

III. Элементы квантовой статистики

Лекция № 7

Особенности квантовомеханического описания и два типа квантовых статистик

1. Напоминание о квантовой механике.
2. Каноническое распределение Гиббса в квантовой статистике.
3. Принцип неразличимости частиц и квантовая статистика.

1. В классической статистике исходили из того, что движение частиц, составляющих систему, определено законами классической механики (в форме Ньютона или Гамильтона). Классическая статистическая физика хорошо объясняет свойства идеального газа при достаточно высоких температурах. Оказалось, что если ее применять для изучения других “газов” - электронного газа в металлах и фотонного газа (электромагнитного теплового излучения), то получим качественно и количественно неверные результаты. Причина этого заключается не в непригодности общих статистических методов, а в специфике квантовых законов.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ устанавливает различия в описании состояний систем в квантовой и классической механике. Состояние частицы в классической механике описывается с помощью координат $\vec{r}$ и импульсов $\vec{p}$ (точка в фазовом пространстве). Квантовая же частица в состоянии с определенными координатами (x, y, z) не обладает определенным импульсом. То есть, для квантовой частицы не существует состояний, в которые ее координаты и импульсы имели бы одновременно точные значения.

Состояние квантовой системы описывает главная величина в квантовой механике – **волновая функция** $\psi(x, y, z, t)$ (в более широком смысле – **вектор состояния**). Пред-

полагается, что в ней содержится вся информация о данной физической системе. Интерпретация волновой функции, предложенная Борном и принятая в квантовой механике, заключается в том, что величина $d\omega = |\psi|^2 dV$ определяет вероятность того, что частица будет обнаружена в элементе объема dV , расположенном в окрестности точки с координатами x, y, z . И утверждение о том, что волновая функция описывает состояние квантовой системы, означает, что эта функция позволяет определить вероятности возможных результатов измерений для всех физических величин, характеризующих эту систему. Понятия вероятности в квантовой механике необходимы с самого начала в отличие от классической механики. Сумма вероятностей всех возможных значений координат системы должна, по определению, быть равной единице. Поэтому

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$

Это равенство представляет собой условие нормировки.

Важнейшим положением квантовой механики является **принцип суперпозиции**. Он следует из волновых свойств частиц, и суть его сводится к следующему. Пусть квантовая система может находиться в состоянии ψ_1 , в котором измеряемая физическая величина L имеет определенное значение L_1 , в состоянии ψ_2 — соответственно L_2 и т.д. Тогда линейная комбинация (суперпозиция) волновых функций $\psi = \sum_n c_n \psi_n$ (c_n — произвольные постоянные)

также является волновой функцией, описывающей одно из возможных состояний системы. Измерение величины L в состоянии, описываемом волновой функцией ψ даст одно из значений $L_1, L_2, \dots, L_n$. Если индекс n пробегает непрерывный ряд значений, то суммирование должно быть заменено интегрированием. Важность принципа суперпозиции заключается в том, что он ограничивает возможные уравнения для ψ линейными уравнениями и тем самым определяет выбор математического аппарата квантовой механики.

Шредингер установил соответствующее уравнение для волновой функции. Его следует понимать как один из постулатов квантовой механики, и оно играет в ней такую же роль, как 2-ой закон Ньютона в классической механике. Для **стационарных состояний**, в которых вероятности измерения физических величин не зависят от времени, уравнение Шредингера имеет вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi = E \psi \quad (7.1)$$

Здесь $\hbar = h/2\pi$; m – масса частицы;

$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа; $U(x, y, z)$ – по-

тенциальная энергия частицы, а E – ее полная энергия.

Выражение в скобках имеет характер оператора; оно указывает все операции, которые должны быть выполнены над волновой функцией ψ и называется оператором Гамильтона $\hat{H}$. Операторы обычно обозначают буквой со шляпкой. Так что уравнение (7.1) в сокращенной форме имеет вид $\hat{H}\psi = E\psi$. Для нахождения волновой функции из (7.1) должны быть еще заданы граничные условия, которые сводятся к требованию однозначности и непрерывности волновой функции и ее первой производной.

Как и в любой теории, дающей вероятностное описание, в квантовой механике сопоставление с опытом производится для средних значений физических величин.

Рассмотрим общие свойства решений уравнения Шредингера на простом примере движения электрона в прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме, параметры которой определены следующим образом

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{при } x \leq 0 \text{ и } x \geq a \end{cases}$$

Оказывается на этом примере уже можно установить ряд общих свойств для квантовомеханических систем.

Кроме того, модель потенциальной ямы используется в качестве простой модели металла.

Электрон может двигаться по оси x в обоих направлениях, но не может находиться вне ящика, где $U = \infty$, а $\psi = 0$. Найдем выражения для $\psi(x)$, энергии и импульса электрона в ящике. Уравнение Шредингера для одномерного движения внутри ящика имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = \varepsilon\psi(x) \quad (7.2)$$

Граничные условия: $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Общее решение такого уравнения известно: $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$.

Мы ввели обозначение $k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}$. Из 1-го граничного условия получаем $\psi(0) = A \sin k \cdot 0 + B \cos k \cdot 0$; т.е. $B=0$.

Из 2-го граничного условия получаем $\psi(a) = A \sin ka = 0$, откуда $ka = \pi n$, где $n=1,2,3,\dots$ - целое число. В дальнейшем оно будет именоваться квантовым числом. Так что с помощью этого условия получим

$$\varepsilon_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \cdot n^2 \quad (7.3)$$

Видно, что уравнение Шредингера имеет решения, удовлетворяющие граничным условиям только при дискретных значениях квантового числа n . Таким образом, энергия электрона в этой задаче оказывается квантованной. Причем дискретность энергии возникла естественным образом, без каких-либо дополнительных предположений, как следствие граничных условий, налагаемых на волновую функцию. Состояние электрона с наименьшей возможной энергией будет в дальнейшем именоваться нормальным или основным, все остальные состояния – возбужденными. Оказывается, что состояние квантовой системы (электрон в потенциальной яме в нашем примере) определяется квантовым числом n . От него зависит энер-

гия (7.3), им определяется вид волновой функции $\psi_n = A \sin \pi x n / a$ и импульс электрона $p_n = \pi \hbar n / a$.

Из (7.3) следует, что расстояние между соседними уровнями энергии равно

$$\Delta \varepsilon_n = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2 m} \cdot (2n + 1) \quad (7.4)$$

и оно тем меньше, чем больше размеры ящика a - размеры области движения. Так что, если электрон движется в области макроскопических размеров ($a \approx 1$ см, например), то расстояния между энергетическими уровнями настолько малы, что образуют практически непрерывный спектр. В лекции № 11 будет показано, что подобную модель можно успешно использовать для описания состояния свободных электронов в металле и что максимальное значение n в металлах $\approx 10^7$. При таких значениях n относительное расстояние между энергетическими уровнями

$$\frac{\Delta \varepsilon_n}{\varepsilon_n} = \frac{2n + 1}{n^2} \approx \frac{1}{n} = 10^{-7}$$

ничтожно мало. Это означает, что дискретный характер состояний свободных электронов в металле проявляется весьма слабо.

В квантовой механике показано, что она переходит в классическую, когда длина волны λ становится достаточно малой по сравнению с характерными размерами, зависящими в каждом отдельном случае от условий задачи. Для движения частицы в ящике условие такого перехода сводится к неравенству $n \gg 1$ или $a \gg \lambda$.

В этом случае волновые свойства частиц проявляются незначительно. Частицы можно считать движущимися по определенным траекториям, как и в классической механике. Но квантование состояний сказывается в том, что оказываются возможными не все, а только некоторые из классических траекторий. Такое приближение называется **квазиклассическим**. Как еще можно сформулировать эти

ограничения, имея в виду описание состояний системы в квантовой статистике?

Классическое описание движения частицы с помощью координат и импульсов, которое строго говоря, недопустимо в квантовой механике, приближенно может быть применено, если координата и соответствующая проекция импульса устанавливаются с неопределенностями $\Delta x, \Delta p_x$, связанными соотношениями Гейзенберга $\Delta x \Delta p_x \geq h$. Это значит, что в квазиклассическом приближении состояние частицы при одномерном движении на фазовой плоскости (x, p_x) изображается не точкой, а прямоугольником с площадью $\Delta x \cdot \Delta p_x = h$. Поэтому для любого квантовомеханического объекта с s степенями свободы состояние описывается в квазиклассическом приближении не точкой в фазовом пространстве $2s$ измерений (см. лекция 4), а ячейкой с объемом h^s . Таким образом, в квазиклассическом приближении (при больших квантовых числах или при коротких волнах) условие квантования состояний заключается в том, что каждому квантовому состоянию произвольной системы отвечает ячейка в фазовом пространстве, имеющая объем h^s .

2. Квантовая статистика – это применение статистического метода Гиббса для описания квантовых систем. Суть статистического метода одинакова и для классических, и для квантовых систем: необходимо определить вероятность того, что система находится в данном микросостоянии. Для классической статистики микросостояние – это одновременное задание координат и импульсов (q, p) всех частиц системы. Для квантовой системы это невозможно из-за принципа неопределенности. Квантовая система может иметь только определенный набор дискретных значений энергий, называемый ее энергетическим спектром. Каждому значению энергии E_n соответствует одно или несколько различных квантовых состояний. Под n понимается совокупность квантовых чисел, которые и определяют состояние системы. Так что микросостояние

квантовой системы – это задание полного набора квантовых чисел n ($n_1, n_2, \dots$) или соответствующих значений энергий E_n ($E_1, E_2, \dots$) системы.

Пусть квантовая система находится в контакте с термостатом (окружающей средой) при температуре T (заданы число частиц N , объем системы V и температура T). Тогда, основываясь по существу на тех же постулатах (см. лекция № 4), можно показать, что выражение для вероятности ω_n того, что система находится в квантовом состоянии с энергией E_n , определяется соотношением, подобным 4.10)

$$\omega_n = \frac{1}{Z} e^{-E_n / kT} \quad (7.5)$$

(7.5) – **каноническое распределение Гиббса в квантовой статистике**. Z называется **статистической суммой** системы

$$Z = \sum_n e^{-E_n / kT} \quad (7.6)$$

Она заменяет в квантовой статистике статистический интеграл (4.9). Важно отметить, что ω_n – это именно вероятность данного состояния системы, а не вероятность системы иметь определенное значение энергии E_n , потому что при вырождении данной энергии может соответствовать не одно, а несколько различных состояний. С помощью распределения Гиббса (7.5) можно вычислить среднее по ансамблю (статистическое среднее) любой физической величины, зависящей от состояния системы. Если $L(E_n)$ – значение этой величины для состояний с энергией E_n , то по определению среднего значения (1.19)

$$\bar{L} = \sum_n L(E_n) \omega_n \quad (7.7)$$

В общем виде нахождение (7.5) и (7.7) представляет собой трудную задачу, потому что требует введения и использования новых понятий в квантовой механике и статистике (смешанное состояние, матрица плотности, статистический оператор).

Однако особенности, которые характеризуют макроскопические тела, часто дают возможность применения достаточно простого **квазиклассического приближения**, о котором уже упоминали в предыдущем параграфе и которое позволяет наглядно решить ряд задач в квантовой статистике. Эти особенности сводятся к необычной густоте распределения энергетических уровней в спектре макроскопического тела (см. дополнение к этой лекции), так что их можно считать непрерывно распределенными. И совокупность дискретных уровней $E_1, E_2, \dots$ можно заменить непрерывной функцией E . Иными словами, мы переходим к квазиклассическому описанию. Далее целесообразно ввести **понятие плотности состояний** $g(E)$ так, что величина $g(E) dE$ равна числу квантовых состояний, приходящихся на интервал значений энергии от E до $E + dE$ и если обозначим через $d\omega$ вероятность того, что система находится в одном из состояний с энергией между E и $E + dE$, то распределение Гиббса (7.5) можно записать так

$$d\omega = \frac{1}{Z} e^{-E/kT} g(E) dE \quad (7.8)$$

А статистическая сумма Z заменится интегралом по всем состояниям

$$Z = \int g(E) e^{-E/kT} dE \quad (7.9)$$

Пределы интегрирования в (7.9) зависят от конкретных свойств системы и условий, в которых она находится.

