и технике рассмотрим их электрические свойства несколько подробнее.

5.3 Собственная и примесная проводимость полупроводников

Собственная проводимость возникает при переходе электронов с верхних уровней валентной зоны в зону проводимости. Для этого необходимо затратить энергию не менее ширины запрещенной зоны (*энергия активации*).

Собственная проводимость носит смешанный электронно-дырочный характер. Ушедший со своего места электрон оставляет вместо себя «дырку», эквивалентную положительному заряду. Ее может занять другой электрон, тогда «дырка» сместится.

Такой вид проводимости существует у полупроводников, свободных от примесей (химически чистые германий, кремний, теллур, селен и др.).

В этом случае при абсолютном нуле температуры над полностью занятой электронами валентной зоной расположена свободная зона проводимости. Электроны на ее уровни переходить не могут, и полупроводник, в смысле проводимости, эквивалентен диэлектрику.

Увеличение температуры обеспечивает электронам энергию, необходимую для такого перехода. В зоне проводимости появляются электроны, а в валентной зоне – «дырки». И, чем уже запрещенная зона,

тем больше электронов оказывается в зоне проводимости при одной и той же температуре. Например, в германии с шириной запрещенной зоны $\Delta E = 0,66$ эВ уже при комнатной температуре их концентрация составляет $\approx 10^{19} \text{ м}^{-3}$. В то время, как у алмаза с $\Delta E = 5,2$ эВ она $\approx 10^4 \text{ м}^{-3}$.

Если приложить внешнее электрическое поле, то возникает направленное движение электронов в зонах проводимости и валентной, обеспечивающее возникновение электрического тока.

Однако при указанной концентрации носителей заряда удельные сопротивления германия и алмаза составят соответственно 0,48 и 10^4 Ом·м. Первый проводит ток, а второй является фактически диэлектриком. Но при повышении температуры до 600 К проводимость алмаза резко возрастает и становится сравнимой с проводимостью германия при комнатной температуре.

Здесь, на примере алмаза, мы подошли к отмеченной ранее условности разделения твердых тел на полупроводники и диэлектрики. При комнатной температуре – это диэлектрик, при повышенной – полупроводник.

Следует отметить, что проводимость в полупроводниках может возбуждать не только повышение температуры, но и световое, ионизирующее и другие виды излучений.

Примесная проводимость обусловлена наличием в кристаллах примесных атомов. Практически от них при производстве полупроводниковых материалов невозможно избавиться полностью. Примеси сильно влияют на свойства полупроводника. Они создают дополнительные энергетические уровни в разрешенных и запрещенных зонах и тем самым стимулируют дополнительные переходы носителей заряда.

Человек научился управлять свойствами полупроводников с помощью тех или иных примесей, добавляя их в необходимом количестве, или, достигая высокой степени очистки вещества. Развитие, например, микроэлектроники, таким образом, тесно связано и с достижениями химической промышленности.

Наибольшее практическое применение имеют два типа примесей – с большей и меньшей валентностью по сравнению с самим полупроводником.

Если к четырехвалентному германию добавить примесь пятивалентного элемента (фосфор, сурьма, мышьяк), то четыре электрона примеси смогут создать связи с атомами германия, а один останется свободным, его и легче перевести в свободную зону проводимости.

Уровни примесных электронов расположены в запрещенной зоне вблизи дна зоны проводимости (рис. 5.4, а). Это *донорные уровни*, которые поставляют электроны в зону проводимости. Возникает *электронная примесная проводимость (n-типа)*. А дырки остаются на неподвижных атомах примеси и

в создании электропроводности участия не принимают.

Если же к элементу (бор, алюминий, индий), то последний будет заимствовать один электрон у атома германия, где возникнет «дырка». Она заполнится следующим электроном от германия, а сама сместится. Другими словами, незаполненные уровни атомов примеси могут заселяться электронами полупроводника из валентной зоны. Такие уровни называются *акцепторными* и располагаются в запрещенной зоне вблизи от верха валентной зоны (рис. 5.4, б).

СВОБОДНАЯ ЗОНА

АКЦЕПТОРНЫЙ УРОВЕНЬ ДОНОРОВ

ВОЛЕНТИННАЯ ЗОНА

5.4

В результате электроны германия связываются с атомами примеси и в создании электропроводности участия не принимают. Носителями заряда в данном случае являются дырки. Возникает *дырочная проводимость (p-типа)*.

5.4 ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Фотопроводимостью называется явление изменения электропроводности полупроводника под действием падающего на него света.

Удельная электрическая проводимость полупроводника складывается из двух составляющих:

$$\sigma = \sigma_{\text{св}} + \sigma_{\text{т}}, \quad (5.3)$$

где $\sigma_{\text{св}}$ – проводимость, вызванная действием освещения; $\sigma_{\text{т}}$ – темновая удельная проводимость (основная проводимость, возникающая при тепловом возбуждении носителей заряда без освещения).

Под действием света, падающего на полупроводник, в последнем возникает явление внутреннего фотоэффекта, который и обуславливает появление фотопроводимости.

Кванты света, поглощаясь веществом вызывают появление *избыточных носителей заряда*. Если энергия кванта $h\nu$ равна или больше ширины запрещенной зоны ΔE , то электроны переходят из валентной зоны в зону проводимости. Эти электроны и возникающие на месте их ухода в валентной зоне «дырки» являются свободными и увеличивают проводимость полупроводника.

Однако возбужденный электрон может оставаться связанным с «дыркой», образуя пару, называемую *экситоном*. Их возникновение в проводнике не увеличивает количество носителей заряда, так как экситоны электрически нейтральны. Но при столкновениях с фононами и другими несовершенствами кристалла они способны либо аннигилировать, либо разорваться на два носителя заряда – электрон и «дырку». В последнем случае возникает фотопроводимость.

Если в полупроводнике имеются примеси, то световые кванты способны возбуждать их электроны, переводя последние либо с донорных уровней в зону проводимости, либо из валентной зоны на акцепторные уровни. Энергия возбуждающего кванта $h\nu$ при этом должна быть больше или равна энергии активации атомов примеси $\Delta E_{\text{п}}$.

В обобщенной форме для собственной и примесной проводимости приведенные выше условия можно записать как

$$h\nu \geq \Delta E, \quad (5.4)$$

откуда, аналогично явлению внешнего фотоэффекта, следует наличие *красной границы внутреннего фотоэффекта*:

$$\nu_{\text{кр}} = \frac{\Delta E}{h}, \quad (5.5)$$

где $\nu_{\text{кр}}$ – минимальная частота падающего света, при которой еще возможен внутренний фотоэффект.

Данное условие можно записать и для максимальной длины волны:

$$\lambda_{\text{кр}} = \frac{ch}{\Delta E}. \quad (5.6)$$

Явление фотопроводимости используется в фотосопротивлениях (фоторезисторах), изготовленных из различных полупроводниковых материалов. Их преимуществом по сравнению с вакуумными фотоэлементами, действие которых основано на явлении внешнего фотоэффекта, является высокая *световая чувствительность* $\frac{dI}{d\Phi}$ (изменение силы тока при изменении светового потока на единицу). Так, у селено-кадмиевых фоторезисторов она в 10^5 раз выше.

Недостаток фоторезисторов – их инерционность.

3 ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

ЛЕКЦИЯ 6

6.1 ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИЭЛЕКТРИКОВ

Как уже отмечалось в предыдущем разделе, к диэлектрикам относятся вещества, практически не проводящие электрический ток, т.е. обладающие весьма большим удельным сопротивлением.

Диэлектриками могут быть вещества как в твердом (кристаллические и аморфные), так и в жидком и газообразном состоянии.

Своим названием они обязаны М. Фарадею, обозначившему таким образом среды, через которые способны проникать электрические поля (от греческого слова *dia* – через и английского *electric* – электрический).

В идеальном диэлектрике нет свободных зарядов, способных перемещаться по его объему. Атомы и молекулы диэлектрика содержат одинаковые количества положительных и отрицательных микрочарядов и в целом нейтральны.

Оценим напряженность электростатического поля, создаваемого внутри атома таким элементарным зарядом. Его величина $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл, тогда при размерах атома $r \approx 10^{-10}$ м получим численное значение напряженности

$$E = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r^2} \approx 1,5 \cdot 10^{11} \text{ В/м.}$$

В технике достигаются поля напряженностью лишь порядка 10^7 В/м. В подобных полях атомы и молекулы диэлектрика оказываются весьма устойчивыми.

Тем не менее, внешние электрические поля оказывают существенное воздействие на диэлектрик, вызывая *поляризацию* его атомов, молекул или ионов.

Под *поляризацией* диэлектриков понимают такое изменение состояния вещества, при котором любой элемент его объема во внешнем электрическом поле приобретает некоторый суммарный *дипольный момент*.

За меру поляризации принимают вектор поляризации

$$\vec{P} = \frac{\sum_{i=1}^n \vec{p}_i}{V}, \quad (6.1)$$

т.е. суммарный дипольный момент единицы объема.

В выражении (6.1)

$$\vec{p}_i = q_i \vec{l}_i \quad (6.2)$$

вектор дипольного момента отдельной молекулы (здесь $\vec{l}$ – плечо диполя), а V – объем диэлектрика.

Величина вектора поляризации $\vec{P}$ для большинства диэлектриков в слабых полях пропорциональна напряженности $\vec{E}$ электрического поля:

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}, \quad (6.3)$$

где ϵ_0 – электрическая постоянная; χ_e – диэлектрическая восприимчивость.

Рассмотрение диэлектрических и магнитных свойств веществ основывается на использовании *теории Максвелла* для единого электромагнитного поля.

Приведем полную систему *уравнений Максвелла* в дифференциальной форме:

$$\text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \text{div } \vec{D} = \rho, \quad (6.4)$$

$$\text{rot } \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad \text{div } \vec{B} = 0. \quad (6.5)$$

Эта система дополняется уравнениями, характеризующими электрические и магнитные свойства среды:

$$\vec{D} = \epsilon \epsilon_0 \vec{E}; \quad \vec{B} = \mu \mu_0 \vec{H}; \quad \vec{j} = \sigma \vec{E}. \quad (6.6)$$

В уравнениях (6.4) – (6.6) $\vec{E}$ и $\vec{D}$ – векторы напряженности и индукции (электрического смещения) электрического поля соответственно; $\vec{H}$ и $\vec{B}$ – векторы напряженности и индукции магнитного поля; ϵ_0 и μ_0 – электрическая и магнитная постоянные; ϵ и μ – относительные диэлектрическая и магнитная проницаемости среды; $\vec{j}$ – вектор плотности тока; σ – удельная проводимость.

Напомним, что в векторном анализе *ротором* или *вихрем* некоторого вектора $\vec{a}$ (обозначается как $\text{rot}_n \vec{a}$) называется предел отношения циркуляции вектора $\vec{a}$ вдоль контура l , ограничивающего площадку ΔS , к величине ее площади ΔS при $\Delta S \rightarrow 0$, т.е.

$$\text{rot}_n \vec{a} = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta S} \oint_l \vec{a}_l d\vec{l}. \quad (6.7)$$

Дивергенцией вектора $\vec{a}$ в точке M поля (обозначается как $\text{div } \vec{a}$) называется предел отношения потока вектора $\vec{a}$ сквозь замкнутую поверхность S , охватывающую точку M , к объему ΔV части поля, ограниченной поверхностью S при $\Delta V \rightarrow 0$, т.е.

$$\text{div } \vec{a} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \oint_S \vec{a} d\vec{S}. \quad (6.8)$$

В настоящем разделе рассматриваются только диэлектрические свойства. Магнитные свойства твердых тел будут описаны в дальнейшем. В этом случае уравнениями Максвелла можно воспользоваться, полагая, что у рассматриваемого вещества магнитная восприимчивость $\chi_m \ll 1$.

Кроме того, если электрическое и магнитное поля не меняются с течением времени (стационарны), то их производные по времени

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = 0, \text{ и } \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0. \quad (6.9)$$

Тогда распределение объемной плотности заряда $\rho(r)$ и напряженности электрического поля $\vec{E}$ в диэлектрике можно найти из системы уравнений Максвелла, преобразованной для электростатического поля в виде

$$\text{rot } \vec{E} = 0, \text{ div } \vec{D} = \rho. \quad (6.10)$$

В макроскопической теории диэлектрики представляются как сплошные среды. Для изотропной диэлектрической среды приведем известное из курса общей физики соотношение между векторами $\vec{D}$ и $\vec{E}$:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 (1 + \chi_e) \vec{E} = \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E}. \quad (6.11)$$

Из выражения (6.11) очевидно, что

$$\varepsilon = 1 + \chi_e. \quad (6.12)$$

Величины ε и χ_e — это основные характеристики электрических свойств диэлектриков.

Если среда *анизотропна*, то векторы $\vec{P}$ и $\vec{E}$ не параллельны между собой, а диэлектрические проницаемость и восприимчивость являются тензорами.

6.2 МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

В микроскопической теории диэлектриков основной задачей является расчет диэлектрической проницаемости (макроскопической характеристики) в зависимости от микроструктуры вещества.

6.2.1 Локальное электрическое поле

Диэлектрические свойства связаны не с отдельными зарядами, а с электрическими диполями. Механизмы поляризации мы обсудим несколько позже, а сейчас лишь укажем, что существуют молекулы, изначально обладающие постоянным дипольным моментом, и молекулы, его не имеющие. В последнем случае дипольные моменты приобретаются молекулами под действием электрического поля, т.е. индуцируются (наводятся).

Пусть пластина диэлектрика помещена между разноименно заряженными ($+Q$ и $-Q$) обкладками плоского конденсатора (рис. 6.1, а), внутри которого до внесения диэлектрика установилось электрическое поле напряженностью $\vec{E}_0$. Под действием этого поля диполи выстраиваются в порядке, показанном на рисунке. Тогда верхняя поверхность пластины диэлектрика заряжается отрицательно, а нижняя — положительно. В результате внутри диэлектрика создается собственное электрическое поле $\vec{E}'$, обратное внешнему полю $\vec{E}_0$, т.е. в диэлектрике устанавливается результирующее поле

$$\vec{E} = \vec{E}_0 - \vec{E}'. \quad (6.13)$$

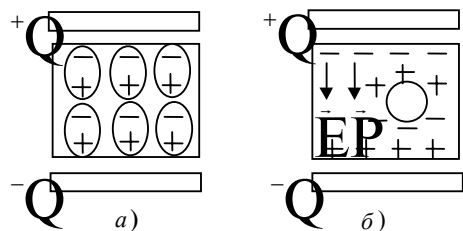


Рис. 6.1

Однако, вследствие дальнего действия дипольных взаимодействий, на отдельный атом действует отличное от $\vec{E}$ некоторое *локальное поле* $\vec{E}_{\text{лок}}$, метод расчета которого предложен Лоренцем. Суть расчета заключается в том, что вокруг рассматриваемого атома проводится виртуальная замкнутая поверхность (рис. 6.1, б). Диполи, оказавшиеся внутри этой поверхности, дискретно влияют на формирование локального поля в центре полости, а весь объем диэлектрика за ее пределами — континуально.

Согласно Лоренцу величина локального поля определяется как

$$\vec{E}_{\text{лок}} = \vec{E} + \vec{E}_{\text{пов}} + \vec{E}_{\text{дип}}, \quad (6.14)$$

где $\vec{E}_{\text{пов}}$ – напряженность поля, созданного в центре выделенной полости поверхностными зарядами, наведенными на ее поверхности; $\vec{E}_{\text{дип}}$ – напряженность поля в центре полости от расположенных внутри нее отдельных диполей.

