

DAUGAVPILS UNIVERSITĀTE

Fizikas katedra

Viktors Čadajevs

CIETVIELU FIZIKA

2003

ANOTĀCIJA

Mācību palīg līdzeklis pamatojas uz lekcijām, kuras autors daudzus gadus lasa DU studentiem – fizikājiem.

Dotajā grāmatā ir mēģināts plašāk un sīkāk izklāstīt cietvielu fizikas pamatjautājumus, ņemot vērā pēdējos sasniegumus šajā nozarē.

Galvenā uzmanība ir vērsta uz fizikālo parādību būtības skaidrojumu.

Autors izsaka visdziļāko pateicību savam kolēģim E. Tamanim, kurš uzņēmās nepateicīgo rediģēšanas un noformēšanas darbu, kā arī A. Antiņam par lekciju materiāla pirmatstrādi.

I nodaļa

KRISTĀLISKĀ REŽĢA TEORIJA

1.1. Kristāliskā režģa translācijas simetrija

Kristāls ir fizikāls objekts ar sarežģītu periodisku telpisku daļiņu: atomu, jonu vai molekulu, izvietojumu. Lai aprakstītu kristālu iekšējas uzbūves likumsakarības, lieto trīsdimensiju telpisko režģi. Atomu periodiskajam izvietojumam kristālā atbilst periodisks mezglu - matemātisko punktu izvietojums telpiskajā režģī. Starp kristālisko struktūru un tās telpisko režģi eksistē ģeometriskā un izmēru atbilstība. Ja kādu no telpiskā režģa mezgliem savieto ar jebkuru kristāliskās struktūras atomu, tad visi citi noteiktā veidā orientētā telpiskā režģa mezgli sakrītīs ar identisko atomu centriem.

Telpiskā režģa mezglu kopu var aprakstīt ar šādiem rādiusvektoriem:

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}, \quad (1.1)$$

kur $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ - koordinātu bāzes vektori, kas orientēti paralēli blīvākajām kristāliskās struktūras atomu rindām un pēc moduļa ir vienādi ar attiecīgajiem starpatomu attālumiem, bet m, n un p var pieņemt veselas skaitliskās vērtības (no $-\infty$ līdz $+\infty$), ieskaitot nulli.

Starpatomu attālumus koordinātu virzienā sauc par kristāliskās struktūras parametriem vai periodiem.

Pateicoties dotajam aprakstam, visu bezgalīgo telpisko režģi var sadalīt vienādos elementāros paralēlskalldņos ar šķautnēm $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, kuri atkārtojas. Tādējādi visu kristālisko struktūru var uzskatīt kā cieši vienu pie otras novietotu paralēlskalldņa veida elementāru šūnu kopu.

Viena no raksturīgākām telpiskā režģa īpašībām ir tā nepārtrauktais viendabīgums (homogenitāte). Telpiskā režģa dažādas daļas uzbūvētas pilnīgi vienādi, tā uzbūvē novērojama likumsakarīga atkārtojamība. Kristāliskā režģa galvenā īpašība ir tā struktūras telpiskais periodiskums. Visu kristālu var salikt no vienādām daļām.

Kristālisko telpas režģi var sadalīt vienādos paralēlskalldņos ar trijām paralēlu plakņu saimēm, pie tam sadalīt tā, ka katrs paralēlskalldnis satur vienu un to pašu struktūrelementu skaitu. Ja visu kristālisko režģi sāk nobīdīt paralēli sev jebkuras paralēlskalldņa šķautnes virzienā un tas pārvietojas par attālumu, kas vienāds ar šķautnes garumu veselu skaitu, tad režģis sakrītīs pats ar sevi. Kristāliskā režģa pārvietošanu paralēli sev sauc

par translāciju. Režģa pārvietojumu par attālumiem a , b vai c , kur a , b , c - šķautnes vismazākajiem pēc tilpuma paralēlskalldņiem, sauc par pamattranslāciju. Translāciju raksturo ar īpašu vektoru $\vec{T}$, kurš norāda paralēlas pārnese virzienu un attālumu šajā virzienā starp kristāliskās struktūras stāvokli kopumā un katra atsevišķa atoma sākotnējo un jauno stāvokli. Translācijas vektoru $\vec{T}$ definē ar tiem pašiem koordinātu bāzes vektoriem $\vec{a}$, $\vec{b}$ un $\vec{c}$, kurus lietojam, lai aprakstītu telpisko režģi:

$$\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}, \quad (1.2)$$

kur n_1, n_2, n_3 - attiecīgie skaitliskie koeficienti.

Translācijas vektors ļauj realizēt pāreju no viena atoma uz otru, pie tam tādu pāreju var veikt pēc patikas daudz reižu visas atomu rindas garumā. Par kristāliskās struktūras translācijas pamatvektoriem izvēlas tādus, kuri pēc lieluma un virziena atbilst koordinātu bāzes vektoriem $\vec{a}$, $\vec{b}$ un $\vec{c}$. Šādi izvēloties translācijas pamatvektorus, tie sakrītīs ar elementārā paralēlskalldņa šķautnēm. Tādējādi translācijas ir simetrijas elementi, kas principiāli atšķiras no visiem agrāk apskatītajiem ar to, ka ļauj aprakstīt bezgalīgas kristāliskas struktūras, saistot savā starpā identiskus atomus atomu rindās, atomu plaknēs un kristāliskajā struktūrā kopumā. Kristālos simetrijas elementu skaitu un pilnu simetrijas elementu kopu, kas raksturo objekta simetriju, sauc par simetrijas klasi. Simetrijas klases atšķiras vai nu ar simetrijas elementu skaitu, vai arī ar to izvietojumu. No piecām simetrijas asīm, simetrijas plaknes un inversijas centra var izveidot tikai 32 dažādas simetrijas klases.

Telpas režģī apskatītajiem simetrijas elementiem tiek pievienots jauns simetrijas elements - translācija $\vec{T}$, kura darbojas nevis uz kādu režģa punktu, bet uz visu režģi kopumā. Translācijas kombinācija ar kristālam raksturīgajiem simetrijas elementiem dod jaunus simetrijas elementu veidus:

pagrieziens ap asi + paralēla pārnese ass virzienā = skrūves ass;

atstarošana plaknē + paralēla pārnese plaknē = slīdošās atstarošanas plakne.

Pilnīgu analīzi ir devis Fjodorovs 1890. gadā, apskatot 230 telpiskās simetrijas grupas, kuras noteiktā veidā sadalās pa 32 punktveida simetrijas klasēm. Šim nolūkam ir nepieciešams visus telpiskās simetrijas grupas elementus novilkt caur vienu punktu un uzskatīt vītņveida asis par vienāda nosaukuma pagriezienu asīm, bet slīdošās atstarošanas plaknes - par spoguļplaknēm.

1.2. Inversais (apgrieztais) režģis

Cietvielu fizikā, analizējot daudzas parādības (difrakciju, elektronu kustību periodiskā potenciāla laukā, fononu izkliedi), kas saistītas ar diskrēto daļiņu periodisko izvietojumu, ļoti svarīga loma ir inversajam režģim. Inversais režģis nav režģis parastajā nozīmē, kuru lieto, definējot kristāla telpisko režģi. Inversais režģis neeksistē kristālā, bet tas ir izdevīga abstrakcija, kas ļauj pietiekami vienkārši un precīzi matemātiski aprakstīt apstākļus, kuros notiek tā vai cita parādība kristāliskā ķermenī.

Starp parastā tiešā režģa parametriem, kas izveidots uz translācijas vektoru $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ bāzes, un inversā režģa parametriem eksistē pilnīgi noteikta sakarība. Jēdziens par inversā

režģa vektoriem seko tieši no funkcijas

$$f(\vec{R}) = f(\vec{R} + \vec{T}) \quad (1.3)$$

izvirzījuma Furjē rindā, kurai ir dotā režģa periods. Visiem inversā režģa vektoriem $\vec{g}$ ir jābūt spēkā sakarībai:

$$e^{i\vec{g}\cdot\vec{T}} = 1 \quad (1.4)$$

vai $\vec{g} \cdot \vec{T} = 2\pi n$, kur n - vesels skaitlis. Vektoru $\vec{g}$ mērvienība ir garuma mērvienības apgrieztas lielums. Šie vektori pieder viļņu vektoru telpai. Jebkuram plakanam vilnim ar viļņa vektoru $\vec{g}$ piemīt dotā kristāliskā režģa periodiskums. Mezglu kopu inversajā telpā, kuru nosaka vektori $\vec{g}$, sauc par inverso režģi, ja plakanam vilnim ar viļņu vektoru $\vec{g}$ ir dotā telpiskā režģa periodiskums (t.i., tāds pats periods kā dotajam telpas režģim):

$$\vec{g} = 2\pi(m_1\vec{a}^* + m_2\vec{b}^* + m_3\vec{c}^*), \quad (1.5)$$

kur m_1, m_2 un m_3 - attiecīgie skaitliskie koeficienti;

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}, \quad \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V}, \quad \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V}, \quad (1.6)$$

kur $V = \vec{a} \cdot [\vec{b} \times \vec{c}]$ ir režģa elementāršūnas tilpums. Katrs inversā režģa vektors ir perpendikulārs noteiktai tiešā režģa atomu plakņu saimei, bet vektora, kura komponentēm nav kopīga reizinātāja, absolūtā vērtība ir apgriezti proporcionāla attālumam starp tās saimes plaknēm, kurai šis vektors perpendikulārs. Katrs inversā režģa mezgls atbilst tiešā režģa paralēlo plakņu saimei.

Jāņem vērā, ka kristalogrāfijā katru inverso režģi izveido attiecībā uz konkrētu Bravē režģi un arī pats inversais režģis ir Bravē režģis.

Tā, piemēram, vienkāršas kubiskas Bravē šūnas inversais režģis ir režģis, kuru var aprakstīt ar vienkāršas kubiskas elementāras šūnas palīdzību, kuras mala ir $2\pi/a$, kur a - tiešā režģa parametrs. Skaldnē centrēta režģa inversais režģis ir tilpumā centrētais, bet tilpumā centrētā režģa inversais režģis ir skaldnē centrētais.

Apskatot rentgenstaru atstarošanu no blakus esošajām atomu plaknēm, Vulfs un Bregs ieguva izkļiedētā starojuma intensitātes maksimumu rašanās nosacījumus:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (1.7)$$

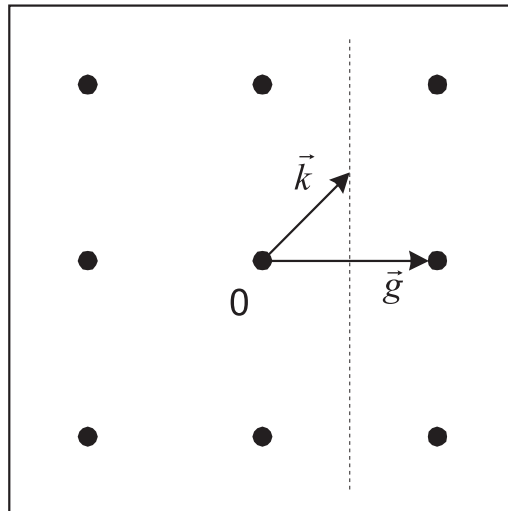
kur d - starpplakņu attālums, θ - leņķis starp atomu plakni un krītošā (un atstarotā) viļņa virzienu, λ - viļņa garums, n - vesels skaitlis.

Otra pieeja, kuru izmantoja Laue, balstās uz inversā režģa jēdziena pielietošanu. Šādā gadījumā iegūst izteiksmi:

$$\vec{k}' - \vec{k} = \vec{g}, \quad (1.8)$$

kur $\vec{k}'$ un $\vec{k}$ - atstarotā un krītošā viļņa vektori, $\vec{g}$ - inversā režģa vektors. Ja ir elastīga izkļiede, tad $(\vec{k}')^2 = (\vec{k})^2$, un tāpēc iepriekšējo izteiksmi var uzrakstīt šādā veidā:

$$\vec{k} \left(\frac{\vec{g}}{2} \right) = \left(\frac{\vec{g}}{2} \right)^2. \quad (1.9)$$



1.1. zīmējums. Briljuēna zonas uzbūve

Patvaļīgs vektors $\vec{k}$, kas vilkts no punkta O kā koordinātu sākuma punkta (1.1. zīm.) līdz jebkuram plaknes punktam, kas ir perpendikulārs inversā režģa vektoram un iet caur tā vidu, apmierinās viļņu difrakcijas nosacījumu kristālā. Tādā veidā konstruētas plaknes (Briljuēna konstrukcijas) sauc par Brega plaknēm. Brega plakņu (konstruētas dažādiem inversā režģa vektoriem) komplekts (kopa) no daudziem viļņu vektoriem $\vec{k}$ - telpā izdala elektromagnētiskā starojuma viļņu vektorus, kuri var būt atstaroti no kristāliskā režģa Brega difrakcijas procesā. Brega plakņu krustojšanās rada virkni slēgtu tilpumu. Tilpumu, kuru norobežo vistuvāk koordinātu sākuma punktam izvietotās Brega plaknes, sauc par pirmo Briljuēna zonu. Otrā Briljuēna zona ir tilpums, kas pieguļ pirmās zonas robežai, kura katrā punktā var nokļūt no pirmās zonas, šķērsojot tikai vienu Brega plakni. Attiecīgi n -tā Briljuēna zona ir tilpums, kas robežojas ar $n - 1$ zonu, kura katrā punktā var nokļūt no koordinātu sākuma punkta, šķērsojot $n - 1$ Brega plakni. Katra Briljuēna zona ir inversā režģa elementārā šūna, pie tam visu zonu tilpumi ir vienādi.

1.3. Režģa dinamika. Harmoniskais tuvinājums

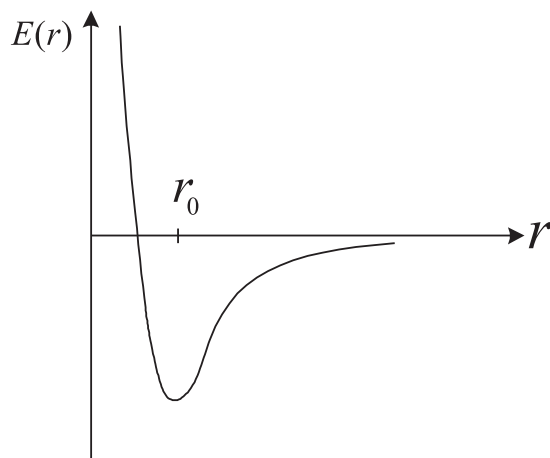
Jebkādā temperatūrā cietā ķermenī atomi veic svārstības ap to vidējo līdzsvara stāvokli.

To spēcīgās savstarpējās mijiedarbības dēļ šādu svārstību raksturs kļūst diezgan sarežģīts un to precīzs apraksts rada lielas grūtības.

Apskatot mierā esošā ķermeņa atomu svārstības, pirmais tuvinājums ir harmoniskais tuvinājums, saskaņā ar kuru katrs atoms svārstās attiecībā pret vidējo līdzsvara stāvokli. Šis stāvoklis atbilst potenciālās bedres minimumam, kuru izveido atoma mijiedarbības spēks ar blakus esošajiem atomiem (1.2. zīm.).

No šejienes seko, ka mazu atomu noviržu no līdzsvara stāvokļa gadījumā atgriešanās spēks ir proporcionāls attālumam un atomi svārstās kā harmoniskais oscilators. Tā kā svārstību amplitūdas ir pietiekami mazas, tad var aprobežoties ar atomu kvadrātisko noviržu uzskaiti. Spēka, kas cenšas atgriezt atomu līdzsvara stāvoklī, lielums būs atkarīgs kā

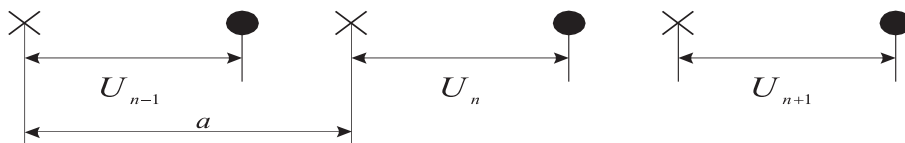
no paša atoma koordinātas, tā arī no tā kaimiņu koordinātas.



1.2. zīmējums. Atomu mijiedarbības potenciālās enerģijas atkarība no to savstarpējā attāluma.

1.3.1. Vienatomu lineārās ķēdītes svārstību spektrs

Jautājuma izpēti sāksim apskatot vienkāršāko gadījumu - vienādo atomu svārstības viendimensijas (lineārā) režģī, kas savā kustībā pakļaujas klasiskās mehāniskās likumiem. Kā cietā ķermeņa viendimensijas modeli aplūkosim ķēdīti no N vienādiem atomiem ar masu M un starpatomu attālumu a . Atomi var pārvietoties pa līniju.



1.3. zīmējums. Vienādo atomu lineārā ķēdīte.

Tādā sistēmā katram atomam piemīt viena brīvības pakāpe, bet visai sistēmai - N brīvības pakāpes.

Pieņemsim, ka laika momentā $t = 0$ mēs izvīzīsim no līdzsvara stāvokļa atomu ar numuru $n = 0$ attālumā U_0 . Tā kā ķēdītē atomi ir saistīti viens ar otru ar saites spēkiem, tad tāds ierosinājums izplatās ķēdītē garenviļņa veidā un visi pārējie atomi nobīdīsies no līdzsvara stāvokļiem.

Lai $U_n(x, t)$ - n -tā atoma nobīde kādā laika momentā t attiecībā pret tā līdzsvara stāvokli punktā ar koordināti $x_n = na$.

Ja atomu nobīdes no līdzsvara stāvokļa ir mazas salīdzinājumā ar attālumu a ($U_n \ll a$), tad starpatomu mijiedarbības spēkus var uzskatīt par kvazielastīgiem. Saskaņā ar Huka likumu, tie ir proporcionāli nobīdēm.

Uzrakstīsim n -tā atoma kustības vienādojumu. Meklējot rezultējošo spēku, kas darbojas uz n -to atomu, uzskatīsim, ka pastāv tikai nelielā attālumā darbojošies spēki, tas

nozīmē, ka šis atoms mijiedarbojas tikai ar tuvākiem kaimiņiem: $(n-1)$ -mo un $(n+1)$ -mo atomu:

$$F_n = F_{n,n-1} + F_{n,n+1} = \beta(U_{n-1} - U_n) + \beta(U_{n+1} - U_n) = \beta(U_{n-1} + U_{n+1} - 2U_n), \quad (1.10)$$

kur β - kvazielastīgā spēka koeficients. Savukārt n -tā atoma kustības vienādojums:

$$M \frac{d^2 U_n}{dt^2} = \beta(U_{n-1} + U_{n+1} - 2U_n). \quad (1.11)$$

Tagad atradīsim svārstību normālās modas, t.i., tādus kustības tipus, pie kuriem visi atomi svārstās ar vienu un to pašu frekvenci ω . Meklēsim vienādojuma (1.11) atrisinājumu skrejoša viļņa veidā:

$$U_n = U_0 \exp[i(kna - \omega t)], \quad (1.12)$$

kur U_0 - nosaka atoma ar $n = 0$ nobīdi laika momentā $t = 0$; $k = 2\pi/\lambda$ - viļņa skaitlis; ω - leņķiskā frekvence.