Теперь легко установить связь между плотностью квантовых состояний $g(E)$ и объемом фазового пространства $d\Gamma$, соответствующего интервалу энергий dE ($d\Gamma = \frac{\partial \Gamma}{\partial E} dE$). Так как в квазиклассическом приближении на каждое квантовое состояние «приходится» в фазовом пространстве ячейка объемом h^s , то

$$g(E) dE = \frac{d\Gamma}{h^s} = \frac{1}{h^s} \frac{\partial \Gamma}{\partial E} dE \quad (7.10)$$

Далее, поскольку по определению (см. 1.14) можно записать $d\omega = f(E) dE$, то получим выражение для функции распределения Гиббса $f(E)$ в квазиклассическом приближении

$$f(E) = \frac{1}{Z \cdot h^s} e^{-E/kT} \frac{\partial \Gamma}{\partial E} = \frac{1}{z} e^{-E/kT} g(E) \quad (7.11)$$

Отметим еще раз, что квазиклассическое приближение применимо для описания поступательного движения квантовых частиц в достаточно большом объеме. Поэтому в дальнейшем мы применим его для анализа состояний электронов в металлах, фононов в кристаллах и электронов и дырок в полупроводниках. Таким образом, при изложении квантовой статистической физики и ее приложений, квантовый характер систем будем рассматривать в этом курсе лекций на основе квазиклассического приближения, в котором каждому квантовому состоянию соответствует ячейка объемом h^s в фазовом пространстве. Так будет учитываться дискретность квантовых состояний.

В качестве примера найдем плотность состояний для частицы, свободно движущейся в ящике.

Фазовое пространство для свободной частицы имеет шесть измерений. Поэтому каждому квантовому состоянию соответствует объем h^3 в фазовом пространстве. Для определения $g(\varepsilon)d\varepsilon$ необходимо найти весь объем фазового пространства, отвечающего энергии частицы, лежащей между ε и $\varepsilon + d\varepsilon$, и разделить его на h^3 .

Элемент объема фазового пространства в этом случае

$$d\Gamma = dx dy dz dp_x dp_y dp_z \quad (7.12)$$

Объем фазового пространства Γ , отвечающий энергии частицы, равной данной величине, получается интегрированием выражения (7.12) по всем координатам и импульсам, удовлетворяющим условию $0 \leq p < \sqrt{2m\varepsilon}$ (Для

свободной частицы $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$). Переходя к сферическим координатам, получим

$$\begin{aligned}
 \Gamma &= \int dx dy dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta p^2 dp = \\
 &= 4\pi V \int_0^{\sqrt{2m\varepsilon}} p^2 dp = \frac{4\pi(2m)^{3/2} \varepsilon^{3/2} V}{3}
 \end{aligned}
 \tag{7.13}$$

Объем фазового пространства, отвечающий энергии между ε и $\varepsilon + d\varepsilon$, равен

$$d\Gamma = \frac{\partial \Gamma}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = 4\pi m V \sqrt{2m\varepsilon} d\varepsilon \tag{7.14}$$

И окончательно величина $g(\varepsilon)d\varepsilon$ - число квантовых состояний частицы, энергия которых находится в интервале между ε и $\varepsilon + d\varepsilon$

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{1}{h^3} \cdot \frac{d\Gamma}{d\varepsilon} d\varepsilon = \frac{4\pi m V \sqrt{2m\varepsilon}}{h^3} d\varepsilon \tag{7.15}$$

Следует отметить, что при больших квантовых числах (больших ε) величина $g(\varepsilon)$ оказывается огромной. Так для свободных электронов в металле при $V=1 \text{ см}^3$ и $\varepsilon \approx 1 \text{ эв} = 10^{-19} \text{ Дж}$ получим $g(\varepsilon) \approx 10^{41} \text{ Дж}^{-1}$.

3. При квантовомеханическом описании систем, состоящих из одинаковых частиц, появляются свои особенности, которые нельзя вывести из сформулированных ранее положений квантовой механики и поэтому эти особенности следует принимать как новые самостоятельные постулаты (принципы).

В классической механике одинаковые частицы (например, молекулы газа) несмотря на тождественность их физических свойств, не теряют своей “индивидуальности”. Ведь за движением каждой из них можно следить по ее траектории. Так что в любой момент классические частицы можно идентифицировать (различить). В квантовой же механике из-за принципа неопределенности понятие о траектории частицы теряет смысл. Поэтому в квантовой

механике принципиально не существует возможности следить в отдельности за каждой из одинаковых частиц и тем самым различать их.

Этот, как говорят, **принцип неразличимости** одинаковых частиц играет основную роль в квантовой статистике. Частицы одного и того же сорта не могут иметь никаких различимых или характерных особенностей. Поэтому взаимные перестановки двух одинаковых частиц не изменяют физическое состояние рассматриваемой системы. Рассмотрим, например, систему из N одинаковых частиц. Перестановка каких-нибудь двух (пусть частиц 1 и 2) не должна сказаться на физической ситуации. Так как ψ - амплитуда вероятности, а вероятности определяются величиной $|\psi|^2$, потребуем выполнение условия

$|\psi(1,2,\dots)|^2 = |\psi(2,1,\dots)|^2$. Удовлетворить этому можно двумя способами. Либо

$$\psi(1,2,\dots) = +\psi(2,1,\dots),$$

либо $\psi(1,2,\dots) = -\psi(2,1,\dots)$

Они соответствуют двум основным квантовым статистикам: статистике Бозе, в которой волновая функция не изменяется при перестановке двух частиц, и статистике Ферми, в которой перестановка двух частиц сопровождается изменением знака волновой функции. Тип статистики, по-видимому, принадлежит к одному из наиболее глубоких свойств вещества, так как все известные элементарные частицы подчиняются либо статистике Бозе, либо статистике Ферми.

Принадлежность частиц к тому или другому классу зависит от величины их **собственного момента, спина**.

Частицы, спин которых равен целому числу квантов $\hbar$

$$s = m\hbar \quad (m=0,1,2,\dots) \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (7.16)$$

описываются симметричными ψ - функциями (сохраняют знак при перестановке двух частиц). Они называются частицами Бозе или **бозонами**. Статистике Бозе подчиняются частицы, состоящие из четного числа элементарных час-

тиц. Частицы же, спин которых равен полуцелому числу квантов действия $\hbar$,

$$s = m\hbar \quad (m = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots) \quad (7.17)$$

описываются антисимметричными волновыми функциями. Они называются частицами Ферми или **фермионами**. Электроны, протоны, нейтроны и вообще атомы, ионы, атомные ядра, состоящие из нечетного числа элементарных частиц, имеют полуцелый спин и подчиняются статистике Ферми. Эта статистика тесно связана с принципом Паули. Например, он исключает возможность существования двух электронов с одинаковым набором квантовых чисел. Принцип Паули справедлив для любых фермионов: в системе одинаковых фермионов не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии две (или более) частицы. В распределении Гиббса (7.5) неразличимость частиц непосредственно не видна. Она присутствует в неявной форме, оказывая влияние на энергетический спектр E_n системы. К каким явным изменениям в статистическом распределении приведет учет неразличимости квантовых частиц мы рассмотрим в следующей лекции, анализируя свойства идеального газа квантовых частиц.

Дополнение

Для конденсированных систем характерна необычайная густота распределения энергетических уровней. Так как на каждое квантовое состояние «приходится» в фазовом пространстве «клетка» объемом h^s (s – число степеней свободы системы), то число квантовых состояний W в элементе фазового объема $\Delta p \cdot \Delta q$ равно

$$W = \frac{\Delta p \cdot \Delta q}{h^s} = \frac{\Delta \Gamma}{h^s} \quad (D1)$$

*Величину W называют еще **статистическим весом** состояния системы и часто вводят безразмерную энтропию системы S , как $S = \ln W$. От обычной энтропии она отличается множителем k (k – постоянная Больцмана).*

Укажем на одно интересное истолкование энтропии для изолированной системы. В этом случае энтропия является функцией только энергии системы (лек. № 4). Статистический вес $W = e^{S(E)}$ по самому своему определению есть число уровней энергии, приходящееся на интервал ΔE и характеризующее ширину распределения вероятностей состояния по энергии. Разделив ΔE на W , получим среднее расстояние между соседними уровнями энергии на данном участке энергетического спектра системы вблизи энергии E . Обозначив это расстояние как $D(E)$, можем записать

$$\frac{\Delta E}{W} = D(E) = \frac{\Delta E}{e^{S(E)}} \quad (D2)$$

Таким образом, функция $S(E)$ характеризует плотность уровней энергетического спектра макроскопической системы. Так как энтропия – аддитивная величина, то из этого соотношения следует, что среднее расстояние между уровнями макроскопического тела **экспоненциально** уменьшается с увеличением его размеров (т.е. числа частиц в нем) и выражается числами вида 10^{-N} (где N – число порядка величины числа частиц в теле). Нетрудно оценить, например, интервал между уровнями энергии электронов в металле из соотношения неопределенности $\Delta x \Delta p \approx \hbar$. В модели свободных электронов их энергия $E = p^2/2m$, а величина $\Delta(p^2)/2m$ тогда определяет минимальный интервал между энергетическими уровнями электронов в металле. Приняв в соотношении неопределенности $\Delta x = L = \text{размер куска металла}$, имеем

$$D(E) \approx \frac{\Delta(p^2)}{m} \approx \frac{\hbar^2}{mL^2} \quad (D3)$$

Подставив $m = 10^{-30}$ кг для электрона и $L \sim 10^{-2}$ м, получим $D(E) \approx 10^{-32}$ Дж. Чтобы подчеркнуть насколько это малая величина, сравним ее с расстоянием между энергетическими уровнями в атоме $\sim 10^{-18}$ Дж и со средней энергией теплового движения $\sim kT \approx 10^{-21}$ Дж.

Из-за чрезвычайной плотности уровней энергии макроскопическое тело никогда не может находиться в строго стационарном квантовом состоянии. Взаимодействие с другими телами, каким бы малым оно не было, будет еще чрезвычайно велико по сравнению с исчезающе малыми величинами $D(E)$. Так что

имеется некоторый присущий системе неизбежный беспорядок, который обусловлен существованием большого числа заселенных энергетических уровней и который объясняет стохастичность всех физических величин для конденсированных систем.

Лекция № 8

Функции распределения для идеальных газов квантовых частиц

1. Введение.
2. Распределения Ферми и Бозе.
3. Условия вырождения газа. Связь между квантовой и классической статистиками.
4. Представление о квазичастицах.

1. Одним из важнейших объектов изучения статистической физики является **идеальный газ**. Взаимодействие между частицами его настолько мало, что им можно пренебречь. Отсутствие взаимодействия между частицами газа позволяет свести квантовомеханическую задачу об определении уровней энергии E_n всего газа в целом к задаче об определении уровней энергии отдельной частицы. Эти уровни будем обозначать ε_i , где индекс i представляет собой совокупность квантовых чисел, определяющих состояние частицы. Энергии E_n выразятся тогда в виде сумм энергий каждой частицы

$$E_n = \sum_i \varepsilon_i n_i \quad (8.1)$$

где n_i - число частиц в газе, находящихся в i -м квантовом состоянии; числа n_i называют **числами заполнения** различных квантовых состояний.

В реальных же квантовых системах, состоящих из большого числа заряженных частиц (электронов, ионов, ядер, ...) из-за взаимодействия между частицами, строго говоря, имеет смысл говорить лишь о волновой функции системы в целом, а не каждой частицы в отдельности. Поэтому следует говорить об энергетических уровнях всей системы (макроскопического тела). Точный учет взаимодействия между частицами такой системы представляет, однако, исключительную по трудности задачу.

Поэтому ее решение естественно может носить лишь приближенный характер.

Трудности квантовой теории взаимодействующих частиц приводят к необходимости выбора подходящего нулевого (исходного) приближения. Оно должно быть математически достаточно простым и отражать свойства реальной системы многих частиц. Основные проблемы в квантовой теории многих взаимодействующих частиц – связаны с тем, что понятие состояний отдельных частиц системы теряет свой точный смысл и может рассматриваться, в лучшем случае, как некоторое приближение к действительности. Естественно поэтому выбрать нулевое приближение теории многих частиц так, чтобы оно было совместимо с понятием индивидуальных состояний отдельных частиц. Приближения такого рода называют **одночастичными**.

Простейшим из одночастичных приближений является модель идеального газа, в которой взаимодействие между частицами не учитывается совсем. Каждая частица меняет свое состояние независимо от других. Квантовые состояния – одночастичные состояния - определяются уравнением Шредингера

$$H_1(\vec{p}, \vec{r})\psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\vec{r})$$

где H_1 – гамильтониан одной частицы; $\psi_i(\vec{r})$ - их волновые функции; ε_i - энергии этих одночастичных квантовых состояний (см. (8.1)).

Так как в квантовой механике тождественные частицы неразличимы, каждое квантовое состояние системы полностью определено, когда заданы значения чисел заполнения одночастичных состояний. Иначе говоря, совокупность чисел заполнения $\{n_i\} = (n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)$ определяет квантовые числа всей системы.

2. Как уже неоднократно отмечалось, основная задача в статистической физике сводится к нахождению функции распределения для данной системы. Наша система - иде-

альный газ квантовых частиц. Для него найти функцию распределения означает: найти вероятность нахождения частицы в i -м квантовом состоянии или среднее число $\overline{n_i}$ частиц в этом состоянии с энергией ε_i .