В случае сферической полости теория дает следующее выражение для $\vec{E}_{\text{пов}}$ в зависимости от поляризованности:

$$\vec{E}_{\text{пов}} = \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}. \quad (6.15)$$

При выборе полости именно сферической формы в кубической решетке внутренние диполи не вносят вклада в создание локального поля в ее центре, т.е.

$$\vec{E}_{\text{дип}} = 0. \quad (6.16)$$

Тогда для кубических кристаллов в соответствии с выражениями (6.14) – (6.16)

$$\vec{E}_{\text{лок}} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}. \quad (6.17)$$

Далее выразим из соотношения (6.11) вектор поляризации

$$\vec{P} = \epsilon_0(\epsilon - 1)\vec{E} \quad (6.18)$$

и, подставив полученное значение в (6.17), получим в окончательном виде локальное поле в атомном узле кубической кристаллической решетки

$$\vec{E}_{\text{лок}} = \left(\frac{\epsilon + 2}{3} \right) \vec{E}. \quad (6.19)$$

Для анизотропных тел расчет локального поля значительно усложняется.

6.2.2 Соотношение Клаузиуса-Мосотти

Представление о локальном поле, поляризующем отдельные атомы диэлектрика, не учитывает обратной связи между наведенным им дипольным моментом и самим полем. То есть является не вполне корректным. Однако данное приближение позволяет получить достаточно реальное соотношение между поляризуемостью и диэлектрической проницаемостью, что и является основной задачей микроскопической теории диэлектриков.

Выразим дипольный момент атома $\vec{p}$ через его поляризуемость α , являющуюся коэффициентом пропорциональности между дипольным моментом атома и напряженностью действующего на него электрического поля (в рассматриваемом случае это и есть локальное поле):

$$\vec{p} = \alpha \vec{E}_{\text{лок}}. \quad (6.20)$$

Определим полную поляризуемость единицы объема, с учетом (6.20), как

$$\vec{P} = n\vec{p} = n\alpha \vec{E}_{\text{лок}}, \quad (6.21)$$

где n – число атомов в единице объема.

Подставим в выражение (6.21) значение $\vec{E}_{\text{лок}}$ по (6.19):

$$\vec{P} = n\alpha \left(\frac{\epsilon + 2}{3} \right) \vec{E}. \quad (6.22)$$

Записав это уравнение в виде

$$n\alpha = 3 \frac{\vec{P}}{\vec{E}} \frac{1}{(\epsilon + 2)} \quad (6.23)$$

и подставив в него полученное из (6.18) отношение

$$\frac{\vec{P}}{\vec{E}} = \epsilon_0(\epsilon - 1), \quad (6.24)$$

окончательно выразим *соотношение Клаузиуса-Мосотти*, связывающее микроскопическое понятие атомной поляризации с макроскопической диэлектрической проницаемостью:

$$n\alpha = 3\epsilon_0 \left(\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \right). \quad (6.25)$$

Для анизотропных тел эта взаимосвязь имеет более сложный характер.

Следует отметить, что в переменных электрических полях поляризация не успевает следовать за изменением поля, так как смещения зарядов инерционны. В результате между колебаниями векторов $\vec{P}$ и $\vec{E}$ появляется разность фаз.

Диэлектрическая проницаемость в этом случае зависит от частоты колебаний ω и является комплексной величиной:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega). \quad (6.26)$$

Более подробный анализ зависимости (6.26) выходит за рамки нашего курса.

6.3 МЕХАНИЗМЫ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ДИЭЛЕКТРИКАХ

В зависимости от строения атомов или молекул диэлектрика выделяют три механизма поляризации: дипольная ориентация, электронная поляризуемость и ионная поляризуемость. Рассмотрим данные механизмы на атомарном уровне.

6.3.1 Дипольная ориентация

Как было отмечено выше, существуют молекулы, изначально имеющие постоянный дипольный момент. Это ассиметричные молекулы, у которых центры распределения (тяжести) положительных и отрицательных зарядов не совпадают, т.е. они эквивалентны электрическому диполю.

Из-за теплового движения дипольные моменты молекул в обычном состоянии ориентированы хаотично.

В электрическом поле такие под действием возникающего моменты ориентируются по полю. *дипольной ориентацией или*

Описанная ситуация скорее молекул. В кристаллическом теле и свободного их поворота быть не может. В кристаллическом теле и свободного их поворота быть не может. В кристаллическом теле и свободного их поворота быть не может.

В процессе поляризации противоборствующих процесса – ориентация и разориентация за счет хаотического теплового движения и столкновения молекул между собой.

На рис. 6.2 в объеме диэлектрика выделена сфера радиуса R и построены два конуса с образующими, составляющими с вектором электрического поля $\vec{E}$ углы Θ и $\Theta + d\Theta$. Эти конусы вырезают на сфере кольцо шириной $Rd\Theta$ и площадью

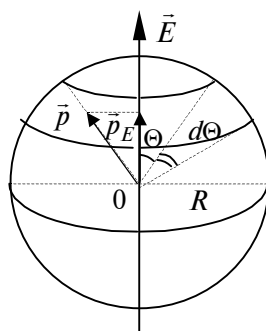


Рис.6.2

Рис. 6.2

дипольные молекулы поворачиваются вращающего момента пары сил, и их Этот процесс принято называть *параэлектрической восприимчивостью*. характерна для газов и отдельных молекулы взаимосвязаны между собой жет. Поворот происходит положений к другим. Однако широко используется в описании явлений.

полярных диэлектриков происходят два

$$dS = 2\pi R \sin \Theta R d\Theta = 2\pi R^2 \sin \Theta d\Theta. \quad (6.27)$$

При отсутствии электрического поля направления всех векторов поляризации отдельных молекул $\vec{p}$ равновероятны. Тогда число молекул dn в единице объема, чьи векторы поляризации оканчиваются в пределах выделенного кольца, будет пропорционально площади этого кольца:

$$dn = C \sin \Theta d\Theta, \quad (6.28)$$

где C – некоторая постоянная, в которую вошло и выражение $2\pi R^2$ из (6.27).

Под действием электрического поля (в общем случае любого силового поля) распределение (6.28) изменяется в соответствии с *теоремой Больцмана* из классической статистики в $\exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$ раз, где U – потенциальная энергия молекулы в данном поле.

В соответствии с известным из электростатики выражением, потенциальная энергия диполя в электрическом поле равна

$$U = -pE \cos \Theta. \quad (6.29)$$

Тогда распределение (6.28), с учетом теоремы Больцмана и формулы (6.29), приобретает вид

Электронный газ должен обладать теплоемкостью $\frac{3}{2}R$, добавляя это значение к теплоемкости решетки $3R$, получим $\frac{9}{2}R$, т.е., согласно классической теории, теплоемкость металла, должна быть в 1,5 раза больше, чем у диэлектриков, в которых нет свободных электронов. На опыте же они практически не отличаются.

Средняя длина свободного пробега по электронной теории $\bar{\lambda} \approx 10^{-10}$ м. Для того, чтобы по формулам электронной теории получить значение проводимости, близкое к реальному, $\bar{\lambda}$ должна быть в сотни раз больше. То есть приходится предполагать, что электрон проходит без соударений с ионами решетки сотни межузельных расстояний. Это непонятно в рамках классической теории.

Классическая электронная теория проводимости металлов не свободна от недостатков. Ее выводы расходятся с рядом экспериментальных наблюдений. Одной их причин расхождений является то, что движение электронов в металлах подчиняется не законам классической механики, а более сложным законам квантовой механики, на основе которой построена современная квантовая теория проводимости.

В классической теории не учитывается взаимодействие электронов друг с другом, а их взаимодействие с решеткой металла описывается как кратковременное соударение. Но при очень низких температурах взаимодействие между электронами может играть решающую роль.

Однако классическая электронная теория не утратила своего значения. Она позволяет во многих случаях быстро найти правильные качественные результаты в наглядной форме. Расхождения между теорией и опытом уменьшаются при снижении концентрации электронов проводимости и увеличении температуры. В ряде случаев, когда концентрация электронов мала (электронные явления в газах), электронная теория применима и количественно. В металлах же с большой концентрацией электронов различия более существенны.

ЛЕКЦИЯ 4

4.1 Квантовая теория свободных электронов.

Вырожденный и невырожденный электронный газ

Совокупность свободных электронов в металлах (электронный газ) представляет собой коллектив частиц, поведение которого качественно отличается от поведения отдельных частиц и описывается статистическими закономерностями.

По характеру поведения в коллективе микрочастицы делятся на *фермионы* и *бозоны*.

Фермионы – это частицы с полуцелым (в единицах $\hbar$, где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h – постоянная Планка) спином: $\frac{\hbar}{2}$; $\frac{3}{2}\hbar$ и т.д. К ним относятся электроны, протоны, нейтроны и др.

Бозоны имеют целочисленный спин: 0 ; $\hbar$; $2\hbar$ и т.д.

Фермионы подчиняются принципу Паули, согласно которому в одном и том же квантовом состоянии не может находиться более одного однотипного фермиона, т.е. эти частицы в коллективе являются «индивидуалистами», стремятся к «уединению».

Бозоны, наоборот, стремятся к объединению в одном и том же состоянии.

Пусть на N частиц приходится G состояний, которые может занимать отдельная частица. Тогда вероятность встречи частиц в одном состоянии будет мала, если

$$\frac{N}{G} \ll 1, \quad (4.1)$$

т.е. число свободных состояний гораздо больше числа самих частиц:

$$G \gg N.$$

В данном случае каждая частица имеет «полную свободу» выбора состояния, и отличить фермионы от бозонов практически невозможно.

При условии

$$\frac{N}{G} \approx 1 \quad (4.2)$$

(т.е. $N \approx G$) проблема выбора появляется, и проявляется специфика частиц. Такие коллективы называют *вырожденными*. Они могут возникать в квантовых объектах, для которых количество состояний G конечно в связи с дискретным характером изменения параметров состояния.

Параметры состояния классических объектов изменяются непрерывно, и для них число состояний G бесконечно велико. Здесь нет проблемы выбора. Это *невырожденные* коллективы.

Однако и квантовые системы могут быть невырожденными при соблюдении условия (4.1).

Свойства невырожденных коллективов описывает классическая статистика Максвелла-Больцмана, с некоторыми положениями которой мы уже познакомились при описании классической электронной теории проводимости.

Свойства вырожденных коллективов изучает *квантовая статистика*. Для фермионов – это *статистика Ферми-Дирака*, для бозонов – *статистика Бозе-Эйнштейна*.

4.2 СТАТИСТИКА ФЕРМИ-ДИРАКА ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

4.2.1 Функция распределения и полная статистическая функция распределения

Электроны проводимости в металле, являясь фермионами, подчиняются квантовой статистике Ферми-Дирака, в которой функция распределения

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \quad (4.3)$$

это среднее число частиц в квантовом состоянии с энергией E или вероятность заполнения данного квантового состояния. Для фермионов оба понятия совпадают, так как в соответствии с принципом Паули в одном и том же состоянии может быть только один фермион. Физический смысл величины E_F поясним несколько позже.

Коллектив же частиц как единое целое можно описать *полной статистической функцией распределения*

$$N(E)dE, \quad (4.4)$$

которая показывает число частиц с энергией в диапазоне от E до $E + dE$.

Полную функцию (4.4) можно получить, перемножив число частиц в квантовом состоянии (4.3) на количество возможных состояний.

Обозначим число квантовых состояний с энергией в интервале dE как

$$g(E)dE. \quad (4.5)$$

Тогда, перемножив выражения (4.3) и (4.5), запишем полную функцию статистического распределения в виде

$$N(E)dE = f(E)g(E)dE. \quad (4.6)$$

Для определения данной функции необходимо сначала найти функцию (4.5).

4.2.2 Фазовое пространство. Число и плотность состояний

В классической механике для описания состояний частиц используются координаты (x, y, z) и составляющие импульса по трем осям (p_x, p_y, p_z) .

Шестимерное пространство с осями координат x, y, z, p_x, p_y, p_z называется *фазовым*, а точки, определяемые данными шестью координатами, – *фазовыми точками*.

В фазовом пространстве определенному состоянию частиц соответствует уже не отдельная точка, а *ячейка элементарного объема*

$$\Delta\Gamma = \Delta\Gamma_v \Delta\Gamma_p = dx dy dz dp_x dp_y dp_z, \quad (4.7)$$

где $\Delta\Gamma_v = dx dy dz$ – элемент объема пространства координат; $\Delta\Gamma_p = dp_x dp_y dp_z$ – элемент объема пространства импульсов.

Для классических частиц, свойства которых меняются непрерывно, указанные объемы могут иметь любые значения, в том числе и бесконечно малые.

При рассмотрении совокупности (газа) свободных электронов, потенциальная энергия которых равна нулю, то есть не зависит от положения (координат) частицы во внешнем поле, пользуются трехмерным пространством импульсов (p), скоростей (v) или волновых векторов (k). Тогда электрон может быть определен вектором, проведенным из начала координат соответствующего пространства в определенную его точку или самой этой точкой. Здесь элемент

$$\Delta\Gamma_v = V, \quad (4.8)$$

где V – объем, в котором движутся частицы.

В случае, когда частица кроме корпускулярных свойств обладает и волновыми (как электрон и другие микрочастицы) свойствами, согласно принципу неопределенностей Гейзенберга, невозможно различить два состояния

$$(x, y, z, p_x, p_y, p_z) \text{ и } (x + dx, y + dy, z + dz, p_x + dp_x, p_y + dp_y, p_z + dp_z),$$

если произведение

$$dx dy dz dp_x dp_y dp_z < h^3. \quad (4.9)$$

В соответствии со сказанным выше в квантовой статистике элементарной в фазовом пространстве является ячейка объемом не менее h^3 . Тогда выражение (4.7) принимает вид

$$\Delta\Gamma = \Delta\Gamma_v \Delta\Gamma_p = h^3. \quad (4.10)$$

У свободных частиц, для которых выполняется равенство (4.8), элемент объема пространства импульсов, с учетом (4.10), равен

$$\Delta\Gamma_p = \frac{h^3}{V}. \quad (4.11)$$

Элементом объемов, определенных выражениями (4.10) и (4.11.), соответствуют определенные квантовые состояния. Деление же фазового пространства на ячейки объемом h^3 или $\frac{h^3}{V}$ называют его квантованием.

Для определения числа квантовых состояний с энергией в интервале dE , определяемого функцией (4.5), в пространстве импульсов выделим шаровой слой толщиной dp (рис. 4.1).