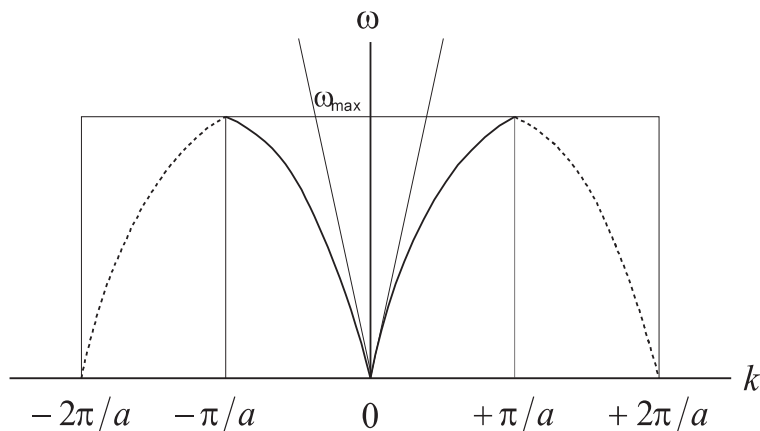
Ievietojot (1.12) izteiksmē (1.11), iegūsim:

$$-M\omega^2 = \beta[\exp(-ika) + \exp(ika) - 2] = -4\beta \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right). \quad (1.13)$$

No šejienes redzam, ka katrai viļņa skaitļa vērtībai k atbilst noteikta vērtība ω^2 , pie tam $\omega^2(k) = \omega^2(-k)$, t.i., ω^2 ir argumenta k pāra funkcija. No (1.13) seko dispersijas sakarība viļņiem, kas izplatās vienādu atomu lineārā ķēdītē:

$$\omega = \pm \left(\frac{4\beta}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right). \quad (1.14)$$

Tā kā ω nevar būt negatīvs lielums, tad mīnusa zīme izteiksmē (1.14) atbilst vērtību k negatīvajam apgabalam. Kā redzams no (1.14), n -tā atoma svārstību frekvence nav atkarīga no n , bet tas savukārt nozīmē, ka visi atomi ķēdītē svārstās ar vienu un to pašu frekvenci.



1.4. zīmējums. Dispersijas līkne lineārai vienatomu ķēdītei.

No (1.14) seko, ka viļņu skaitļa vērtības $|k| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{a}$ gadījumā, t.i., īsu viļņu ar garumu $\lambda = 2a$ gadījumā, svārstību cikliskā frekvence sasniedz maksimālo vērtību:

$$\omega = \omega_{\max} = \left(\frac{4\beta}{M}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.15)$$

Mazām k vērtībām, tā pat kā viļņu garumiem, kuri daudz lielāki par ķēdītes starpatomu attālumiem ($\lambda \gg a$), ω ir atkarīgs no k lineāri, tāpat kā nepārtrauktas elastīgas stīgas ar lineāru blīvumu $\rho = M/a$ gadījumā:

$$\omega = \left(\frac{4\beta}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{ka}{2} \approx \left(\frac{4\beta}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{ka}{2} = \left(\frac{c}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} k = v_{sk}k, \quad (1.16)$$

kur c - elastības koeficients.

Tātad diskrētās ķēdītes atšķirība no nepārtrauktās stīgas ir tāda, ka nepastāv proporcionalitāte starp frekvenci ω un viļņa skaitli k . Tas ir saistīts ar viļņa dispersiju. Īsie viļņi, daļiņu masas inerces dēļ, izplatās lēnāk nekā garie viļņi. Viļņu dispersija parādās atvērto liknei $\omega = \omega(k)$ no lineārās atkarības, kas ir spēkā elastīgai stīgai.

Viļņa izplatīšanas ātrums pa diskrēto ķēdīti atšķirībā no viļņa izplatīšanas ātruma pa elastīgo stīgu ir atkarīgs no viļņa garuma:

$$v = \frac{\omega\lambda}{2\pi} = \lambda \left(\frac{\beta}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi a}{\lambda}. \quad (1.17)$$

Tāda atkarība ir raksturīga elastīgo viļņu izplatībai vidē ar diskrētu struktūru. Atrisinājums (1.12) apraksta viļņus, kas izplatās pa ķēdīti ar fāzes ātrumu

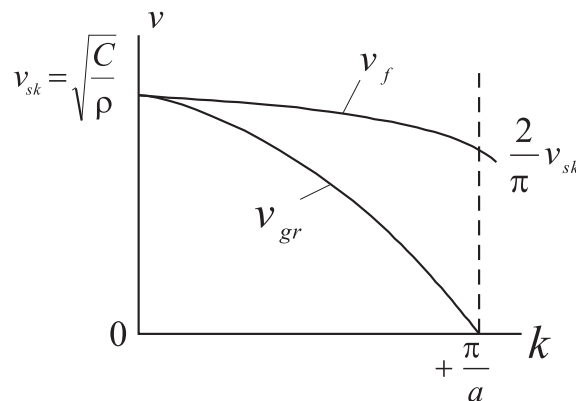
$$v_f = \frac{\omega}{k} = v_{sk} \left| \frac{\sin\left(\frac{ka}{2}\right)}{\frac{ka}{2}} \right| \quad (1.18)$$

un ar grupas ātrumu

$$v_{gr} = \frac{\partial\omega}{\partial k} = v_{sk} \left| \cos \frac{ka}{2} \right|. \quad (1.19)$$

Viļņa skaitļa mazo vērtību gadījumā (1.5. zīm.), fāzes un grupas ātrumi sakrīt un ir vienādi ar skaņas ātrumu:

$$v_f = v_{gr} = v_{sk}. \quad (1.20)$$



1.5. zīmējums. Fāzes un grupas ātruma atkarība no viļņa skaitļa.

Kā redzams no (1.19) un 1.5. zīmējuma, visīsākiem viļņa garumiem, t.i., ja $k = \frac{\pi}{a}$, grupas ātrums, ar kuru tiek pārnests atomu svārstību enerģija ķēdītē, kļūst vienāds ar

nulli. Tas liecina par to, ka šīs svārstību modas raksturo ķēdītē stāvvilņus, kuriem ir veids

$$U_n = U_0 \exp[i(kna - \omega t)] = U_0 \exp(-i\omega t) \cos \pi n \quad (1.21)$$

un kuri ir divu skrejošo vilņu ar vienādām amplitūdām, frekvencēm un garumiem, bet pretējs izplatīšanās virziens, saskaitīšanas rezultāts.

Risinot diferenciālvienādojumu (1.11), mēs nepieminējam uzdevuma robežnosacījumus. Robežnosacījumu uzdošana ļauj noteikt vilņa skaitļa k izmaiņas intervālu un pieļaujamo k vērtību skaitu šajā intervālā. Līdz šim mēs pētījām bezgalīgi garu ķēditi. Skaidrs, ka spēki, kas darbojas uz atomiem ķēdes vidusdaļā, ir atšķirīgi no tiem spēkiem, kas darbojas tās galos. Tas noved pie tā, ka līdzsvara stāvoklis ķēdītes galos tiek izjaukts. No šīm grūtībām var izvairīties, ja pieņem, ka atomi veido lielu gredzenu tā, ka pēdējais atoms ($n = N$) atkal atrodas attālumā a no pirmā ($n = 1$). Ja N ir liels skaitlis, tad tāda gredzena īpašības maz atšķiras no lineārās ķēdītes īpašībām. Tad par robežnosacījumiem ir ērti izvēlēties periodiskos Bornā – Karmana robežnosacījumus, saskaņā ar kuriem nobīdēm ir jāapmierina ciklitātes nosacījums:

$$U_{n+N} = U_n, \quad (1.22)$$

jo n un $n + N$ kārtas skaitļi attiecas uz vienu un to pašu atomu. Ievietojot risinājumu (1.12) izteiksmē (1.22), iegūsim

$$U_{n+N} = \exp(ikNa) U_n = U_n, \quad (1.23)$$

ja $\exp(ikNa) = 1$.

No šejienes seko, ka atrisinājums (1.12) apmierina robežnosacījumus (1.22), ja

$$kNa = 2\pi n \quad (n = 0; \pm 1; \pm 2; \dots), \quad (1.24)$$

t.i., $k = \left(\frac{2\pi}{a}\right) \left(\frac{n}{N}\right)$ veids tiek kvantēts.

Tā kā k sastopams tikai izteiksmēs, kuru tips ir $\exp(ikna)$, tad nekas nemainīsies, ja tam pieskaitīt lielumam $2\pi/a$ proporcionālu lielumu. Tāpēc k izmaiņas var ierobežot ar intervālu:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq +\frac{\pi}{a}. \quad (1.25)$$

Pieļaujamo vai pašvērtību skaits intervālā (1.25). izpildoties ciklitātes nosacījumam (1.22), ņemot vērā (1.24), ir vienāds ar N , t.i., ar atomu vai elementāro šūnu skaitu ķēdītē. Katrai k pašvērtībai atbilst sava īpašfunkcija atrisinājuma (1.12) formā, tāpēc tādu funkciju vai lineāri neatkarīgo atrisinājumu skaits nevar pārsniegt N .

Tagad mēs varam atrast kustības lineārā vienādojuma vispārīgo atrisinājumu. Harmonisko svārstību gadījumā, atomu kustību ķēdītē var attēlot kā (1.12) veida skrejošo vilņu superpozīciju, kur katrs vilnis raksturojas ar vilņa skaitli k , frekvenci ω_k un amplitūdu A_k . Tad nobīdi U_n var uzrakstīt sekojošā veidā:

$$U_n = \sum_k A_k \exp[i(kna - \omega_k t)], \quad (1.26)$$

kur summēšana tiek veikta pēc visām k vērtībām, kas apmierina nosacījumu (1.23).

1.3.2. Trīsdimensiju režģa atomu svārstības

Tagad izmantosim iegūtos rezultātus, lai kvalitatīvi aprakstītu trīsdimensiju režģa atomu svārstības. Pieņemsim, ka trīsdimensiju režģis ar tilpumu V sastāv no vienādiem atomiem ar masu M un režģī ir N elementārās primitīvās Bravē šūnas. Tā kā katram atomam režģī piemīt trīs brīvības pakāpes, tad viss kristāls tiek raksturots ar $3N$ brīvības pakāpēm. Risinot uzdevumu harmoniskā tuvinājumā, katra j -tā atoma nobīde pakļaujas kustības vienādojumam (1.11), nomainot tajā nobīdi ar nobīdes vektoru $\vec{U}_j$. Rezultātā, lai aprakstītu trīsdimensiju režģa pilno svārstību spektru, ņemot vērā brīvības pakāpes, iegūst $3N$ saistīto kustības vienādojumu sistēmu. Tādas sistēmas atrisinājumu atkal meklē skrejošo viļņu veidā:

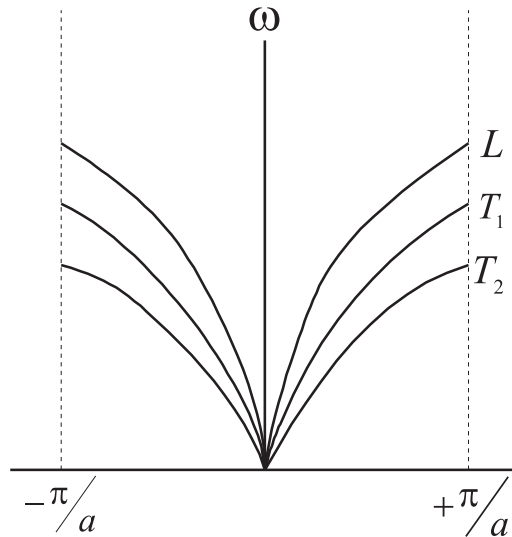
$$\vec{U}_j = A_k \vec{\epsilon}_\nu \exp \left[i \left(\vec{k} \cdot \vec{R}_j^0 - \omega t \right) \right], \quad (1.27)$$

kur $\vec{k}$ - viļņa vektors, kas nosaka viļņu izplatīšanas virzienu; A_k - svārstību amplitūda; $\vec{\epsilon}_\nu$ - normālās modas polarizācijas vienības vektors, kas apraksta virzienu, kurā kustas atomi; $\vec{R}_j^0$ - j -tā atoma rādiusvektors līdzsvara konfigurācijā.

Ievietojot izteiksmi (1.27) kustības vienādojumu ar skaitu $3N$ sistēmā, iegūst homogēno vienādojumu sistēmu attiecībā pret amplitūdām A_k , kurai ir netriviālie atrisinājumi, ja determinants, kas sastādīts no koeficientiem pie nezināmajiem A_k , ir vienāds ar nulli. Pie tam, izrādās, ka determinants ir trešās pakāpes polinoms attiecībā pret ω^2 un vispārīgā gadījumā tam ir trīs saknes.

Tādā veidā, katrai viļņa vektora $\vec{k}$ vērtībai ir trīs svārstību modas, kuras nosaka dispersijas sakarību trīs līknes (1.6. zīm.):

$$\omega = \omega_{\vec{k}}^v \quad (v = 1, 2, 3). \quad (1.28)$$



1.6. zīmējums. Primitīva trīsdimensiju Bravē režģa dispersijas līknes.

Viena no trim modām L atbilst garenvilnim, bet pārējās divas T_1 un T_2 - šķērsvilkņiem. Izotropā vidē risinājumus izvēlas tādā veidā, lai polarizācijas vektors $\vec{\epsilon}_\nu(\vec{k})$ un atomu

nobīde būtu paralēla vektoram $\vec{k}$ garenviļņa gadījumā un perpendikulāra tam šķērsviļņa gadījumā.

1.4. Viendimensijas režģa svārstības ar bāzi

Apskatīsim viendimensijas režģa ar bāzi atomu garensvārstības, kad lineārai Bravē elementāršūnai ar parametru $2a$ pienākas divi atomi. Pieņemsim, ka pa taisni izvietojas N šūnas. Tādai sistēmai piemīt $2N$ brīvības pakāpes. Risinot uzdevumu par atomu svārstību tādā sistēmā, ir iespējami divi ķēdītes modeļi. Pirmais modelis – lineāra divatomu ķēdīte no vienādiem atomiem, kas ir sasaistīti ar atsperītēm, kurām ir dažādi elastības koeficienti. Otrs modelis – lineāra divatomu ķēdīte, kurā viens pēc otra izvietoti atomi ar dažādām masām M_1 un M_2 , bet spēki starp blakusesošo atomu pāriem ir vienādi (atomi savā starpā ir saistīti ar vienāda stinguma atsperītēm). Mēs izmantosim otro modeli.

Apzīmēsim ar $2na$ atomu ar masu M_1 pāra līdzsvara stāvokļus, bet ar $(2n+1)$ – atomu ar masu M_2 nepāra līdzsvara stāvokļus. Lai U_{2n} ir atoma ar masu M_1 nobīde virzienā x kaut kādā laika momentā t attiecībā pret tā līdzsvara stāvokli, bet U_{2n+1} – atoma ar masu M_2 nobīde no tā līdzsvara stāvokļa. Ņemot vērā tikai blakusesošo atomu mijiedarbību, rezultējošo spēku, kas darbojas uz atzīmētajiem atomiem, mēs pierakstīsim sekojošā veidā:

$$F_{2n} = \beta (U_{2n+1} - U_{2n}) - \beta (U_{2n} - U_{2n-1}) = \beta (U_{2n+1} + U_{2n-1} - 2U_{2n});$$

$$F_{2n+1} = \beta (U_{2n+2} - U_{2n+1}) - \beta (U_{2n+1} - U_{2n}) = \beta (U_{2n+2} + U_{2n} - 2U_{2n+1}).$$

Tagad pierakstīsim kustības vienādojumus:

$$\begin{aligned} M_1 \frac{d^2 U_{2n}}{dt^2} &= \beta (U_{2n+1} + U_{2n-1} - 2U_{2n}); \\ M_2 \frac{d^2 U_{2n+1}}{dt^2} &= \beta (U_{2n+2} + U_{2n} - 2U_{2n+1}). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Ņemot vērā to, ka dažādo masu atomu svārstības var notikt ar dažādām amplitūdām U_1 un U_2 , šo vienādojumu atrisinājumu meklēsim skrejošo viļņu veidā:

$$U_{2n} = U_1 \exp [i (2nka - \omega t)];$$

$$U_{2n+1} = U_2 \exp \{i [(2n+1)ka - \omega t]\}. \quad (1.30)$$

Ievietojot šos atrisinājumus vienādojumā (1.29) un saīsinot kopējo reizinātāju $\exp[i(2nka - \omega t)]$ katrā no vienādojumiem, nonākam pie vienādojumu sistēmas attiecībā pret U_1 un U_2 :

$$\begin{cases} (2\beta - M_1\omega^2) U_1 - 2\beta \cos ka U_2 = 0, \\ -2\beta \cos ka U_1 + (2\beta - M_2\omega^2) U_2 = 0 \end{cases} \quad (1.31)$$

Šai homogēno vienādojumu sistēmai ir atrisinājums, ja determinants ir vienāds ar nulli.

$$\begin{vmatrix} (2\beta - M_1\omega^2) & (-2\beta \cos ka) \\ (-2\beta \cos ka) & (2\beta - M_2\omega^2) \end{vmatrix} = 0. \quad (1.32)$$

No šejienes iegūstam vienādojumus, kas saista frekvenci ω un viļņa skaitli k :

$$\omega^4 - 2\beta \left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right) \omega^2 + \frac{4\beta^2}{M_1 M_2} \sin^2 ka = 0. \quad (1.33)$$

Ši bikvadrātvienādojuma saknes:

$$\omega_{i,2}^2 = \beta \left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right) + \beta \sqrt{\left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 ka}. \quad (1.34)$$

Negatīvajām ω vērtībām nav fizikālās jēgas, tāpēc mēs interesēsimies tikai par pozitīvajām vērtībām. Tad no (1.34) seko, ka katram viļņa skaitlim k atbilst divas ω vērtības, tātad arī divas (1.30) veida svārstību modas. Izmantojot Borna-Karmana robežnosacījumus: $U_{2n+2N} = U_{2n}$ vai $U_{2n+1+2N} = U_{2n+1}$, atradīsim viļņa skaitļu k pieļaujamās vērtības. Ciklitātes nosacījums: $U_{2n+2N} = U_1 \exp\{I[2n + 2N]ka - \omega t\} = U_1 \exp[I(2nka - \omega t)] \exp(i2Nka)$ izpildās, ja $\exp(i2Nka) = 1$. Tas ir iespējams gadījumā, ja $2Nka = 2\pi m$, kur m ir vesels skaitlis. No šejienes

$$k = \frac{2\pi m}{2a N}. \quad (1.35)$$

Ņemot vērā to, ka k sastopams tikai $\exp(i2nka)$ veida izteiksmēs, tad nekas nemainīsies, ja viļņa skaitlim k pieskaitīt lielumu, kas ir proporcionāls $2\pi/2a$. Tātad k izmaiņas var ierobežot ar intervālu

$$-\frac{\pi}{2a} \leq k \leq +\frac{\pi}{2a}. \quad (1.36)$$

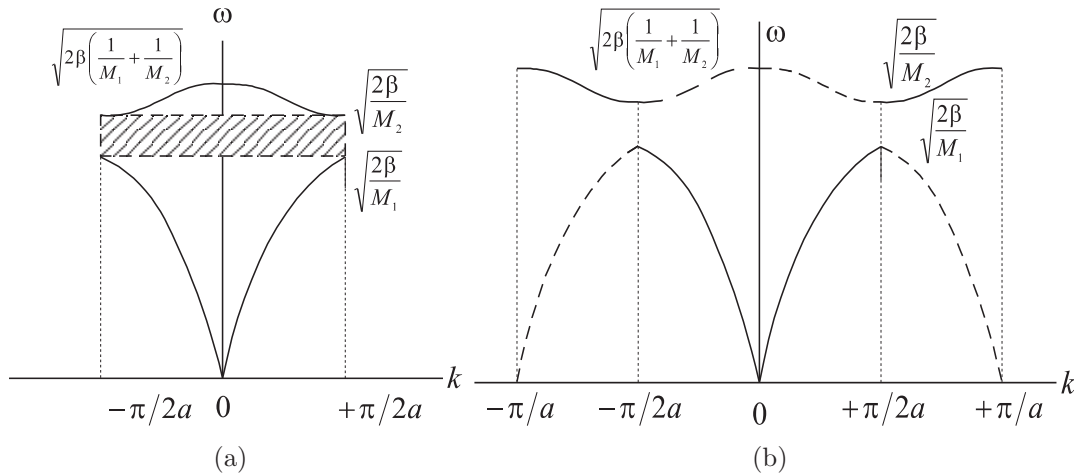
No (1.34) un (1.35) ir redzams, ka intervālā (1.36) pieļaujamo neekvivalento k vērtību skaitu ierobežo robežas $N/2 \leq m \leq N/2$ un k skaits ir vienāds ar N – elementāro šūnu skaitu ķēdītē.