Общие принципы квантовой механики накладывают строгие ограничения на возможные значения чисел заполнения или чисел частиц в каждом одночастичном состоянии. Для газа квантовых частиц, состояние которых описывается антисимметричными волновыми функциями, справедлив принцип Паули: в каждом квантовом состоянии может находиться одновременно не более одной частицы. Следовательно, возможные значения n_i ограничены двумя значениями: $n_i = 0$ и $n_i = 1$. То есть, состояние может быть либо заполнено, либо не заполнено. Если идеальный газ таких частиц находится в равновесии, то можно показать, что среднее число частиц в i -м квантовом состоянии определяется следующим образом

$$\overline{n_i} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT} + 1} \quad (8.2)$$

где T – температура, μ – химический потенциал (см. раздел «Термодинамика» и лекцию № 1), k – постоянная Больцмана. Это и есть функция распределения для идеального газа, подчиняющегося статистике Ферми (для краткости о таком газе говорят как о ферми-газе). При $\exp(\varepsilon_i - \mu)/kT \gg 1$ она переходит, как и следовало, в функцию распределения Больцмана.

Если ферми-газ находится в контакте с термостатом при температуре T (канонический ансамбль), то соотношение

$$U = \overline{E} = \sum_i \varepsilon_i \overline{n_i} \quad (8.3)$$

определяет среднюю энергию газа, а условие

$$\sum_i \bar{n}_i = \sum_i \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT} + 1} = N \quad (8.4)$$

определяет полное число частиц в газе и в неявном виде задает химический потенциал μ как функцию T и N .

Если идеальный газ состоит из частиц с целым спином, состояние которых описывается симметричными волновыми функциями, то такие частицы запрету Паули не подчиняются, и число частиц n_i , которые могут находиться в данном квантовом состоянии, ничем не ограничено. При этом функция распределения идеального газа, подчиняющегося статистике Бозе, имеет такой вид (сравните с (8.2))

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT} - 1} \quad (8.5)$$

Она отличается от функции распределения Ферми знаком перед единицей в знаменателе. Но по существу отличия будут значительными. Так при $T=0$ К для бозе-газа энергетический спектр будет представлен единственным основным уровнем с нулевой энергией. Все частицы находятся на этом уровне, так как в одном и том же квантовом состоянии одновременно может находиться произвольное число частиц.

Отметим еще раз, что в квантовой статистике изображение состояния в фазовом пространстве (пространстве q, p), строго говоря, невозможно, так как в соответствии с соотношением неопределенности координаты q и импульсы p не могут иметь одновременно определенных значений. Поэтому вместо распределения по участкам фазового пространства в квантовой статистике ищут распределение непосредственно по энергиям.

Распределениями Ферми и Бозе в форме (8.2) и (8.5) следует пользоваться, если дискретность спектра энергий в системе выражена отчетливо. В то же время при решении многих задач (электроны в металле, колебания кристаллической решетки в твердых телах, электромагнитное равновесное излучение в полости — абсолютно черное

тело и т.д.) можно считать, что спектр возможных значений энергии ε практически непрерывен. В этом случае функция распределения для квантовых идеальных газов может быть записана в таком виде $\bar{n} = f$ и равно

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/kT} \pm 1} \quad (8.6)$$

где знак "+" относится к статистике Ферми, а "-" - к статистике Бозе.

Чтобы при этом определить число квантовых состояний при квазинепрерывном распределении энергетических уровней в §2 предыдущей лекции была введена функция, которую называют плотностью состояний $g(\varepsilon)$. И число состояний в интервале энергий $d\varepsilon$ будет равно $g(\varepsilon) d\varepsilon$. С помощью этой функции средняя энергия системы и число частиц (уравнения (8.3) и (8.4)) могут быть записаны так

$$\bar{E} = \int \varepsilon f(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon \quad (8.7)$$

$$N = \int f(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon \quad (8.8)$$

Примером идеального ферми - газа может служить известная модель, объясняющая многие свойства металлов – «газ» свободных электронов в металлах. Для электронного газа в металлах при $T=0$ распределение Ферми имеет особенно простой вид. Энергетический спектр электронов будет представлять квазинепрерывные (практически непрерывные, близко отстоящие друг от друга значения энергии) уровни, начинающиеся с нулевого уровня и заканчивающиеся некоторым граничным уровнем $\varepsilon_f = \mu$ - уровнем (энергией) Ферми. Энергия ε_f зависит от общего числа электронов в металле. Такой характер заполнения энергии объясняется тем, что в одном квантовом состоянии с энергией ε не может находиться более одного электрона.

Итак, функция распределения для свободных электронов в металле

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \varepsilon_f)/kT} + 1} \quad (8.9)$$

Графически при $T=0$ она представляется следующим образом (рис.8.1). Для всех состояний с энергией

$$\varepsilon < \varepsilon_f$$

$$f = \frac{1}{0 + 1} = 1$$

То есть, все эти состояния заняты.

Все состояния электронов с $\varepsilon > \varepsilon_f$ свободны. Потому что для них

$$f = \frac{1}{\infty + 1} = 0. \text{ По мере}$$

увеличения температуры распределение становится более плавным – состояния, энергия которых меньше ε_f на величину средней тепловой энергии kT , частично «опустошаются», а состояния с энергией, превышающей ε_f на ту же величину, наоборот частично заполняются (рис.8.2).

Примером идеального бозе - газа является «фотонный газ» свободного электромагнитного излучения в полости – модель абсолютно черного тела. Для него

$\mu = 0$, $h\nu = \varepsilon$. Так что функция распределения имеет такой вид

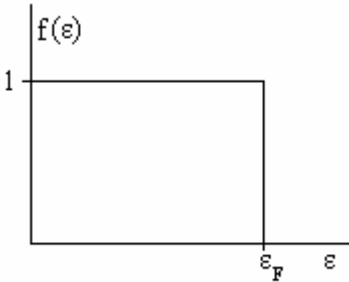


Рис. 8.1

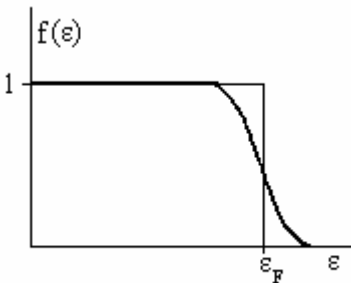


Рис. 8.2.

$$f = \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (8.10)$$

Это средняя степень заполнения квантовых состояний фотонами, среднее число фотонов в состоянии с энергией $h\nu$.

Не всегда для объяснения физических явлений можно пользоваться простыми моделями- системами, в которых взаимодействие между частицами настолько мало, что их можно рассматривать как идеальный газ (фотоны, фононы, электроны проводимости в металлах). Например, при фазовых переходах (плавление, ферромагнетизм, порядок – беспорядок в сплавах) взаимодействие между частицами настолько сильно, что такие упрощения недопустимы и необходимо разрабатывать специальные приближенные методы.

3. Установим критерий применимости квантовой и классической статистики применительно к идеальному газу. Для этого выясним, при каких условиях функции распределения Ферми и Бозе перейдут в функцию распределения Максвелла-Больцмана.

Рассмотрим конкретно случай идеального газа в отсутствие внешнего поля (просто, например, идеальный одноатомный газ при определенных давлении и температуре или газ свободных электронов в металле). Для него возможные значения энергии поступательного движения частиц в сосуде конечных размеров распределены практически непрерывно. Так что

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

При этом оба квантовых распределения можно записать в виде одной формулы

$$f(\varepsilon) = \frac{dN}{dW} = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/kT} \pm 1} \quad (8.11)$$

где dN – число частиц газа в состояниях с энергией от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$, а dW – число таких состояний. $dW = d\Gamma / h^3$, а

$d\Gamma = dxdydz \cdot dp_x dp_y dp_z$ -элементы фазового объема свободной частицы идеального газа в μ - пространстве. (8.11) переходит в распределение Максвелла-Больцмана (лекция № 6), если выполняется неравенство $e^{(\mu-\varepsilon)/kT} \ll 1$ при любых ε . Так как $\varepsilon \geq 0$, то условие можно заменить более жестким

$$e^{\mu/kT} \ll 1 \quad (8.12)$$

При выполнении этого условия мы можем найти $e^{\mu/kT}$, переписав теперь (8.11) в таком виде

$$dN = dW e^{\mu/kT} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} = e^{\mu/kT} \frac{d\Gamma}{h^3} e^{-\varepsilon/kT} \quad (8.13)$$

Используем условие нормировки $\int dN = N$ - полное число частиц.

$$N = e^{\mu/kT} \frac{V}{h^3} \int \int \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2mkT}} dp_x dp_y dp_z \quad (8.14)$$

Интегрирование по координатам дает объем сосуда V . В (8.14) три одинаковых интеграла Пуассона I .

Напомним, что

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{1/2} \quad (8.15)$$

В нашем случае каждый из интегралов равен

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-p_x^2/2mkT} dp_x = (2\pi mkT)^{1/2} \quad (8.16)$$

Так что (8.14) можно переписать так

$$N = e^{\mu/kT} \frac{V}{h^3} (2\pi mkT)^{3/2} \quad (8.17)$$

или

$$e^{\mu/kT} = \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2} \quad (8.18)$$

Так что из (8.12) следует, что если

$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \gg 1 \quad (8.19)$$

газ будет подчиняться распределению Больцмана.

Если же выполняется условие

$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \ll 1 \quad (8.20)$$

то это означает, что для описания свойств газа необходимо воспользоваться одним из квантовых распределений.

Газ, подчиняющийся распределению Максвелла-Больцмана, называется невырожденным, а газ, подчиняющийся одному из квантовых распределений – вырожденным. Поэтому неравенство (8.20) принято называть условием вырождения. Этому будет способствовать малая масса частиц, большая плотность, низкие температуры.

Посчитаем в качестве примера величину критерия вырождения для одного из самых легких газов – гелия при $T=5K$ и $P=10^5 \text{ Па}$. Низкая температура и малая масса атомов гелия делают условия наименее благоприятными для применимости распределения Больцмана. Величину V/N вычислим, используя уравнение состояния

$$PV = \frac{M}{\mu} RT = \frac{N}{N_A} RT \quad (8.21)$$

здесь $\frac{M}{\mu} = \frac{N}{N_A}$ - число молей газа, N_A – число Авогадро

$$\frac{V}{N} = \frac{RT}{PN_A} = \frac{8,31 \cdot 5}{10^5 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}} = 6,9 \cdot 10^{-28} \text{ м}^3$$

Так как масса атома гелия

$$m = \frac{\mu}{N_A} = \frac{4 \cdot 10^{-3}}{6,02 \cdot 10^{23}} = 6,6 \cdot 10^{-27} \text{ кг, то}$$

$$\frac{2\pi mkT}{h^2} = \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 6,6 \cdot 10^{-27} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 5}{6,26^2 \cdot 10^{-68}} = 6,6 \cdot 10^{18} \frac{1}{\text{м}^3}$$

и

$$\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} = 17 \cdot 10^{27} \frac{1}{\text{м}^3}$$

Так что

$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} = 6,9 \cdot 17 \cdot 10^{-1} = 11,6 > 1$$

Таким образом, даже при таких низких температурах гелий будет подчиняться распределению Больцмана, будет невырожденным газом. Тем более для всех остальных газов условие применимости классической статистики будет выполняться.

Теперь оценим величину критерия вырождения для электронного газа в натрии. Пусть $T=1000 \text{ К}$, плотность $\rho = 970 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, число свободных электронов равно числу атомов.

Тогда

$$\frac{V}{N} = \frac{V_{\text{моля}}}{N_A} = \frac{M_{\text{моля}}}{\rho \cdot N_A} = \frac{23 \cdot 10^{-3}}{970 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}} \cong 4 \cdot 10^{-29} \frac{1}{\text{м}^3}$$

$$\frac{2\pi mkT}{h^2} = \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 10^3}{6,626^2 \cdot 10^{-68}} = 0,18 \cdot 10^{18} \frac{1}{\text{м}^3}$$

и

$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} = 4 \cdot 10^{-29} \cdot 0,076 \cdot 10^{27} \cong 0,003 \ll 1$$

То есть, к электронному газу в металлах даже при очень высоких температурах распределение Больцмана оказывается неприменимым, так как неравенство (8.19) не выполняется. Иными словами, электронный газ в металлах всегда вырожден. Поэтому и не удавались попытки объяснить теплоемкость металлов с помощью классических законов.

4. Квазичастица – фундаментальное понятие квантовой теории, введение которого радикально упрощает опи-

сание явлений в системах частиц с сильным взаимодействием, в частности, в твердых телах, квантовых жидкостях.