Объем слоя между сферами
ячеек в этом объеме

$$\frac{4\pi p^2 dp}{\Delta\Gamma_p} = \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp. \quad (4.12)$$

Каждой такой ячейке частицы. Тогда число состояний в ячейке, выраженному правой

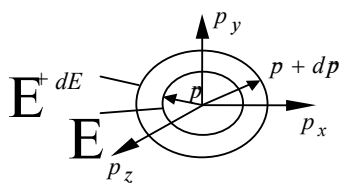
$$g(p)dp = \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp.$$

Однако для электронов каждой фазовой ячейке соответствует не одно состояние, а два, отличающиеся направлением спина. То есть для электронов число состояний в формуле (4.13) необходимо удвоить:

$$g(p)dp = \frac{8\pi V}{h^3} p^2 dp. \quad (4.14)$$

Полная энергия свободных частиц совпадает с кинетической, и частица со скоростью v и импульсом $p = mv$ имеет энергию

$$E = \frac{p^2}{2m} \text{ или } dE = \frac{p}{m} dp. \quad (4.15)$$



. 4.1

равен $4\pi p^2 dp$, а число элементарных

соответствует одно состояние
слое толщиной dp равно количеству
частью (4.12):

$$(4.13)$$

С учетом (4.15), из уравнения (4.14) получим число квантовых состояний электронов уже в интервале энергий dE :

$$g(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} E^{1/2} dE . \quad (4.16)$$

И, наконец, поделив обе части (4.16) на dE , получим число состояний электронов в единичном интервале энергий или *плотность состояний*

$$g(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} E^{1/2} . \quad (4.17)$$

4.2.3 Распределение электронов в металле. Энергия Ферми

В выражение (4.3), определяющее функцию распределения в квантовой статистике Ферми-Дирака, входит величина E_F , которую называют *уровнем или энергией Ферми*.

Рассмотрим свойства функции (4.3) при абсолютном нуле ($T = 0K$) :

$$f(E) = 1 , \quad (4.18)$$

если $E < E_F$ (так как в этом случае выражение в знаменателе $e^{\frac{E-E_F}{kT}} \rightarrow 0$).

$$f(E) = 0 , \quad (4.19)$$

если $E > E_F$ (так как $e^{\frac{E-E_F}{kT}} \rightarrow \infty$), т.е. при абсолютном нуле все состояния с энергией, меньшей энергии Ферми, заняты электронами (вероятность их заполнения равна единице), а состояния с энергией, большей энергии Ферми, – свободны (вероятность заполнения равна нулю). Отсюда следует, что энергия Ферми – это максимальная энергия, которую могут иметь электроны в металле при $T = 0K$.

На рис. 4.2, а приведен ступенчатый график функции распределения $f(E)$ при $T = 0K$. При значении энергии электрона, равном E_F , функция $f(E)$ скачком обращается в ноль.

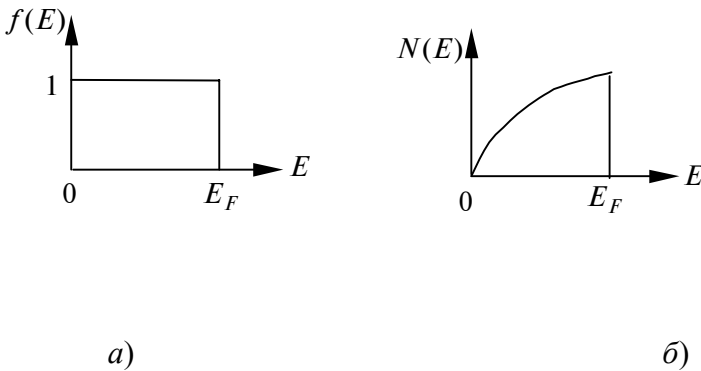


Рис. 4.2

Далее запишем полную функцию распределения Ферми-Дирака при абсолютном нуле, подставив в (4.6) выражения (4.18) и (4.16):

$$N(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} E^{1/2} dE . \quad (4.20)$$

График функции $N(E)$ представлен на рис. 4.2, б. Площади под графиками на рис. 4.2 соответствуют заполненным электронами энергетическим состояниям.

Проинтегрировав выражение (4.20) в пределах от 0 до E_F , получим полное число электронов N , заполняющих уровни до уровня Ферми, а так как других электронов на более высоких уровнях просто нет, то N будет равно и полному числу свободных электронов в металле

$$N = \frac{8\pi V}{3h^3} E_F^{3/2} (2m)^{3/2} . \quad (4.21)$$

Поделив обе части (4.21) на объем V , найдем концентрацию свободных электронов

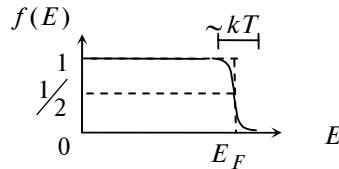
$$n = \frac{8\pi}{3h^3} E_F^{3/2} (2m)^{3/2}, \quad (4.22)$$

откуда определим энергию Ферми

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (4.23)$$

Функция распределения $f(E)$ очень слабо зависит от температуры. Ее вид при $T \neq 0K$ представлен на рис. 4.3. Спад зависимости от энергии до нуля происходит в узком интервале энергий порядка kT с центром в точке E_F . Чем выше температура, тем более полого идет данный участок кривой.

Из выражения (4.3) следует, что при $E = E_F$ для любой температуры, отличной от абсолютного нуля ($T \neq 0K$), функция распределения $f(E) = \frac{1}{2}$, т.е. вероятность заполнения уровня Ферми равна 50 %.



4.3

что при $E = E_F$ для любой абсолютного нуля ($T \neq 0K$), функция вероятность заполнения уровня

Тепловому возбуждению подвержено небольшое количество электронов с $E < E_F$, располагающихся на уровнях, прилегающих к уровню Ферми и в результате переходящих на уровни с $E > E_F$.

Теоретически можно показать, что число таких электронов составляет при комнатной температуре менее 1 % от общего числа свободных электронов.

Расчеты показывают, что и энергия Ферми слабо зависит от температуры. Поэтому в большинстве случаев для описания электронного газа металлов принимают ее значение при абсолютном нуле.

Следует помнить, что электронный газ в металлах в реальных условиях всегда является вырожденным и должен описываться квантовой статистикой Ферми-Дирака. Для снятия вырождения необходима температура $\sim 10^5$ К, при которой металл в конденсированном состоянии существовать не может.

4.3 МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ МЕТАЛЛОВ ЗОММЕРФЕЛЬДА

А. Зоммерфельдом в 1928 году на основе квантовой статистики Ферми-Дирака была разработана квантовая электронная теория проводимости металлов, в которой, в частности, использовались выражения (4.3) функции распределения и (4.17) плотности состояний.

Выше было отмечено, что тепловому возбуждению подвергается только малая часть свободных электронов с энергией, близкой к энергии Ферми. Зоммерфельдом это положение было отнесено и к электронам, ответственным за электропроводность. В остальном использовались те же основные положения теории Друде-Лоренца и рассматривался электронный перенос, аналогичный проанализированному Лоренцем (см. п.3.4).

В результате применения квантовой статистики Зоммерфельд получил выражение для электропроводности

$$\sigma = \frac{n_0 e^2 \bar{\lambda}_F}{m v_F}, \quad (4.24)$$

где $\bar{\lambda}_F$ и v_F — средняя длина свободного пробега электронов, обладающих энергией Ферми и их скорость соответственно.

Формула (4.24) аналогична формуле (3.10) классической теории Друде, но по смыслу существенно от нее отличается. В знаменателе вместо средней скорости теплового движения электронов стоит не зависящая от температуры скорость электронов, обладающих энергией Ферми

$$v_F = (2E_F / m)^{1/2} \sim 10^6 \text{ м/с}. \quad (4.25)$$

Величина этой скорости весьма велика, что совершенно не объяснимо с позиций классической теории, согласно которой при абсолютном нуле температуры всякое движение замирает.

Данный факт подчеркивает, что энергия Ферми имеет чисто квантовый характер и не является энергией теплового движения электронов.

В формуле (4.24) величиной, зависящей от температуры, оказывается только средняя длина свободного пробега электронов $\bar{\lambda}_F$. И для получения реальных значений электропроводности необходимо, как

и в теории Друде, предположить, что ее величина составляет сотни межатомных расстояний в кристаллической решетке.

Температурную зависимость и большое значение $\bar{\lambda}_F$ и, соответственно, σ можно объяснить, предположив что электроны не рассеиваются неподвижным упорядоченным распределением ионов решетки металла.

Тогда $\bar{\lambda}_F$ будет обусловлена рассеянием на дефектах кристаллического строения (атомах примесей, междоузельных атомах и вакансиях, дислокациях, границах зерен и двойниковых прослоек и т.д.), не зависящем от температуры, и рассеянием на фононах, зависящем от температуры.

Первый из указанных факторов определяет постоянное значение проводимости (удельного сопротивления) при низких температурах (менее 20 К). С повышением же температуры возрастает роль фононного рассеяния, уменьшающего $\bar{\lambda}_F$ и σ .

Правомерность отказа от рассеяния электронов на неподвижных ионах доказывается в квантовой физике при учете волновых свойств электронов. Их движение в периодическом поле кристаллической решетки рассматривается как процесс распространения электронных волн де Бройля.

ЛЕКЦИЯ 5

5.1 Зонная теория твердого тела. Энергетические зоны в кристаллах. Движение электронов в периодическом поле. Функции Блоха

Зонная теория металлов является дальнейшим развитием квантовой теории проводимости и позволяет объяснить электрические свойства кристаллических материалов, зависящие от их внутреннего строения.

В рассмотренной ранее квантовой теории, предполагающей наличие свободных электронов, подчиняющихся статистике Ферми-Дирака, невозможно было объяснить появление этих свободных электронов. И к наиболее существенному ее недостатку следует отнести тот факт, что при рассмотрении движения электронов проводимости не учитывалась реальная периодическая структура металлов, определяемая их кристаллической решеткой, и наличие электрического поля, тоже периодического характера, создаваемого положительно заряженными ионами металла, находящимися в узлах решетки.

В зонной теории эти факторы учитываются и доказывается, что дискретные энергетические уровни электронов в отдельно взятых атомах при объединении их в кристаллическую решетку расщепляются на ряд близко лежащих подуровней, образующих энергетические зоны с разрешенными значениями энергии. Эти зоны разделяются зонами запрещенных значений энергии. Разрешенные зоны могут и перекрывать друг друга.

Для доказательства используются два способа – *приближения сильной и слабой связи*.

В первом из них принимается, что энергия связи электронов с атомами много больше их кинетической энергии движения в кристалле (сильная связь с атомом).

На рис. 5.1, а представлены расстояния друг от друга, кристаллической решетки. изображена в виде двух воронок, внутри которых показаны энергетических уровней

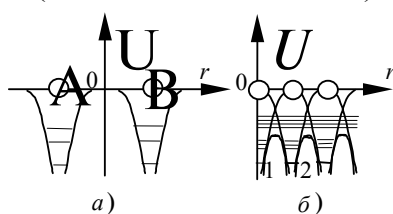


Рис. 5.1

Высота барьеров для уровней, тоже разная. Барьеры между соседними атомами. Кроме того барьеры достаточно широки, чтобы мог наблюдаться эффект туннелирования электронов через них.

Если же расстояние между атомами уменьшить до значений порядка величины постоянной кристаллической решетки, то за счет взаимодействия между атомами происходит частичное наложение потенциальных кривых, отделяющих атомы друг от друга. При этом образуются новые потенциальные

два изолированных атома A и B на значительно превышающем период Энергетическая схема атомов кообразных потенциальных ям, несколько из существующих электронов.

электронов, находящихся на разных препятствуют обмену электронов

кривые типа 1 и 2 на рис. 5.1, б. На рисунке видно, что при этом происходит уменьшение высоты и толщины потенциальных барьеров.

Более тонким барьер оказывается для валентных электронов. Кроме того, на рис. 5.1 показано расщепление энергетических уровней электронов с образованием энергетических зон, о чем говорилось выше.

В результате энергетическая зона валентных электронов оказывается над потенциальным барьером, что говорит о полном их обобществлении в решетке. Они становятся свободными.

Внутренние же (более близкие к ядру) электронные уровни расщепляются меньше. Находящиеся в этих зонах электроны прочно связаны с ядром. Для них потенциальный барьер оказывается и выше и толще. Эти электроны в образовании проводимости практически не участвуют. Хотя некоторая вероятность их туннелирования сквозь барьер имеется.

В приближении слабой связи считают, что энергия взаимодействия электронов с атомами решетки значительно меньше их кинетической энергии. Тогда можно считать электроны свободными и использовать для их описания уравнение Шредингера, но с учетом периодичности поля кристаллической решетки.

В данном случае также обнаруживается зонная энергетическая структура, которая следует непосредственно из решения уравнения Шредингера.

Для электрона, движущегося в периодическом силовом поле, данное уравнение, в случае одномерного движения вдоль оси x , запишется в виде

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0, \quad (5.1)$$

где $U(x)$ – потенциальная энергия электрона, периодически изменяющаяся в соответствии с периодом кристаллической решетки.

Соответственно периодически изменяется и амплитуда волновой функции $\psi(x)$.

Блох доказал, что решение уравнения Шредингера в данном случае имеет вид

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx}, \quad (5.2)$$

где $u(x)$ – функция с периодичностью потенциала; k – волновой вектор $\left(k = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$.

Решения вида (5.2) называются *функциями Блоха*.

Дальнейший теоретический анализ позволил получить так называемые *дисперсионные соотношения* для свободных электронов и электронов, движущихся в периодическом поле. Это зависимости энергии электронов от импульса $E(p)$ или от волнового вектора $E(k)$.

На рис. 5.2, а графически показана дисперсионная кривая для свободных электронов. Энергия в данном случае изменяется квазинепрерывно, кривая состоит из близко расположенных отдельных точек, на рисунке сливающихся в сплошную линию.

На рис. 5.2, б зависимость энергии от волнового вектора k в периодическом поле, на которой явно прослеживается зонная энергетическая структура. Сплошными линиями показаны зоны квазинепрерывного изменения энергии, т.е. разрешенные зоны, а пунктирными – запрещенные зоны.

Зоны, чередующиеся с запрещенными зонами, называются *зонами Бриллюэна*. На границах этих зон энергия испытывает разрыв. На рисунке представлена одномерная картина. В трехмерном же пространстве зоны Бриллюэна ограничены замкнутыми многогранными поверхностями, вложенными друг в друга.

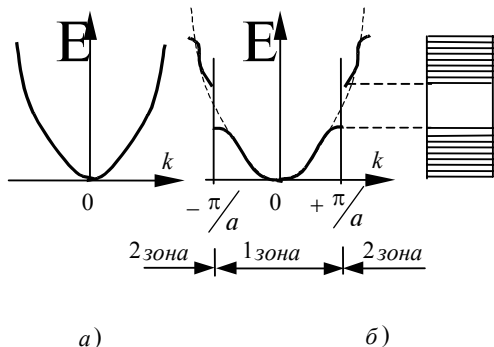


Рис. 5.2

изменяется квазинепрерывно, кривая расположенных отдельных точек, на друг с другом.

отображена дисперсионная зависимость энергии от волнового вектора k в периодическом поле, на которой явно прослеживается зонная энергетическая структура. Сплошными линиями показаны зоны квазинепрерывного изменения энергии, т.е. разрешенные зоны, а пунктирными – запрещенные зоны. Здесь же показаны и так называемые *зоны Бриллюэна* – это области k -пространства, в которых энергия электронов изменяется квазинепрерывно.

Важной характеристикой металла является также *поверхность Ферми* – изоэнергетическая поверхность в k - или p - пространстве с энергией, равной энергии Ферми. Для свободных электронов – это сферическая поверхность, для электронов проводимости металлов – имеет сложную форму.

Оба приближения сильной и слабой связи электронов со своими атомами дают аналогичные результаты. В обоих случаях возникают разрешенные и запрещенные энергетические зоны. Различие только в

их ширине. В модели сильной связи – узкие разрешенные зоны и широкие запрещенные. Во второй модели – наоборот.