Tā kā katrai k vērtībai atbilst divas svārstību modas, tad intervālā (1.36) normālo modu pilnais skaits ir vienāds ar brīvības pakāpju skaitu sistēmā, t.i., $2N$. Intervāls (1.36) ir divatomu ķēdītes Briljuēna zona.

Tātad uzdevuma par divu veidu atomu svārstībām ķēdītē atrisinājums noved pie ω atkarības no k divām līknēm, kas ieguva dispersijas likuma divu zaru nosaukumu. 1.7. zīmējumā apakšējo līkni sauc par **akustisko zaru**, bet augšējo - par **optisko**. Redzams, ka visām k vērtībām optisko svārstību frekvence ir lielāka par akustisko svārstību frekvenci. Lai noskaidrotu zaru izcelšanos, apskatīsim svārstību frekvences izmaiņas pie mazām k vērtībām un pie $k = \pm\pi/(2a)$. Mazām vērtībām $ka \ll 1$ izteiksmē (1.33) izvirzīsim $\sin^2 ka$ rindā ($\sin^2 ka \approx k^2 a^2$) un aprobežosimies ar pirmo izvirzījuma locekli. Izmantojot kvadrātvienādojuma $x^2 + px + q = 0$ sakņu īpašības ($x_1 + x_2 = -p$, $x_1 x_2 = q$), kā arī to, ka optiskā zara svārstību frekvence vāji mainās $k = 0$ tuvumā, atradīsim vienādojuma (1.33) saknes:

$$\omega_1 = \sqrt{2\beta \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)} \quad - \text{optiskais zars}, \quad (1.37)$$

$$\omega_2 = \left(a \sqrt{\frac{2\beta}{M_1 + M_2}} \right) k \quad - \text{akustiskais zars}. \quad (1.38)$$



1.7. zīmējums. Divatomu lineārās ķēdītes dispersijas liknes:

(a) - attēlotā, (b) - Briljuēna paplašinātā zona.

Salīdzinot izteiksmi (1.38) ar (1.16), var secināt, ka atkarība $\omega = \omega(k)$ apraksta akustisko garensvārstību zaru. Šī atkarība, tāpat kā daudzatomu ķēdītes gadījumā, tuvojas nullei proporcionāli k . Skaņas ātruma vērtību šim zaram garo viļņu gadījumā izsaka izteiksme:

$$v_{sk} = a \sqrt{\frac{2\beta}{M_1 + M_2}}. \quad (1.39)$$

Pie $k = \pm\pi/(2a)$, t.i., uz Briljuēna zonu robežas, frekvence sasniedz vērtību $\omega_2 = \sqrt{2\beta/M_1}$, līkne kļūst lēzena un grupas ātrums kļūst vienāds ar nulli, t.i., apakšējais zars uzvedas tāpat, kā dispersijas līkne vienas atomu ķēdītes gadījumā. No iepriekšminētā ir skaidrs, kāpēc apakšējais zars ieguva nosaukumu - akustiskais.

Otrā līkne sākas pie $k = 0$ no frekvences maksimālās vērtības (1.37), kura, pieaugot k , nolaižas lejā, sasniedzot pie $k = \pm\pi/(2a)$ vērtību $\omega_2 = \sqrt{2\beta/M_2}$. Šo zaru sauc par optisko, tā kā jonu kristālos garensvārstību optiskās modas var mijiedarboties ar elektromagnētisko starojumu. Pie $k \rightarrow 0$ optisko svārstību fāzes ātrums $v_f = \frac{\omega}{k} \rightarrow \infty$, bet grupas ātrums $v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = 0$.

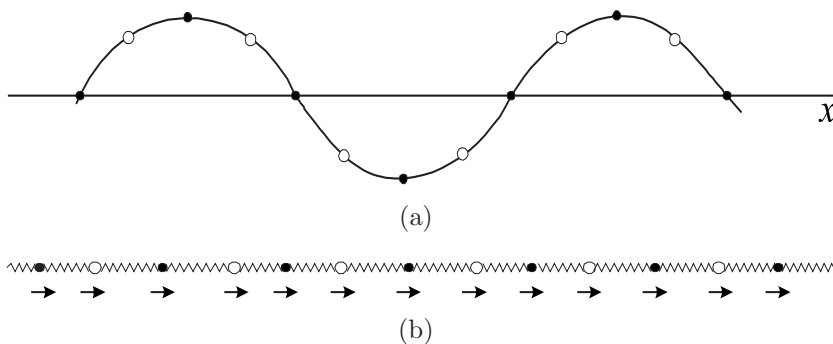
Kā redzams no 1.7. zīmējuma divi zari ir sadalīti ar aizliegto frekvenču joslu (zīmējumā tā ir iesvītrotā), t.i., apgabalā $\sqrt{2\beta/M_1} < \omega < \sqrt{2\beta/M_2}$ kustības vienādojumam (1.29) nav atrisinājuma. Tomēr, ja ķēdītē aizvietot, piemēram, vienu vai vairākus atomus ar masu M_2 uz atomiem ar masu M_1 , t.i., struktūrā ievadīt defektus, tad aizliegtajā frekvenču apgabalā parādās atrisinājumi, kuru sauc par **lokālām modām**.

Noskaidrosim ķēdītes atomu akustisko un optisko svārstību modu atšķirības fizikālo jēgu. Šim nolūkam vienā un tajā pašā zarā salīdzināsim savā starpā svārstību amplitūdu attiecību U_1/U_2 un blakusesošo atomu svārstību fāzes. Mazām k vērtībām (t.i., pie $ka \ll 1$), ņemot vērā (1.30) un pēc atrisinājuma (1.38) ievietošanas vienādojumā (1.31) iegūsim sekojošo:

$$\left(\frac{U_{2n}}{U_{2n+1}}\right)_{ak} = \left(\frac{U_1}{U_2}\right) = 1. \quad (1.40)$$

No šejienes seko, ka blakusesošo atomu svārstības ķēdītē notiek fāzē un tām ir vienāda amplitūda, t.i., šūnas nobīdās kā viens vesels. Tāds svārstību tips ir raksturīgs akustiskajam

vilnim (1.8. zīm.).

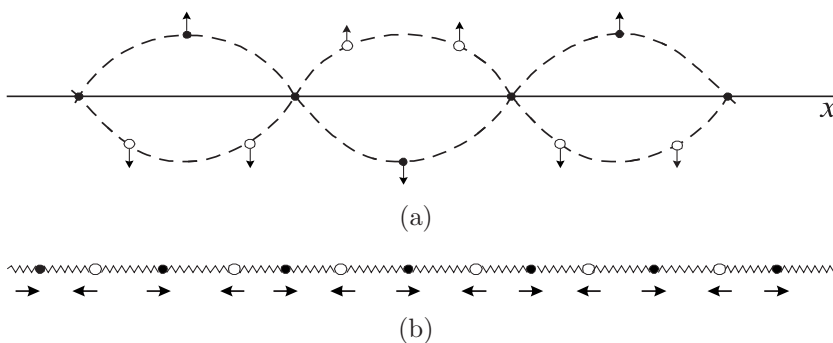


1.8. zīmējums. Atomu svārstības, kas atbilst akustiskai modai pie $k = 0$:
(a) - šķērssvārstības, (b) - garensvārstības.

Ja vienādojumā (1.27) ievietot atrisinājumu (1.37) svārstību optiskajam zaram pie $k = 0$, tad

$$\left(\frac{U_1}{U_2}\right)_{opt} = -\frac{M_2}{M_1}, \quad (1.41)$$

t.i., šūnā atomi svārstās pretējos virzienos (pretfāzē), bet katras šūnas, kas satur divu veidu atomus, masas centrs paliek uz vietas (1.9. zīm.), jo, kā tas seko no (1.41), atomu masas centra nobīdes amplitūda šūnā: $U_1 M_1 + U_2 M_2 = 0$.

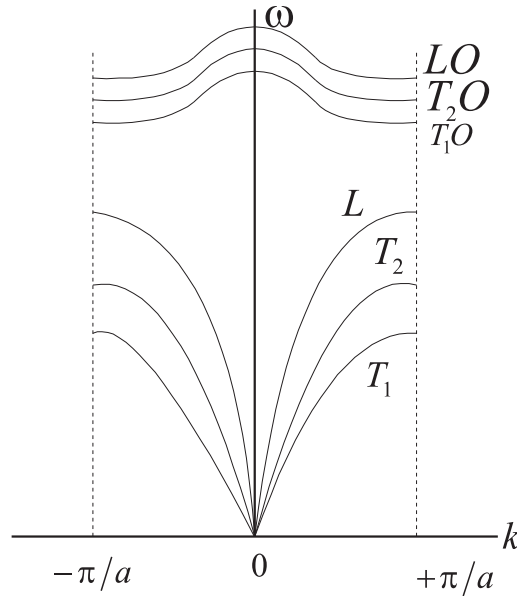


1.9. zīmējums. Garo viļņu optiskās svārstību modas: atomu ar masām M_1 un M_2 , kuri nobīdīti fāzē par 180° , kustība:
(a) - šķērssvārstības, (b) - garensvārstības.

Trīsdimensiju režģa ar bāzi atomu svārstību gadījumā, kad elementārai šūnai pienākas r atomu (sistēmai ar $3rN$ brīvības pakāpēm), sistēmas $3rN$ vienādojumu atrisinājums noved pie $3r$ svārstību zariem un šo zaru dispersijas attiecības var pierakstīt sekojošā veidā:

$$\omega = \omega_k^s \vartheta \quad (\vartheta = 1, 2, 3; \quad s = 1, 2, \dots, r). \quad (1.42)$$

Trīs apakšējie zari (1.10. zīm.), kuri pie mazām k vērtībām tiecas lineāri uz nulli, tiek saukti par **akustiskajiem**, bet pārējie $(3r - 3)$ ir **optiskie**, starp kuriem tāpat izšķir **šķērssvārstību** un **garensvārstību** zarus.



1.10. zīmējums. Trīsdimensiju režģa ar bāzi dispersijas liknes:

T_1 un T_2 - līknes, kas atbilst akustiskām šķērsviļņiem, L - garensviļņu modām.

1.5. Kristāla normālsvārstības

Tā vietā, lai aprakstītu daļiņu individuālās svārstības, apskata to kolektīvo kustību kristālā tāpat kā telpiski sakārtotā sistēmā. Tāds vienkāršojums pamatojas uz to, ka spēcīgo saites spēku darbības dēļ, svārstības, kas rodas vienai daļiņai, nekavējoties tiek nodotas blakusesošām daļiņām un kristālā tiek ierosināta kolektīva kustība elastīga viļņa veidā, kurš aptver visas kristāla daļiņas.

Cieto ķermeni var apskatīt kā dinamisku sistēmu, kurā spēki, kas darbojas uz atomiem, ir proporcionāli to nobīdēm no līdzsvara stāvokļiem, tas nozīmē, ka atomi veic vienkāršu harmonisku kustību.

Kā zināms no klasiskās mehānikas, šajā gadījumā var izmantot normālas koordinātas - dažādo atomu nobīdes lineārās kombinācijas, kurām piemīt sekojoša īpašība: katras modas kustības vienādojumam ir tāds pats veids kā lineārajam oscilatoram. Tādēļ apskatāmā sistēma ir līdzīga lineāro oscilatoru kopai. No mehānikas ir arī zināms, ka normālo koordinātu skaits vienāds ar brīvības pakāpju skaitu.

Tāds paņēmieni tiek izmantots kristāliskā režģa dinamikā, lai aprakstītu režģa atomu mazās svārstības ap to līdzsvara stāvokli. Sarežģītais kolektīvais svārstību stāvoklis tiek sadalīts normālās svārstībās.

Mēs ieviesīsim normālas svārstības q_k , kas mainās laikā pēc sekojošā harmoniskā likuma:

$$q_k = A_k \sqrt{N} \exp(i\omega_k t). \quad (1.43)$$

Pēc izteiksmes (1.43) ievietošanas izteiksmē (1.26) iegūsim:

$$U_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k q_k \exp(inka). \quad (1.44)$$

Diferencējot izteiksmi (1.43) pēc t , ir viegli parādīt, ka jebkura q_k kustības vienādojumam ir sekojošs veids:

$$\frac{d^2 q_k}{dt^2} + \omega^2(k) q_k = 0 \quad (k = 1, 2, 3, \dots, N). \quad (1.45)$$

Ir zināms, ka tas ir lineārā harmoniskā oscilatora kustības vienādojums. Tāda oscilatora pilnā enerģija E_k sastāv no tā kinētiskās un potenciālās enerģijas, un to nosaka pēc klasiskās izteiksmes:

$$E_k = \frac{M}{2} \dot{q}_k^2 + \frac{M}{2} \omega_k^2 q_k^2, \quad (1.46)$$

kur M - oscilatora masa. Tad ķēdītes atomu svārstību pilnā enerģija:

$$E = E_k + E_p = E_{p_0} + \sum_k E_k, \quad (1.47)$$

E_k - kinētiskā enerģija;

E_{p_0} - potenciālās enerģijas vērtība līdzsvara stāvoklī;

E_p - potenciālā enerģija.

Tātad ķēdītes atomu svārstību pilnā siltumenerģija sastāv no normālsvārstību enerģijas, kuras uzvedas līdzīgi kā lineārie harmoniskie oscilatori ar pašfrekvenci ω_k .

Viens no režģa svārstību teorijas pamatjautājumiem ir jautājums par normālsvārstību sadalījumu pa frekvencēm. Normālsvārstību, kuras var rasties lineārā ķēdītē, viļņu garumi ir vienādi:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots, N), \quad (1.48)$$

kur L - ķēdītes garums; N - atomu skaits ķēdītē.

Normālsvārstību skaits z ar viļņa garumu, kas ir vienāds vai lielāks par λ_n , ir vienāds ar n :

$$z = n = \frac{2L}{\lambda_n}.$$

Analoģiskā veidā, stāvvilņu skaitam trīsdimensiju kristālā ar tilpumu V (piemēram, kubā ar šķautni L un tilpumu L^3), kuram piemīt garums, kas ir vienāds vai lielāks par λ , jābūt vienādam ar $z = 2L/\lambda^3 = 8V/\lambda^3$.

Precīzāki aprēķini parāda, ka

$$z = \frac{4\pi V}{\lambda^3}. \quad (1.49)$$

Tā kā $\lambda = 2\pi\nu/\omega$, tad

$$z = \frac{V}{2\pi^2\nu^3} \omega^3. \quad (1.50)$$

Diferencējot šo izteiksmi, iegūsim:

$$dz = g(\omega) d\omega = \frac{3V}{2\pi^2\omega^3} \omega^2 d\omega. \quad (1.51)$$

Formula (1.51) izsaka normālsvārstību skaitu, kuras ir ietvertas frekvenču intervālā no ω līdz $\omega + d\omega$. Funkcija

$$g(\omega) = \frac{dz}{d\omega} = \frac{3V}{2\pi^2\nu^3} \omega^2 \quad (1.52)$$

nosaka normālsvārstību aizpildīšanas blīvumu spektrālajā laukumā $d\omega$. Funkciju $g(\omega)$ sauc par normālsvārstību sadalījuma funkciju pa frekvencēm.

Tā kā normālsvārstību kopējais skaits, kāds var rasties režģī, ir vienāds ar $3N$, tad funkcijai $g(\omega)$ ir jāapmierina normēšanas nosacījums:

$$\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 3N, \quad (1.53)$$

kur $\omega_{\max}$ – maksimālā frekvence, kas ierobežo normālsvārstību spektru no augšas.

Ievietojot (1.52) izteiksmē (1.53) un nointegrējot, iegūsim, ka

$$\frac{V\omega_{\max}^3}{2\pi^2v^3} = 3N. \quad (1.54)$$

No šejienes atradīsim, ka

$$\omega_{\max} = v \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (1.55)$$

Temperatūru

$$\theta = \frac{\hbar\omega_{\max}}{K_B}, \quad (1.56)$$

kur K_B – Bolcmaņa konstante, sauc par **Debaja raksturtemperatūru**. Sasniedzot šo temperatūru, cietajā ķermenī tiek ierosināts pilns normālsvārstību spektrs, kas ietver arī svārstības ar maksimālo frekvenci $\omega_{\max}$. Ievietojot izteiksmē (1.52) v^3 no (1.54), iegūsim:

$$g(\omega) = 9N \frac{\omega^2}{\omega_{\max}^3}. \quad (1.52')$$

1.6. Svārstību kvantēšana. Fononi

Kvantu mehānikā viendimensijas oscilatoru saprot kā sistēmu, kuru apraksta ar Hamiltona operatoru

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2M} + \frac{M\omega_k^2}{2}\hat{X}^2, \quad (1.57)$$

kur $\hat{P}_x = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ - impulsa operators, $\hat{X}$ - koordinātes operators.

Atbilstoši hamiltoniānam (1.57), Šrēdingera vienādojums oscilatora stacionārajiem stāvokļiem tiek pierakstīts sekojoši:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{M\omega_k^2}{2}X^2\psi = E_k\psi, \quad (1.58)$$

kur $\hbar$ - Planka konstante; ψ - viļņa funkcija; E_k - oscilatora pilnā enerģija.

Vienādojuma (1.58) atrisinājums ir enerģijas iespējamās vērtības (pašvērtības):

$$E_k = \hbar\omega_k \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.59)$$

kur n - galvenais kvantu skaitlis.

Formula (1.59) parāda, ka oscilatora enerģija var pieņemt tikai diskrētas vērtības.

Kēdītes atomu svārstību pilnā enerģija:

$$E = E_{p_0} + \sum_K E_k = E_{p_0} + \sum_K \hbar\omega_k \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.60)$$

Procesi, kas notiek cietajā ķermenī un ir saistīti ar kristāliskā režģa atomu svārstībām, ir attēlojami īpaši vienkārši, ja izmantot vienu no visfundamentālākajiem kvantu mehānikas vispārinājumiem. Šī vispārinājuma pamatā ir franču fiziķa Lui Debroļjī ideja par to, ka katram vilnim ar frekvenci ω un viļņa vektoru $\vec{k}$ var attiecināt daļiņu ar enerģiju $E = \hbar\omega$ un impulsu $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Tā elektromagnētiskos viļņus var apskatīt kā starojuma kvantu oscilatorus vai uzskatīt, ka tie sastāv no daļiņām - kvantiem, kuras sauc par fotoniem. Analogiski, ja izmantot formulu (1.59) kvantu oscilatora enerģijai, tad skaņas vilni ar viļņa vektoru $\vec{k}$ var apskatīt kā kvantu $n(\vec{k})$ kopu ar enerģiju $\hbar\omega(\vec{k})$. Šos skaņas viļņa kvantus sauc par fononiem. Lielums $\hbar\omega(\vec{k})$ nosaka vismazāko ierosinājuma enerģijas porciju virs pamatlīmeņa $\frac{1}{2}\hbar\omega(\vec{k})$. Tā kā fonons pārnēs vismazāko enerģiju, tad to apskata kā elementāro ierosinājumu. Atomu kolektīvā kustība kristālā ir skaņas viļņi, bet tiem atbilstošie ierosinājumi - fononi. No teiktā seko, ka katru svārstību modu ar frekvenci $\omega(\vec{k})$ var ierosināt ar veselu skaitu kvantu, kuriem ir enerģija $\hbar\omega(\vec{k})$. Pie tam lielumam n formulā (1.59) ir vienkārša jēga - tas ir dotā veida fononu skaits ar impulsu $\vec{p}$ un enerģiju $\hbar\omega(\vec{k})$.