В системах сильно взаимодействующих частиц энергию при некоторых условиях можно представить как энергию основного состояния при $T = 0$ K и энергию слабовозбужденных состояний, состоящих из уровней, расположенных не слишком высоко над основным. И всякое слабовозбужденное состояние макроскопического тела можно рассматривать в квантовой механике как совокупность отдельных **элементарных возбуждений**. Эти элементарные возбуждения ведут себя как некоторые **квазичастицы**, движущиеся в занимаемом телом объеме и обладающие определенными энергиями и импульсами. До тех пор, пока число квазичастиц достаточно мало, они не взаимодействуют друг с другом (т.е. их энергии складываются просто аддитивно), так что их совокупность можно рассматривать как некоторый идеальный газ. В общем случае квазичастице нельзя поставить в соответствие какие-либо определенные частицы системы; она представляет собой коллективное образование.

Сведение системы к газу квазичастиц позволяет чрезвычайно упростить ее рассмотрение. Мы получаем возможность говорить на привычном физическом языке и использовать простую ясную модель идеального газа. Переход системы из основного в возбужденное состояние рассматривается как появление в ней газа квазичастиц. Эти квазичастицы могут совпадать по своей природе с теми, из которых «построена» сама система, но могут и отличаться от них. Примером квазичастиц являются **фононы**, описывающие состояние кристалла, атомы которого совершают малые колебания около положений равновесия (лекция № 9). Возбужденные состояния электронной системы в металлах также можно описать в терминах одночастичных возбуждений. Так что при отличной от нуля температуре металл можно рассматривать как смесь двух идеальных газов – электронов и фононов.

Дополнение

Найдем связь между энтропией и функцией распределения f_i канонического ансамбля Гиббса вероятностью обнаружить систему в состоянии с энергией E_i

$$f_i = \frac{e^{-E_i/kT}}{\sum_i e^{-E_i/kT}} = \frac{1}{Z} e^{-E_i/kT} \quad (Д1)$$

По определению выражение для средней энергии по ансамблю (для внутренней энергии в термодинамике)

$$U = \bar{E} = \sum_i f_i E_i \quad (Д2)$$

Изменить равновесное значение U можно, изменяя либо f_i , либо E_i . То есть, либо меняя заселенность уровней энергии (f_i), либо смещая сами уровни энергии

$$dU = \sum_i (E_i df_i + f_i dE_i) \quad (Д3)$$

С другой стороны из термодинамического тождества

$$dU = T dS - \delta A \quad (Д4)$$

где dS – изменение энтропии, связанное с изменением внутренней энергии (Д3), а δA – работа, которая производится над системой. Уровни энергии E_i могут изменяться только при совершении работы над системой извне. Таким образом, если отождествить уравнения (Д3) (из статистики) и (Д4) (из термодинамики), то

$$\delta A = -\sum_i f_i dE_i \quad (Д5)$$

и

$$TdS = \sum_i E_i df_i \quad (Д6)$$

Определение для функции распределения (1) можно переписать в таком виде

$$E_i = \frac{1}{kT} \ln Z - \frac{1}{kT} \ln f_i \quad (Д7)$$

Подставив (Д7) в (Д6), получим

$$dS = -k \sum_i \ln f_i df_i \quad (Д8)$$

Так как $\sum_i f_i = 1$, то $\sum_i d f_i = 0$, и первое слагаемое из (Д7) вклада в (Д6) не даст.

Энтропия – функция состояния, а dS – полный дифференциал, поэтому (Д8) можно записать еще в таком виде

$$dS = -k d\left(\sum_i f_i \ln f_i\right) \quad (Д9)$$

Проинтегрировав это уравнение, получим

$$S = -k \sum_i f_i \ln f_i = -k \overline{\ln f} \quad (Д10)$$

- выражение для энтропии через функцию распределения (см. 5.13) с точностью до произвольной постоянной, которая в квантовой статистике равна нулю.

Лекция № 10

Тепловые свойства неметаллических кристаллических твердых тел

1. Опытные данные о теплоемкости кристаллов.
Классические представления.
2. Модель Эйнштейна.
3. Понятие о фононах. Модель Дебая.
4. Теплопроводность и ангармонизм кристаллов.

1. В этой лекции рассмотрим теплоемкость кристаллических твердых тел (диэлектриков) и выясним, как статистическая физика объясняет экспериментальные данные, используя простые модели твердого тела.

Теплоемкость при постоянном объеме C_V является более фундаментальной величиной, чем теплоемкость при постоянном давлении C_p , которую обычно определяют в экспериментах. Величины C_p и C_V связаны простым термодинамическим соотношением

$$C_p - C_V = \beta^2 B V T \quad (10.1)$$

где β - температурный коэффициент объемного расширения; B - модуль всестороннего сжатия, V - объем, T - температура. Для твердых тел разность $C_p - C_V$ невелика и ею часто можно пренебречь.

Теплоемкость C_V по определению равна

$$C_V = \left(\frac{\delta Q}{\delta T} \right)_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \quad (10.2)$$

где S - энтропия, U - внутренняя энергия.

Экспериментальные факты, относящиеся к теплоемкости твердых тел, можно резюмировать так

а) При комнатных температурах значения теплоемкости одноатомных твердых тел близки к $25 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$ ($C_V \cong 3R$

- закон Дюлонга-Пти).

б) При низких температурах теплоемкость заметно уменьшается (рис. 10.1) и вблизи абсолютного нуля спадает по закону $C_V \sim T^3$

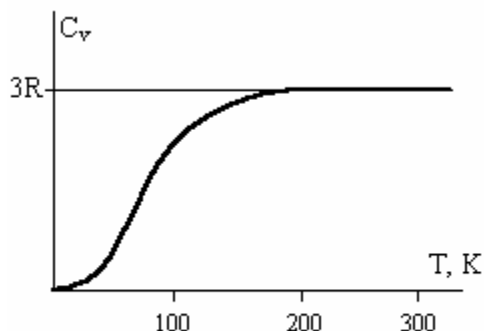


Рис. 10.1

С точки зрения классической статистики закон Дюлонга - Пти вполне понятен. В твердом теле каждый атом можно рассматривать как трехмерный осциллятор, поскольку согласно нашим

представлениям, атом удерживается относительно положения равновесия некоторой квазиупругой силой. Среднее значение кинетической энергии частицы при тепловом равновесии мы вычислили в лекции 2. Оно равно

$$\overline{\varepsilon_{кин}} = \frac{M\overline{v^2}}{2} = \frac{3}{2}kT \quad (10.3)$$

При гармонических колебаниях кинетическая энергия переходит в потенциальную (полная энергия не меняется в зависимости от времени). При этом среднее значение потенциальной энергии $\overline{U_{пот}}$ осциллятора будет равно $\overline{E_{кин}}$. Говорят еще, что у осциллятора число степеней свободы в два раза больше по сравнению с числом степеней свободы свободной частицы. Так что моль вещества будет обладать энергией

$$U = 3kT \cdot N_A = 3RT \quad (10.4)$$

Отсюда

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = 3R \quad (10.5)$$

- в соответствии с законом Дюлонга-Пти. Но зависимость $C_V(T)$ классическая статистика не объясняет.

2. В 1907 г. Эйнштейн предложил простую модель, которая позволила объяснить, почему теплоемкость твердых тел падает при низких температурах. Он высказал предположение, что при низких температурах тепловая энергия колебательного движения может быть распределена между осцилляторами, составляющими твердое тело, неравномерно. В классической теории каждый осциллятор обладает энергией $3 kT$. Идея Эйнштейна заключалась в том, что колебания механических осцилляторов нужно квантовать точно так же, как Планк квантовал электромагнитные осцилляторы, объясняя равновесное излучение абсолютно черного тела.

Впоследствии кванты энергии колебаний решетки кристаллических твердых тел были названы **фононами** по аналогии с введенными Планком квантами электромагнитного излучения - фотонами. Тогда в соответствии с распределением (8.10) среднее число осцилляторов с энергией $\hbar\omega$ будет равно

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (10.6)$$

а средняя энергия осциллятора с частотой ω

$$\bar{\varepsilon} = \bar{n} \cdot \hbar\omega$$

Далее Эйнштейн предположил, что все осцилляторы имеют одну и ту же частоту ω_E .

В этом случае энергия, определяемая колебаниями решетки, будет равна (тепловые свойства решетки из N колеблющихся атомов можно трактовать как свойства $3N$ независимых осцилляторов)

$$U = 3N \cdot \bar{n} \hbar \omega_E = 3N \cdot \frac{\hbar \omega_E}{e^{\hbar \omega_E / kT} - 1}. \quad (10.7)$$

И теплоемкость такого твердого тела

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{\partial U}{\partial T} = 3N \hbar \omega_E \left(-\frac{\hbar \omega_E}{k} \right) \left(-\frac{1}{T^2} \right) \frac{e^{\hbar \omega_E / kT}}{\left(e^{\hbar \omega_E / kT} - 1 \right)^2} = \\ &= 3Nk \left(\frac{\hbar \omega_E}{kT} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_E / kT}}{\left(e^{\hbar \omega_E / kT} - 1 \right)^2} \end{aligned} \quad (10.8)$$

При высоких температурах $kT \gg \hbar \omega_E$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar \omega_E}{1 + \frac{\hbar \omega_E}{kT} + \dots - 1} = kT, \quad U = 3N_A kT$$

и $C_V = 3N_A \cdot k = 3R$ - закон Дюлонга - Пти.

При низких температурах $kT \ll \hbar \omega_E$

$$e^{\hbar \omega_E / kT} \gg 1 \quad \text{и} \quad \bar{\varepsilon} = \hbar \omega_E \cdot e^{-\hbar \omega_E / kT}$$

И при $T \rightarrow 0$ теплоемкость твердого тела в этой модели стремится к нулю по закону

$$C_V = 3Nk \left(\frac{\hbar \omega_E}{kT} \right)^2 \cdot e^{-\frac{\hbar \omega_E}{kT}}.$$

А эксперимент дает $C_V \sim T^3$

Ограниченность модели Эйнштейна состоит в том, что предположение о равенстве частот всех колебаний решетки в твердом теле является слишком сильным.

Результаты применения модели Эйнштейна удобно обсуждать, пользуясь представлением о некоторой характеристической температуре θ_E , называемой температурой Эйнштейна, и которая определяется соотношением

$$\hbar \omega_E = k \theta_E \quad (10.9)$$

Для большинства твердых тел значения θ_E лежат в интервале 100-300 К.

3. В модели Эйнштейна каждый атом рассматривается как независимый осциллятор. Эта модель объясняет уменьшение C_V при уменьшении температуры, однако наблюдаемое на опыте зависимость $C_V(T)$ несколько отличается от предсказания Эйнштейна. Кроме того, конечно, эта модель никак не объясняет, например, существование звука в твердых телах. Ведь звуковая волна представляет собой коррелированные колебания большого числа атомов вблизи своих равновесных положений, в то время как в этой модели каждый атом колеблется в пределах

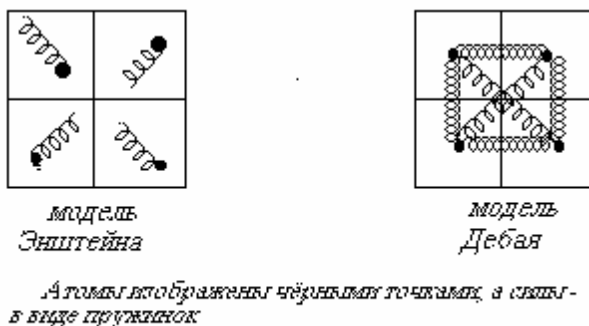


Рис. 10.2

своей элементарной ячейки и даже движение ближайших соседей не связано с ним по фазе.

В 1912 г. Дебай предложил другую модель, в которой квантовалось уже не движение каждого отдельного атома, а упругой волны, распространяющейся по всему телу. В такой схеме каждый атом движется благодаря совместно-му воздействию всех упругих волн, т.е. движение атома обусловлено всеми взаимодействиями, в которых он участвует. Простая механическая модель представлена на (рис. 10.2). Эти волны характеризуются набором частот $\omega(\vec{k})$ и волновых векторов $\vec{k}$.

В квантовой механике мы говорили о реальных частицах, свободное движение которых описывается плоскими волнами. В нашем случае выражения для смещений ато-

мов кристаллической решетки, которые представляются в виде суперпозиции плоских волн, распространяющихся в кристалле, мы рассматриваем, как волновую функцию некоторых фиктивных частиц (“квазичастиц”), которые называются **фононами**. Происхождение этого термина связано с тем, что эти квазичастицы находятся в таком же отношении к упругим волнам, распространяющимся в решетке (т.е. к звуку), как световые кванты-фотоны - к электромагнитным волнам. Можно сказать, что обычно в квантовой механике волны описывают движение частиц, а здесь частицы вводятся для описания волн.