В реальных кристаллах можно обнаружить как данные предельные случаи, так и промежуточные.

5.2 Заполнение зон электронами.

Металлы, диэлектрики и полупроводники

Одним из важнейших достижений зонной теории явилось объяснение различий электрических свойств твердых тел.

Более ранние теории пытались объяснить наличие и отсутствие электропроводности высокой или низкой подвижностью электронов. Однако в реальных диэлектриках могут существовать электроны с достаточно высокой подвижностью, что подтверждается, например, наблюдаемым экспериментально явлением фотопроводимости, когда под действием света многие диэлектрики приобретают значительную электропроводность.

Зонная теория объясняет наличие твердых тел, проводящих электрический ток (проводники) и его не проводящих (диэлектрики), различием в ширине запрещенных зон и характером заполнения электронами разрешенных энергетических зон.



5.3

На рис. 5.3 представлены схемы энергетических зон металлов (проводников), диэлектриков (изоляторов) и полупроводников.

Валентной называют зону, возникшую из уровня, на котором находятся валентные электроны в основном состоянии изолированного атома.

Рассмотрим все три схемы, приведенные на рис. 5.3.

В случае а) электроны заполняют валентную зону не полностью, что характерно для *металлов*. Электронам необходимо сообщить небольшую энергию (порядка $10^{-23} \dots 10^{-22}$ эВ), чтобы перевести их на более высокие свободные уровни в той же самой валентной зоне.

Для этого достаточно энергии теплового движения при температуре немного выше абсолютного нуля, или энергии даже слабого электрического поля. В результате в кристалле появляется направленное движение электронов, т.е. металлы теоретически должны быть хорошими проводниками, что и наблюдается на самом деле.

У металлов валентная зона одновременно является и зоной проводимости.

В случаях б) и в) уровни валентной зоны полностью заняты электронами, а сама зона отделена от выше расположенной свободной энергетической зоны запрещенным интервалом энергий (запрещенная зона) величиной ΔE (ширина запрещенной зоны).

По величине ширины запрещенной зоны такие кристаллы делят на *диэлектрики* с относительно большим значением $\Delta E > 3$ эВ и полупроводники, у которых сравнительно узкая запрещенная зона с $\Delta E < 1$ эВ.

У диэлектриков внешнее электрическое поле не может сообщить электронам энергию, достаточную для перехода в свободную зону. Скорее происходит пробой или плавление кристалла.

Ширина запрещенной зоны в полупроводниках позволяет электрическому полю перебросить электроны в свободную зону, которая является в этом случае и зоной проводимости. Электроны ведут себя в ней подобно электронам проводимости в валентной зоне металлов.

В связи с широким применением полупроводниковых материалов в науке и технике рассмотрим их электрические свойства несколько подробнее.

5.3 Собственная и примесная проводимость полупроводников

называются *акцепторными* и располагаются в запрещенной зоне вблизи от верха валентной зоны (рис. 5.4, б).

В результате электроны германия связываются с атомами примеси и в создании электропроводности участия не принимают. Носителями заряда в данном случае являются дырки. Возникает *дырочная проводимость (p-типа)*.

5.4 ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Фотопроводимостью называется явление изменения электропроводности полупроводника под действием падающего на него света.

Удельная электрическая проводимость полупроводника складывается из двух составляющих:

$$\sigma = \sigma_{\text{св}} + \sigma_{\text{т}}, \quad (5.3)$$

где $\sigma_{\text{св}}$ – проводимость, вызванная действием освещения; $\sigma_{\text{т}}$ – темновая удельная проводимость (основная проводимость, возникающая при тепловом возбуждении носителей заряда без освещения).

Под действием света, падающего на полупроводник, в последнем возникает явление внутреннего фотоэффекта, который и обуславливает появление фотопроводимости.

Кванты света, поглощаясь веществом вызывают появление *избыточных носителей заряда*. Если энергия кванта $h\nu$ равна или больше ширины запрещенной зоны ΔE , то электроны переходят из валентной зоны в зону проводимости. Эти электроны и возникающие на месте их ухода в валентной зоне «дырки» являются свободными и увеличивают проводимость полупроводника.

Однако возбужденный электрон может оставаться связанным с «дыркой», образуя пару, называемую *экситоном*. Их возникновение в проводнике не увеличивает количество носителей заряда, так как экситоны электрически нейтральны. Но при столкновениях с фононами и другими несовершенствами кристалла они способны либо аннигилировать, либо разорваться на два носителя заряда – электрон и «дырку». В последнем случае возникает фотопроводимость.

Если в полупроводнике имеются примеси, то световые кванты способны возбуждать их электроны, переводя последние либо с донорных уровней в зону проводимости, либо из валентной зоны на акцепторные уровни. Энергия возбуждающего кванта $h\nu$ при этом должна быть больше или равна энергии активации атомов примеси $\Delta E_{\text{п}}$.

В обобщенной форме для собственной и примесной проводимости приведенные выше условия можно записать как

$$h\nu \geq \Delta E, \quad (5.4)$$

откуда, аналогично явлению внешнего фотоэффекта, следует наличие *красной границы внутреннего фотоэффекта*:

$$\nu_{\text{кр}} = \frac{\Delta E}{h}, \quad (5.5)$$

где $\nu_{\text{кр}}$ – минимальная частота падающего света, при которой еще возможен внутренний фотоэффект.

Данное условие можно записать и для максимальной длины волны:

$$\lambda_{\text{кр}} = \frac{ch}{\Delta E}. \quad (5.6)$$

Явление фотопроводимости используется в фотосопротивлениях (фоторезисторах), изготовленных из различных полупроводниковых материалов. Их преимуществом по сравнению с вакуумными фотоэлементами, действие которых основано на явлении внешнего фотоэффекта, является высокая *световая чувствительность* $\frac{dI}{d\Phi}$ (изменение силы тока при изменении светового потока на единицу). Так, у селено-кадмиевых фоторезисторов она в 10^5 раз выше.

Недостаток фоторезисторов – их инерционность.

6.1 ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИЭЛЕКТРИКОВ

Как уже отмечалось в предыдущем разделе, к диэлектрикам относятся вещества, практически не проводящие электрический ток, т.е. обладающие весьма большим удельным сопротивлением.

Диэлектриками могут быть вещества как в твердом (кристаллические и аморфные), так и в жидком и газообразном состоянии.

Своим названием они обязаны М. Фарадею, обозначившему таким образом среды, через которые способны проникать электрические поля (от греческого слова *dia* – через и английского *electric* – электрический).

В идеальном диэлектрике нет свободных зарядов, способных перемещаться по его объему. Атомы и молекулы диэлектрика содержат одинаковые количества положительных и отрицательных микрозарядов и в целом нейтральны.

Оценим напряженность электростатического поля, создаваемого внутри атома таким элементарным зарядом. Его величина $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл, тогда при размерах атома $r \approx 10^{-10}$ м получим численное значение напряженности

$$E = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r^2} \approx 1,5 \cdot 10^{11} \text{ В/м.}$$

В технике достигаются поля напряженностью лишь порядка 10^7 В/м. В подобных полях атомы и молекулы диэлектрика оказываются весьма устойчивыми.

Тем не менее, внешние электрические поля оказывают существенное воздействие на диэлектрик, вызывая *поляризацию* его атомов, молекул или ионов.

Под *поляризацией* диэлектриков понимают такое изменение состояния вещества, при котором любой элемент его объема во внешнем электрическом поле приобретает некоторый суммарный *дипольный момент*.

За меру поляризации принимают вектор поляризации

$$\vec{P} = \frac{\sum_{i=1}^n \vec{p}_i}{V}, \quad (6.1)$$

т.е. суммарный дипольный момент единицы объема.

В выражении (6.1)

$$\vec{p}_i = q_i \vec{l}_i \quad (6.2)$$

вектор дипольного момента отдельной молекулы (здесь $\vec{l}$ – плечо диполя), а V – объем диэлектрика.

Величина вектора поляризации $\vec{P}$ для большинства диэлектриков в слабых полях пропорциональна напряженности $\vec{E}$ электрического поля:

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}, \quad (6.3)$$

где ϵ_0 – электрическая постоянная; χ_e – диэлектрическая восприимчивость.

Рассмотрение диэлектрических и магнитных свойств веществ основывается на использовании *теории Максвелла* для единого электромагнитного поля.

Приведем полную систему *уравнений Максвелла* в дифференциальной форме:

$$\text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \text{div } \vec{D} = \rho, \quad (6.4)$$

$$\text{rot } \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad \text{div } \vec{B} = 0. \quad (6.5)$$

Эта система дополняется уравнениями, характеризующими электрические и магнитные свойства среды:

$$\vec{D} = \epsilon \epsilon_0 \vec{E}; \quad \vec{B} = \mu \mu_0 \vec{H}; \quad \vec{j} = \sigma \vec{E}. \quad (6.6)$$

В уравнениях (6.4) – (6.6) $\vec{E}$ и $\vec{D}$ – векторы напряженности и индукции (электрического смещения) электрического поля соответственно; $\vec{H}$ и $\vec{B}$ – векторы напряженности и индукции магнитного поля; ϵ_0

и μ_0 – электрическая и магнитная постоянные; ε и μ – относительные диэлектрическая и магнитная проницаемости среды; $\vec{j}$ – вектор плотности тока; σ – удельная проводимость.

Напомним, что в векторном анализе *ротором* или *вихрем* некоторого вектора $\vec{a}$ (обозначается как $\text{rot}_n \vec{a}$) называется предел отношения циркуляции вектора $\vec{a}$ вдоль контура l , ограничивающего площадку ΔS , к величине ее площади ΔS при $\Delta S \rightarrow 0$, т.е.

$$\text{rot}_n \vec{a} = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta S} \oint_l \vec{a}_l d\vec{l}. \quad (6.7)$$

Дивергенцией вектора $\vec{a}$ в точке M поля (обозначается как $\text{div} \vec{a}$) называется предел отношения потока вектора $\vec{a}$ сквозь замкнутую поверхность S , охватывающую точку M , к объему ΔV части поля, ограниченной поверхностью S при $\Delta V \rightarrow 0$, т.е.

$$\text{div} \vec{a} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \oint_S \vec{a} d\vec{S}. \quad (6.8)$$

В настоящем разделе рассматриваются только диэлектрические свойства. Магнитные свойства твердых тел будут описаны в дальнейшем. В этом случае уравнениями Максвелла можно воспользоваться, полагая, что у рассматриваемого вещества магнитная восприимчивость $\chi_m \ll 1$.

Кроме того, если электрическое и магнитное поля не меняются с течением времени (стационарны), то их производные по времени

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = 0, \text{ и } \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0. \quad (6.9)$$

Тогда распределение объемной плотности заряда $\rho(r)$ и напряженности электрического поля $\vec{E}$ в диэлектрике можно найти из системы уравнений Максвелла, преобразованной для электростатического поля в виде

$$\text{rot} \vec{E} = 0, \text{ div} \vec{D} = \rho. \quad (6.10)$$

В *макроскопической теории* диэлектрики представляются как сплошные среды. Для изотропной диэлектрической среды приведем известное из курса общей физики соотношение между векторами $\vec{D}$ и $\vec{E}$:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 (1 + \chi_e) \vec{E} = \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E}. \quad (6.11)$$

Из выражения (6.11) очевидно, что

$$\varepsilon = 1 + \chi_e. \quad (6.12)$$

Величины ε и χ_e – это основные характеристики электрических свойств диэлектриков.

Если среда *анизотропна*, то векторы $\vec{P}$ и $\vec{E}$ не параллельны между собой, а диэлектрические проницаемость и восприимчивость являются тензорами.

6.2 МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

В *микроскопической теории* диэлектриков основной задачей является расчет диэлектрической проницаемости (макроскопической характеристики) в зависимости от микроструктуры вещества.

6.2.1 Локальное электрическое поле

Диэлектрические свойства связаны не с отдельными зарядами, а с электрическими диполями. Механизмы поляризации мы обсудим несколько позже, а сейчас лишь укажем, что существуют молекулы, изначально обладающие постоянным дипольным моментом, и молекулы, его не имеющие. В последнем случае дипольные моменты приобретаются молекулами под действием электрического поля, т.е. индуцируются (наводятся).

Пусть пластина диэлектрика помещена между разноименно заряженными ($+Q$ и $-Q$) обкладками плоского конденсатора (рис. 6.1, а), внутри которого до внесения диэлектрика установилось электрическое поле напряженностью $\vec{E}_0$. Под действием этого поля диполи выстраиваются в порядке, показанном на рисунке. Тогда верхняя поверхность пластины диэлектрика заряжается отрицательно, а нижняя – по-

ложительно. В результате внутри диэлектрика создается собственное электрическое поле $\vec{E}'$, обратное внешнему полю $\vec{E}_0$, т.е. в диэлектрике устанавливается результирующее поле

$$\vec{E} = \vec{E}_0 - \vec{E}' . \quad (6.13)$$

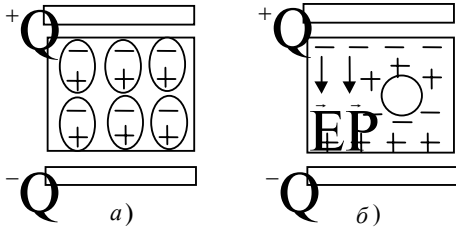


Рис. 6.1

Однако, вследствие дальнедействующих дипольных взаимодействий, на отдельный атом действует отличное от $\vec{E}$ некоторое *локальное поле* $\vec{E}_{\text{лок}}$, метод расчета которого предложен Лоренцем. Суть расчета заключается в том, что вокруг рассматриваемого атома проводится виртуальная замкнутая поверхность (рис. 6.1, б). Диполи, оказавшиеся внутри этой поверхности, дискретно влияют на формирование локального поля в центре полости, а весь объем диэлектрика за ее пределами – континуально.

Согласно Лоренцу величина локального поля определяется как

$$\vec{E}_{\text{лок}} = \vec{E} + \vec{E}_{\text{пов}} + \vec{E}_{\text{дип}} , \quad (6.14)$$

где $\vec{E}_{\text{пов}}$ – напряженность поля, созданного в центре выделенной полости поверхностными зарядами, наведенными на ее поверхности; $\vec{E}_{\text{дип}}$ – напряженность поля в центре полости от расположенных внутри нее отдельных диполей.

В случае сферической полости теория дает следующее выражение для $\vec{E}_{\text{пов}}$ в зависимости от поляризованности:

$$\vec{E}_{\text{пов}} = \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} . \quad (6.15)$$

При выборе полости именно сферической формы в кубической решетке внутренние диполи не вносят вклада в создание локального поля в ее центре, т.е.

$$\vec{E}_{\text{дип}} = 0 . \quad (6.16)$$

Тогда для кубических кристаллов в соответствии с выражениями (6.14) – (6.16)

$$\vec{E}_{\text{лок}} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} . \quad (6.17)$$

Далее выразим из соотношения (6.11) вектор поляризации

$$\vec{P} = \epsilon_0(\epsilon - 1)\vec{E} \quad (6.18)$$

и, подставив полученное значение в (6.17), получим в окончательном виде локальное поле в атомном узле кубической кристаллической решетки

$$\vec{E}_{\text{лок}} = \left(\frac{\epsilon + 2}{3} \right) \vec{E} . \quad (6.19)$$

Для анизотропных тел расчет локального поля значительно усложняется.