Fononu jēdziena ieviešana ļauj daudzus gadījumus apskatīt jebkuru cieto ķermeni kā kastī, kurā atrodas fononu gāze. Fononi, tāpat kā parastās gāzes daļiņas, kustas tādā kastē no sienas līdz sienai. Saduroties savā starpā tie var pazust un veidoties no jauna. Fononu gāze nav parastā gāze. Fononu skaits cietā ķermenī nav pastāvīgs. Fononu ir jo vairāk, jo augstāka temperatūra, bet tuvojoties nullei, to skaits arī tiecas uz nulli. Īstās daļiņas dzīvo tukšā telpā, piemēram, atomu un elektronu var izņemt no kristāla, bet fononu "izlaist" no kristāla nevar. Stingri runājot, fonona impulss nav impulss, bet vektors ar īpašībām, kas ir ļoti līdzīgas impulsa īpašībām. To sauc par kvaziimpulsu. Viens no otra būtiski atšķiras ar to, ka saduroties fononu kvaziimpulss var pārvietoties pa režģi diskrētām porcijām, pie tam tas nesaglabājas. Kvaziimpulss ir lielums, kas tiek noteikts ar precizitāti līdz konstantam vektoram $\hbar\vec{g}$, kur $\vec{g}$ ir apgrieztā režģa vektors. Tā apvienojoties diviem fononiem ar kvaziimpulsiem $\hbar\vec{k}_1$ un $\hbar\vec{k}_2$ vienā fononā ar kvaziimpulsu $\hbar\vec{k}_3$, enerģijas saglabāšanas likumu var rakstīt:

$$\omega(\vec{k}_1) + \omega(\vec{k}_2) = \omega(\vec{k}_3). \quad (1.61)$$

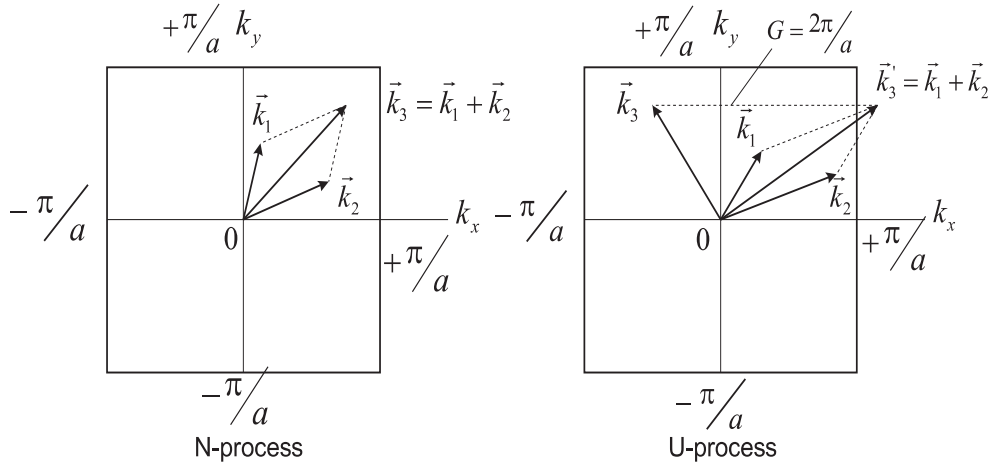
Pie tam kvaziimpulsiem būs spēkā sekojošā vienādība:

$$\hbar\vec{k}_1 + \hbar\vec{k}_2 = \hbar\vec{k}_3 + \hbar\vec{g}. \quad (1.62)$$

Ja $\vec{g}=0$, vienādība (1.62) iegūst sekojošo veidu:

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3. \quad (1.63)$$

Šajā gadījumā, viļņu vektoru summa saglabājas. Sadursme, kurai ir spēkā vienādība (1.63), tiek saukta par **normālo procesu** jeb **N-procesu**. Mijiedarbība, kuras rezultātā viļņa vektoru summa mainās par lielumu $\vec{g}$, tiek saukta par **pārmešanas procesu** vai **U-procesu**. Lai izprastu atšķirību starp N- un U-procesiem, apskatīsim fononu uzvedību parastajā primitīvajā kvadrātrežģā ar parametru a pirmajā Briljuēna zonā (1.11. zīm.).



1.11. zīmējums. Trīsfononu procesu shematiskais attēlojums pirmajā Briljuēna zonā:

$$-\pi/a \leq k_x \leq +\pi/a; -\pi/a \leq k_y \leq +\pi/a.$$

Pieņemsim, ka divu fononu ar viļņa vektoriem $\vec{k}_1$ un $\vec{k}_2$ sadursmes rezultātā punktā O izveidojas fonons ar viļņa vektoru $\vec{k}_3$. Ja sākotnējie vektori ir tādi, ka summārais vektors $\vec{k}_3$ neiziet no Briljuēna zonas robežām, tad visiem trim vektoriem piemīt pozitīvie virzieni attiecībā pret k_x , un tiem ir spēkā nosacījumi (1.61) un (1.62) pie $\vec{g} = 0$. Aprakstītā aina atbilst N-procesam. Tā kā siltumenerģija tiek pārnesta fonona grupas ātruma virzienā, tad N-procesa gadījumā enerģijas plūsmas virziens modā ar viļņa vektoru $\vec{k}_3$ sakrīt ar virzienu, kurā enerģija tiek efektīvi pārnesta ar modām $\vec{k}_1$ un $\vec{k}_2$.

Pārmešanas procesa ilustrācijai, pieņemsim, ka sākotnējiem vektoriem $\vec{k}_1$ un $\vec{k}_2$ ir pozitīvs virziens attiecībā pret k_x un to modas ir tādas, ka vektors $\vec{k}_3' = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$ iziet ārpus Briljuēna zonas. Var apgalvot, ka vektors $\vec{k}_3$ ir ekvivalents vektoram $\vec{k}_3'$. Redzams, ka pēc U-procesa siltumenerģija tiek nodota virzienā, kas nesakrīt ar grupas ātrumu virzieniem modās $\vec{k}_1$ un $\vec{k}_2$.

Vienlaicīgi režģī var būt ierosināts pēc patikas daudz vienādu fononu. Tas nozīmē to, ka fononu gāze pakļaujas Bozē - Einšteina statistikai. Tā kā fononu pilnais skaits šajā gāzē nav uzdots, bet ir atkarīgs no līdzsvara stāvokļa, tad fononu ķīmiskais potenciāls ir vienāds ar nulli. Tādēļ fononu vidējais skaits katrā kvantu stāvoklī (ar kvaziimpulsu $\vec{p}$ un enerģiju E) tiek noteikts siltumlīdzsvarā ar Planka sadalījuma funkciju

$$\langle n_p \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E(p)}{K_B T}} - 1}. \quad (1.64)$$

Pie augstām temperatūrām ($K_B T \gg E$) šī izteiksme iegūst sekojošo izskatu

$$\langle n_p \rangle = \frac{K_B T}{E(p)}, \quad (1.65)$$

t.i., fononu skaits dotajā stāvoklī ir proporcionāls temperatūrai.

Fononu ieviešana ļāva noskaidrot, no kā veidojas cietā ķermeņa ierosinājuma stāvokļu enerģija. Fononu ieviešanas iespējamība ir saistīta ar to, ka kristālisks ciets ķermenis gandrīz vienmēr atrodas salīdzinoši zemā ierosinājuma līmenī. Fononu jēdziens ir plašākas metodes atsevišķs gadījums, kurai ir svarīga pamatloma dažādu ķermeņu kvantu enerģētisko spektru teorijā. Jebkurš makroskopiska ķermeņa vāji ierosināts stāvoklis var būt

apskatīts kvantu mehānikā kā atsevišķo elementāro ierosinājumu kopa. Šie elementārie ierosinājumi uzvedas tāpat kā kvazidaļiņas, kas kustas ķermenī ar noteiktu tilpumu. Šis pieņēmums ir pamatā kvazidaļiņu metodei. Vēsturiski pirmās kvazidaļiņas cietā ķermenī bija fononi.

Pāšreiz vislabākā eksperimentālā viļņu novērošanas metode režģī ir neelastīgā siltumneitronu izkliede uz fononiem. Siltumneitronu un fononu enerģija un impulss ir salīdzināmi savā starpā. Neelastīgas sadursmes rezultātā neitrons zaudē vai iegūst būtisku savas enerģijas daļu, un līdz ar to var noteikt kā viļņa garuma izmaiņu (enerģijas izmaiņu), tā arī virziena izmaiņu (impulsa izmaiņu).

Pētot režģa svārstības ar neitronu izkļiedes palīdzību, ir nepieciešams ņemt vērā enerģijas saglabāšanas likumu neelastīgas sadursmes gadījumā

$$\frac{\hbar^2}{2m_n} (\vec{k}_i^2 - \vec{k}_j^2) = \hbar\omega_{\vec{k}}, \quad (1.66)$$

kur $\vec{k}_i$ un $\vec{k}_j$ - atbilstoši sākotnējais un pēdējais neitrona viļņa vektors;

m_n - neitrona masa;

$\omega_{\vec{k}}$ - fonona frekvence režģī ar viļņa vektoru $\vec{k}$.

Precīzi izmērot $\vec{k}_i$ un $\vec{k}_j$ un neitrona kūlīša enerģētiskos zaudējumus, var eksperimentāli noteikt sakarību starp ω un k , t.i., dispersijas attiecību viļņiem režģī.

1.7. Kristāliskā režģa siltumietilpība. Einšteina un Debaja modeļi

Siltumkustības pamatīpatnības cietajā ķermenī var izprast, apskatot siltumīpatnības uzvedību izmainoties temperatūrai. Pēc definīcijas, vielas siltumietilpība, kas attiecināta vienam molam, ir enerģija, kuru nepieciešams pievadīt vielas vienam molam, lai palielinātu tā temperatūru par 1 K. No šejienes, siltumietilpība pie nemainīga tilpuma

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V. \quad (1.67)$$

Siltumietilpības klasiskajā teorijā cietais ķermenis tiek apskatīts kā $3N$ neatkarīgo lineāro harmonisko oscilatoru sistēma. Saskaņā ar klasisko statistiku tāda oscilatora vidējā enerģija ir vienāda ar $K_B T$. Ja kristāls sastāv no N_A atomiem (N_A - Avogadro skaitlis), tad pilnā vidējā siltumenerģija ir

$$E = 3N_A K_B T = 3RT, \quad (1.68)$$

kur R – gāzes universālā konstante. No šejienes molārā siltumietilpība

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = 3R. \quad (1.69)$$

Saskaņā ar (1.69) cietā ķermeņa siltumietilpība nav atkarīga no temperatūras. To arī apliecina eksperiments pietiekami augstu temperatūru apgabalā. 1918. g. franču zinātnieki P. Dilongs un A. Pti eksperimentāli apliecināja šīs atbilstības patiesīgumu.

Zemo temperatūru apgabalā siltumietilpības nemainīgums netiek novērots. Samazinoties temperatūrai, cieto ķermeņu siltumietilpība kļūst mazāka par $3R$ un pie $T \rightarrow 0$ tā tiecas uz nulli saskaņā ar Nernsta teoriju. Lai izskaidrotu siltumietilpības atkarību no temperatūras ir nepieciešams izmantot kvantu statistikas pieņēmumus. 1907.g. Einšteins piedāvāja modeli, kas ļāva izskaidrot siltumietilpības atkarību no temperatūras. Viņš izmantoja sekojošus divus pieņēmumus:

1. cietais ķermenis ir vienādu harmonisko oscilatoru (atomu) kopa, kas svārstās neatkarīgi viens no otra ar vienu un to pašu frekvenci ω trijos savstarpēji perpendikulāros virzienos;
2. oscilatora enerģija ir kvantēta pēc Planka.

Tāda oscilatora vidējo enerģiju nosaka sekojoša izteiksme:

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1}. \quad (1.70)$$

Tādā veidā, ja cietajā ķermenī ir N_A atomu, tad pilnā siltumenerģija, kuru nosaka režģa svārstības, ir

$$E = 3N_A \langle E \rangle = 3N_A \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1}. \quad (1.71)$$

No izteiksmes (1.71) iegūsim molārās siltumietilpības vispārīgo izteiksmi:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{3N_A K_B \left(\frac{\hbar\omega}{K_B T} \right)^2}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1 \right)^2} e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}}. \quad (1.72)$$

Apskatīsim divus robežgadījumus.

1. Augsto temperatūru gadījums ($K_B T \gg \hbar\omega$).

Šajā gadījumā formulu (1.72) var vienkāršot, izvirzot rindā

$$\left(e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1 \right)^2 = \left(1 + \frac{\hbar\omega}{K_B T} - 1 \right)^2 = \left(\frac{\hbar\omega}{K_B T} \right)^2.$$

Eksponente $e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}}$ (1.72) skaitītājā tiecas uz vieninieku. Tad formula (1.72) iegūst sekojošo izskatu

$$C_V \approx 3N_A K_B \approx 3R.$$

Kā redzams, augsto temperatūru gadījumā, formula (1.72) noved pie Dilinga un Pti likuma.

2. Zemo temperatūru gadījums ($K_B T \ll \hbar\omega$).

Šajā gadījumā $e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} \gg 1$, un saucējā vieninieku var neņemt vērā. Līdz ar to

$$C_V = 3R \left(\frac{\hbar\omega}{K_B T} \right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega}{K_B T}}. \quad (1.73)$$

Kā redzams no (1.73), cietā ķermeņa temperatūrai tiecoties uz nulli, eksponenciālais reizinātājs kļūst noteicošais, tā kā siltumietilpība tiecas uz nulli pa eksponenti.

Siltumietilpība, ko izskaitļoja Einšteins, samazinās atkarībā no temperatūras ātrāk nekā tas ir īstenībā. Eksperiments parādīja, ka dielektriķu siltumietilpība zemās temperatūrās (pie $T \rightarrow 0$) mainās atkarībā no T^3 . Teorijas nesaskaņa ar eksperimentu ir saistīta ar to, ka Einšteina modelī katrs atoms veic harmoniskas svārstības neatkarīgi no citiem atomiem ar frekvenci ω . Nākošo soli kvantu teorijas attīstībā spēra P. Debajs 1912. gadā. Debajs saglabāja Einšteina pamatideju, tikai papildināja to ar sekojošo: harmoniskie oscilatori svārstās ar dažādām frekvencēm. Saskaņā ar Debaju pilnā siltumenerģija, kuru nosaka režģa svārstības, ir vienāda ar

$$E = \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1} g(\omega) d\omega. \quad (1.74)$$

Ievietojot $g(\omega)$ vērtību no izteiksmes (1.52'), atradīsim

$$E = \frac{9N_A}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1}. \quad (1.75)$$

Ērtības labad, pāriesim pie bezdimensionāla lieluma $x = \frac{\hbar\omega}{K_B T}$. Tādā gadījumā izteiksme (1.75) pārrakstīsies sekojošā veidā

$$E = 9N_A K_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^4 \theta \int_0^{\theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (1.76)$$

kur θ - Debaja temperatūra.

Funkciju

$$D\left(\frac{\theta}{T}\right) = \frac{3}{\left(\frac{\theta}{T}\right)^3} \int_0^{\theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (1.77)$$

sauc par **Debaja funkciju**. No izteiksmēm (1.76) un (1.77) seko pilnās enerģijas Debaja interpolācijas formula

$$E = 3N_A K_B T D\left(\frac{\theta}{T}\right). \quad (1.78)$$

Šī izteiksme atšķiras no klasiskās izteiksmes (1.68) ar Debaja funkciju. Augsto temperatūru apgabalā (pie $T \gg \theta$) izpildās nosacījums $(\theta/T) \ll 1$. Tā kā integrālī (1.77) $x \ll (\theta/T)$, tad x izpildās nevienādība $x \ll 1$. Tāpēc var izmantot izvīrziņu:

$$\frac{x^3}{e^x - 1} = x^2 - \frac{1}{2}x^3 + \frac{x^4}{12} - \dots \quad (1.79)$$

No šejienes un izteiksmes (1.77) seko

$$D\left(\frac{\theta}{T}\right) = 1 - \frac{3}{8}\left(\frac{\theta}{T}\right) + \frac{1}{20}\left(\frac{\theta}{T}\right)^2 - \dots \quad (1.80)$$

Tāpēc augsto temperatūru apgabalā, saskaņā ar (1.78) un (1.80) ir spēkā

$$E = 3RT \left[1 - \frac{3}{8}\left(\frac{\theta}{T}\right) + \frac{1}{20}\left(\frac{\theta}{T}\right)^2 - \dots \right]. \quad (1.81)$$

Pie $T \rightarrow 0$, kad $(\theta/T) \rightarrow \infty$, no izteiksmes (1.77) seko, ka

$$D(\infty) = \frac{3}{\left(\frac{\theta}{T}\right)^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (1.82)$$

Integrālis izteiksmes (1.82) labajā pusē ir vienāds ar $\pi^4/15$. Tāpēc

$$D(\infty) = \frac{\pi^4}{5 \left(\frac{\theta}{T}\right)^3}. \quad (1.83)$$

No šejienes un no izteiksmes (1.78) seko, ka pie $T \rightarrow 0$ ir spēkā

$$E = \frac{3}{5} \frac{RT\pi^4}{\left(\frac{\theta}{T}\right)^3} = \frac{3}{5} \frac{\pi^4 R}{\theta^3} T^4. \quad (1.84)$$

Diferencējot izteiksmi (1.78) pēc temperatūras, iegūsim cietā ķermeņa siltumietilpības Debaja interpolācijas formulu

$$C_V = 3R \left[D\left(\frac{\theta}{T}\right) - \left(\frac{\theta}{T}\right) \frac{\partial D\left(\frac{\theta}{T}\right)}{\partial \left(\frac{\theta}{T}\right)} \right]. \quad (1.85)$$

Augsto temperatūru apgabalā no izteiksmes (1.81) seko

$$C_V = 3R \left[1 - \frac{1}{20} \left(\frac{\theta}{T}\right)^2 + \dots \right]. \quad (1.86)$$

Apgabalā $T \ll \theta$ no izteiksmes (1.84) iegūsim

$$C_V = \gamma \left(\frac{T}{\theta}\right)^3, \quad (1.87)$$

kur $\gamma = \frac{12}{5} R\pi^4$. Tādā veidā, Debaja tuvinājumā kad $T \rightarrow 0$, cietā ķermeņa siltumietilpība tiecas uz nulli pēc T^3 likuma.

II nodaļa

ZONU TEORIJA

2.1. Šrēdingera vienādojums kristālam

Kristāls ir daļiņu sistēma, kas sastāv no daudziem elektroniem un atomu kodoliem. Pilnu informāciju par šo sistēmu un tās enerģētisko spektru var iegūt risinot Šrēdingera vienādojumu šīs sistēmas stacionāram stāvoklim.

Kristālā pastāv daudz mijiedarbību, tāpēc Šrēdingera vienādojums ir ļoti sarežģīts.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} - \frac{\hbar^2}{2M_j} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} + \frac{1}{8\pi\epsilon\epsilon_0} \left(\sum_{j \neq k} -\frac{Z_j Z_k e^2}{R_{jk}} + \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r_{ik}} - \sum_{ij} \frac{Z_j e^2}{r_{ij}} \right) + \sum_{ij} V_{ij} + \sum_{ij} S_{ij} \right\} \Psi = E \Psi, \quad (2.1)$$

kur

Ψ - elektronu un kodolu sistēmas viļņu funkcija.

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_j);$$

$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2}$ - elektronu kinētiskā enerģija;

$-\frac{\hbar^2}{2M_j} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2}$ - kodolu kinētiskā enerģija;

$\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{j \neq k} \frac{Z_j Z_k e^2}{R_{jk}}$ - kodolu Kulona mijiedarbības potenciālā enerģija;

$\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{j \neq k} \frac{Z_j e^2}{r_{jk}}$ - elektronu Kulona mijiedarbības ar kodoliem potenciālā enerģija;

$\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r_{ik}}$ - elektronu Kulona mijiedarbības potenciālā enerģija;

$\sum_{ij} V_{ij}$ - spin - orbitālās mijiedarbības enerģija;

$\sum_{ij} S_{ij}$ - spin - spina mijiedarbības enerģija;

E - sistēmas (kristāla) pilnā enerģija.