Введение фононов становится более ясным, если рассмотреть энергию тепловых колебаний кристалла - она определится как сумма энергий невзаимодействующих квантовых осцилляторов

$$U = \sum_{\vec{k}} \hbar \omega(\vec{k}) \cdot n(\vec{k}) \quad (10.10)$$

Здесь $n(\vec{k})$ - номер энергетического уровня осциллятора с частотой $\omega(\vec{k})$. Он либо равен нулю, либо это - положительное и целое число.

Иначе говоря, вместо сложной картины локального движения отдельных атомов рассматривается совокупность волн, из которых складывается движение атомов.

Так вот оказывается весьма удобным для рассмотрения многих свойств кристаллов сопоставить системе частиц (атомов, ионов), совершающей малые колебания, совокупность квазичастиц, энергия которых определяется с помощью формулы (10.10) (см. также (4.10)). Вместо того, чтобы говорить об осцилляторе, имеющем частоту колебаний $\omega(\vec{k})$ и находящемся на $n(\vec{k})$ - энергетическом уровне, будем рассматривать $n(\vec{k})$ квазичастиц (фононов), имеющих энергию $\hbar \omega(\vec{k})$. Введение фононов отражает квантовый характер колебаний решетки кристаллов. Представление о фононах позволяет заменить

рассмотрение сложной системы атомов (ионов) кристалла, совершающих малые колебания около положений равновесия, изучением наглядной модели идеального газа фононов, имеющих определенные значения энергии и импульса. Таким образом, колебания кристаллической решетки эквивалентны идеальному газу квазичастиц - фононов. Фононы свободно распространяются в объеме, занимаемом кристаллом. Фононы - квазичастицы, потому что их существование вне кристалла невозможно в противоположность электронам и фотонам.

Поскольку числа $n(\vec{k})$ могут принимать любые положительные значения, то в одном и том же состоянии может находиться любое число фононов. Значит, они подчиняются статистике Бозе и функция распределения имеет вид (6).

Итак, имеем идеальный газ фононов при некоторой температуре T . Энергия их меняется практически непрерывно, поэтому можно суммирование в (10.10) заменить интегрированием (см. лек. N 7). Тогда выражение для внутренней энергии фононного газа U следует записать так

$$U = \int \hbar \omega \bar{n}(\omega, T) g(\omega) d\omega \quad (10.11)$$

Зная U , легко найти и $C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$. Главная проблема за-

ключается теперь в нахождении плотности состояний $g(\omega)$ - числа состояний фононов, приходящихся на единичный интервал частот. Воспользуемся квазиклассическим приближением (см. лек. № 7) для идеального газа фононов. В этом случае минимальный объем ячейки в фазовом пространстве, приходящийся на одно состояние, будет равен в соответствии с соотношением неопределенности

$$\Delta \Gamma_{\min} = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z = h^3 \quad (10.12)$$

Если $d\Gamma$ - объем фазового пространства, соответствующий интервалу частот $d\omega$, разделить на минимальный объем ячейки в фазовом пространстве, определяющий одно со-

стояние фонона, то мы получим число квантовых состояний, приходящихся на этот интервал частот. То есть

$$g(\omega) d\omega = \frac{d\Gamma}{h^3} \quad (10.13)$$

Для идеального газа мы пользуемся представлением о μ -пространстве, то есть о фазовом пространстве, положение точки в котором определяется тремя пространственными и тремя импульсными координатами и размерность которого равна шести (см. лек. № 3). Пространственные координаты ограничены объемом V твердого тела, в котором мы рассматриваем возможные состояния фононного газа. Поэтому значения $d\Gamma$ можно записать в виде

$$d\Gamma = V \cdot dp_x dp_y dp_z \quad (10.14)$$

Если ввести сферические координаты и разбить импульсное пространство не на кубики величиной $dp_x dp_y dp_z$, а на шаровые слои объемом $4\pi p^2 dp$, то соотношение (10.14) можно записать так

$$d\Gamma = V \cdot 4\pi p^2 dp \quad (10.15)$$

Теперь, чтобы представить (10.13) в окончательном виде, необходимо рассмотреть предположения, сделанные Дебаем. Он считал, что все волны в твердом теле являются упругими, звуковыми. То есть, зависимость частоты от величины волнового вектора (закон дисперсии) имеет простой вид

$$\omega = v \cdot k \quad (10.16)$$

где v - скорость звуковых волн в твердом теле (сравните (10.16) с известным соотношением для световых волн

$$c = \lambda \nu \quad (c = 3 \cdot 10^8 \frac{M}{c}), \quad k = 2\pi / \lambda \text{ - волновое число}).$$

Кроме того, Дебай указал, что в кристаллических твердых телах (в отличие от электромагнитных волн в свободном пространстве) не могут распространяться волны со сколь угодно малой длиной волны; $\lambda_{min} = 2a$ (a - период решетки). Поэтому и частоты колебаний решетки (энергии фо-

нонов) ограничены сверху некоторым максимальным значением $\omega_{\max} = \omega_D$, и значением волновых векторов

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

Далее, поскольку импульс квантовой частицы связан с длиной волны соотношением де Бройля $p = \frac{h}{\lambda}$, с учетом

(10.16) выражение (10.13) для $g(\omega) d\omega$ можно записать так

$$g(\omega)d\omega = \frac{d\Gamma}{h^3} = V \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} = V \frac{\omega^2 d\omega}{2\pi^2 v^3} \quad (10.17)$$

В твердых телах могут распространяться продольные и два типа поперечных (сдвиговых) звуковых волн. Это соответствует трем возможным поляризациям фононов.

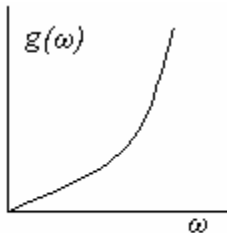


Рис. 10.3

Скорости распространения продольных звуковых волн и поперечных будут разными. Поэтому выражение (10.17) определяет плотность состояний для каждого типа волн. Если же предположить, что звуковые волны в твердом теле характеризуются некоторой одинаковой, средней скоростью распространения зву-

ка $\bar{v}$, то в модели Дебая окончательное выражение для плотности фононных состояний можно записать так (см. также рис.10.3)

$$g(\omega) = V \frac{3\omega^2}{2\pi^2 \bar{v}^3} \quad (10.18)$$

И тогда энергия колебательного движения решетки, тепловая энергия фононного газа будет равна (см. (10.11), (10.6), (10.18))

$$U = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 \bar{v}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (10.19)$$

Далее обычно вводят понятие дебаевской температуры θ

$$k\theta = \hbar \omega_{max} = \hbar \omega_D = \hbar \bar{v} \cdot k_D \quad (10.20)$$

Она является важным физическим параметром твердых тел. Из определения (10.20) ясен и ее смысл. Это температура, при которой становятся существенными колебания с частотами, примерно равными ω_D . При температурах, больших дебаевской, оказываются возбужденными все колебания кристалла. Дебаевскую температуру называют еще характеристической. Ее величина зависит и от структуры кристалла (в (10.20) входит $k_D \approx \frac{1}{a}$, a - па-

раметр решетки; $\bar{v}$ - скорость звуковых волн также зависит от структуры вещества). Значения θ обычно находятся в пределах 200-400 К. Так для Na $\theta = 160$ К, для Al - 420 К; для Cu - 343 К. Понятие дебаевской температуры позволяет ввести критерий для решения вопроса о том, высокой или низкой является данная температура. В области низких температур выполняется условие $T \ll \theta$, а область высоких температур характеризуется неравенством $T \gg \theta$.

Если в (10.19) произвести замену переменных

$\hbar \omega / kT = x$ и обозначить $\hbar \omega_D / kT = x_D = \theta / T$, то

$$U = \frac{3V}{2\pi^2 v^3 \hbar^3} (kT)^4 \int_0^{\theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 9NkT \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \quad (10.21)$$

В (10.21) использовано следующее определение дебаевской частоты ω_D . Так как полное число колебательных степеней свободы равно $3N$ (N - число атомов, либо число элементарных ячеек в кристалле), то

$$3N = \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \frac{V \cdot 3}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega \quad (10.22)$$

Отсюда

$$\omega_D^3 = 6\pi^2 \bar{v}^3 \frac{N}{V}, \quad \theta = \frac{\hbar \bar{v}}{k} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (10.23)$$

И если принять следующие значения скорости звука и атомной плотности для твердого тела

$$\bar{v} = 5 \cdot 10^2 \frac{\text{м}}{\text{с}}; \quad \frac{N}{V} = 10^{29} \frac{\text{ат}}{\text{м}^3}, \quad \text{то}$$

$$\omega_D \approx 10^{13} \frac{\text{рад}}{\text{с}}, \quad \text{а} \quad k_D = \frac{\omega_D}{\bar{v}} \approx 2 \cdot 10^{11} \text{ м}^{-1}.$$

$$\theta = \frac{\hbar \omega_D}{k} \cong \frac{10^{-34} \cdot 10^{13}}{10^{-23}} \approx 10^2 \text{ К}$$

Зная зависимость внутренней энергии кристалла U от температуры, легко найти и его теплоемкость C_V

$$C_V = 9Nk \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (10.24)$$

Значения дебаевских температур θ , энергии тепловых колебаний U , теплоемкости C_V вычислены, табулированы и в справочниках и книгах по физике твердого тела.

Обычно теория Дебая хорошо согласуется с опытом. Объясняется это также тем, что теплоемкость является интегральной характеристикой и поэтому малочувствительной к деталям частотного спектра колебаний решетки.

В области низких температур ($\theta/T \gg 1$) в верхний предел интегрирования в (10.21) и (10.24) можно положить равным бесконечности и тогда интегралы в этих соотношениях вычисляются точно.

Так что энергия U оказывается равной (см. аналогию с законом Стефана-Больцмана в тепловом излучении)

$$U = \frac{3\pi^4 Nk}{5 \theta^3} \cdot T^4 \quad (10.25)$$

А теплоемкость C_V (закон T^3 Дебая)

$$C_V \cong \frac{12}{5} \pi^4 Nk \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 = 234 Nk \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \quad (10.26)$$

При очень низких температурах он выполняется хорошо, потому что в этой области температур существуют лишь колебания решетки, соответствующие длинным волнам - звуковым волнам (низкие частоты). Энергии фононов с частотами, равными примерно дебаевской частоте, слишком велики, чтобы их можно было возбудить при этих температурах.

4. Представление о фоновом газе в твердых телах может быть использовано и для анализа переноса тепла (теплопроводности) в неметаллических кристаллах. Кинетическая теория газов (см. лек. № 3) дает следующее выражение для коэффициента теплопроводности

$$\lambda = \frac{1}{3} c \cdot \bar{v} \cdot l \quad (10.27)$$

где c - теплоемкость на единицу объема, $\bar{v}$ - средняя скорость частиц, l - средняя длина свободного пробега частиц между соударениями.

Дебай применил этот результат кинетической теории для описания теплопроводности диэлектрических твердых тел, считая, что c - есть теплоемкость колебаний решетки (фононов), $\bar{v}$ - средняя скорость распространения фононов (скорость звука в твердых телах), l - средняя длина свободного пробега фононов.

При низких температурах зависимость $\lambda(T)$ определяет теплоемкость. В соответствии с законом Дебая $C_V \approx T^3$. Поэтому при низких температурах теплопроводность диэлектрика пропорциональна T^3 .

При высоких температурах ($T \gg \theta$) теплоемкость приближается к предельному значению $3R$ (закон Дюлонга - Пти) и зависимость $\lambda(T)$ связана с температурным изменением длины свободного пробега фононов l . Величина l определяется в основном двумя процессами: геометрическим рассеянием (на границах образца и на дефектах) и рассеянием фононов на фононах (фонон-фононные взаимодействия). Здесь следует особо отметить, что без взаимодействия фононов друг с другом теплопроводность в диэлектриках не может существовать, так же как в идеальном газе теплопроводности нет без столкновений молекул газа. Если бы силы взаимодействия между атомами в кристаллах были упругими, колебания атомов - гармоническими, то это соответствовало бы идеальному газу невзаимодействующих фононов. И этого гармонического приближения достаточно для объяснения теплоемкости диэлектриков. Для объяснения теплопроводности, теплового расширения, зависимости модулей упругости от температуры необходимо учитывать ангармонические слабые в разложении для потенциальной энергии кристалла или, что то же самое, - учитывать неупругий характер взаимодействия между атомами в кристаллах. На другом языке это означает учет фонон - фононных взаимодействий. Теперь можно пояснить, как средняя длина свободного пробега фононов l (а, следовательно, и теплопроводность диэлектриков) будет зависеть от температуры. Некоторое число фононов взаимодействует с данным фононом. При высоких температурах среднее число фононов пропорционально T (см. (10.6)). Частота столкновений данного фонона должна быть пропорциональна числу фононов, с которыми он может столкнуться, следовательно, $l \sim 1/T$.