6.2.2 Соотношение Клаузиуса-Мосотти

Представление о локальном поле, поляризующем отдельные атомы диэлектрика, не учитывает обратной связи между наведенным им дипольным моментом и самим полем. То есть является не вполне корректным. Однако данное приближение позволяет получить достаточно реальное соотношение между поляризуемостью и диэлектрической проницаемостью, что и является основной задачей микроскопической теории диэлектриков.

Выразим дипольный момент атома $\vec{p}$ через его поляризуемость α , являющуюся коэффициентом пропорциональности между дипольным моментом атома и напряженностью действующего на него электрического поля (в рассматриваемом случае это и есть локальное поле):

$$\vec{p} = \alpha \vec{E}_{\text{лок}} . \quad (6.20)$$

Определим полную поляризуемость единицы объема, с учетом (6.20), как

$$\vec{P} = n\vec{p} = n\alpha \vec{E}_{\text{лок}} , \quad (6.21)$$

где n – число атомов в единице объема.

Подставим в выражение (6.21) значение $\vec{E}_{\text{лок}}$ по (6.19):

$$\vec{P} = n\alpha \left(\frac{\varepsilon + 2}{3} \right) \vec{E}. \quad (6.22)$$

Записав это уравнение в виде

$$n\alpha = 3 \frac{\vec{P}}{\vec{E}} \frac{1}{(\varepsilon + 2)} \quad (6.23)$$

и подставив в него полученное из (6.18) отношение

$$\frac{\vec{P}}{\vec{E}} = \varepsilon_0 (\varepsilon - 1), \quad (6.24)$$

окончательно выразим *соотношение Клаузиуса-Мосотти*, связывающее микроскопическое понятие атомной поляризации с макроскопической диэлектрической проницаемостью:

$$n\alpha = 3\varepsilon_0 \left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \right). \quad (6.25)$$

Для анизотропных тел эта взаимосвязь имеет более сложный характер.

Следует отметить, что в переменных электрических полях поляризация не успевает следовать за изменением поля, так как смещения зарядов инерционны. В результате между колебаниями векторов $\vec{P}$ и $\vec{E}$ появляется разность фаз.

Диэлектрическая проницаемость в этом случае зависит от частоты колебаний ω и является комплексной величиной:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega). \quad (6.26)$$

Более подробный анализ зависимости (6.26) выходит за рамки нашего курса.

6.3 МЕХАНИЗМЫ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ДИЭЛЕКТРИКАХ

В зависимости от строения атомов или молекул диэлектрика выделяют три механизма поляризации: дипольная ориентация, электронная поляризуемость и ионная поляризуемость. Рассмотрим данные механизмы на атомарном уровне.

6.3.1 Дипольная ориентация

Как было отмечено выше, существуют молекулы, изначально имеющие постоянный дипольный момент. Это ассиметричные молекулы, у которых центры распределения (тяжести) положительных и отрицательных зарядов не совпадают, т.е. они эквивалентны электрическому диполю.

Из-за теплового движения дипольные моменты молекул в обычном состоянии ориентированы хаотично.

В электрическом поле такие под действием возникающего моменты ориентируются по полю. *дипольной ориентацией или*

Описанная ситуация скорее молекул. В кристаллическом теле и свободного их поворота быть не разню от одних стабильных приближение свободного поворота параэлектрических и парамагнитных

В процессе поляризации противоборствующих процесса – ориентация ей силами электрического поля и разориентация за счет хаотического теплового движения и столкновения молекул между собой.

На рис. 6.2 в объеме диэлектрика выделена сфера радиуса R и построены два конуса с образующими, составляющими с вектором электрического поля $\vec{E}$ углы Θ и $\Theta + d\Theta$. Эти конусы вырезают на сфере кольцо шириной $Rd\Theta$ и площадью

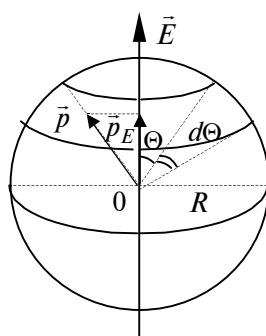


Рис.6.2

Рис. 6.2

дипольные молекулы поворачиваются вращающего момента пары сил, и их Этот процесс принято называть *параэлектрической восприимчивостью*. характерна для газов и отдельных молекулы взаимосвязаны между собой может. Поворот происходит скачкообразных к другим. Однако широко используется в описании явлений.

полярных диэлектриков происходят два

$$dS = 2\pi R \sin \Theta R d\Theta = 2\pi R^2 \sin \Theta d\Theta . \quad (6.27)$$

При отсутствии электрического поля направления всех векторов поляризации отдельных молекул $\vec{p}$ равновероятны. Тогда число молекул dn в единице объема, чьи векторы поляризации оканчиваются в пределах выделенного кольца, будет пропорционально площади этого кольца:

$$dn = C \sin \Theta d\Theta , \quad (6.28)$$

где C – некоторая постоянная, в которую вошло и выражение $2\pi R^2$ из (6.27).

Под действием электрического поля (в общем случае любого силового поля) распределение (6.28) изменяется в соответствии с *теоремой Больцмана* из классической статистики в $\exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$ раз, где U – потенциальная энергия молекулы в данном поле.

В соответствии с известным из электростатики выражением, потенциальная энергия диполя в электрическом поле равна

$$U = -pE \cos \Theta . \quad (6.29)$$

Тогда распределение (6.28), с учетом теоремы Больцмана и формулы (6.29), приобретает вид

$$dn = C \exp(a \cos \Theta) \sin \Theta d\Theta , \quad (6.30)$$

где произведена подстановка

$$a = \frac{pE}{kT} . \quad (6.31)$$

Поляризация диэлектрика, т.е. дипольный момент единицы объема будет равен

$$P = \int p_E dn = \int p \cos \Theta dn = Cp \int_0^\pi \cos \Theta \exp(a \cos \Theta) \sin \Theta d\Theta , \quad (6.32)$$

где p_E – величина составляющей вектора дипольного момента отдельной молекулы по направлению электрического поля (см. рис. 6.2).

С другой стороны, эту же величину P можно представить, как

$$P = \langle \cos \Theta \rangle \int p dn = \langle \cos \Theta \rangle Cp \int_0^\pi \exp(a \cos \Theta) \sin \Theta d\Theta , \quad (6.33)$$

где $\langle \cos \Theta \rangle$ – некоторое ожидаемое или усредненное значение косинуса угла между векторами каждого диполя и направлением поля.

Выразим $\langle \cos \Theta \rangle$, приравняв предварительно правые части (6.32) и (6.33):

$$\langle \cos \Theta \rangle = \frac{\int_0^\pi \cos \Theta \exp(a \cos \Theta) \sin \Theta d\Theta}{\int_0^\pi \exp(a \cos \Theta) \sin \Theta d\Theta} . \quad (6.34)$$

Вычисление интегралов приводит к решению вида

$$\langle \cos \Theta \rangle = \left[\frac{\exp a + \exp(-a)}{\exp a - \exp(-a)} \right] = \left(\operatorname{ctha} - \frac{1}{a} \right) \equiv L(a) , \quad (6.35)$$

где ctha – гиперболический котангенс; $L(a)$ – функция Ланжевена, которая используется для описания ориентации диполей в диэлектриках и в парамагнитных материалах.

В обычных условиях даже в сильных полях $a \ll 1$, тогда при разложении в ряд ctha можно ограничиться двумя членами разложения

$$\operatorname{ctha} = \frac{1}{a} + \frac{a}{3} - \frac{a^2}{45} + \dots$$

Тогда, в соответствии с (6.35), функция Ланжевена принимает вид

$$\langle \cos \Theta \rangle \equiv L(a) = \frac{a}{3} = \frac{pE}{3kT} \quad (a \ll 1). \quad (6.36)$$

Отсюда поляризация диэлектрика, то есть дипольный момент единицы объема будет равен

$$P = \langle \cos \Theta \rangle pn = \frac{np^2 E}{3kT} , \quad (6.37)$$

а диэлектрическая восприимчивость

$$\chi_e = \frac{P}{\varepsilon_0 E} = \frac{np^2}{3\varepsilon_0 kT} . \quad (6.38)$$

Последнее выражение носит название *формулы Дебая-Ланжевена*.

Если же $a \rightarrow \infty$, то $L(a) \rightarrow 1$, т.е. наступает насыщение, когда все имеющиеся электрические диполи развернулись по полю.

6.3.2 Электронная поляризуемость

Электронная поляризуемость – это единственный из механизмов поляризации, наблюдаемый во всех диэлектрических материалах. Заключается он в относительном смещении электронов и ядра под действием электрического поля. Наблюдается деформирование электронных оболочек и смещение центров распределения положительных и отрицательных зарядов с образованием электрических диполей.

Смещение у всех атомов происходит в одном направлении, т.е. образующиеся дипольные моменты ориентированы одинаково.

Искажение электронных оболочек способно вызвать изменение расстояний между ядрами.

Тепловое движение молекул не оказывает влияния на данный тип поляризации.

Электронная поляризация по своему характеру относится к колебательным процессам. Теория рассматривает вынужденные колебания электронов под действием синусоидального внешнего поля, которое отождествляется с локальным полем Лоренца.

Электронная поляризуемость определяется дипольным моментом электрона с амплитудой $p = ex_{\text{амп}}$, где $x_{\text{амп}}$ – амплитуда вынужденных колебаний.

6.3.3 Ионная поляризуемость

Данный тип поляризации обусловлен относительным смещением положительных и отрицательных ионов под действием электрического поля в твердых телах с ионной связью.

То есть происходит образование индуцированных диполей, вклад которых в диэлектрические свойства аналогичен вкладу такого же типа диполей при электронной поляризации.

4 МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

ЛЕКЦИЯ 7

7.1 МАГНИТНОЕ ПОЛЕ В МАГНЕТИКАХ. ДИАМАГНЕТИКИ, ПАРАМАГНЕТИКИ И ФЕРРОМАГНЕТИКИ. НАМАГНИЧЕННОСТЬ

Термин «магнетики» относится ко всем без исключения веществам, но многие из них обладают слабыми магнитными свойствами. Последние присущи как макроскопическим телам, так и молекулам, атомам, ядрам и электронам.

Магнетик во внешнем магнитном поле с индукцией $\vec{B}_0$ намагничивается и создает свое собственное магнитное поле $\vec{B}'$, которое складывается с внешним. В результате в магнетике возникает результирующее поле

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}' . \quad (7.1)$$

Индукция $\vec{B}$, характеризующая магнитное поле в веществе связана с напряженностью поля известным из курса общей физики соотношением

$$\vec{B} = \mu\mu_0\vec{H} , \quad (7.2)$$

где μ_0 – магнитная постоянная; μ – относительная магнитная проницаемость среды.

В зависимости от величины μ все вещества делятся на три группы:

- *диамагнетики* (μ немного меньше единицы; $\vec{B}'$ и $\vec{B}_0$ направлены в разные стороны; выталкиваются внешним полем);

- *парамагнетики* (μ немного больше единицы; $\vec{B}'$ и $\vec{B}_0$ направлены в одну сторону; втягиваются в области внешнего поля максимальной напряженности);
- *ферромагнетики* (μ значительно больше единицы – до $10^3 \dots 10^6$; $\vec{B}'$ и $\vec{B}_0$ направлены в одну сторону).

Вектор индукции собственного поля магнетика $\vec{B}'$ зависит по направлению от свойств вещества, а по величине от индукции внешнего магнитного поля $\vec{B}_0$.

Для однородного магнитного поля, например внутри длинного соленоида, соотношение между $\vec{B}'$ и $\vec{B}_0$ выражается зависимостью

$$\vec{B}' = \chi_m \vec{B}_0, \quad (7.3)$$

где χ_m – магнитная восприимчивость.

У диамагнитных тел $|\chi_m| < 1$, отрицательна и не зависит от величины напряженности внешнего магнитного поля и температуры.

Парамагнетики имеют $|\chi_m| < 1$, но величина ее положительна.

У ферромагнетиков χ_m зависит от внешнего поля нелинейно.

Запишем магнитную индукцию результирующего поля в магнетике, подставив в (7.1) выражение (7.3):

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}' = \vec{B}_0 + \chi_m \vec{B}_0 = (1 + \chi_m) \vec{B}_0. \quad (7.4)$$

Из определения магнитной проницаемости также можно записать

$$\vec{B} = \mu \vec{B}_0. \quad (7.5)$$

Приравняв правые части выражений (7.4) и (7.5), получим соотношение между магнитными проницаемостью и восприимчивостью:

$$\mu = 1 + \chi_m. \quad (7.6)$$

Далее перейдем к понятию *намагниченности* вещества.

По определению *магнитным моментом* контура с током называется вектор, перпендикулярный к плоскости контура (направление определяется по правилу правого винта), модуль которого равен произведению силы тока I на площадь контура S

$$p_m = IS. \quad (7.7)$$

Электрон, движущийся по орбите с частотой обращения ν , тоже образует контур с током I величиной

$$I = -ev \quad (7.8)$$

(знак минус отражает отрицательность заряда электрона).

Тогда *орбитальный магнитный момент* электрона на орбите радиусом r

$$p_m = IS = -ev\pi r^2. \quad (7.9)$$

Учитывая, что линейная скорость электрона на орбите

$$v = \omega r = 2\pi\nu r, \quad (7.10)$$

где ω – циклическая частота, выразим из (7.10) частоту ν и, подставив ее в (7.9), получим

$$p_m = -\frac{evr}{2} \quad \text{или} \quad p_m = -\frac{e\omega r^2}{2}. \quad (7.11)$$

Электрон на орбите обладает и механическим моментом импульса

$$L = I\omega = mvr, \quad (7.12)$$

где I – момент инерции электрона ($I = mr^2$).

Из выражений (7.11) и (7.12) определим отношение орбитального магнитного момента электрона к его механическому моменту импульса, называемое *гиромагнитным отношением*

$$\Gamma = \frac{p_m}{L} = -\frac{e}{2m}. \quad (7.13)$$

По законам квантовой механики момент импульса электрона на орбите может принимать лишь дискретные значения в соответствии с выражением

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (7.14)$$

где l – орбитальное квантовое число, принимающее значения

$$l = 0, 1, 2, \dots, n \quad (7.15)$$

(n – главное квантовое число).

Поэтому и орбитальный магнитный момент может принимать только дискретные значения. В соответствии с (7.13)

$$p_m = L\Gamma = -\frac{\hbar e}{2m}\sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}, \quad (7.16)$$

где величина

$$\mu_B = \frac{\hbar e}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24}, \text{ Дж/Тл}, \quad (7.17)$$

носит название *магнетона Бора*, принимаемого за единицу измерения магнитных моментов в атомных системах.

Кроме орбитального магнитного момента p_m электрон обладает и *спиновым магнитным моментом* p_{ms} , связанным с наличием у него *импульса* L_s , называемого *спином*.