Šrēdingera vienādojumu kristāliem var risināt ar tuvināšanas metodēm, kad netiek ņemtas vērā kodolu un elektronu spin - orbitālās mijiedarbības, kā arī relatīvistiskie efekti. Šādā gadījumā stacionārais Šrēdingera vienādojums ir sekojošs

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} - \frac{\hbar^2}{2M_j} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \left(\sum_{j \neq k} -\frac{Z_j Z_k e^2}{R_{jk}} + \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r_{ik}} - \sum_{ij} \frac{Z_j e^2}{r_{ij}} \right) \right\} \Psi = E\Psi, \quad (2.2)$$

kur

m_i - i-tā elektrona masa,

M_j - j-tā kodola masa,

$\vec{r}_i$ - i-tā elektrona rādiusvektors,

$\vec{R}_j$ - j-tā kodola rādiusvektors,

Z_j, Z_k - atomu kodolu kārtas numuri,

r_{ij} - attālums starp atbilstošo elektronu un kodolu,

R_{jk} - attālums starp atbilstošajiem kodoliem,

r_{ik} - attālums starp atbilstošajiem elektroniem.

Tā kā sistēmas stāvokli nosaka tās viļņu funkcija, bet viļņu funkcija, kas atbilst vienādojumam (2.2), ir atkarīga no mainīgo skaita, kuri atbilst katrai daļiņai, tad praktiski Šrēdingera vienādojumu uzrakstīt nav iespējams, jo to skaits būs ar kārtu 10^{24} (vienā molā ietilpst 10^{24} daļiņas).

Fizikālās teorijas uzdevums ir sameklēt pietiekami pamatotus tuvinājumus, kuri dotu iespēju interpretēt un aprēķināt tos lielumus, kurus novēro eksperimentos, saglabājot Šrēdingera vienādojuma principiālās īpašības, kuras atspoguļo kristāla (cieta ķermeņa) atšķirības no ideāla izolēta atoma.

2.2. Adiabātiskais tuvinājums

Vienkāršosim iegūto Šrēdingera vienādojumu:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} - \frac{\hbar^2}{2M_j} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} + V(\vec{r}_i, \vec{R}_j) \right\} \Psi = E\Psi, \quad (2.3)$$

kur

$$V(\vec{r}_i, \vec{R}_j) = \frac{1}{8\pi\epsilon_0\epsilon} \left(\sum_{j \neq k} \frac{Z_j Z_k e^2}{R_{jk}} + \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r_{ik}} - \sum_{ij} \frac{Z_j e^2}{r_{ij}} \right)$$

ir elektronu un kodolu Kulona mijiedarbības enerģija.

Ņemsim vērā, ka kodolu masa ir daudz lielāka par elektronu masu ($m \ll M$). Tāpēc jebkuras kodolu konfigurācijas gadījumā elektroni bez inerces nonāks savstarpējā līdzsvarā. Citiem vārdiem runājot, kodolus salīdzinājumā ar elektroniem var uzskatīt par nekustīgiem. Šī iemesla dēļ elektronu un kodolu kustību var uzskatīt par neatkarīgu

vienai no otras, un tā notiek bez enerģijas apmaiņas starp elektronu un kodolu daļiņu apakšsistēmām. Šajā apstākļi slēpjas adiabātiskā tuvinājuma jēga.

Aplūkojot elektronu kustību un pieņemot kodolus par nekustīgiem ($m_I \ll M_j$), sakarībā (2.3) var atnest saskaitāmo, kas nosaka kodola kinētisko enerģiju: tā kā

$$\frac{1}{M_j} \ll \frac{1}{m_i}; \quad \frac{1}{M_j} \xrightarrow{m_i \ll M_j} 0,$$

tad var uzrakstīt, ka

$$-\frac{\hbar^2}{2M_j} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} \xrightarrow{m_i \ll M_j} 0. \quad (2.4)$$

Ņemot vērā (2.3), nosacījumu (2.4) var uzrakstīt sekojoši

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + V(\vec{r}_i, \vec{R}_j) \right\} \varphi = \varepsilon \varphi, \quad (2.5)$$

kur φ ir nekustīgo kodolu laukā kustībā esošo elektronu viļņu funkcija.

Tagad $\vec{R}_j$ ir parametri, kuri nosaka kodolu potenciālo lauku, bet nevis Šrēdingera vienādojuma mainīgie, tādēļ $\varphi(\vec{r}_i, \vec{R}_j)$, $\varepsilon(\vec{R}_j)$ un $V(\vec{r}_i, \vec{R}_j)$ ir atkarīgi no $\vec{R}_j$ kā parametriem:

$$\varphi(\vec{r}_i, R), \quad \varepsilon(R), \quad V(\vec{r}_i, R).$$

Pieņemsim, ka Ψ ir pilnā viļņa funkcija, Φ - kodolu sistēmas viļņu funkcija, bet φ ir elektronu sistēmas viļņa funkcija. Tad elektronu un kodolu sistēmas pilno viļņa funkciju var uzrakstīt sekojoši:

$$\Psi(\vec{r}, R) = \Phi(R) \varphi(\vec{r}, R). \quad (2.6)$$

Precīzais kvantu mehānikas uzdevums adiabātiskā tuvinājuma gadījumā sadalās divos vienkāršākos uzdevumos:

1. uzdevumā par elektronu kustību nekustīgo kodolu laukā;
2. uzdevumā par kodolu kustību elektronu radītajā vidējā laukā.

$$\begin{cases} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_i} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + V(\vec{r}, R) \right\} \varphi = \varepsilon \varphi - & \text{elektroniem atbilstošais vienādojums,} \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M_j} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} + \varepsilon(\vec{R}) \right\} \Phi = W \Phi - & \text{kodoliem atbilstošais vienādojums.} \end{cases} \quad (2.7)$$

Šāda veida tuvinājumā ir jāievēro, ka formulā $V(\vec{r}, R)$ ir Kulona spēku mijiedarbības starp elektroniem un kodoliem potenciālā enerģija un, ja pirmajā uzdevumā par elektronu kustību nekustīgo kodolu laukā tika ņemta vērā elektronu savstarpējās mijiedarbības enerģija ar kodoliem, bet kodolu mijiedarbības enerģiju varēja neievērot, tad otrajā gadījumā (uzdevumā par kodolu kustību elektronu vidējā laukā) to vajag ņemt vērā. Tādēļ vienādojumus precizētā veidā var pierakstīt:

$$\begin{cases} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_i} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + \frac{1}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon} \left[\sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r_{ik}} - \sum_{ij} \frac{Z_j e^2}{r_{ij}} \right] \right\} \varphi = \varepsilon \varphi, \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M_j} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} + \frac{1}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon} \sum_{j \neq k} \frac{Z_j Z_k l^2}{R_{jk}} + \varepsilon \right\} \Phi = W \Phi. \end{cases} \quad (2.8)$$

Taču šajā gadījumā uzdevums par visu elektronu kopas kustību nekustīgo atomu kodolu laukā kristālā kļūst ārkārtīgi sarežģīts un risināšanai jālieto tuvinājuma metodes, kas tiks aplūkotas tālāk.

Ir jāņem vērā, ka pielietojot adiabātisko tuvinājumu, pilnu informāciju par kristālu iegūt nav iespējams. Šajā tuvinājumā mēs zaudējam informāciju par elektronu kustības atkarību no kodolu kustības.

Nav iespējams izskaidrot, piemēram, elektronu - fononu mijiedarbību, skaņas viļņu izplatīšanos kristālos, supravadītspēju, elektronu Kupera pāru veidošanos, kuri rodas savstarpējās pievilkšanās dēļ vienam no tiem izstarojot, bet otram absorbējot virtuālo fononu.

2.3. Viennelektrona tuvinājums

Aplūkojot elektrona kustību kristāliskā režģa nekustīgo kodolu laukā (adiabātiskais tuvinājums) mēs iegūsim sekojošu Šrēdingera vienādojumu

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + \frac{1}{8\pi\epsilon\epsilon_0} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r_{ik}} - \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \sum_{i=j} \frac{Z_j e^2}{r_{ij}} \right\} \varphi = \epsilon \varphi.$$

Šāda veida vienādojumu ir grūti atrisināt, jo ir jāņem vērā milzīgs skaits mainīgo, kuri ir atkarīgi no elektronu skaita. Šos mainīgos ir jāsamēklē katrai daļiņai.

Šādos gadījumos pieļauj vēl vienu pieņēmumu, ko sauc par **viennelektrona tuvinājumu**. Dotā tuvinājuma būtība ir tāda, ka no visa elektronu daudzuma kristālā tiek izdalīts viens elektrons. Visus pārējos elektronus var aizstāt ar kādu efektīvo lādiņu, kurš noteiktā veidā sadalīts telpā. Mūsu izvēlētais elektrons atradīsies šī lādiņa ārējā elektriskā lauka iedarbībā. Šāds elektriskais lauks ir vidējais lauks un nav atkarīgs no laika.

Apzīmēsim $(n - 1)$ elektronu, kas aizstāti ar efektīvo lādiņu, potenciālo enerģiju ar $\Omega(\vec{r})$.

Šim gadījumam Šrēdingera vienādojumu var pierakstīt sekojošā veidā:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + [\Omega(\vec{r}) - V_0(\vec{r})] \right\} \varphi = \epsilon \varphi, \quad (2.9)$$

kur

$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2}$ - mūsu izvēlēta viena elektrona kinētiskā enerģija;

$[\Omega(\vec{r}) - V(\vec{r})]$ - potenciālā enerģija kristālā viennelektrona tuvinājuma gadījumā;

$\Omega(\vec{r})$ - elektronu vidējā lauka potenciālā enerģija;

$V(\vec{r})$ - elektrona mijiedarbības potenciālā enerģija ar nekustīgajiem kodoliem.

Dotajā Šrēdingera vienādojumā mēs aplūkojam atsevišķi izvēlēto elektronu, kurš atrodas citu elektronu vidējā laukā un nekustīgo kodolu laukā. Šajā gadījumā uzdevums reducējas uz šo lauku noteikšanu. Ievietojot lauku lielumu vērtības Šrēdingera vienādojumā, nosaka elektrona enerģētisko spektru.

Pārējo elektronu vidējā lauka potenciālo enerģiju nosaka pēc Hartri - Foka metodes.

Vispārīgā gadījumā mēs varam ieviest apzīmējumu

$$[\Omega(\vec{r}) - V(\vec{r})] = U(\vec{r}),$$

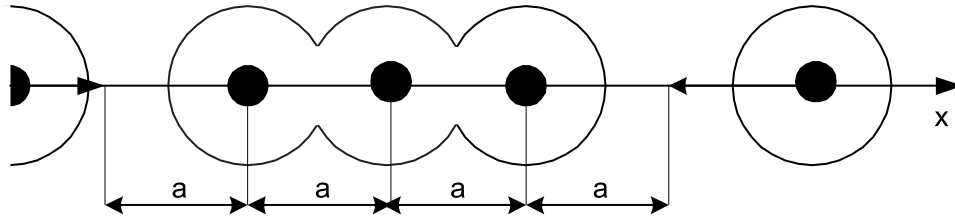
kuru izmantojot, Šrēdingera vienādojumu uzrakstīsim sekojošā veidā

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + U(\vec{r}) \right\} \varphi = \varepsilon \varphi. \quad (2.10)$$

Viennelektrona tuvinājuma gadījumā mēs iegūstam tā saukto **viennelektrona kristāla modeli**. Šādā modeli kristālā kustas viens elektrons un uz to iedarbojas kodolu potenciālais lauks (kristālrežģa jonu lauks) un ārējais dotā kristāla elektronu vidējais lauks.

Izmantojot adiabatisko tuvinājumu, mēs jau zaudējam informāciju par elektronu kustības atkarību no kodolu kustības. Tagad, izmantojot viennelektrona modeli, mēs atkal zaudējam zināmu informāciju, proti, katra elektrona enerģijas atkarību no visiem pārējiem. Tas nozīmē, ka nevar precīzi noteikt ne viļņu funkciju, ne enerģijas skaitliskās vērtības.

Aplūkojot viennelektrona tuvinājumu, bieži pielieto viendimensionālo vienatoma kristāla modeli. Šādu modeli var iztēloties kā viena veida atomu periodisku atkārtošanos, kuri atrodas dinamiskā līdzsvarā (t.i., visi atgrūšanās spēki tiek kompensēti ar blakusatoma pievilkšanās spēkiem) un ir vienādā attālumā viens no otra. Šādu modeli varētu iegūt, ja kādas izvēlētas ass virzienā satuvinātu viena veida atomus līdz tie kondensējas un pāriet cietā fāzē.



2.1. zīmējums. Viendimensijas režģa shematisks attēlojums.

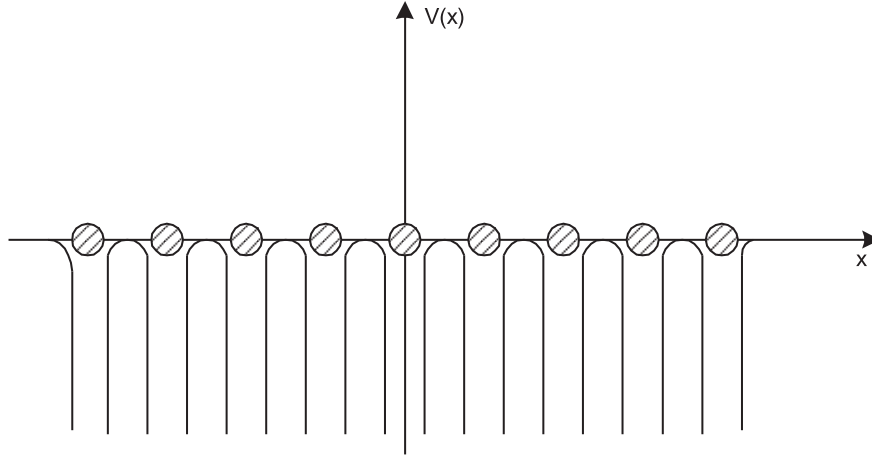
Viennelektrona tuvinājumā tiek aplūkots viendimensionāls modelis, kurā katrs atoms sastāv no kodola un satur kaut kādu vidējo elektronu lauka komponenti. Pēc kondensācijas cietā fāzē iegūstam viendimensionālu kodolu ķēdīti, kuras laukā kustas viens izvēlētais elektrons. Uz šo elektronu darbojas pārējo kristāla elektronu vidējais lauks.

Vienkāršākajā gadījumā pieņem, ka elektronu vidējais lauks ir 0 un viens elektrons kristālā kustas periodiskās kodolu ķēdītes potenciālā lauka iedarbībā. Šajā gadījumā Šrēdingera vienādojumu var uzrakstīt sekojoši:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x). \quad (2.11)$$

Katra kodola potenciālo lauku, kurš darbojas uz elektronu, var attēlot grafiski, ņemot vērā viendimensionālu atomu kristāla periodiskumu (2.2. zīm.). Šāda veida potenciālam risinājumu analītiskā formā nav iespējams atrast. Tas nozīmē, ka ir jāatrod tādu potenciāla izteiksmi, kurš atsevišķos aspektos ir ļoti līdzīgs kristālrežģa potenciālam un pieļauj ļoti vienkāršu Šrēdingera vienādojuma analītisku atrisinājumu.

Šādu uzdevumu atrisināja Kronigs un Penni. Viņi pieņēma, ka kristāls atšķiras no citiem vielas agregātstāvokļiem tieši ar to, ka tajā ir periodisks potenciālais lauks.



2.2. zīmējums. Viendimensijas režģa periodiskā potenciāla shematiskais attēlojums.

2.4. Bloha viļņu funkcijas

Aplūkosim elektrona viļņu funkciju periodiska potenciālā laukā Bloha funkcijas veidā. Lai izslēgtu malas efektus, uzskatīsim, ka kristāls ir bezgalīgs.

Lai iegūtu Bloha funkciju, pierādīsim sekojošu teorēmu: *elektrona viļņu funkcija periodiskā laukā ir plakans vilnis, kas modulēts ar režģa periodu.*

Šo teorēmu sauc par **Bloha teorēmu**.

Pieņemsim, ka periodisks lauks kristālā tiek aprakstīts ar šāda veida potenciālo enerģiju:

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{T}), \quad \vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3,$$

kur

$\vec{r}$ - elektrona rādiusvektors;

$\vec{T}$ - režģa translācijas vektors;

$\vec{a}_i$ - galveno translāciju vienības vektori;

n_i - veseli skaitļi.

Periodiska potenciāla laukā elektrona viļņu funkcija ir $\Psi(\vec{r})$. Tādā gadījumā, ņemot vērā elektrona atrašanās varbūtību kristālā, var rakstīt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r})|^2 dr = 1 \quad \text{un} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \Psi(\vec{r} + \vec{T}) \right|^2 dr = 1,$$

t.i.,

$$|\Psi(\vec{r})|^2 = \left| \Psi(\vec{r} + \vec{T}) \right|^2. \quad (2.12)$$

Viļņu funkcijām $|\Psi(\vec{r})|$ un $\left| \Psi(\vec{r} + \vec{T}) \right|$, kuras apmierina Šrēdingera vienādojuma atrisinājuma prasības (2.12):

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}) = \varepsilon \Psi(\vec{r}).$$

ir jāatšķiras par kādu reizinātāju ρ :

$$\Psi(\vec{r} + \vec{T}) = \rho \Psi(\vec{r}) = \rho(\vec{T}) \Psi(\vec{r}). \quad (2.13)$$

Izmantojot nosacījumu par varbūtību, vienādību var rakstīt

$$|\Psi(\vec{r} + \vec{T})|^2 = |\rho \Psi(\vec{r})|^2 = |\rho|^2 \cdot |\Psi(\vec{r})|^2,$$

no kurienes seko, ka

$$|\rho|^2 = 1. \quad (2.14)$$

Šis izteiksmes atrisinājums kompleksos skaitļos ir eksponentfunkcija

$$\rho(\vec{T}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}}, \quad (2.14a)$$

kur $\vec{k}$ ir reāls vektors. Tādā gadījumā viļņu funkcija izskatīsies sekojoši:

$$\Psi(\vec{r} + \vec{T}) = \rho(\vec{T}) \Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}} \Psi(\vec{r}). \quad (2.15)$$

Vispārīgākā gadījumā var uzrakstīt plakana viļņa vienādojumu:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = A_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad \text{kur} \quad A_{\vec{k}}(\vec{r}) = A_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}), \quad (2.16)$$

$A_{\vec{k}}(\vec{r})$ ir plakana viļņa amplitūda.

Tātad kristāla periodiskajā laukā elektrona viļņa funkcija ir plakans vilnis, ko nosaka režģa periods. Tā kā reālais vektors $\vec{k}$ nosaka elektrona viļņa funkciju, tad saucsim to par viļņu vektoru $\vec{k}$, bet tā projekcijas saucsim par viļņa skaitli. Šos terminus lietošim tālākā izklāstā.

2.5. Kroniga - Penni modelis

Kronigs un Penni vienatoma kristāla laukā esošo elektronu potenciāla funkciju piedāvāja attēlot periodiski atkārtojošos potenciālo barjeru veidā. Potenciālā barjera – telpas apgabals, kura katrā punktā ir noteikta potenciālās enerģijas vērtība, un kura atdala vienu telpas apgabalu no cita.