Лекция № 11

Электроны в металлах

1. Модель свободных электронов и проблема теплоемкости металлов.
2. Электронный ферми-газ в металлах при $T=0$ К.
3. Теплоемкость электронного газа.
4. Закон Видемана-Франца.

1. Металлы обладают рядом свойств, отсутствующих у других твердых тел. Они - прекрасные проводники электричества и тепла, обладают пластичностью. Металлическое состояние - наиболее распространенное - более двух третей химических элементов - металлы.

В 1897 г. Томсон открыл электрон, и уже через три года Друде предложил теорию электро- и теплопроводности металлов еще до появления квантовой теории. В его модели металла валентные электроны атомов образуют идеальный электронный газ, электрические и тепловые свойства которого объясняются кинетической теорией газов. Однако этим представлениям противоречит отсутствие на опыте вклада в теплоемкость металла от электронного газа. Если электроны в металле рассматривать как идеальный газ, то в соответствии с кинетической теорией среднее значение энергии свободного электрона при температуре T равно $\overline{p^2} / 2m = 3 / 2kT$ (формулы (2.7),(2.8)).

Следовательно, каждый такой электрон дает вклад в теплоемкость металла, равный $3/2 k$. И электронная теплоемкость одного моля металла будет равна:

$$C_{эл} = \frac{3}{2} k \cdot N_A = \frac{3}{2} R.$$

Кроме этого, в теплоемкость металлов дадут вклад и колебания ионов - колебания кристаллической решетки $C_{реш} = 3R$ - формула (10.5) .

Так что полная теплоемкость металла

$$C_{металла} = C_{реш} + C_{эл} = 3R + \frac{3}{2} R = \frac{9}{2} R$$

В действительности же теплоемкость металлов при высоких температурах, как и теплоемкость диэлектриков, подчиняется закону Дюлонга-Пти ($C=3R$) и, следовательно, определяется колебаниями решетки. В течение почти четверти века этот парадокс не был объяснен и вызывал сомнения в справедливости модели Друде. Кроме того, модель свободных электронов хорошо объясняла проводимость в металлах. Почему же электроны, участвующие в проводимости так, как будто они свободно движутся, в то же время не дают вклада в теплоемкость? Причина несостоятельности теории Друде оказалась не в модели свободных электронов, а в попытке описать свойства электронного газа с помощью классической статистики. Электроны - квантовые частицы, подчиняющиеся принципу Паули, поэтому свойства электронного газа в металле следует объяснять, используя квантовую статистику (распределение Ферми).

В этой лекции рассмотрим далее свойства электронного газа в металлах в основном состоянии (т.е. при $T=0\text{ K}$), а затем уже учтем, как они изменятся при отличных от нуля температурах. При этом убедимся, что термически возбуждать (менять энергию при изменении температуры) можно только малую долю свободных электронов. Все остальные исключены из участия в ряде явлений из-за принципа Паули. Фактически это будет означать, что и комнатные температуры для электронов в металлах являются очень низкими.

2. В лекции № 8 показано, что электронный газ в металлах вырожден при интересующих нас температурах и плотностях электронов, типичных для металлов, то есть свободные электроны в металлах подчиняются квантовой статистике Ферми. Если $T=0\text{ K}$, то свободные электроны будут распределены по различным квантовым состояниям таким образом, чтобы полная энергия электронного газа имела наименьшее возможное значение. Из принципа Паули следует, что все электроны в металле должны иметь различные квантовые числа и что в одном кванто-

вом состоянии может находиться не более двух электронов с учетом спина. Квантовое описание состояний свободных электронов металла осуществляется заданием трех компонентов импульса

$$(p_x, p_y, p_z; \quad \varepsilon = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}) \text{ и проекции } S_z \text{ спина на}$$

некоторое направление. В квазиклассическом приближении состояние электрона будет определяться ячейкой в шестимерном пространстве. Размер ячейки равен h^3 .

Далее задача сводится к заполнению электронами этих ячеек. Число состояний электронного газа в элементе фазового пространства $dp_x dp_y dp_z \cdot dV$ тогда будет равно

$$2 \cdot \frac{dp_x dp_y dp_z \cdot dV}{h^3} \quad \text{Здесь } dV = dx dy dz, \text{ а множитель } 2$$

возникает из-за спина. Интегрируя по dV (что сводится к замене dV на полный объем V металла, где находятся электроны), получим число состояний электронов в элементе пространства импульсов. В этом пространстве свободные электроны парами заполняют ячейки квантовых состояний, начиная с ячейки, помещенной в начало отсчета для импульсов ($p=0, \varepsilon=0$). В идеальном квантовом газе свободных электронов все направления импульсов равновероятны и можно от распределения по ячейкам перейти к распределению по шаровым слоям (т.е. перейти к сферическим координатам в пространстве импульсов). Тогда число квантовых состояний свободных электронов с абсолютной величиной импульса в интервале между p и $p+dp$ будет равно

$$2 \cdot \frac{4\pi p^2 dp \cdot V}{h^3} \quad (11.1)$$

Число электронов, заполняющих все эти состояния с импульсами от нуля до некоторого граничного p_f , равно

$$N = \frac{2 \cdot V}{h^3} 4\pi \int_0^{p_f} p^2 dp = \frac{8\pi V}{h^3} \frac{p_f^3}{3} \quad (11.2)$$

Отсюда получаем выражение и для максимального импульса электронов p_f ,

$$p_f = h \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{1/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad (11.3)$$

и для максимальной энергии электронов $\mathcal{E}_f$, которую они могут иметь при $T=0\text{ K}$

$$\mathcal{E}_f = \frac{p_f^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \quad (11.4)$$

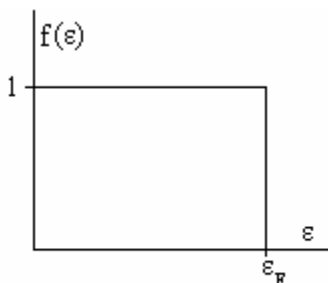


Рис. 11.1

То есть, при абсолютном нуле все уровни энергии (все состояния) ниже некоторого будут заполнены электронами, а все более высокие не будут содержать электронов. Энергетический уровень, который отделяет заполненные уровни от вакантных, называется энергией Ферми $\mathcal{E}_f$.

Эта энергия имеет простой термодинамический смысл. Функция распределения Ферми (см. рис.11.1) по квантовым состояниям

$$f = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/kT} + 1} \quad (11.5)$$

в пределе при $T \rightarrow 0$ обращается в единицу при всех значениях $\varepsilon < \mu$ и в нуль при $\varepsilon > \mu$. Видно, что химический потенциал электронного газа при $T=0\text{ K}$ совпадает с энергией Ферми $\mathcal{E}_f$

$$\mu = \mathcal{E}_f \quad (11.6)$$

Полная энергия электронного ферми - газа получится умножением числа состояний (11.1) на энергию электрона

$\frac{p^2}{2m}$ и интегрированием по всем импульсам

$$E_{\text{полн}} = \frac{8\pi V \cdot 1}{h^3 \cdot 2m} \int_0^{p_f} p^4 dp = \frac{8\pi V}{h^3} p_f^3 \cdot \frac{p_f^2}{2m} \cdot \frac{1}{5} = \frac{3}{5} N \cdot \varepsilon_f \quad (11.7)$$

Полученное соотношение для полной энергии (11.7) применимо приближенно также и при температурах $T \neq 0$ К. Условие их применимости (условие “сильного вырождения” газа) требует, очевидно, малости тепловой энергии kT по сравнению с энергией Ферми ε_f

$$kT \ll \frac{h^2}{m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \quad (11.8)$$

Это условие, как и следовало ожидать, противоположно условию (8.32) о применимости классической статистики и совпадает с условием (8.20) там же, когда для описания свойств газа следует пользоваться квантовыми распределениями. Температуру, определяемую условием $kT_f = \varepsilon_f$, называют **температурой вырождения**. Вырожденный электронный газ обладает своеобразной особенностью - он становится тем более “идеальным”, чем больше его плотность $\left(\frac{N}{V} \right)$. Дело в том, что при такой, как в металлах

плотности электронов $\left(\frac{N}{V} \sim 10^{28} \text{ м}^{-3} \right)$ энергия ε_f составляет несколько электронвольт, что в сотни раз превышает тепловую энергию, и поэтому все электроны остаются в “замороженном” состоянии. Только при температурах, характерных для звезд, электронный газ становится невырожденным, а до тех пор, пока металл остается твердым телом, ситуация продолжает быть почти такой же, как при абсолютном нуле.

3. Рассмотрим подробнее, что будет происходить со свободными электронами в металле при повышении температуры от абсолютного нуля до некоторого значения T . Для классического идеального газа эффект повышения температуры сводится к увеличению энергии каждой частицы на

величину порядка kT , что при комнатной температуре составляет около 0,02 эВ. Поведение электронного ферми-газа при $T > 0$ К на первый взгляд может показаться неожиданным. Энергия Ферми в металлах - это величина $\sim 1-7$ эВ, поэтому обмен энергией электронов с окружающей средой происходит лишь путем перемещения электронов, расположенных вблизи энергии Ферми, на близлежащие свободные уровни с более высокой энергией. Электроны же, находящиеся в “море” уровней ниже $\mathcal{E}_f$, остаются на них, поскольку все соседние уровни энергии заняты, а для перехода на пустые уровни, лежащие выше $\mathcal{E}_f$, они не получают достаточно энергии ($kT \ll \mathcal{E}_f$). В итоге при конечных температурах электронная система почти не меняется, благодаря “замороженности” основного количества энергетических уровней электронов - лишь электроны вблизи уровня $\mathcal{E}_f$ будут напоминать обычный идеальный газ. Так что термодинамические функции свободных электронов в металлах оказываются совсем иными, чем функции обычного идеального газа.

Чтобы оценить электронный вклад в теплоемкость металлов, полезно рассмотреть как меняется плотность состояний электронного газа в металлах, и что с ней произойдет при $T \neq 0$ К. Напомним, что плотность состояний $g(\varepsilon)$ - это число состояний, приходящихся на единичный интервал энергии. Выражение для $g(\varepsilon)$ можно получить, если записать число состояний в каком-то элементе $d\Gamma$ фазового пространства. По определению (см. также лекцию № 7)

$$\frac{d\Gamma}{h^3} = \frac{8\pi V p^2 dp}{h^3} = g(\varepsilon) d\varepsilon \quad (11.9)$$

Так как для свободных электронов в металле

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}, \quad \text{то} \quad p = \sqrt{2m\varepsilon} \quad \text{и} \quad dp = \frac{\sqrt{2m}}{2\sqrt{\varepsilon}} d\varepsilon.$$

Используя эти соотношения и (11.9), получим

$$g(\varepsilon) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \quad (11.10)$$

График этой функции показан на рис.11.2.

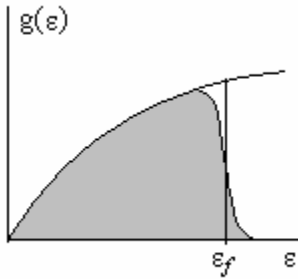


Рис. 11.2

Видно, что при абсолютном нуле все состояния вплоть до ε_f заняты. Пунктирная кривая описывает ход изменения плотности состояний

при $T \ll \frac{\varepsilon_f}{k}$. Можно ска-

зать, что принцип Паули оказывает существенное влияние на тепловое пове-

дение электронов проводимости. При повышении температуры от абсолютного нуля каждый электрон не приобретает энергии $\sim kT$. Лишь те электроны, энергия которых отличается на величину порядка kT от энергии Ферми, могут воспринять тепло - именно эти электроны и приобретают энергию $\sim kT$. Этот подход к интерпретации тепловых свойств электронов в металлах, резко отличающийся от классического, сразу дает качественное решение проблемы теплоемкости электронного газа. Если N - общее число свободных электронов, то лишь их часть порядка $\frac{kT}{\varepsilon_f}$ может быть

термически возбуждена при температуре T , поскольку именно такая их доля содержится в энергетическом интервале порядка kT в верхнем участке кривой, описывающей энергетическое распределение электронов на рис.11.2. Ка-

ждый из этих $\frac{N kT}{\varepsilon_f}$ электронов приобретает тепловую

энергию kT и, следовательно, полная тепловая энергия электронов $E_{\text{тепл}}$ по порядку величины будет равна в расчете на 1 моль

$$E_{\text{тепл}} = \frac{N_A \cdot kT}{\varepsilon_f} \cdot kT = \frac{kR}{\varepsilon_f} T^2 \quad (11.11)$$

Следовательно, теплоемкость

$$C_V^{эл} = \frac{\partial E_{метл}}{\partial T} = \frac{2kR}{\varepsilon_f} \cdot T = \gamma_{эл} \cdot T \quad (11.12)$$

пропорциональна T в согласии с экспериментальными данными. Электронный вклад в теплоемкость металлов убывает при $T \rightarrow 0$ по линейному закону.