В квантовой механике доказывается, что

$$L_s = \sqrt{3} \frac{\hbar}{2}, \quad (7.18)$$

а его проекция на направление некоторого внешнего поля, например, на направление вектора индукции внешнего магнитного поля $\vec{B}$, принимает только два значения:

$$L_{sB} = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (7.19)$$

Результаты опытов Штерна и Герлаха показали, что проекция спинового магнитного момента p_{msB} на направление $\vec{B}$ по величине равна магнетону Бора

$$p_{msB} = \pm \mu_B. \quad (7.20)$$

С учетом (7.17) и (7.19) выражение (7.20) принимает вид

$$p_{msB} = \pm \frac{\hbar e}{2m} = -\frac{e}{m} L_{sB} \quad (7.21)$$

(минус учитывает отрицательный заряд электрона). Тогда гиромагнитное отношение собственных моментов электрона

$$\Gamma_s = \frac{p_{msB}}{L_{sB}} = -\frac{e}{m}, \quad (7.22)$$

т.е. в два раза больше, чем для орбитальных моментов. Данный факт оказался существенным при выяснении природы ферромагнетизма.

Кроме электронов *спином и спиновым магнитным моментом обладают и атомные ядра*. Спин ядер по порядку величины соответствует спину электрона. Но, так как масса ядра примерно в тысячу раз больше массы электрона, то в соответствии с формулой (7.21) спиновый магнитный момент ядра во столько же раз меньше, чем электронный, поэтому при обсуждении магнитных свойств веществ им можно пренебречь.

Суммарный момент импульса атома находится векторным сложением орбитальных и спиновых моментов импульса электронов (если не учитывать спины ядер).

Схема такого сложения была предложена в 1925 году Расселом и Саундерсом. В ней сначала находится векторная сумма орбитальных моментов всех электронов, а затем спиновых. Полученные результирующие векторы снова суммируются и дают общий момент импульса атома.

Последнему соответствует *резльтирующий магнитный момент атома*

$$P_m = -g\mu_B \sqrt{J(J+1)}, \quad (7.23)$$

проекции которого на направление поля $\vec{B}$ равны

$$P_{mB} = -m_J g \mu_B, \quad (7.24)$$

где J – внутреннее квантовое число, определяющее численное значение суммарного момента импульса и суммарного магнитного момента атома; m_J – магнитное квантовое число, определяющее проекции указанных выше суммарных моментов на направление поля $\vec{B}$; g – *фактор магнитного расщепления Ланде*.

Фактор Ланде учитывает отличие в значениях гиромагнитных отношений для спиновых моментов и орбитальных. В частных случаях чисто орбитального и чисто спинового проявления магнитных явлений соответственно $g = 1$ и $g = 2$.

по контуру 2, что эквивалентно появлению дополнительного тока

$$\Delta I = -ev_L = -e \frac{\omega_L}{2\pi}. \quad (7.31)$$

Соответственно возникает и дополнительный магнитный момент электрона

$$\Delta p_m = \Delta IS = -\frac{e\omega_L S}{2\pi}. \quad (7.32)$$

Так как все Z электронов атома прецессируют в одном направлении, то дополнительный магнитный момент атома составит

$$\Delta P_m = Z\Delta p_m = -\frac{Ze\omega_L S}{2\pi}. \quad (7.33)$$

С учетом выражения для Ларморовой частоты (7.30) последняя запись приобретает вид

$$\Delta P_m = -\frac{Ze^2 S}{4\pi m} B_0, \quad (7.34)$$

где S – площадь дополнительного контура, описываемого электроном при прецессии.

Данная площадь рассчитывается по формуле

$$S = \frac{2\pi \langle r^2 \rangle}{3}, \quad (7.35)$$

где $\langle r^2 \rangle$ – средний квадрат расстояния электронов от ядра.

При отсутствии прецессии, в случае перпендикулярности плоскости орбиты вектору $\vec{B}_0$, площадь S равна площади орбиты.

Окончательно (7.34), с учетом (7.35), принимает вид

$$\Delta P_m = -\frac{Ze^2 \langle r^2 \rangle}{6m} B_0. \quad (7.36)$$

Из выражения (7.36) следует, что индуцированный дополнительный магнитный момент атома направлен противоположно внешнему полю. Поэтому диамагнетики и намагничиваются противоположно полю.

Намагниченность, как известно, пропорциональна величине напряженности внешнего магнитного поля:

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H} = \chi_m \frac{\vec{B}_0}{\mu_0}. \quad (7.37)$$

Тогда для определения магнитной восприимчивости χ_m выразим величину намагниченности как произведение индуцированного магнитного момента атома (7.36) на число атомов в единице объема n :

$$M = \Delta P_m n = -\frac{Ze^2 \langle r^2 \rangle n}{6m} B_0. \quad (7.38)$$

Из (7.37) выразим величину

$$\chi_m = \frac{\mu_0 M}{B_0} \quad (7.39)$$

и подставим в полученное выражение величину намагниченности по (7.38):

$$\chi_m = -\frac{\mu_0 Ze^2 \langle r^2 \rangle n}{6m}. \quad (7.40)$$

К такому же результату приводит и рассмотрение данного вопроса в рамках квантовой механики.

ЛЕКЦИЯ 8

8.1 ПРИРОДА ПАРАМАГНЕТИЗМА. КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ЛАНЖЕВЕНА

Атомы парамагнетиков имеют суммарные орбитальные и спиновые магнитные моменты, отличные от нуля. Согласно классической теории парамагнетизма, созданной Ланжевеном, такие атомы представляют собой постоянные магнитные диполи, магнитные моменты которых в отсутствие внешнего магнитного поля ориентированы случайным образом, и взаимодействие между диполями пренебрежимо мало.

Напомним, что теория Ланжевена используется и для объяснения дипольной ориентации в диэлектриках (см. п. 6.3.1).

Магнитные диполи парамагнетиков во внешнем магнитном поле также ориентируются по полю, что объясняется следующим образом.

В магнитном поле диполь приобретает потенциальную магнитную энергию U_m , пропорциональную величине своего атомного магнитного момента P_m и индукции внешнего поля B_0 :

$$U_m = -P_m B_0 \cos \Theta, \quad (8.1)$$

где Θ – угол между векторами $\vec{P}_m$ и $\vec{B}_0$.

Минимальное значение этой энергии соответствует углу $\Theta = 0$. Поэтому диполи стремятся ориентироваться по полю.

Проекция магнитного момента отдельного диполя на направление поля, определяющая в конечном счете намагниченность парамагнетика, равна

$$P_{mB} = P_m \cos \Theta. \quad (8.2)$$

Далее, проводя рассуждения, аналогичные описанным формулами (6.27) – (6.34) для диэлектриков, воспользовавшись рис. 6.2 и заменив величины дипольного момента и напряженности электрического поля на магнитный момент и индукцию магнитного поля, а поляризованность на намагниченность, получим величину усредненного косинуса угла между векторами $\vec{P}_m$ и $\vec{B}_0$ (или $\vec{P}_{mB}$):

$$\langle \cos \Theta \rangle = \frac{\int_0^\pi \cos \Theta \exp(a \cos \Theta) \sin \Theta d\Theta}{\int_0^\pi \exp(a \cos \Theta) \sin \Theta d\Theta}. \quad (8.3)$$

Вычисление интегралов приводит выражение (8.3) к виду

$$\langle \cos \Theta \rangle = \left[\frac{\exp a + \exp(-a)}{\exp a - \exp(-a)} \right] = \left(\operatorname{ctha} - \frac{1}{a} \right) \equiv L(a), \quad (8.4)$$

где ctha – гиперболический котангенс; $L(a)$ – функция Ланжевена, в которой под a понимается отношение потенциальной энергии атомарных магнитных моментов в поле к кинетической энергии их хаотического теплового движения:

$$a = \frac{P_m B_0}{kT}. \quad (8.5)$$

Если $a \ll 1$, то при разложении в ряд ctha можно ограничиться двумя членами разложения $\operatorname{ctha} = \frac{1}{a} + \frac{a}{3} - \frac{a^2}{45} + \dots$. Тогда, в соответствии с (8.4), функция Ланжевена принимает вид

$$\langle \cos \Theta \rangle \equiv L(a) = \frac{a}{3} = \frac{P_m B_0}{3kT} \quad (a \ll 1). \quad (8.6)$$

Отсюда намагниченность, т.е. суммарный магнитный момент единицы объема будет равен

$$M = n P_m \langle \cos \Theta \rangle = \frac{n P_m^2 B_0}{3kT}, \quad (8.7)$$

а магнитная восприимчивость в соответствии с (7.39) и (8.7) –

$$\chi_m = \frac{\mu_0 M}{B_0} = \frac{\mu_0 n P_m^2}{3kT}. \quad (8.8)$$

Соотношение (8.8) выражает закон Кюри, согласно которому магнитная восприимчивость парамагнетика обратно пропорциональна его термодинамической температуре:

$$\chi_m = \frac{C}{T}. \quad (8.9)$$

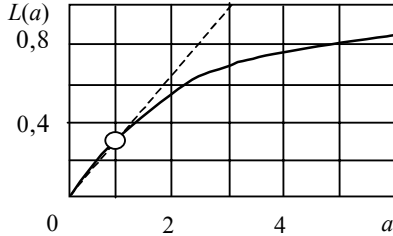
Тепловое движение атомов разрушает их ориентацию в магнитном поле.

Из сравнения формул (8.8) и (8.9) следует, что постоянная Кюри

$$C = \frac{\mu_0 n P_m^2}{3kT}. \quad (8.10)$$

Условие $a \gg 1$, т.е. в случае, когда потенциальная энергия магнитного диполя в поле значительно превышает энергию теплового движения, возможно только в очень сильных магнитных полях и при низких температурах.

В пределе при $a \rightarrow \infty$ функция Ланжевена $L(a) \rightarrow 1$. Наступает состояние магнитного насыщения парамагнетика, когда магнитные моменты всех атомов выстраиваются вдоль поля.



. 8.1

На рис. 8.1 функция Ланжевена представлена графически. При малых значениях a кривая хорошо аппроксимируется отрезком прямой OA в соответствии с (8.6).

8.2 КВАНТОВАЯ ПРИРОДА ПАРАМАГНЕТИЗМА

В классической теории парамагнетизма используется допущение любой возможной ориентации магнитных моментов относительно направления внешнего магнитного поля.

В квантовой физике показано, что не только численные значения магнитного момента атома P_m , но и его проекции P_{mB} на направление внешнего поля B_0 , определяющие возможные направления момента, принимают дискретные значения – приведенные выше формулы (7.23) и (7.24).

Проекция магнитного момента P_m , определяемого выражением (7.24), в магнитном поле с индукцией B_0 соответствует потенциальная энергия

$$U_{Jm} = -P_{mB} B_0 = -m_J g \mu_B B_0. \quad (8.11)$$

Определим намагниченность парамагнетика как суммарный магнитный момент единицы объема:

$$M = n P_m \langle \cos \Theta \rangle. \quad (8.12)$$

Однако, в отличие от классического рассмотрения, в выражении (8.3), определяющем $\langle \cos \Theta \rangle$, вместо интегрирования следует произвести суммирование по дискретным направлениям, занимаемым вектором магнитного момента. Тогда

$$M = n \frac{\sum_{-J}^J P_{mB} \exp(-U_{Jm} / kT)}{\sum_{-J}^J \exp(-U_{Jm} / kT)}. \quad (8.13)$$

Подставив в полученное выражение значения проекции магнитного момента и его потенциальной энергии в поле соответственно по формулам (7.24) и (8.11) и произведя суммирование, можно представить (8.13) в виде

$$M = n g \mu_B J B_J(a), \quad (8.14)$$

где безразмерная переменная

$$a = \frac{g \mu_B J B_0}{kT}, \quad (8.15)$$

а B_J – функция Бриллюэна, получаемая в результате суммирования в выражении (8.13),

$$B_J(a) = \frac{2J+1}{2J} \operatorname{cth} \frac{2J+1}{2J} a - \frac{1}{2J} \operatorname{cth} \frac{a}{2J}. \quad (8.16)$$

В классическом пределе, когда число ориентаций бесконечно велико (внутреннее квантовое число $J \rightarrow \infty$), функция Бриллюэна переходит в функцию Ланжевена.

Функция Бриллюэна изменяется в пределах от нуля (при отсутствии внешнего магнитного поля) до единицы (при бесконечно большом внешнем поле). В последнем случае намагниченность достигает насыщения.

Зная намагниченность, можно определить и магнитную восприимчивость парамагнетика в рамках квантовой теории:

$$\chi_m = \frac{\mu_0 M}{B_0} = \frac{\mu_0 n g \mu_B J}{B_0} B_J(a). \quad (8.17)$$

Экспериментальные исследования парамагнитных свойств проводят как правило на непроводящих соединениях, содержащих ионы с магнитным моментом, отличным от нуля (ионы редкоземельных элементов, группы железа и др.). Исследования на самих перечисленных элементах затруднены из-за проявления парамагнетизма электронного газа (*парамагнетизма Паули*) и взаимодействия парамагнитных частиц между собой.

Рассмотрение подобных вопросов, как и ядерного парамагнетизма, выходит за рамки нашего пособия.

8.3 ПРИРОДА ФЕРРОМАГНЕТИЗМА. МОЛЕКУЛЯРНОЕ ПОЛЕ ВЕЙССА

Намагничивание ферромагнетиков, как и парамагнетиков, также объясняется упорядочением магнитных моментов атомов.

Однако способность к намагничиванию под действием внешнего магнитного поля у ферромагнетиков несравненно выше, что не могла объяснить теория парамагнетиков.

Отправным моментом создания теории ферромагнетизма послужило обнаружение Эйнштейном и де Гаазом (1915) *магнито-механического эффекта*, заключающегося в возникновении вращения стержня, свободно подвешенного внутри соленоида, при его намагничивании, т.е. увеличение суммарного магнитного момента в стержне приводит к созданию дополнительного момента импульса. И наоборот, увеличение суммарного момента импульса приводит к появлению дополнительного магнитного момента, что и наблюдал Барнет при быстром вращении стержня (*эффект Барнета*).

Иоффе и Капица наблюдали приобретение вращательного импульса стержнем, когда последний в намагниченном состоянии быстро нагревался выше точки Кюри. При этом сориентированные моменты импульса принимали хаотические направления и суммарный момент становился равным нулю. На основании закона сохранения импульса стержень начинал вращаться.

Описанные опыты позволили определить значение гиромагнитного отношения ферромагнетика, которое оказалось в два раза больше, чем для электронных орбит, и соответствовало отношению собственных (спиновых) магнитного и механического моментов электрона.

Данный факт указывает на то, что ферромагнетизм вызван спиновыми магнитными моментами электронов, но не орбитальными.

Согласно современным представлениям сильная ориентация отдельных магнитных моментов в ферромагнетике, вплоть до насыщения, существует независимо от приложения внешнего поля, т.е. любой образец ферромагнетика обладает спонтанной намагниченностью. Данное положение было высказано Розингом (1892) и развито Вейссом (1907).

Однако опыт показывает, что при отсутствии внешнего поля отдельные образцы намагничены в целом далеко не всегда. Вейсс дал следующее объяснение данному противоречию. Весь объем ферромагнетика разбит на отдельные малые, но макроскопического размера, области – домены, которые намагничены до насыщения. Однако векторы намагничивания отдельных доменов направлены хаотически и суммарный магнитный момент образца в целом равен нулю.

Природа сил, ориентирующих спины электронов в доменах, долгое время оставалась неизвестной. Это не могли быть обычные силы магнитного взаимодействия спиновых моментов, так как энергия такого взаимодействия на два порядка меньше, чем энергия теплового движения при комнатной темпера-

туре. То есть тепловое движение должно было бы разрушать ориентацию спинов. Природа этих сил была выяснена лишь в рамках квантовой механики, о чем будет сказано ниже.