Kronigs un Penni piedāvāja taisnstūrveida barjeras formu. Tādā gadījumā potenciālo barjeru var attēlot sekojošā veidā:

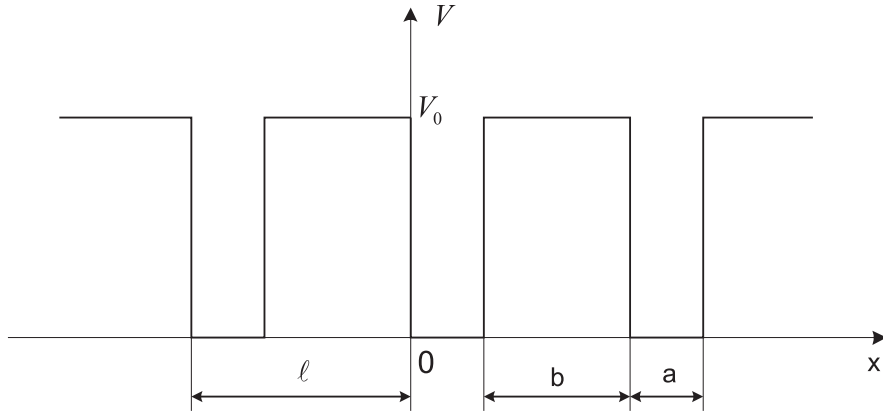
$$V = \begin{cases} 0, & \text{ja } nl \leq x \leq nl + a \\ V_0, & \text{ja } nl - b \leq x \leq nl \end{cases}, \quad (2.16a)$$

kur

nl - potenciāla periods ($nl = 0, 1, \dots$);

b - potenciālās barjeras platums,

a - attālums starp potenciālām barjerām.



2.3. zīmējums. Kroniga - Peni viendimensijas periodisks potenciāls

Tagad, pēc visiem pieņemtajiem vienkāršojumiem, galvenais uzdevums ir atrast elektrona, kas kustas periodiskā laukā, kuru apraksta izteiksme (2.16a), enerģiju un viļņa funkciju.

Šim nolūkam ir jāatrisina Šrēdingera vienādojums elektronam, kas kustas nekustīgu kodolu periodiskajā potenciālajā laukā

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x), \quad (2.17)$$

kur

$\Psi(x)$ - elektrona viļņa funkcija;

x - tā stāvokļa koordināta;

$V(x)$ - kodolu lauka potenciālā enerģija;

m - elektrona masa;

E - elektrona enerģija kodolu potenciālā laukā, pie tam $V(x)$ apraksta izteiksme (2.16a) un tā ir koordinātas x periodiskā funkcija.

Tad pie $(x + \ell)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x + \ell)}{d(x + \ell)^2} + V(x + \ell) \Psi(x + \ell) = E \Psi(x + \ell), \quad (2.18)$$

kur ℓ ir periods. Tā kā lauks ir periodisks, tad $\ell = \text{const}$ un $V(x) = V(x + \ell)$, bet $\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d^2}{d(x + \ell)^2}$.

Iegūstam, ka

$$\begin{cases} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \Psi(x + \ell) = E \Psi(x + \ell) \end{cases} \quad (2.19)$$

No šejienes: vienai un tai pašai enerģijas vērtībai atbilst abas viļņa funkcijas.

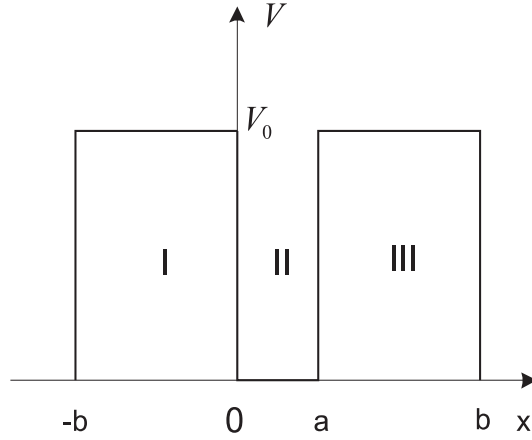
Izmantosim Bloha teorēmas rezultātu. Viendimensijas gadījumam translācijas vektoru $\vec{T}$ var aizvietot sekojoši: $\vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$, $\ell = na$, kur a ir režģa periods.

Iegūsim sekojošu rezultātu viendimensijas gadījumam:

$$\Psi(x + \ell) = e^{ik \cdot \ell} \Psi(x). \quad (2.20)$$

Lai iegūtu dotā Šrēdingera vienādojuma (2.17) vērtību enerģētisko spektru, ir pietiekami atrisināt vienādojumu vienam periodam, saskaņā ar (2.19). Sadalīsim vienu periodu trijos apgabalos:

1. $-b \leq x \leq 0$,
2. $0 \leq x \leq a$,
3. $a \leq x \leq a + b$.



2.4. zīmējums. Kroniga - Peni modelis

Pirmajam apgabalam atrisināsim šāda veida Šrēdingera vienādojumu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_1}{dx^2} + V_0 \Psi_1 = E \Psi_1.$$

Izdalīsim abas puses ar $\frac{\hbar^2}{2m}$ un iegūsim:

$$-\frac{d^2 \Psi_1}{dx^2} + \left(\frac{(V_0 - E) 2m}{\hbar^2} \right) \cdot \Psi_1 = 0.$$

Apzīmēsim $\lambda^2 = \frac{(V_0 - E) 2m}{\hbar^2}$, tad

$$\frac{d^2 \Psi_1}{dx^2} - \lambda^2 \Psi_1 = 0, \quad n_{1,2} = \pm \lambda, \quad (2.21)$$

$$\Psi_1 = C_1 e^{\lambda x} + C_2 e^{-\lambda x},$$

kur C_1 un C_2 - konstantes.

Otrajam apgabalam var pierakstīt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_2}{dx^2} = E \Psi_2.$$

Tā kā intervālā $0 \leq x \leq a$, tad $V(x) = 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_2}{dx^2} - E \Psi_2 = 0.$$

Izdalot abas puses ar $-\frac{\hbar^2}{2m}$, iegūsim:

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_2 = 0,$$

apzīmējot $\frac{2mE}{\hbar^2} = \chi^2$, iegūstam:

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \chi^2\Psi_2 = 0,$$

$$n^2 + \chi^2 = 0,$$

$$n_{1,2} = \pm i\chi,$$

$$\Psi = C_3 e^{i\chi x} + C_4 e^{-i\chi x}. \quad (2.22)$$

Analoģiski pirmajam apgabalam, risinot Šrēdingera vienādojumu III apgabalam, iegūstam:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_3}{dx^2} + V_0\Psi_3 = E\Psi_3, \quad \Psi_3 = C_5 e^{\lambda x} + C_6 e^{-\lambda x}. \quad (2.23)$$

Ja x atrodas I-jā apgabalā, tad $(x+l)$ nokļūst III-jā. Tātad no (2.20):

$$\Psi_3 = e^{ikl} \cdot \Psi_1(x).$$

No šejienes ir viegli izteikt koeficientus C_5, C_6 atbilstoši ar C_1, C_2 .

Ievietojot izteiksmē (2.23), iegūsim:

$$\Psi_3 = (C_1 e^{\lambda(x-l)} + C_2 e^{-\lambda(x-l)}) e^{ikl}, \quad (2.24)$$

t.i., lai noteiktu elektrona, kas atrodas potenciālā periodiskā laukā, viļņa funkcijas, ir jāatrod divus koeficientu pārus:

1. C_1 un C_2 ;

2. C_3 un C_4 .

Šim nolūkam izmantosim viļņa funkcijas nepārtrauktības nosacījumu: atrisinājumi Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 ir nepārtraukti p-tā $x = 0$, pārejot no apgabala I – apgabalā II, un p-tā $x = a$, pārejot no apgabala II – apgabalā III. Tāpat tām ir jābūt nepārtrauktām pie to (viļņu funkciju) pirmās kārtas atvasinājumu pārejām.

Tādēļ var pierakstīt:

$$\begin{cases} \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \\ \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0), \text{ pie } x = 0 \end{cases} \quad \text{un} \quad \begin{cases} \Psi_2(a) = \Psi_3(a) \\ \Psi_2'(a) = \Psi_3'(a), \text{ pie } x = a; \end{cases} \quad (2.25)$$

$$\Psi_1' = \frac{d\Psi_1}{dx} = C_1 \lambda e^{\lambda x} - C_2 \lambda e^{-\lambda x};$$

$$\Psi_2' = \frac{d\Psi_2}{dx} = C_3 i\chi e^{i\chi x} - C_4 i\chi e^{-i\chi x};$$

$$\Psi_3' = \frac{d\Psi_3}{dx} = C_5 \lambda e^{\lambda x} - C_6 \lambda e^{-\lambda x};$$

ievietojot robežnosacījumus $x = 0$ un $x = a$, iegūsim:

$$\begin{cases} \Psi'_1 = C_1\lambda - C_2\lambda, & \Psi_1 = C_1 + C_2 \\ \Psi'_2 = C_3i\chi - C_4i\chi, & \Psi_2 = C_3 + C_4 \end{cases} \quad \text{pie } x = 0;$$

$$\begin{cases} \Psi_2 = C_3e^{i\chi a} + C_4e^{-i\chi a}, & \Psi'_2 = C_3i\chi e^{i\chi a} - C_4i\chi e^{-i\chi a} \\ \Psi_3 = C_5e^{\lambda a} + C_6e^{-\lambda a}, & \Psi'_3 = C_5\lambda e^{\lambda a} - C_6\lambda e^{-\lambda a} \end{cases} \quad \text{pie } x = a.$$

Iegūstam sistēmu no 4 lineāriem vienādojumiem:

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = C_3 + C_4, \\ C_1\lambda - C_2\lambda = C_3i\chi - C_4i\chi, \\ C_3e^{i\chi a} + C_4e^{-i\chi a} = C_5e^{\lambda a} + C_6e^{-\lambda a}, \\ C_3i\chi e^{i\chi a} - C_4i\chi e^{-i\chi a} = C_5\lambda e^{\lambda a} - C_6\lambda e^{-\lambda a}. \end{cases} \quad (2.26)$$

Ņemot vērā, ka $\Psi_3 = \Psi_1 e^{ik\ell}$ un (2.24), iegūsim:

$$\begin{aligned} C_5e^{\lambda a} + C_6e^{-\lambda a} &= (C_1e^{\lambda(a-\ell)} + C_2e^{-\lambda(a-\ell)}) \cdot e^{ik\ell}, \\ C_5\lambda e^{\lambda a} - C_6\lambda e^{-\lambda a} &= (C_1e^{\lambda(a-\ell)} - C_2e^{-\lambda(a-\ell)}) \cdot \lambda e^{ik\ell} \end{aligned}$$

pie $x = a$, tā kā režģa periods ir $\ell = a + b$, tad $a - \ell = -b$.

Ievietojot izteiksmē (2.26), iegūstam:

$$\begin{cases} C_1 + C_2 - C_3 - C_4 = 0, \\ C_1\lambda - C_2\lambda - C_3i\chi + C_4i\chi = 0, \\ -(C_1e^{-\lambda b} + C_2e^{\lambda b}) \cdot e^{ik\ell} + C_3e^{i\chi a} + C_4e^{-i\chi a} = 0, \\ -(C_1e^{-\lambda b} - C_2e^{\lambda b}) \cdot \lambda e^{ik\ell} + C_3i\chi e^{i\chi a} - C_4i\chi e^{-i\chi a} = 0. \end{cases}$$

Atverot iekavas, iegūsim:

$$\begin{cases} C_1 + C_2 - C_3 - C_4 = 0, \\ \lambda C_1 - \lambda C_2 - i\chi C_3 + i\chi C_4 = 0, \\ -e^{ik\ell-\lambda b}C_1 - e^{ik\ell+\lambda b}C_2 + e^{i\chi a}C_3 + e^{-i\chi a}C_4 = 0, \\ -\lambda e^{ik\ell-\lambda b}C_1 - \lambda e^{ik\ell+\lambda b}C_2 + i\chi e^{i\chi a}C_3 - i\chi e^{-i\chi a}C_4 = 0. \end{cases} \quad (2.27)$$

Dotajai sistēmai ir atšķirīgs no nulles atrisinājums tikai tad, ja determinants, kas sastādīts no tās koeficientiem, ir vienāds ar nulli:

$$D_{et} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \lambda & -\lambda & -i\chi & i\chi \\ -e^{ik\ell-\lambda b} & -e^{ik\ell+\lambda b} & e^{i\chi a} & e^{-i\chi a} \\ -\lambda e^{ik\ell-\lambda b} & -\lambda e^{ik\ell+\lambda b} & i\chi e^{i\chi a} & -i\chi e^{-i\chi a} \end{vmatrix} = 0.$$

Risinot šo determinantu un veicot atbilstošās aizvietošanas, iegūstam:

$$\text{ch } \lambda b \cdot \cos \chi a + \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \cdot \text{sh } \lambda b \cdot \sin \chi a = \cos k\ell, \quad k \in \mathbb{R}, \quad (2.28)$$

tā kā $\lambda^2 = \frac{(V_0 - E) \cdot 2m}{\hbar^2}$, bet $\chi^2 = \frac{2m \cdot E}{\hbar^2}$, t.i., λ un χ ir izteikti caur E , tad, uzdodot $k\ell$ vērtības un risinot izteiksmi (2.28), var iegūt elektrona, kas atrodas vienatoma kristāla kodolu periodiskā potenciālā laukā, enerģētisko spektru.

Tomēr tādas izteiksmes risināšana ir sarežģīta. Kronigs un Penni piedāvāja apskatīt šī uzdevuma robežgadījumu, lai varētu iegūt vienkāršu funkcionālu E atkarību no $k\ell$.

Tā kā ℓ ir potenciāla periods, bet $\cos k\ell$ ir periodiska funkcija, ir skaidrs, ka E būs atkarīgs tikai no k vērtības.

Vienkāršosim izteiksmi (2.28) sekojošā veidā - samazināsim barjeru platumu, tiecot to uz 0 ($b \rightarrow 0$), un tajā pat laikā palielināsim tās augstumu līdz bezgalībai $V_0 \rightarrow \infty$, bet tā, lai to reizinājums būtu nemainīgs $bV_0 = \text{const}$.

Iegūsim:

$$\cos k(a+b) \xrightarrow[b \rightarrow 0]{V_0 \rightarrow \infty} = \text{ch } \lambda b \cdot \cos \chi a + \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \cdot \sin \chi a \cdot \text{sh } \lambda b.$$

Tā kā $b \rightarrow 0$, tad $\ell \rightarrow a$, bet no tā, ka $V_0 \rightarrow \infty$, iegūsim, ka $\lambda \rightarrow \infty$. Tad $\frac{\chi}{\lambda} \rightarrow 0$. Atvasinājums $\lambda b \rightarrow \sqrt{b} \rightarrow 0$, jo:

$$\lambda b = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \cdot b \xrightarrow[E < V_0]{} \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{b^2} = \sqrt{\frac{2mV_0 b}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{b} \xrightarrow[b \rightarrow 0]{V_0 b = \text{const}} 0;$$

$$\text{ch } \lambda b \xrightarrow[b \rightarrow 0]{} \frac{e^{\lambda b} + e^{-\lambda b}}{2} = 1; \quad \text{sh } \lambda b \xrightarrow[b \rightarrow 0]{} \frac{e^{\lambda b} - e^{-\lambda b}}{2} = 0.$$

Apskatīsim reizinātāju:

$$\frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \cdot \text{sh } \lambda b = \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \cdot \frac{e^{\lambda b} - e^{-\lambda b}}{2},$$

izdalīsim pirmo reizinātāju ar λ^2 , bet attiecībā pret otru izmantosim izvirzījuma formulas:

$$e^{\lambda b} \approx 1 + \lambda b, \quad e^{-\lambda b} \approx 1 - \lambda b.$$

Iegūstam:

$$\frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \cdot \frac{e^{\lambda b} - e^{-\lambda b}}{2} \rightarrow \frac{1 - \frac{\chi^2}{\lambda^2}}{2\frac{\chi}{\lambda}} \cdot \frac{(1 + \lambda b - 1 + \lambda b)}{2} = \frac{\lambda}{2\chi} \cdot \lambda b = \frac{\lambda^2 b^2}{2\chi b}, \quad \text{jo} \quad \frac{\chi^2}{\lambda^2} \rightarrow 0.$$

Izmantojot vienādību $\lambda b = \sqrt{\frac{2mV_0 b}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{b}$, iegūsim:

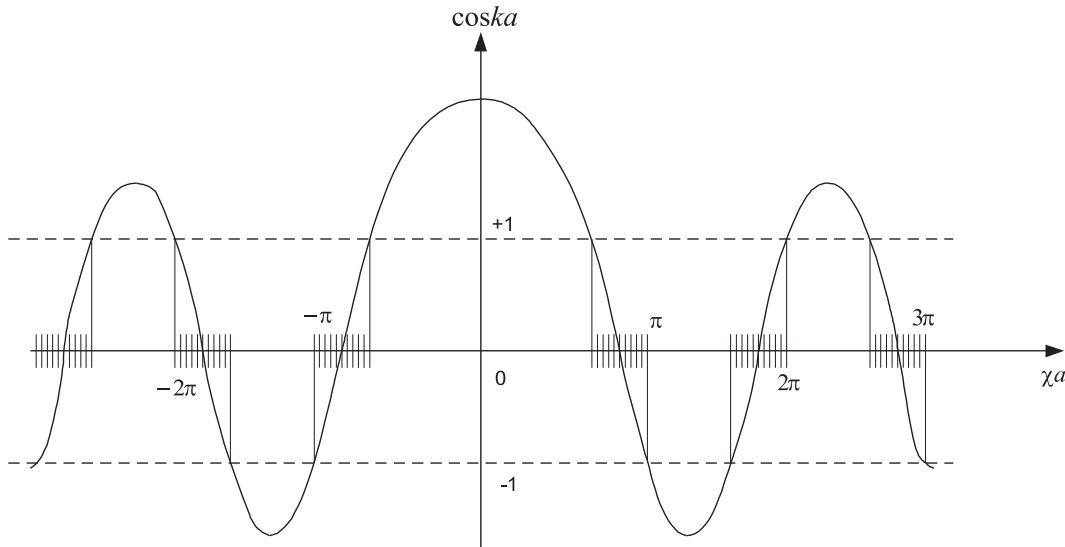
$$\frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \cdot \text{sh } \lambda b = \frac{2mV_0 b^2}{2\hbar^2 \chi b} = \frac{mV_0 b}{\hbar^2 \chi}.$$

Ja apzīmēt $P = \frac{V_0 m a b}{\hbar^2}$, tad

$$\frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \text{sh } \lambda b = \frac{P}{\chi a}.$$

Līdz ar to vienādojumu (2.28) var pierakstīt šādi:

$$\cos ka = \cos \chi a + \frac{P}{a\chi} \sin \chi a. \quad (2.29)$$



2.5. zīmējums. Vienādojuma (2.29) labās puses atkarība no χa . Pieļaujamo χa vērtību intervāli iesvītroti.

Atrisināsim šo vienādojumu grafiski, t.i., konstruēsim atkarības $\cos(ka)$ no χa grafiku (2.5.zīm.)

Tā kā $\cos ka$ ir ierobežota funkcija intervālā $-1 \leq \cos ka \leq 1$, tad, acīmredzami, ka vienādojuma (2.29) labā puse ir jāapskata apgabalā, kurš ir ierobežots ar divām pārtrauktām līnijām.

Redzams, ka ne visā dotā grafika definīcijas apgabalā vienādojumam (2.29) ir atrisinājums, bet tikai noteiktajos intervālos, kad funkciju $\cos ka$ un $\cos \chi a + \frac{P}{\chi a} \sin \chi a$ definīciju apgabali sakrīt. Līdz ar to, χ pieļaujamām vērtībām, un tātad arī elektrona enerģijai E kodolu periodiskajā potenciālajā laukā ir diskrets spektrs, pie tam χ pieļaujamās vērtības un E atrodas “zonās”, kas ir atdalītas ar intervāliem, kuros tādu vērtību nav. Tātad elektronu enerģētiskajam spektram kristālā ir zonu struktūra.