Точное выражение для $\gamma_{эл}$ таково: $\frac{\pi^2 N_A k^2}{2\varepsilon_f}$.

Значение $\gamma_{эл}$ в (11.12)- это величина порядка $10^{-3} \frac{Дж}{моль \cdot K}$.

Таким образом, при низких температурах полная теплоемкость металла будет равна

$$C_V^{металла} = \gamma_{эл} \cdot T + a \cdot T^3 \quad (11.13)$$

где первое слагаемое представляет собой вклад электронов, а второй - вклад колебаний решетки (фононный вклад в теплоемкость при $T \rightarrow 0$ - закон Дебая T^3 , формула (10.24).

Так как величина $a \sim 10^{-4} \frac{Дж}{моль \cdot K^4}$, то при очень низких температурах слагаемое $\gamma_{эл} \cdot T$ доминирует и электронный газ будет определять теплоемкость металла.

При высоких температурах выражение для теплоемкости металла будет иметь вид

$$C_V = \gamma_{эл} \cdot T + 3R \quad (11.14)$$

И, следовательно, при комнатной температуре вклад электронов в полную теплоемкость составит примерно $3 \cdot 10^{-1} \frac{Дж}{моль \cdot K}$, т.е. величину малую по сравнению с $25 \frac{Дж}{моль \cdot K}$, которую дает закон Дюлонга - Пти (второе слагаемое в (11.14)). Так что свободные электроны в металле, являющиеся носителями электрического тока, “не участвуют” в теплоемкости. Их степени свободы как бы “заморожены”. Поэтому теплоемкость металлов при высоких температурах определяется по существу колебаниями решетки (фононами) как в диэлектриках. Понять это удалось после создания квантовой статистики.

4. Электропроводность (коэффициент σ) и теплопроводность (коэффициент λ) металлов не являются независимыми величинами. Как было обнаружено экспериментально, отношение $\lambda/\sigma \cdot T$ приближенно сохраняет свое значение для всех металлов при температуре выше температуры Дебая. Это - закон Видемана-Франца.

Для объяснения этого закона достаточно воспользоваться представлением об идеальном газе электронов в металле. Тогда выражение коэффициента теплопроводности (см. лек. № 3 и № 6) для идеального газа

$$\lambda = \frac{1}{3} c_{эл} \cdot l \cdot v \quad (11.15)$$

где $c_{эл}$ - теплоемкость электронного газа в металле, $c_{эл} \sim T$;

l - средняя длина свободного пробега электронов; v - скорость свободных электронов, которые могут принять участие в тепловом движении, т.е. $v = v_f$ - (см. (11.3)

$v_f = p_f / m$). Соответствующее выражение для коэффициента электропроводности в модели свободных электронов называется формулой Друде (см. II часть курса физики) и имеет вид

$$\sigma = \frac{N e^2 l}{m v_f} \quad (11.16)$$

С учетом этих соотношений получим

$$\frac{\lambda}{\sigma \cdot T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e} \right)^2 = 2,45 \cdot 10^{-8} \frac{Bm}{Om \cdot K^2} \quad (11.17)$$

Эта постоянная называется числом Лоренца. В этих рассуждениях мы исходим из того, что теплопроводность металлов определяется электронами. То есть, фононный вклад в теплопроводность металлов мал.

Убедимся, что в чистых металлах при комнатных температурах переносчиками теплового потока являются электроны, а не фононы. Для этого сопоставим их вклады в

теплопроводность металлов. В выражении (10.27), определяющем коэффициент теплопроводности идеального газа

$$\lambda = \frac{1}{3} c \cdot \nu \cdot l; \quad c - \text{теплоемкость газа на единицу объема. Это}$$

соотношение можно записать так, чтобы входила теплоемкость в расчете на моль

$$\lambda = \frac{1}{3} \frac{n}{N_A} c \cdot l \cdot \nu \quad \text{или} \quad \frac{3N_A \cdot \lambda}{n} = c l \nu \quad (11.18)$$

где для фононного газа: n - число ионов в единице объема;

$c_{\text{реш}} = 3R$; $l_{\text{ср}}$ - средняя длина свободного пробега фононов (скорость звука);

для электронного газа: n - число электронов в единице объема;

$$c_{\text{эл}} = \gamma_{\text{эл}} \cdot T = \frac{1}{2} \pi^2 N_A \cdot k \cdot \frac{kT}{\varepsilon_f} \cong 10^{-1} R;$$

$l_{\text{эл}}$ - средняя длина свободного пробега электронов;

$\nu = \nu_f$ - скорость свободных электронов на поверхности Ферми.

Если из опытных данных взять $l_{\text{ср}} \approx 3 \cdot 10^{-8} \text{ м}$,

$\nu_{\text{ср}} \approx 10^3 \frac{\text{м}}{\text{с}}$, $l_{\text{эл}} \approx 10^{-7} \text{ м}$, $\nu_f = 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}}$, то получим

для электронного газа значение $c \cdot l \cdot \nu = 0,3 \cdot 10^2 R$, а для фононного $-0,3R$. То есть, электронный вклад в теплопроводность чистых металлов в сотни раз больше. Действительно, из опыта известно, что нормальные чистые металлы при комнатных температурах имеют теплопроводность величину на один-два порядка большую, чем твердые диэлектрики. В чистых металлах теплопроводность при любых температурах обусловлена в основном электронами. В металлах с примесями, а также в неупорядоченных сплавах вклад фононов в теплопроводность может быть сравним с вкладом электронов.

Лекция № 12

Элементы зонной теории кристаллов

1. Введение. Образование энергетических зон. Диэлектрики, металлы, полупроводники.
2. Полупроводники, чистые, примесные.
Дырочная проводимость.

1. Зонная теория, т.е. теория энергетических зон электронов является основой для объяснения электрических свойств твердых тел. Она позволяет установить причину, по которой твердые тела разделяются на металлы (хорошие проводники электричества), диэлектрики (изоляторы, плохие проводники) и полупроводники (вещества, электрические свойства которых достаточно резко меняются с температурой). Эта теория основана на следующих основных понятиях: понятии энергетической зоны и запрещенной зоны (зазора между различными зонами); понятии заселенности, плотности состояний разрешенных зон электронами.

Как возникают энергетические зоны электронов в твердых телах? Рассмотрим систему, состоящую из N ней-



Рис. 12.1

тральных атомов. Электроны в каждом атоме имеют дискретные энергетические уровни. По мере сближения ато-

мов и образования кристаллического твердого тела каждый уровень изолированного атома даст N уровней системы. Эта совокупность дискретных уровней, возникающая в результате расщепления энергетического уровня изолированного атома, и представляет собой разрешенную зону - рис.12.1. Видно, что одни значения энергий разрешены, а другие запрещены. То есть, образование энергетических зон электронов в кристалле качественно можно представить, как результат расщепления дискретных уровней электронов в изолированных атомах под влиянием возмущения от соседних атомов. В системе из N изолированных атомов, рассматриваемой как единое целое, каждый уровень ввиду неразличимости электронов оказывается N -кратно вырожденным (электроны эти имеют одинаковую энергию). При образовании из атомов кристалла из-за взаимодействия атомов, вырождение снимается - каждый уровень расщепляется на N различных, но близко расположенных (квазинепрерывных) уровней, образующих зону. В соответствии с этим различают s -зону, p -зону и т.д. Ширина зоны пропорциональна взаимодействию атомов или степени перекрытия электронных оболочек.

При температуре, равной абсолютному нулю, система находится в состоянии с минимальной энергией. Предположим, что каждый атом отдает в энергетическую зону по два электрона. Ясно, что зона окажется полностью заполненной. В общем случае, когда атом содержит четное число электронов, они заполняют некоторое целое число зон, т.е. в кристалле, состоящем из таких атомов, имеются зоны или целиком заполненные, или полностью вакантные. Это имеет место для кристаллов, состоящих из атомов с заполненными электронными оболочками. Такие вещества будут **диэлектриками**. Электроны в них перемещаются в решетке, однако, число электронов, движущихся справа налево, точно равно числу электронов, движущихся в противоположном направлении - распределение электронов по составляющих импульса оказывается симметричным. Внешнее электрическое поле не изменяет этого положения - все состояния в зоне заняты. Электроны не могут

взять энергию у электрического поля отсутствуют свободные состояния. И электрического тока не будет.

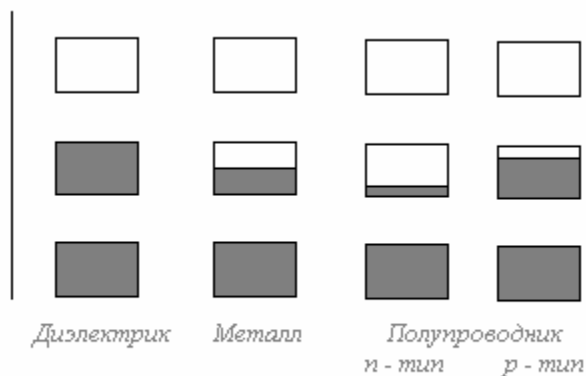


Рис.12.2

Диэлектрик станет проводить ток только тогда, когда электроны смогут благодаря достаточно высокой температуре или очень сильному полю (пробой диэлектрика) перейти в следующую, незаполненную зону.

Если твердое тело состоит из атомов, которые в свободном состоянии кроме замкнутых электронных оболочек содержат еще по одному электрону, то зона, формируемая этими электронами будет заполнена наполовину. И такое вещество является **металлом**, ибо в нем электроны в такой полузаполненной зоне могут менять состояние при воздействии внешнего электрического поля. Примером являются все щелочные металлы.

Вводя такую классификацию твердых тел (диэлектрики, металлы), сделали следующие предположения. Во-первых, считали, что зоны не перекрываются. Это действительно так для зон, формирующихся из внутренних электронных оболочек атомов. Но зоны, образованные из валентных электронов, могут перекрываться и это, конечно, сказывается на заполнении зон. Примером являются щелочноземельные металлы. Хотя они и двухвалентны, тем не менее не являются диэлектриками именно из-за перекрытия зон. Существенным является эффект пере-

крытия зон и у переходных металлов (*Ni, Fe*). Во-вторых, предполагали, что самая высокая зона, содержащая электроны, отделена от расположенной выше незаполненной зоны щелью, значительно большей, чем средняя тепловая энергия kT .

Имеются вещества, у которых ширина этой запрещенной зоны не столь велика. Так что при повышении температуры возможен переход электронов в свободную зону, где они становятся носителями тока. Такие вещества называют **полупроводниками**. При абсолютном нуле чистые и идеальные кристаллы полупроводников должны вести себя как изоляторы. Характерные полупроводниковые свойства обнаруживаются или при тепловом возбуждении, или при наличии примесей или дефектов решетки.

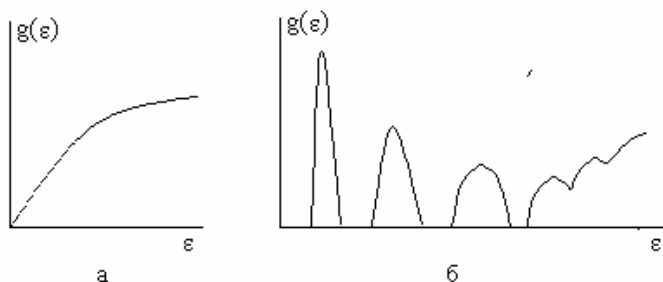


Рис.12.3

Итак, в кристаллических твердых телах электроны располагаются в энергетических зонах. При этом существуют такие области значений энергии, где нет ни одного электронного уровня. Эти недоступные для электронов области называются энергетическими щелями или запрещенными зонами. Схематическое изображение заполненности электронами разрешенных энергетических зон для диэлектриков, металлов и полупроводников дано на рис.12.3.

Наибольший интерес представляют две соседние зоны, одна из которых является наивысшей из заполненных (она называется **валентной зоной**, и ее максимальное значение обозначается через E_v), а другая - наинизшая из пустых,

или частично заполненных (она называется **зоной** проводимости, и ее минимальная энергия обозначается через E_c). Разность $E_g \equiv E_c - E_v$ называется **шириной запрещенной зоны**. Характерная энергия, которая отделяет заполненные уровни от пустых, называется **уровнем Ферми** (E_f).