Согласно же классической теории ферромагнетизма, разработанной Вейссом, на магнитные моменты атомов действует некоторое *эффективное* или *молекулярное поле сил* H_e , пропорциональное намагниченности насыщения M_S

$$H_e = \lambda M_S, \quad (8.18)$$

где λ – *постоянная молекулярного поля* или *коэффициент Вейсса* (зависит от кристаллической структуры материала и не зависит от температуры), – является характеристикой данного вида магнитных атомов.

Для тела в ферромагнитном состоянии даже без внешнего поля M_S и H_e имеют большие значения. При высоких температурах тепловое движение разрушает домены и при температуре $T = T_K$ (T_K – температура, соответствующая *точке Кюри*) материал теряет свои ферромагнитные свойства и превращается в парамагнетик.

Что бы намагнитить ферромагнетик при температуре выше точки Кюри, необходимо приложить внешнее магнитное поле H . Величина намагниченности в этом случае будет определяться как внешним полем, так и молекулярным, создаваемым самой намагниченностью, т.е.

$$M = \chi_{m0}(H + H_e) \quad (T > T_K), \quad (8.19)$$

где

$$\chi_{m0} = \frac{C}{T} - \quad (8.20)$$

магнитная восприимчивость в слабом поле, подчиняющаяся закону Кюри для парамагнетиков.

Величина χ_{m0} оказывается меньше наблюдаемой восприимчивости χ_m , которая равна величине намагниченности, отнесенной к величине внешнего приложенного поля H :

$$\chi_m = \frac{M}{H}. \quad (8.21)$$

Из последнего выражения, с учетом (8.18) и (8.20), получим значение намагниченности ферромагнетика при температуре выше точки Кюри:

$$M = \chi_m H = \chi_{m0} H (1 - \lambda \chi_{m0})^{-1} \quad (T > T_K). \quad (8.22)$$

Из (8.22) и (8.20) наблюдаемая магнитная восприимчивость

$$\chi_m = \frac{\chi_{m0}}{1 - \lambda \chi_{m0}} = \frac{C}{T - \lambda C} = \frac{C}{T - T_K} \quad (T > T_K = \lambda C). \quad (8.23)$$

Выражение (8.23) носит название *закона Кюри-Вейсса* для магнитной восприимчивости при температурах выше точки Кюри.

8.4 РОЛЬ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СПОНТАННОМ НАМАГНИЧИВАНИИ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ

С развитием квантовой физики стало возможным дать объяснение сильной ориентировке электронных спинов. В 1928 году Френкелем, а затем и Гейзенбергом была выдвинута гипотеза об электростатической природе сил, ответственных за спонтанное намагничивание ферромагнетиков. Их возникновение происходит при *обменном взаимодействии* электронов внутренних недостроенных оболочек атомов, так как у заполненных оболочек суммарные спиновые магнитные моменты равны нулю. Такие атомы имеют переходные металлы группы железа и редкоземельные элементы.

Обменное взаимодействие приводит к обобществлению электронов соседними атомами. При этом изменяется энергия системы. Например, энергия простейшей системы из двух атомов водорода равна

$$U = 2E_0 + \frac{K \pm A}{1 \pm S^2}, \quad (8.24)$$

где $2E_0$ – суммарная энергия двух изолированных атомов водорода; K – энергия кулоновского взаимодействия зарядов в ядре; S – интеграл неортогональности, имеющий значение в интервале $0 \leq S \leq 1$; A – энергия обменного взаимодействия.

Энергия A определяется выражением

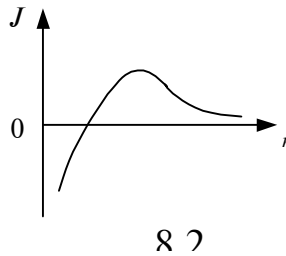
$$A = -J(\vec{S}_i \vec{S}_j), \quad (8.25)$$

где $\vec{S}_i$ и $\vec{S}_j$ – результирующие спины двух соседних атомов; J – обменный интеграл, показывающий вероятность обмена соседних атомов, когда электрон 1 атома A переходит к атому B , а электрон 2 наоборот.

Из квантовой физики следует, что обменный интеграл может быть как положительным, так и отрицательным. При его положительном значении энергетически выгодной является конфигурация с параллельными спинами, а при отрицательном – с антипараллельными.

Математическая формула для выхода за рамки нашего

Представим лишь графическую зависимость величины обменного интеграла J от расстояния r между (рис. 8.2).



определения обменного интеграла

рассмотрения. зависимость величины обменного

двумя атомами

Из рисунка следует, что на величина обменного интеграла

малых расстояниях между атомами отрицательна, т.е. ориентация с параллельными спинами энергетически невыгодна. При некотором критическом значении расстояния интеграл становится положительным и выгодна ориентация с параллельными спинами. Но это расстояние не должно быть и слишком велико. Тогда обменный интеграл убывает до нуля.

Отсюда следует, что по расстоянию между атомами можно предсказать, какой из элементов, имеющих непарные спины, обладает ферромагнитными свойствами.

Так, например, марганец с большим непарным спином на атом не обладает такими свойствами из-за малого расстояния между атомами, а в некоторых его соединениях ($MnAs$, $MnSb$) расстояние между атомами марганца увеличивается, обменный интеграл становится положительным, и эти соединения уже обладают ферромагнитными свойствами.

Таким образом, необходимыми и достаточными условиями возникновения ферромагнетизма в рамках модели обменного взаимодействия является наличие у атома недостроенных внутренних оболочек и положительная величина обменного интеграла, которая обуславливает параллельность ориентации спиновых магнитных моментов.

8.5 ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА ФЕРРОМАГНЕТИКОВ

Наличие доменной структуры, как уже указывалось выше, предсказано в теории ферромагнетизма, разработанной Вейссом.

Существование доменов (областей спонтанной намагниченности) подтверждено и результатами многочисленных опытов. Наиболее наглядным является метод порошковых фигур. На поверхность ферромагнетика наносится слой жидкости со взвешенными в ней частицами ферромагнитного порошка (Fe_2O_3), которые оседают в основном в местах неоднородности магнитного поля. Эти неоднородности в магнетике концентрируются вблизи доменных границ. В результате осевший порошок прорисовывает доменную структуру как при отсутствии внешнего магнитного поля, так и ее изменение при наложении последнего.

В кристаллических структурах спины способны ориентироваться вдоль определенных кристаллографических направлений – направлений наиболее легкого намагничивания, которыми в основном и определяется число доменов в кристалле, и их форма (также имеет значение и требование минимизации энергии). Поэтому в различных по строению материалах домены располагаются относительно друг друга под разными, но определенными углами.

Например, требование к минимизации энергии приведет к повороту магнитных моментов в одном из двух соседних доменов, если эти направления у обоих окажутся одинаковыми (рис. 8.3). В последнем случае такие домены подобны двум сближенным одинаковыми полюсами магнитам, когда энергия магнитного взаимодействия максимальна. На рисунке показано, что такой разворот осуществляется посте-

пенно в пределах некоторой *стенкой Блоха*. Толщина составляет ~ 300 периодов нм.

Каким же образом объема ферромагнетика при поле?

Приведем известную величины напряженности. Если внешнее поле ориентировки доменов равна нулю (начало координат).

При внесении поле, возрастающее с течением увеличивается в соответствии с которую можно разбить на три

На участке 1 с увеличением H происходит рост доменов, в которых магнитные моменты наиболее близки по своей ориентировке к направлению внешнего поля. Этот рост осуществляется за счет поглощения других доменов с менее благоприятной ориентировкой. Процесс сопровождается смещением границ доменов. При небольших значениях H это смещение происходит плавно и может быть обратимым, в сильных полях – смещение скачкообразно и приобретает необратимый характер. Скачкообразность в изменении намагниченности носит название *эффекта Баркгаузена* (кривая намагниченности имеет пилообразный характер). Увеличение размеров благоприятно ориентированного домена происходит до тех пор, пока он не займет весь объем образца.

При дальнейшем увеличении H (участок 2) дальнейшее намагничивание осуществляется за счет вращения намагниченности доминирующего домена в направлении внешнего поля. Процесс идет более медленно, чем на стадии 1, и завершается при полном совпадении направления намагниченности с вектором напряженности внешнего поля, то есть наступает *техническое насыщение*.

Однако на участке 3 процесс намагничивания полностью не прекращается, хотя и резко замедляется. На данном этапе суммарный магнитный момент увеличивается за счет переориентации в сильных полях спинов, имевших за счет теплового движения антипараллельную ориентировку.

При периодическом изменении направления и величины приложенного внешнего магнитного поля появляется известная *петля гистерезиса*.

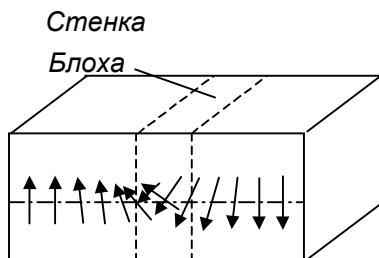


Рис. 8.3

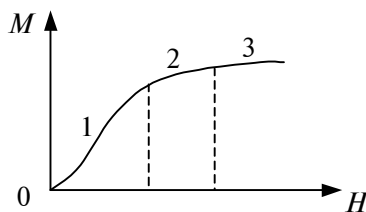


Рис. 8.4

области между доменами, называемой *стенки*, например, для железа кристаллической решетки или ~ 100

происходит намагничивание всего внесении его во внешнее магнитное

зависимость намагниченности M от внешнего поля H (рис. 8.4).

отсутствует, то из-за хаотичности намагниченность образца в целом

ферромагнетика во внешнее магнитное времени, намагниченность показанной на рисунке зависимостью, участка.

8.6 АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМ. ФЕРРИМАГНЕТИЗМ. ФЕРРИТЫ

В п. 8.4 при обсуждении обменного взаимодействия было отмечено, что отрицательные значения обменного интеграла соответствуют энергетически выгодному расположению в соседних узлах кристаллической решетки магнитных атомов с антипараллельными направлениями спинов. При данной модели упорядоченности спонтанной намагниченности не возникает из-за взаимной компенсации спинов. Такая модель была предложена *Неелем* и названа *антиферромагнетизмом*.

В настоящее время известно много твердых тел, обладающих подобным явлением.

Для возникновения антиферро- чтобы кристаллическое тело состояло противоположно намагниченных можно представить на примере соединениях MnO или $RbMnF_3$. На только магнитно-активные ионы

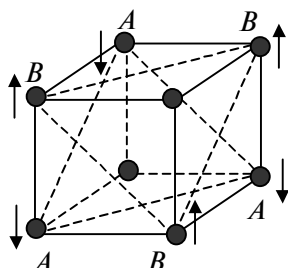


Рис. 8.5

антиферромагнетизма необходимо, в простейшем случае из двух подрешеток. Подобную структуру расположения ионов марганца Mn^{2+} в рис. 8.5 в узлах решетки показаны Mn^{2+} , образующие подрешетки A и B с

противоположными направлениями спинов.

Полное антиферромагнитное упорядочение возможно лишь при абсолютном нуле температуры когда суммарный магнитный момент равен нулю. При повышении температуры упорядоченное антипараллельное направление спинов начинает нарушаться и полностью исчезает при температуре, соответствующей *точке Нееля* или *антиферромагнитной точке Кюри*. Например, для MnO точка Нееля составляет $T_N \approx 120$ К.

В антиферромагнитных материалах магнитные моменты подрешеток хотя и антипараллельны, но равны по величине и взаимно компенсируются.

Неель в 1948 году рассмотрел случай неравенства величин магнитных моментов в подрешетках. Такое возможно, если в них располагаются атомы разного сорта или неодинаковое их количество. В результате появляется спонтанная намагниченность. То есть возникает явление нескомпенсированного антиферромагнетизма, которое называют *ферримагнетизмом*.

К *ферримагнетикам* относится большая группа кристаллических тел – *ферритов*, имеющих общую формулу $Me \cdot Fe_2O_3$, где Me – двухвалентный катион металла (Fe, Ni, Co, Cu, Zn, Cd).

Ферриты имеют наряду с хорошими магнитными свойствами и высокое электрическое сопротивление, благодаря чему нашли широкое применение в технике сверхвысоких частот (не дают потерь на образование вихревых токов Фуко).

Известны и другие группы ферримагнитных материалов, применяющихся в различных областях науки и техники.

Следует отметить, что рассмотренные нами явления ферро-, антиферро- и ферримагнетизма описывают только наиболее простые случаи спонтанной намагниченности материалов.

Существуют твердые тела, в которых минимизация энергии взаимодействия соседних магнитных атомов требует винтообразного или наклонного относительного расположения спинов.

5 КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

ЛЕКЦИЯ 9

9.1 РАБОТА ВЫХОДА ЭЛЕКТРОНА ИЗ МЕТАЛЛА

Электроны проводимости в металле находятся в состоянии беспорядочного теплового движения. Если их кинетическая энергия достаточно велика, то они способны покинуть металл и образовать около его поверхности электронное облако.

При выходе электрона из металла он совершает работу против сил притяжения со стороны положительного заряда, возникшего в месте выхода, и против сил отталкивания со стороны отрицательно заряженного электронного облака.

Работа выхода – это работа, которую необходимо совершить для удаления электрона из металла в вакуум за счет уменьшения кинетической энергии электрона.

Работа выхода зависит от химической природы металла и состояния его поверхности. Ее величину для различных металлов можно найти в справочниках.

9.2 КОНТАКТНАЯ РАЗНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛОВ

Можно считать, что поверхность металла представляет собой *двойной электрический слой*, подобный тонкому конденсатору (отрицательно заряженное электронное облако у поверхности металла и сама поверхность, заряженная положительно).

Разность потенциалов $\Delta\varphi$ между обкладками такого конденсатора зависит от работы выхода A следующим образом:

$$\Delta\varphi = \frac{A}{e}, \quad (9.1)$$

где e – заряд электрона.

Электрон, вылетая из металла, преодолевает задерживающее его электрическое поле двойного слоя.

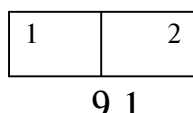
Характеризующая это поле разность потенциалов $\Delta\varphi$ называется *контактной разностью потенциалов* или *поверхностным скачком потенциала* между металлом и окружающей средой.

Контактная разность потенциалов возникает и между соприкасающимися металлами.

Пусть соприкасаются два разнородных металла с работами выхода $A_1 > A_2$. Тогда электроны проводимости будут преимущественно переходить из металла 2 в металл 1 (рис. 9.1).

При этом оба металла заряжаются пространстве электрическое поле.

Между металлами устанавливается *потенциалов*



разноименно и создают в окружающем

внутренняя контактная разность

$$\Delta\varphi_{12} = \varphi_1 - \varphi_2. \quad (9.2)$$

Между двумя точками, находящимися вблизи от поверхностей металлов 1 и 2, вне их возникает *внешняя контактная разность потенциалов*

$$\Delta\varphi'_{12} = \varphi'_1 - \varphi'_2. \quad (9.3)$$

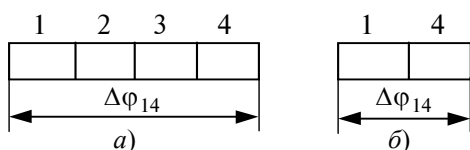
Явление возникновения описанной выше контактной разности потенциалов при соприкосновении разнородных металлов открыл в конце XVIII века итальянский физик *А. Вольта*. Экспериментально им установлено два закона.