Atļauto enerģētisko zonu platums palielinās, pieaugot χa vērtībām, t.i., palielinoties enerģijai, jo $\chi = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Bez tam jebkuras uzdotās zonas platums samazināsies, pieaugot P . Parametrs $P = \frac{V_0 m a b}{\hbar^2}$ raksturo potenciālo barjeru, kas atdala apgabalus ar nulles potenciālu, jaudu.

Kad elektrona enerģija pieaug, bet parametrs $P = \text{const}$, elektronam ir vieglāk tikt cauri vai “izsūkties” cauri potenciālām barjerām un potenciālo barjeru eksistēšanas ietekme samazinās pieaugot χa . Pie $\chi a \rightarrow \infty$ ($E \rightarrow \infty$) elektrons “uzvedas” kā brīvs. Tāds tuvinājums, kad barjeras relatīvi nav būtiskas un elektronu viļņu funkcija ir tāda pati kā brīvajam elektronam, ir ieguvis nosaukumu – gandrīz brīvo elektronu tuvinājums (metāla gadījums).

Pieaugot P - jebkuras enerģētiskās zonas platums samazinās. Kad $P \rightarrow \infty$, ir atļauti tie atrisinājumi, kad $a\chi = \pi n$, kur $n = 0, 1, 2, \dots$.

Tādi atrisinājumi apraksta elektrona, kas atrodas viendimensijas kustībā un ir ieslēgts potenciālajā bedrē ar platumu a , enerģētiskos līmeņus. Tādā gadījumā, potenciālās barjeras kļūst nepārvaramas un par citiem apgabaliem ar nulles potenciālu elektrons “neko nezina”, it kā to nemaz nav bijis. Tādu gadījumu, kad potenciālās barjeras ir ļoti lielas, sauc par stiprās saites tuvinājumu. Stiprās saites analogijas sastopamas reālajos kristālos.

Enerģētisko spektru, kas atbilst grafikam:

$$\cos ka = \cos \chi a + \frac{P}{\chi a} \sin \chi a$$

var apskatīt sekojošā veidā. Viļņu skaitļu k telpā atļautās enerģētiskās zonas ieņem apgabalus - intervālus no $ka = 0$ līdz $ka = \pi$, no $ka = \pi$ līdz $ka = 2\pi$ un utt., kas ir vienādi pēc garuma.

Tā kā $\cos ka$ ir pāra funkcija, tad tādi paši intervāli, tikai ar pretēju zīmi, būs arī negatīvo ka vērtību apgabalā.

Viszemāk esošā enerģētiskā zona ir visšaurākā. Zonas platums pieaugs, pieaugot enerģijai. Un otrādi – pieaugot enerģijai aizliegto enerģiju apgabali samazinās un kļūst arvien šaurāki.

Noslēgumā, varam teikt, ka ar Kroniga - Penni modeli iegūstam sekojošus rezultātus kristāla viendimensijas modelim.

1. Cietā ķermeņa enerģētiskajam spektram piemīt zonu struktūra.
2. Eksistē atļautās zonas, kurās atrodas enerģijas līmeņi. Šajos līmeņos var atrasties elektroni.
3. Eksistē zonas, kas ir aizliegtas elektrona enerģijas vērtībām.
4. Šīs zonas nepārklājas, t.i., vienlaicīgi divām zonām nevar būt viena vai vairākas enerģijas vērtības.
5. Ja atļauto zonu platums palielinās, tad aizliegto zonu platums samazinās.
6. Enerģētiskās zonas $E(ka)$ telpā ieņem intervālus ka , kas pēc garuma ir vienādi ar 2π , ņemot vērā negatīvās vērtības.

Kā jau tika minēts iepriekš, elektrona viļņa funkcija var būt attēlota plakana viļņa veidā (Bloha teorēma). Šim pieņēmumam ir jāatbilst Vulfa-Brega nosacījumam elektromagnētisko viļņu difrakcijai kristālā, kad tiek novērota to pilnā izkļiede [14]: $n\lambda = 2a_i$, kur

n - vesels skaitlis,

λ - DeBroljī viļņa garums,

a_i - režģa periods viļņa izplatīšanās virzienā;

$$\lambda = \frac{2a_i}{n}.$$

Viļņa vektors $\vec{k}$ pēc moduļa ir vienāds: $k = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$, no šejienes

$$k = \frac{2\pi}{2a_i}n = \frac{\pi}{a_i}n,$$

kur n - vesels skaitlis.

Šis viļņa vektors $\vec{k}$ atbilst sekojošam apgrieztā režģa veidam.

Pieņemsim, ka vektors $\vec{b}$ ir:

$$\vec{b} = \sum_{i=1}^3 \frac{2\pi n_i}{a_i} \left(\frac{\vec{a}_i}{a_i} \right).$$

Ņemot vērā, ka vektors $\vec{k}$ var pieņemt kā pozitīvas, tā arī negatīvas vērtības, var pieņemt, ka vektors $\vec{k}$ atrodas intervālā:

$$-\frac{\pi}{a_i}n \leq k \leq +\frac{\pi}{a_i}n, \quad n \in Z,$$

kur Z - veselu skaitļu kopa.

Summārais intervāls, kur var atrasties vektora vērtības, ir vienāds ar $\frac{2\pi}{a_i}n$.

Apskatīsim $\vec{k}$ projekciju uz x asi, kur a_x ir tiešā režģa periods pa šo asi:

$$-\frac{\pi}{a_x}n \leq k_x \leq +\frac{\pi}{a_x}n \quad \text{un} \quad b_x = \frac{2\pi}{a_x}n,$$

n - vesels skaitlis.

Redzam, ka inversais režģis – ir viļņu vektoru telpa, kaut vai atgriezeniskā režģa vektora un viļņa vektora pieraksta analogijas dēļ.

Tomēr viļņa vektors, translācijas invariances dēļ, ir noteikts neviennozīmīgi.

Apskatīsim vektoru $\vec{a}_1$ - kas ir virziens vienai no pamattranslācijām. Pieņemsim, ka režģa periods šajā virzienā: $|\vec{a}_1| = a_1$.

Ieviesīsim vektoru $\vec{k}'$, kas atšķiras no vektora $\vec{k}$ par inversā režģa vektoru $\vec{b} = \frac{2\pi n_1}{a_1^2} \vec{a}_1$ (n_1 - vesels skaitlis):

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{b} = \vec{k} + \frac{2\pi n_1}{a_1^2} \vec{a}_1.$$

Veiksim viļņa funkcijas translāciju par vektoru $n_1 \vec{a}_1$, tad, ņemot vērā Bloha teorēmu, iegūsim:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + n_1 \vec{a}_1) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1 n_1} \cdot \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + n_1 \vec{a}_1) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1 n_1} \cdot \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{in_1 \vec{a}_1 \cdot \vec{k} - \frac{2\pi n_1}{a_1^2} \vec{a}_1} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{in_1 \vec{a}_1 \cdot \vec{k}'} e^{-in_1 \vec{a}_1 \cdot \frac{2\pi}{a_1^2} \vec{a}_1} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

$$\text{jo} \quad \vec{a}_1^2 = |\vec{a}_1|^2 = a_1^2;$$

tā kā $e^{-in_1 \frac{2\pi}{a_1^2} \cdot a_1^2} = 1$, tad

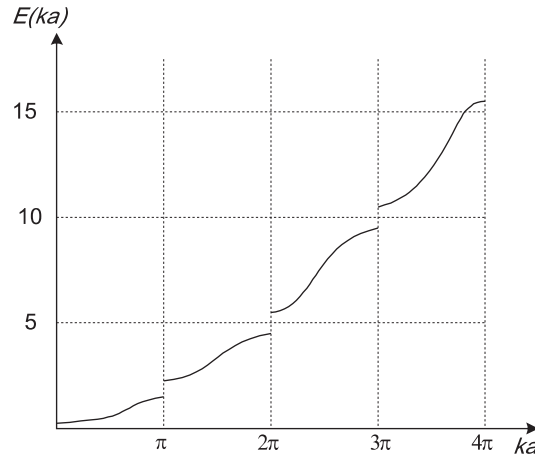
$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + n_1 \vec{a}_1) = e^{in_1 \vec{a}_1 \cdot \vec{k}'} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}).$$

Iegūtā izteiksme parāda, ka viļņa funkcija $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ pārveidojas tāpat kā, ja tā atbilstu stāvoklim ar viļņa vektoru $\vec{k}'$, t.i., katrai elektrona viļņa funkcijai kristālā atbilst viļņu vektoru kopa, kurā vektori atšķiras viens no otra par vektoru: $\vec{b} = n_1 \frac{2\pi}{a_1^2} \vec{a}_1$ ar dažādiem pozitīviem un negatīviem veselajiem n_1 , bet stāvokļi, kas atbilst vektoriem $\vec{k}$ un $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{b}$ ir neatšķirami. Tas ir, dažādām viļņa vektoru vērtībām elektrona viļņa funkcijas, atšķirībā no viļņu vektoriem, kas atbilst neperiodiskajai struktūrai, var būt vienādas vai arī atšķirties par fāzes reizinātāju.

Tātad viļņa vektoru periodiskuma nosacījumu viendimensijas modelim var pierakstīt:

$$\vec{k}' = \vec{k} + \frac{2\pi}{a} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Pieņemot sākuma vektoru $\vec{k} = 0$, mēs nonākam pie tā, ka viļņa vektoru vērtību apgabals, kas atbilst fizikāli atšķirīgām elektrona viļņa funkcijām, atrodas intervālos:



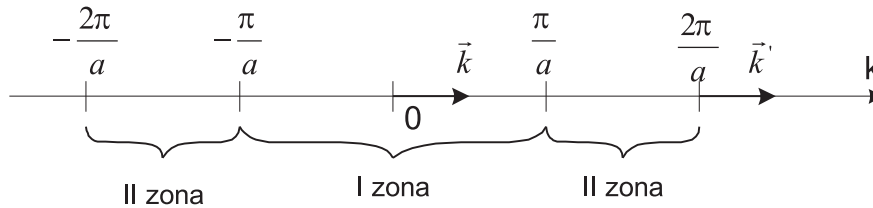
2.6. zīmējums. Elektronu enerģijas pārtraukumi uz Briljuena zonu robežām.

no $-\frac{\pi}{a}$ līdz $+\frac{\pi}{a}$, no $-\frac{2\pi}{a}$ līdz $-\frac{\pi}{a}$ un no $+\frac{\pi}{a}$ līdz $\frac{2\pi}{a}$ utt.

$E(k)$ enerģētiskais spektrs, ņemot vērā, ka arguments $\frac{ka}{a} = k$, ir attēlots 2.6. zīm. Tādu veidu sauc par **paplašinātām zonām**.

$\vec{k}$ vērtību apgabali, kuros elektronu enerģija mainās nepārtraukti, bet uz robežas mainās lēcienveidīgi, tiek saukti par **Briljuēna zonām**.

Viendimensijas gadījumā vektoram $\vec{k}$ mainoties no $-\frac{\pi}{a}$ līdz $+\frac{\pi}{a}$ mēs iegūstam pirmo Briljuēna zonu, apgabalā no $-\frac{2\pi}{a}$ līdz $-\frac{\pi}{a}$ un no $\frac{\pi}{a}$ līdz $\frac{2\pi}{a}$ - otro Briljuēna zonu utt. Kopējais Briljuēnas zonas intervāls ir vienāds ar $\frac{2\pi}{a}$;



2.7. zīmējums. Briljuēna zonas.

Divdimensiju plakanaam režģim viļņa vektora k_x fizikālās vērtības atrodas intervālos no $-\frac{\pi}{a_x}$ līdz $+\frac{\pi}{a_x}$, bet vektora k_y - no $-\frac{\pi}{a_y}$ līdz $+\frac{\pi}{a_y}$. Taisnstūra iekšienē ar laukumu $\frac{2\pi}{a_x} \cdot \frac{2\pi}{a_y}$ atrodas visi fizikāli atšķirīgie elektrona viļņa vektori plakanaam taisnstūra režģim.

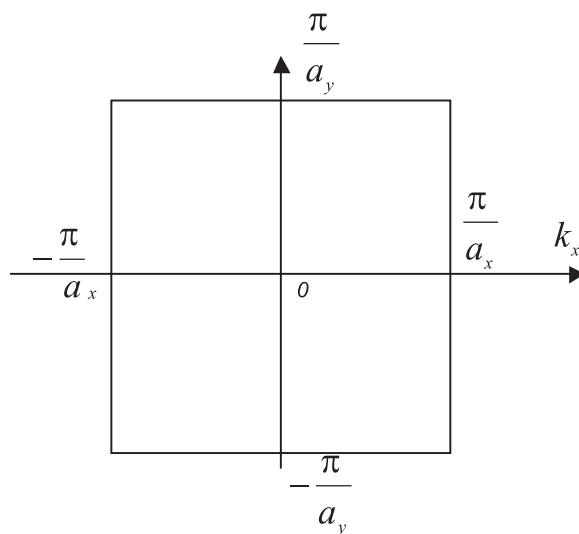
Kā tika minēts iepriekš, paplašinātā zona ir elektrona iespējamās enerģijas atkarība no tai atbilstošā viļņa vektora $E(\vec{k}) = f(\vec{k})$. Viendimensijas gadījumā mēs iegūstam sekojošu atkarības grafiku (2.9. zīm.).

Tomēr nav nepieciešamības apskatīt enerģiju visās Briljuēna zonās, jo sistēmas periodiskums ir par iemeslu tam, ka elektrona stāvokļi ar viļņa vektoru $\vec{k}$ un $\vec{k}'$, kur

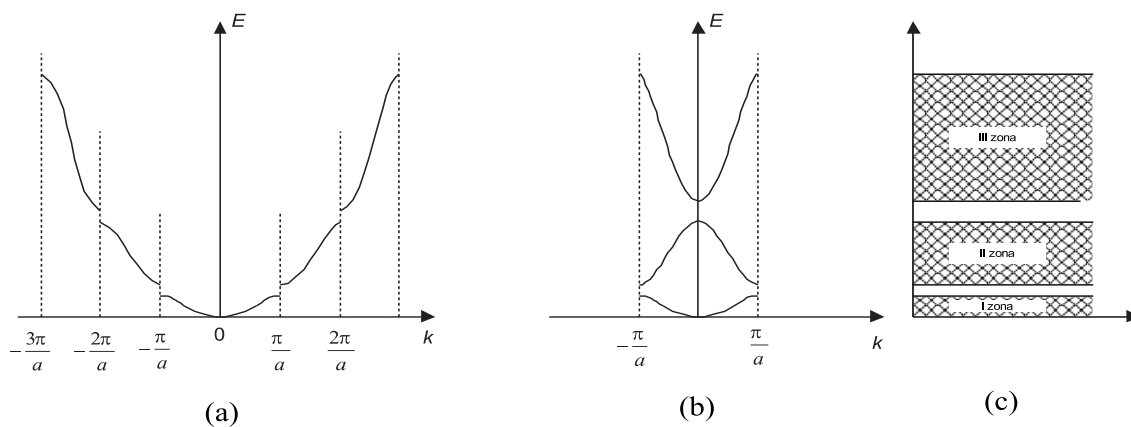
$$\vec{k}' = \vec{k} + n \frac{2\pi}{a^2} \vec{a}, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots)$$

ir fizikāli neatšķirami.

Šis apstāklis ļauj jebkuru elektrona stāvokli ar viļņa vektoru $\vec{k}$ izteikt, izmantojot viļņa vektoru $\vec{k}$, kas atrodas pirmās Briljuēna zonas ietvaros, t.i., izmantojot atgriezeniskā režģa jēdzienu, mēs reducējam visas Briljuēna zonas pirmajā zonā (2.9.(b) zīm.).



2.8. zīmējums. Divdimensiju plakana režģa Briljuēna zona.



2.9. zīmējums. (a) - Vienādu atomu ķēdītes E izmaiņa atkarībā no k vienā un tajā pašā k -telpas virzienā; (b) - enerģiju spektrs Briljuēna pamatzonā; (c) - atļauto un aizliegto enerģiju zonas.

Pārvietojot otro zonu, ir jānobīda līknes $E(k)$ zīmējuma labo zaru (viendimensijas gadījums) pa kreisi par lielumu $\frac{2\pi}{a}$, bet visu kreiso līkni pa labi uz $\frac{2\pi}{a}$. Analogiski arī visas pārējās zonas var reducēt pirmajā zonā.

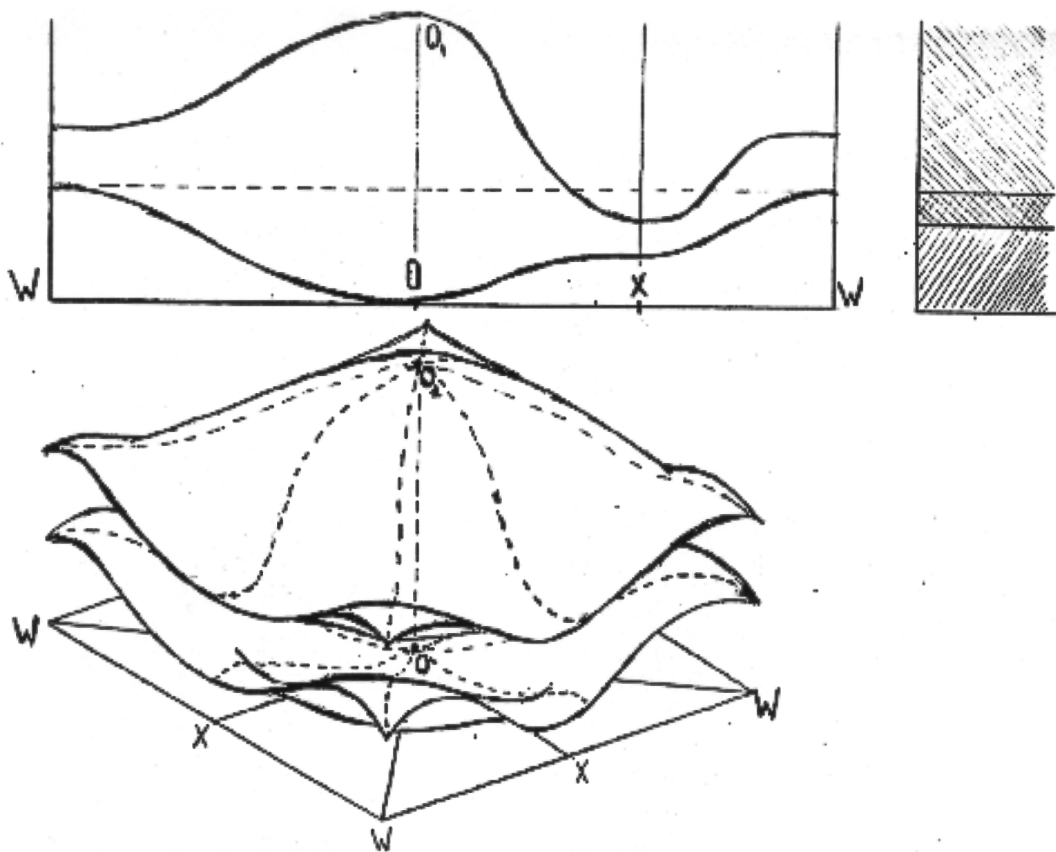
Atļauto un aizliegtu enerģiju zonas var attēlot sekojošā veidā - (2.9.(c) zīm.). Elektronu atļautās enerģijas iesvītrotās zonas, kas ir atdalītas ar aizliegtās enerģijas zonām. Pie tam ir redzams, ka šīs zonas nepārklājas apskatītajā viendimensijas gadījumā, jo nav tāda gadījuma, kad viena enerģijas vērtība pieder divām zonām vienlaicīgi.

Tagad apskatīsim divdimensiju gadījumu.