Ширина запрещенной зоны полупроводников обычно порядка 1 эВ ($1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж) или меньше, в то время как у диэлектриков это примерно несколько электронвольт. Так у *Si* $E = 1,1$ эВ; у *Ge* - 0,7 эВ; у алмаза - 6 эВ; у *SiO* - 8 эВ; у *NaCl* - 7 эВ.

Как распределены электроны по состояниям в твердых телах в зависимости от энергии? В модели свободных электронов выражение для плотности состояний $g(\varepsilon)$ (число состояний электронов, приходящихся на единичный интервал энергий) имеет простой вид (см.(7.17))

$$g(\varepsilon) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m^3 \varepsilon)^{1/2} \quad (12.1)$$

График функции $g(\varepsilon)$ приведен на рис.12.3а.

Плотность состояний электронов в кристаллических твердых телах описывается более сложной функцией. Кривая плотности состояний распадается на некоторое число различных участков (зон), как это показано на рис.12.3б, который и отражает заполнение энергетических зон на языке плотности состояний. Такой тип структуры плотности состояний называется **зонной структурой** спектра электронов в кристалле. Вид зонной структуры определяется конкретными свойствами данного твердого тела. Видно, что зоны, образованные из внутренних заполненных оболочек атомов, довольно узки, и они не перекрываются друг с другом.

2. Теория полупроводников - это одна из важнейших областей применения статистики Ферми.

В ней очень плодотворно используются простые модели зонной структуры. Важнейшими понятиями в этих моде-

лях являются понятия о дырках и эффективных массах электронов и дырок.

В простой модели металла (теория свободных электронов - лек. № 11) связь между энергией электрона и его импульсом (закон дисперсии) проста $\varepsilon(p) = p^2 / 2m$. Это соответствует плотности состояний $g(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}$ - рис.12.3а.

В модели кристаллических твердых тел, учитывающей взаимодействие электронов с кристаллической решеткой (зонная теория твердых тел), плотность электронных состояний является гораздо более сложной функцией - рис.12.3б. Однако для описания некоторых электронных состояний в зоне проводимости полупроводников и в валентной зоне модель свободных электронов может быть

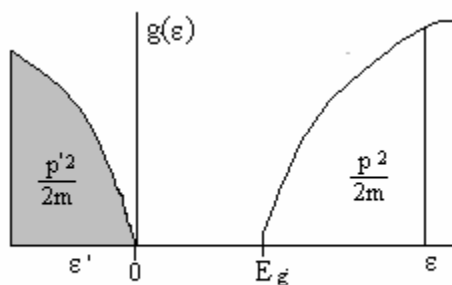


Рис. 12.4

использована с некоторыми модификациями.

Если в зоне проводимости находится небольшое число электронов (рис.12.4), то они занимают состояния вблизи минимального значения энергии (у дна

зоны). Энергию электрона $\varepsilon(p)$ можно разложить в ряд по степеням импульса вблизи этого минимального значения. Линейный член разложения обратится в нуль в точке экстремума. И тогда, если за начало отсчета энергии взять вершину валентной зоны, то для электронов в зоне проводимости

$$\varepsilon(p) = E_g + \frac{1}{2m_e^*} p^2 \quad (12.2)$$

То есть, электроны в этой зоне ведут себя как свободные электроны с массой m_e^* , которая называется эффективной массой электрона в зоне проводимости. Замена истинной

массы электрона на эффективную массу учитывает тот факт, что электрон движется в периодическом поле кристаллической решетки, а не является полностью свободным.

Рассмотрим, как описать состояния электронов в почти целиком заполненной валентной зоне (рис.12.4). Оказывается более удобным рассмотрение не заполненных состояний, а вакантных. Напомним, что в статистике Ферми величина

$$\overline{n_i} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu) / kT} + 1} \quad (12.3)$$

-это вероятность того, что состояние с энергией ε_i - занято. Поэтому величина

$$\overline{n'_i} = 1 - \overline{n_i} = \frac{1}{e^{-(\varepsilon_i - \mu) / kT} + 1} \quad (12.4)$$

представляет собой вероятность того, что это состояние вакантно (не занято).

Итак, мы будем говорить, что состояние с энергией ε_i занято **дыркой**, если оно не занято электроном. То есть, дырки можно рассматривать как определенный сорт частиц. Если состояние электрона с импульсом p и энергией $\varepsilon(p)$ не занято, то мы будем говорить, что в системе электронов существует дырка, у которой заряд, импульс, энергия и уровень Ферми определяются следующим образом

$$\begin{aligned} e' &= +|e| \\ \vec{p}' &= -\vec{p} \\ \varepsilon'(p') &= const - \varepsilon(p) \\ \mu' &= const - \mu \end{aligned} \quad (12.5)$$

Статистическое распределение дырок описывается, таким образом, функцией распределения Ферми

$$\overline{n_i} = \frac{1}{e^{(\varepsilon'_i - \mu) / kT} + 1} \quad (12.6)$$

Следовательно, почти полностью заполненную электро-

нами валентную зону удобно рассматривать как заполненную определенным количеством дырок - частиц, поведение которых описывается по существу теми же формулами, что и для электронов при малом заполнении зоны проводимости, но имеющих положительный заряд и другую эффективную массу m_h^*

$$[\varepsilon'(p') = p'^2 / 2m_h^*]$$

Ясно, что введение дырок и дырочной проводимости не означает их реального существования. Такое представление - это удобный способ описания электронной системы. То, что вакантные состояния в верхней части почти заполненной зоны ведут себя как частицы с положительным зарядом $+|e|$, является одним из наиболее интересных особенностей зонной теории твердого тела. Это имеет и большое практическое значение, так как работа транзисторов, других полупроводниковых устройств связана с тем, что в полупроводниках одновременно существуют и дырки, и электроны. На языке плотности состояний зонная структура для валентной зоны и для зоны проводимости показана на рис.12.5

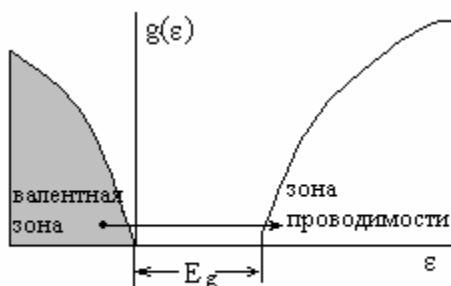


Рис. 12.5

О проводимости полупроводников.

Полупроводниками с собственной проводимостью

(собственными полупроводниками) называют вещества, в которых при 0 К имеются целиком заполненные зоны

(называемые валентными) и совершенно пустые (называемые зонами проводимости). С ростом температуры возбужденные электроны переходят из нижней зоны в верхнюю. Как электроны, так и дырки, появившиеся при таких переходах в верхней и нижней зонах, обуславливают возникно-

вление электропроводности. В результате вещество, которое было диэлектриком при 0 К, при более высоких температурах становится проводником. Температура, при которой появляется проводимость, зависит от ширины запрещенной зоны E_g (рис.12.5). Далее естественно предположить, что в соответствии с распределением Больцмана (при $E - E_f \gg kT$) концентрация электронов в зоне проводимости будет пропорциональна $\exp(-E/kT)$. Поэтому можно ожидать, что и собственная проводимость такого полупроводника также будет зависеть от температуры, а сопротивление соответственно как $\exp(E_g/kT)$.

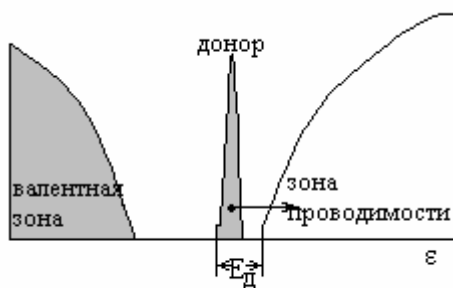


Рис.12.6.

Примесные полупроводники.

Некоторые полупроводниковые вещества со сравнительно большой шириной запрещенной зоны E_g обнаруживают проводимость при сравнительно низких температурах

только в том случае, когда они содержат примеси. Это объясняется тем, что эти примеси создают новые уровни между валентной зоной и зоной проводимости (то есть внутри запрещенной зоны). Существуют два типа примесных полупроводников.

В полупроводниках *n*-типа имеются примесные уровни E_d , заполненные электронами при 0 К. Эти уровни располагаются вблизи зоны проводимости. При более высоких температурах электроны переходят с этих уровней в зону проводимости, в результате чего появляются носители тока - электроны и возникает электропроводность. Примеси, которым принадлежат такие уровни, называются **донорами**. В качестве примера можно назвать примеси *P* или *As* в *Ge* (рис.12.6).

В полупроводниках *p*-типа имеются примесные уровни E_A , не занятые электронами при 0 К и расположенные вблизи потолка валентной зоны. При конечных температурах электроны переходят из заполненной (валентной) зоны на эти уровни. При этом в валентной зоне появляются дырки, которые и обуславливают проводимость. В этом случае примесные атомы называются **акцепторами**.

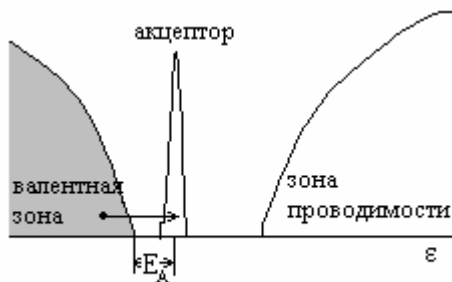


Рис.12.7.

Примером акцепторов являются *B* или *Al* в *Ge* (рис.12.7).

Полупроводники являются элементной базой современной электроники.

Свойства полупроводниковых приборов определяются параметрами энергетических барьеров, возникающих на границе раздела между полупроводником и металлом или между двумя частями полупроводникового кристалла. Если в кристалл полупроводника введена примесь (говорят еще, что он легирован) так, что одна его часть имеет проводимость *p*-типа, а другая – проводимость *n*-типа, то на границе раздела между этими частями из-за диффузии дырок и электронов возникнет двойной электрический слой и соответствующее электрическое поле, которое будет препятствовать переходу дырок из *p* в *n*-область, а электронов – наоборот. Этот слой называется *p-n* переходом. Наличие двойного слоя эквивалентно появлению энергетического барьера. Ширина его определяется уровнем легирования; высота барьера – величина порядка ширины запрещенной зоны E_g . Электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне имеют энергию $\sim kT$ (0,02 эВ при комнатной температуре) и поэтому не могут преодолеть этот барьер. Внешнее напряжение в зависимости

от знака может увеличить или уменьшить высоту барьера и тем самым управлять работой p - n перехода. Существуют различные технологические способы получения p - n переходов. Свойства p - n переходов позволяют использовать их в качестве выпрямителей, фотодиодов и других приборов. Следующий этап применения p - n переходов – это транзисторы, интегральные схемы на основе полупроводников.

В последние годы стала актуальной идея использования квантовых состояний в полупроводниках для хранения и обработки информации, потому что вычислительная техника подошла к пределу своих возможностей по быстродействию компьютеров (10^9 Гц) и размеру микросхем (0,1 мкм). Масштаб 0,1 мкм (10^{-7} м) определяет уже границы применимости законов классической механики для расчета характеристик электронных приборов.

Дополнение

Свойства полупроводников могут радикально меняться в зависимости от наличия в них дефектов. Поэтому, когда в начале 60-х гг. XX века появились идеи о возможной перспективности использования полупроводниковых гетероструктур (устройств, состоящих из различных полупроводниковых веществ), необходимо было изготовить идеальный гетеропереход из разных полупроводников с границей раздела, лишенной дефектов кристаллической решетки. В 1967 г. будущий лауреат Нобелевской премии по физике 2000 г. Алферов Ж.И. с сотрудниками нашел такую систему – GaAs – AlGaAs. Исследования электрических и оптических свойств гетероструктур показали, что в них существуют такие физические явления, которые открывают принципиально новые возможности эффективного управления движением носителей заряда и световыми потоками. Открытие идеальных гетеропереходов, разработка технологии их получения, исследование их физических особенностей образовали основу для разработки новых полупроводниковых приборов. К началу 70-х гг. в лаборатории Ж.И. Алферова были созданы гетеролазеры, обеспечивающие непрерывный режим их работы при комнатной температуре; лазеры с распределенной обратной связью; высокоэффективные светоизлучающие диоды, фотодиоды, фототранзисторы, тиристоры, солнечные

элементы. В 90-е гг. ими была разработана технология выращивания гетероструктур с так называемыми квантовыми точками, которые представляют собой кластеры нанометрового масштаба, «запечатанные» в матрицу другого полупроводника. Энергетический спектр подобных образований, состоящих из нескольких тысяч атомов, подобен спектру одиночного атома. На основе таких структур были созданы лазеры, обладающие чрезвычайно высокой температурной стабильностью. Исследования Ж.И. Алферова позволили создать принципиально новую электронику на основе гетероструктур.