Первый закон Вольты: соединение двух разнородных металлов приводит к образованию между ними контактной разности потенциалов, зависящей только от их химической природы и температуры.

Второй закон Вольты: если соединить последовательно несколько разнородных металлов при одинаковой температуре (рис. 9.2, а), то разность потенциалов между концами цепи не зависит от природы промежуточных металлов, а определяется только контактной разностью потенциалов, возникающей при соприкосновении крайних металлов (рис. 9.2, б).

Классическая электронная теория проводимости объясняет законы Вольты и дает возможность найти выражение для внешней и внутренней контактных разностей потенциалов.

Внешняя контактная разность потенциалов обусловлена различием в значениях работы выхода соприкасающихся металлов. И при обычных температурах, когда $\Delta\varphi_{12} \ll \Delta\varphi'_{12}$,



$$\Delta\varphi'_{12} = \frac{A_2 - A_1}{e} . \quad (9.4)$$

Появление внутренней контактной разности потенциалов связано с представлением об электронном газе.

Давление идеального газа

$$p = n_0 k T . \quad (9.5)$$

Если концентрации электронов в контактирующих металлах $n_{01} \neq n_{02}$, то даже при равенстве температур $T_1 = T_2$ давления в металлах разные. Возникает диффузионный переход электронов, пока электрическое поле не скомпенсирует влияние перепада давлений. В результате появляется внутренняя контактная разность потенциалов

$$\Delta\varphi_{12} = \frac{kT}{e} \ln \frac{n_{01}}{n_{02}} . \quad (9.6)$$

Формула (9.6) является математическим выражением первого закона Вольты (показывает, что $\Delta\varphi_{12}$ зависит от температуры и химической природы металлов).

6 ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

ЛЕКЦИЯ 10

10.1 ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

Рассмотрим замкнутую цепь из двух разнородных металлических проводников 1 и 2 (рис. 10.1).

Если температуры $T_1 = T_2$, то, в соответствии с формулой (9.6), $\Delta\varphi_1 = \Delta\varphi_2$.

Если же $T_1 \neq T_2$, то возникает *термоэлектродвижущая сила* (термоЭДС):

$$\varepsilon = \Delta\varphi_1 - \Delta\varphi_2 = \frac{k}{e} (T_1 - T_2) \ln \frac{n_{01}}{n_{02}} . \quad (10.1)$$

Обозначив

$$\frac{k}{e} \ln \frac{n_{01}}{n_{02}} = \alpha, \quad (10.2)$$

где α – удельная термоЭДС, получим

$$\varepsilon = \alpha(T_1 - T_2). \quad (10.3)$$

10.1.1 Явление Зеебека (1821)

Если спаи разнородных металлов, образующих замкнутую цепь (рис. 10.1), поддерживать при разных температурах, то в цепи в соответствии с (10.3) возникает термоЭДС, вызывающая протекание электрического тока.

Данное явление широко используется для измерения температур *термопарами*, волокна из различных металлов со собой концами. Температура постоянной, а второй спай подвергается градуировке, то термоЭДС судят о значении

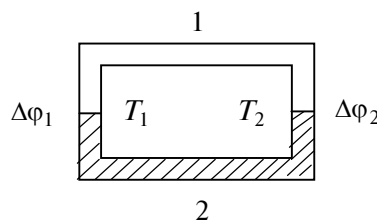


Рис. 10.1

используется для измерения которые представляют собой две про- или сплавов со сваренными между одного из спаев поддерживается по- помещается в среду, температуру Термопара предварительно гда по величине возникающей измеряемой температуры.

10.1.2 Явление Пельтье (1834)

Явление Пельтье обратное явлению Зеебека. Если через термопару, спаи которой находятся при одинаковой температуре, пропускать от внешнего источника электрический ток, то температура одного из спаев повышается, а другого – понижается, т.е. дополнительно к джоулеву теплу выделяется и поглощается тепло Пельтье:

$$Q_n = nIt, \quad (10.4)$$

где n – коэффициент Пельтье, зависящий от природы спаянных материалов; I – сила пропускаемого тока; t – время.

Между коэффициентом Пельтье и удельной термоЭДС существует соотношение, вытекающее из законов термодинамики,

$$n = \alpha T. \quad (10.5)$$

В одном из спаев электроны, движущиеся под действием внешнего электрического поля, тормозятся полем контактного слоя. Их кинетическая энергия уменьшается и, соответственно, понижается температура электронного газа, т.е. спай охлаждается.

Другой спай нагревается, так как в нем протекают противоположные процессы (электроны ускоряются).

Явление Пельтье можно использовать для создания холодильников, для отопления помещений (теплый спай – внутри помещения, охлаждающийся – снаружи, летом следует поменять направление тока, и помещение будет охлаждаться).

10.1.3 Явление Томсона (предсказал в 1856 году)

Явление Томсона аналогично явлению Пельтье. Наблюдается в однородном проводнике (а не в двух разнородных): при прохождении тока по проводнику, вдоль которого имеется градиент температуры $\frac{dT}{dx}$, выделяется или поглощается дополнительное тепло.

Выделяющаяся при этом удельная мощность

$$w = \tau \frac{dT}{dx} j, \quad (10.6)$$

где τ – коэффициент Томсона, зависящий от природы материала; j – плотность тока.

В более нагретом конце тепловые скорости электронов выше, поэтому их диффузия к холодной части больше, чем в обратном направлении. Соответственно энергия в нагретом конце больше. Если ток течет в направлении возрастания температуры, то электроны перенесут в холодную часть дополнительную энергию, выделяющуюся в виде дополнительного тепла и наоборот.

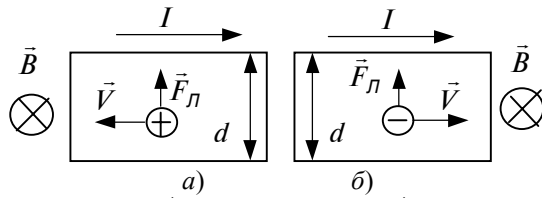
10.2 ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ

10.2.1 Эффект Холла (1880)

В проводящей пластине, помещенной в магнитное поле, при прохождении по ней электрического тока I возникает разность потенциалов U в направлении, перпендикулярном вектору магнитной индукции $\vec{B}$ и направлению тока. Эффект обусловлен действием силы Лоренца на заряды, движущиеся в проводнике.

На рис. 10.2 показана проводящая пластина шириной d , заданы взаимно перпендикулярные направления тока I и вектора $\vec{B}$ однородного магнитного поля, а также направления скоростей движения заряженных частиц $\vec{V}$ и действия силы Лоренца $\vec{F}_L$. В случае а) ток создается движением положительных зарядов (полупроводники p – типа с дырочной проводимостью), а в случае б) – отрицательных (металлы и полупроводники n – типа).

Сила Лоренца изменяет траектории движения заряженных частиц. В результате на рис. 10.2 и положительные и отрицательные заряды смещаются к верхней грани, сообщая ей соответствующий по знаку заряд. Нижние грани заряжаются противоположным зарядом. На обеих частях рисунка между верхней и нижней гранью возникает разность потенциалов U .



10 2

Установившееся электрическое поле препятствует перемещению зарядов под действием силы Лоренца. При достижении равновесия

$$F_L = F_{эл}, \text{ или } qVB = qE, \quad (10.7)$$

откуда напряженность электрического поля

$$E = VB. \quad (10.8)$$

Воспользуемся известным выражением плотности тока

$$j = qnV, \quad (10.9)$$

откуда скорость заряженных частиц

$$V = \frac{j}{qn}. \quad (10.10)$$

Подставим полученное выражение в (10.8):

$$E = \frac{j}{qn} B. \quad (10.11)$$

Выразим разность потенциалов между гранями через напряженность и расстояние между гранями d с учетом (10.11):

$$U = Ed = \frac{1}{qn} djB. \quad (10.12)$$

Обозначим в последнем выражении

$$\frac{1}{qn} = R, \quad (10.13)$$

где R – постоянная Холла.

С учетом (10.13) выражение для возникающей поперечной разности потенциалов запишется следующим образом:

$$U = RdjB. \quad (10.14)$$

Эффект Холла позволяет определить характер проводимости полупроводников, применяется в устройствах преобразования тока, в различных приборах.

10.2.2 Эффект Эттинсгаузена

При обсуждении эффекта Холла предполагалось, что носители заряда движутся с одинаковыми скоростями, тогда для всех частиц выполняется равенство (10.7).

При различных значениях скоростей зарядов указанное равенство будет выполняться только для их части, обладающей некоторой средней скоростью V_0 .

Частицы, обладающие скоростями $V > V_0$ в соответствии с (10.7) будут отклоняться по направлению действия силы Лоренца, а имеющие скорости $V < V_0$ – в сторону действия сил электрического поля. В результате быстрые частицы, имеющие большую энергию, нагревают грань, к которой подходят, а медленные – отбирают тепло у противоположной грани. Возникает поперечная разность температур, возникновение которой и называется *эффектом Эттинсгаузена*.

Может быть применен в работе охлаждающих устройств.

10.2.3 Эффект Нернста

Под действием силы Лоренца заряженные частицы движутся по круговой траектории радиусом

$$r = \frac{mV}{qB}. \quad (10.15)$$

Выражение легко получить, учитывая центростремительный характер силы Лоренца.

Быстрые частицы слабее закручиваются магнитным полем и доходят до передней грани пластины, изображенной на рис. 10.2, подогревая ее. Медленные частицы закручиваются больше и попадают на заднюю грань, охлаждая ее.

В результате возникает продольная разность температур.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Настоящее учебное пособие по курсу «Физика проводников и диэлектриков» для студентов нефизических специальностей высших учебных заведений подготовлено автором в небольшом по объему, но достаточно глубоком по содержанию и информативности издании. Его следует рассматривать как дополнительный и обобщающий материал по разрозненным сведениям по данному вопросу, изложенным в различных разделах курса общей физики, материаловедения и других.

Автор надеется, что представленный в виде небольшого числа лекций материал удобен для восприятия. Студенты, обучающиеся по техническим специальностям энергетического профиля, учебные планы которых не содержат дисциплины «Физика твердого тела» смогут составить первоначальное представление по данному предмету на основе изучения отдельных вопросов, касающихся электрофизических свойств материалов.

Опыт преподавания в техническом вузе показал, что в процессе изучения предлагаемого курса у студентов возникает интерес и к другим свойствам твердого тела (тепловым, оптическим и другими), объясняемым на основе изучения внутреннего строения вещества.

Тем, кто собирается углубить свои знания о свойствах твердых тел, порекомендуем, в первую очередь, обратиться к источникам, указанным в списке литературы. Здесь приводятся учебные пособия и монографии известных отечественных и зарубежных авторов, наиболее приемлемые для начинающих знакомство с «Физикой твердого тела». Материал изложен на доступном для студента нефизической специальности уровне без использования громоздкого математического аппарата. При желании более глубокого теоретического освоения предмета следует обратиться к источникам, указанным в списке литературы.

Настоящее учебное пособие может быть полезно и преподавателям. Количество и содержание лекций легко изменить и дополнить в соответствии с часами учебного плана. Предлагаемый курс может быть использован и в качестве элективного.

Автор предвидит возможность различного рода замечаний по подбору материала, характеру и техническим погрешностям его изложения и заранее благодарен читателю, взявшему на себя труд высказать свое мнение.

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Елифанов Г.И. **Физика твердого тела: Учеб. пособие для втузов. Изд. 2-е, перераб. и доп. М.: Высш. школа, 1977. 288 с., ил.**
2. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела: Учеб. пособие для студентов. М.: Высш. школа, 1985. 384 с., ил.
3. Блейкмор Дж. Физика твердого тела: Пер. с англ. М.: Мир, 1988. 608 с., ил.
4. Детлаф А.А., Яворский Б.М. Курс физики: Учеб. пособие для втузов. М.: Высш. школа, 1989. 608 с., ил.
5. Новиков Н.И. Дефекты кристаллического строения металлов. М.: Металлургия, 1975. 208 с., ил.
6. Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир, 1967, 643 с., ил.
7. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 791 с., ил.
8. Матаре Г. Электроника дефектов в полупроводниках: Пер. с англ. М.: Мир, 1974. 463 с., ил.

ПРЕДИСЛОВИЕ

1 КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ ТВЕРДЫХ
ТЕЛ

ЛЕКЦИЯ 1

1.1 Роль современных представлений о структуре и
физиче-
ских свойствах проводников и диэлектриков в
подготовке
инженеров электротехнического и электроэнер-
гетического
профиля

1.2 Кристаллические и аморфные тела

1.3 Кристаллическая решетка. Трансляционная
симметрия

1.4 Физические типы кристаллов

ЛЕКЦИЯ 2

2.1 Дефекты кристаллического строения Точеч-
ные дефекты:
вакансии, примеси внедрения и замещения

2.2 Краевые и винтовые дислокации. Механиче-
ское двойни-
кование

2.3 Влияние дефектов кристаллических материалов
на их
электрофизические свойства

2 ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ И
ПОЛУПРОВОДНИКОВ

ЛЕКЦИЯ 3

3.1 Классическая электронная теория проводи-
мости металлов
Предпосылки создания

3.2 Основные электрические свойства металлов

3.3 Модель Друде

3.4 Модель Лоренца

.....

3.5 Недостатки классической теории проводимости

.....

ЛЕКЦИЯ 4

.....

4.1 Квантовая теория свободных электронов.

Вырожденный и

невырожденный электронный газ

.....

4.2 Статистика Ферми-Дирака для электронного газа

4.3 Модель электропроводности металлов Зоммерфельда

ЛЕКЦИЯ 5

.....

5.1 Зонная теория твердого тела. Энергетиче-

ские зоны в

кристаллах Движение электронов в периодическом поле

Функции Блоха

.....

5.2 Заполнение зон электронами. Металлы, диэлек-

трики и

полупроводники

.....

5.3 Собственная и примесная проводимость полупроводников

5.4 Фотопроводимость полупроводников

.....

3 ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

.....

ЛЕКЦИЯ 6

.....

6.1 Электрические характеристики диэлектриков

.....

6.2 Микроскопическая теория диэлектрических свойств

6.3 Механизмы поляризации в диэлектриках

.....

4 МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

.....

ЛЕКЦИЯ

7

.....

7.1 Магнитное поле в магнетиках. Диамагнетики, парамагнетики и ферромагнетики. Намагниченность

.....

7.2 Природа диамагнетизма. Прецессия электронных орбит.

ЛЕКЦИЯ

8

8.1 Природа парамагнетизма. Классическая теория Ланжевена

8.2 Квантовая природа парамагнетизма

8.3 Природа ферромагнетизма. Молекулярное поле Вейсса

8.4 Роль обменного взаимодействия в спонтанном намагничивании ферромагнетиков

8.5 Доменная структура ферромагнетиков

8.6 Антиферромагнетизм. Ферримагнетизм Ферриты

5 КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

ЛЕКЦИЯ

9

9.1 Работа выхода электрона из металла

9.2 Контактная разность потенциалов

6 ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

ЛЕКЦИЯ

10

10.1 Термоэлектрические явления

10.2 Гальваномагнитные эффекты

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