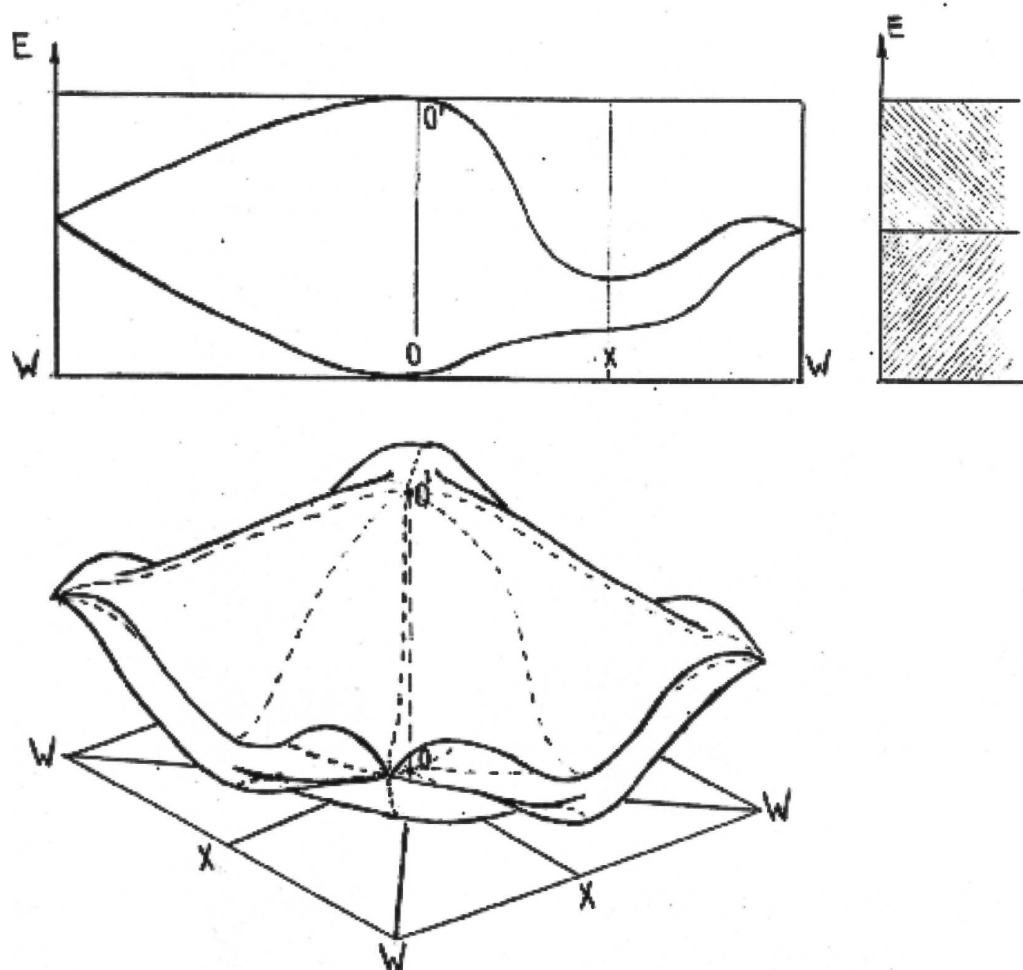
Pieņemsim, ka ir dots divdimensiju kvadrātisks režģis ar periodu a . Tad atgriezeniskā režģa vektori ir $b_1 = b_2 = \frac{2\pi}{a}$ ir lieli un atrodas režģa primitīvās translācijas virzienos (2.10. zīm. un 2.11. zīm.). Briljuēna zona ir kvadrāts un enerģija enerģētiskajā zonā ir divkomponetu viļņu vektora $\vec{k}(k_x, k_y)$ funkcija. Tādā gadījumā enerģiju var attēlot kā virsmu, atliekot to trešajā dimensijā kā divdimensiju mainīgā $\vec{k}$ funkciju. Tātad pirmajā reducētajā Briljuēna zonā var apskatīt viļņa vektoru paralēli jebkurai šīs plaknes līnijai.

Dotajā gadījumā (2.10. zīm.) ir attēlotas enerģijas atkarības, kas ir izskaitļotas paralēli trijām līnijām Briljuēna zonā: līnijas, kas iziet no zonas W uz stūra centru O , no centra O uz kvadrāta X malas viduspunktu un no X uz W . Enerģētisko zonu izskaitļojumu rezultāti tiek attēloti kongruentu līkņu veidā simetrijas līnijām Briljuēna zonā.

Otrās zonas enerģija punktā X atrodas zemāk nekā pirmās zonas enerģija punktā W . Tādā gadījumā saka, ka zonas pārklājas. Tāds gadījums ir raksturīgs metāliem.



2.10. zīmējums. Divdimensiju kvadrātiska režģa atļautās enerģētiskās zonas.

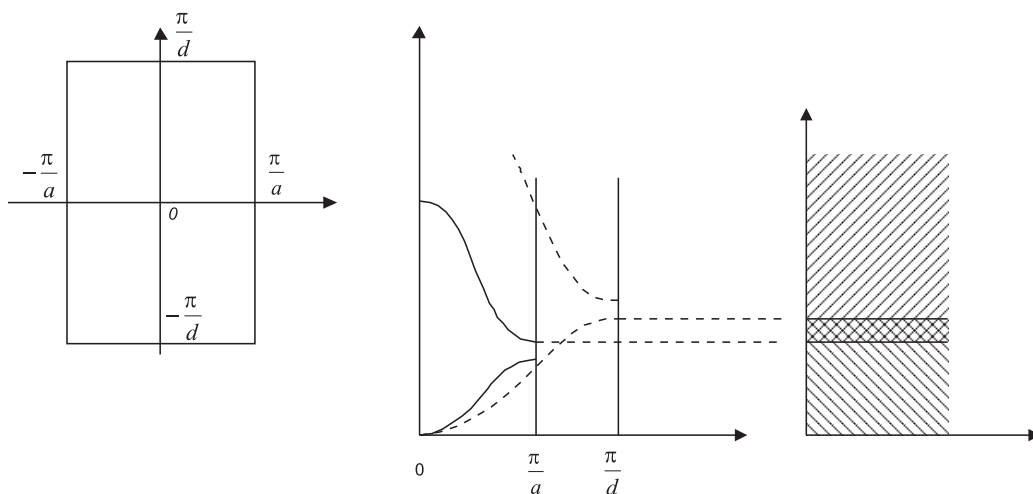


2.11. zīmējums. Divdimensiju kvadrātiska režģa atļautās enerģētiskās zonas.

Otrajā zīmējumā (2.11. zīm.) ir parādītas divas zonas, deģenerētas punktos W , bet, kas nepārklājas visās pārējās Briljuēna zonās, t.i., viena zona pakāpeniski pāriet citā. Aizliegtā enerģiju zona nepastāv.

Par enerģētisko zonu viendimensijas gadījumiem var uzskatīt plaknes $OO'X$.

Pārklājušos zonu aina būs vienkāršāka, ja Briljuēna zonu iedomāties ar robežām punktos $\pm \frac{\pi}{a}$. Tad var iztēloties, ka aizliegtām zonām var būt dažādas enerģijas (2.12. zīm.).



2.12. zīmējums. Divdimensiju režģa enerģētisko zonu pārklāšanās.

Secīgi notiek zonu pārklāšanās. Tas nozīmē, ka pakāpeniski aizpildot enerģētiskos līmeņus pirmajā zonā, otrā zona sāk uzņemt elektronus vēl pirms tam, kad pirmā zona būs pilnīgi piepildīta. Tātad, ja ir pietiekoši daudz elektronu, aizņemtie elektronu stāvokļi “iespiežas”, t.i., daļēji nokļūst nākošajā zonā. Briljuēna zonas robežu eksistence vēl nenozīmē, ka eksistē arī aizliegtās enerģijas apgabali. Aizliegtu zonu rašanās un pazušana ir atkarīga ne tikai no kristāla ģeometriskiem izmēriem (dotajā gadījumā parametri a un d), bet arī no kristāliskā režģa, kurā kustas elektroni, potenciāla rakstura.

2.6. Cieto ķermeņu klasifikācija pamatojoties uz to zonu struktūru

Iepriekšējās nodaļās bija apskatītas atļautās un aizliegtās enerģijas zonas kristālā, t.i., tie enerģijas līmeņi, kas atrodas zonās un kurus režģa kristāliskajā laukā var ieņemt vai neieņemt elektrons. Rodas jautājums - vai īstenībā no visiem iespējamajiem līmeņiem elektroni aizpilda visus līmeņus?

Šī jautājuma izanalizēšanai ir jāatceras, kāds ir enerģētisko līmeņu aizpildījums izolēta atoma gadījumā.

Elektrona stāvokli izolētā atomā nosaka četru kvantu skaitļu kopums: n, s, l, m .

Galvenais kvantu skaitlis n raksturo elektrona enerģiju atomā. Jo lielāks n , jo lielāka elektrona enerģija, jo tālāk tas atrodas no kodola.

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Orbitālais kvantu skaitlis l nosaka elektrona kustības daudzuma momentu apkārt kodolam, raksturojot orbītas formu (novirzi no riņķveida formas)

$$l = 0, \dots, n - 1.$$

l atkarība no n pastāv, jo orbītas rādiusa izmēram ir jābūt atkarīgam no elektrona saites enerģijas ar kodolu. Jo tālāk atrodas elektrons no kodola (n - liels), t.i., jo lielāks orbītas rādiuss, jo lielāka ir tās deformācijas varbūtība salīdzinājumā ar riņķveida orbītu.

Magnētiskais kvantu skaitlis m nosaka plaknes, kurā atrodas orbīta, attiecībā pret plaknēm, kur izvietojas citu elektronu orbītas, orientāciju;

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Vienai l vērtībai var atbilst $2l + 1$ vērtību.

Spina kvantu skaitlis s raksturo elektrona kustību ap savu asi. Tāda rotācija var notikt tikai divos pretējos virzienos, tāpēc lielums s var pieņemt tikai divas vērtības:

$$s = \pm \frac{1}{2}.$$

Noteikts kvantu skaitļu kopums saskaņā ar Pauli principu raksturo tikai vienu elektrona stāvokli atomā: dotajā stāvoklī nevar atrasties vairāk par vienu elektronu. Tas nozīmē, ka visi Z elektroni atomā atšķiras savā starpā kaut vai ar vienu no četriem kvantu skaitļiem: n , l , m , s .

Redzams, ka pie $n = 1$ ir iespējami divi varianti, t.i., maksimālais elektronu skaits līmenī ar galveno kvantu skaitli $n = 1$ ir vienāds ar divi.

Pie $n = 2$, ir iespējami astoņi kvantu skaitļu kopu varianti, t.i., elektronu maksimālais skaits līmenī ar $n = 2$ ir vienāds ar astoņi.

Pie $n = 3$ - astoņpadsmit elektronu utt.

Vispārīgā gadījumā elektronu skaits priekš $n = \text{const}$ ir vienāds

$$N = 2n^2.$$

N elektronu kopa, kuriem piemīt viena n vērtība, veido čaulu, kuras atkarībā no attālināšanas no kodola, t.i., pēc n vērtības pieaugšanas, apzīmē ar burtiem K , L , N , M , O utt. Aizpildot čaulas, elektroni tiecas ieņemt stāvokļus ar vismazāko n vērtību, jo sistēma cenšas ieņemt stāvokļus ar minimālo enerģiju, kas dotajā gadījumā atbilst minimāli iespējamajam galvenajam kvantu skaitlim.

Elektronu kopa ar uzdotām n un l vērtībām veido čaulu. Katra čaula satur apakščaulu skaitu, kas ir vienāds ar galveno kvantu skaitli. Maksimālais elektronu skaits apakščaulā, ņemot vērā spinu, ir $2(2l + 1)$. Bet, tā kā vienā līmenī var atrasties divi elektroni ar pretēji vērstiem spiniem, tad viena apakščaula satur $2l + 1$ līmeni.

n	1	2	3	4	5
Čaulas simbols	K	L	M	N	O
$2n^2$ elektronu daudzums	2	8	18	32	50

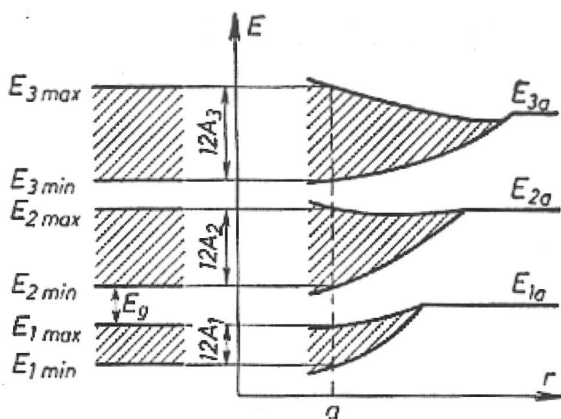
l	0	1	2	3
Apakščaulas simbols	s	p	d	f
$2(2l+1)$ elektronu daudzums	2	6	10	14

Čaula tiek aizpildīta sākot no s - apakščaulas, pēc tam sākas p - apakščaulas aizpildīšana. Tālāk, kad p - apakščaulu elektroni ir aizpildījuši pilnīgi, sāk aizpildīties nākošās čaulas s un p apakščaulas. Un tikai pēc tam sāk aizpildīties iepriekšējās čaulas apakščaulas d un f . Elementa valenci nosaka elektronu skaits ārējā $s - p$ apakščaulā. Līmeņi, kurus ieņem valentie elektroni, tiek saukti par valentajiem līmeņiem (sīkāk jautājums par līmeņu aizpildīšanu ir apskatīts jebkurā “Kvantu mehānikas” izdevuma “Periodiskās elementu sistēmas” nodaļā). Izolētā atomā augstāk par valento līmeni izvietojas enerģijas līmeņi, kurus var ieņemt elektrons ierosinot atomu. Šīs elektrona ierosinājuma stāvokļa līmenis ir atdalīts no pēdējā valentā līmeņa ar zonu, kurā elektrons nevar atrasties. Tāpēc, lai tas pārietu uz pirmo ierosināto līmeni elektronam ir jāpārvar enerģētiskā barjera, kas ir vienāda ar ierosinātā atoma potenciālo barjeru.

Līdz šim mēs apskatījām izolētu atomu. Tagad apskatīsim sistēmu, kuru iegūst apvienojot N viena veida atomus. Tuvināsim šos N atomus no bezgalības līdz izveidosies cietais ķermenis.

Tā kā, kopējais atomu skaits kristālā ir ļoti liels (1 cm^3 satur $10^{22} - 10^{23}$ atomu), tad blakusesošie apakšlīmeņi izvietoti ļoti tuvu, tos var uzskatīt par kvazinepārtrauktu joslu vai enerģētisko zonu.

Enerģētisko līmeņu sašķelšanās notiek savstarpējās mijiedarbības dēļ, pie tam tiek ņemts vērā tas, ka paši zemākie līmeņi atbilst iekšējiem atoma elektroniem. Šie elektroni, salīdzinājumā ar augstākiem līmeņiem, izjūt vāju iedarbību no citu kristāla kodolu puses un tāpēc sekojošie līmeņi sašķēlas arvien vairāk. Pašiem augstākajiem līmeņiem pat iespējama līmeņu sašķelšanas apgabalu pārklāšanās. Līmeņu sašķelšanās pakāpe ir atkarīga arī no attālumiem starp kristāla atomiem.



2.13. zīmējums. Enerģijas zonu veidošanās no enerģijas līmeņiem, atomiem tuvojoties;
a - kristālrežģa konstante.

Vispārīgā gadījumā sašķelšanās rezultātā kristālā veidojas atļautās enerģijas zonas, kas ir atdalītas ar aizliegtām zonām. Elektronu ierosināto stāvokļu līmeņi tāpat sašķēlas un izveido ierosinātā stāvokļa zonu. Šī zona ir atļauto enerģiju zona.

Lielāko interesi izraisa divas blakusesošās zonas, viena no kurām ir visaugstākā no aizpildītajām zonām, kuru izveidoja sašķelts valenta līmenis, un kura tiek saukta par valento zonu, cita – viszemākā no tukšajām (elektrona ierosinātā stāvokļa zona), kuru sauc par **vadīspējas zonu**.

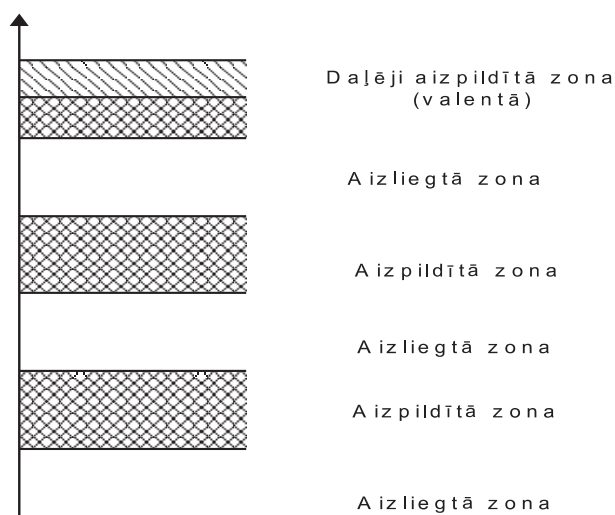
Apzīmēsim valentās zonas maksimālo enerģiju ar E_V , bet vadīspējas zonas minimālo enerģiju – E_{VD} , tad starpība $E_V - E_{VD} = E_g$ tiek saukta par aizliegtās zonas platumu. Raksturīgā enerģija, kas atdala ieņemtos līmeņus no neaizpildītajiem, tiek saukta par Fermi līmeni – pēdējais līmenis, kuru ieņem elektroni pie 0° K , ja nepastāv ārējās iedarbības.

Ņemot vērā Pauli principu, katrā no apakšlīmeņiem var būt izvietojušies divi elektroni ar pretēji vērstiem spiniem. Tātad pēdējā valentā zona var būt aizpildīta pilnīgi vai līdz pusei (atkarībā no elektronu daudzuma izolēta atoma ārējā valentā līmenī).

Vadāmības zonas aizpildīšana var notikt, ja valentajā zonā elektroni iegūst enerģiju $E \geq E_g$ enerģētiskās barjeras pārvarēšanai, kas ir vienāda ar aizliegtās zonas, kura atrodas starp valento un vadīspējas zonu, platumu.

Attēlosim iespējamās zonu struktūras gadījumus, ņemot vērā zonu aizpildījumu:

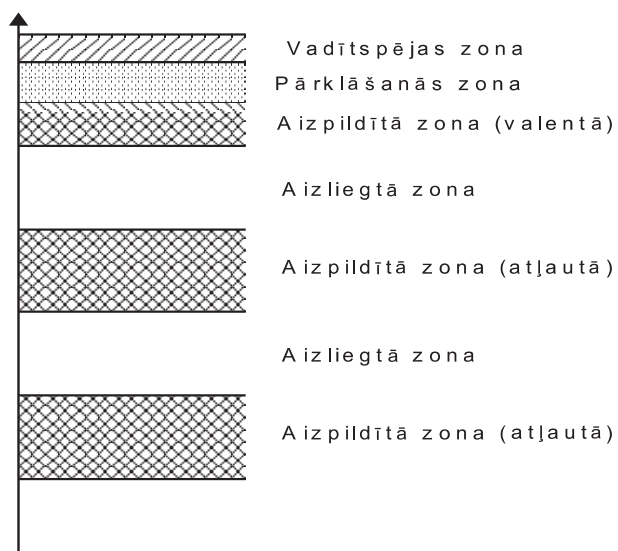
1. Nepilnīgi aizpildītās valentās zonas gadījums (2.14. zīm.).
2. Valentās zonas un vadīspējas zonas pārklāšanās gadījums (2.15. zīm.).
3. Šaurās aizliegtās zonas ($E_g = 1 - 3 \text{ eV}$) gadījums starp valento un vadīspējas zonu (2.16. zīm.).
4. Platas aizliegtās zonas ($E_g = 3 - 10 \text{ eV}$) gadījums starp valento un vadīspējas zonu (2.17. zīm.).



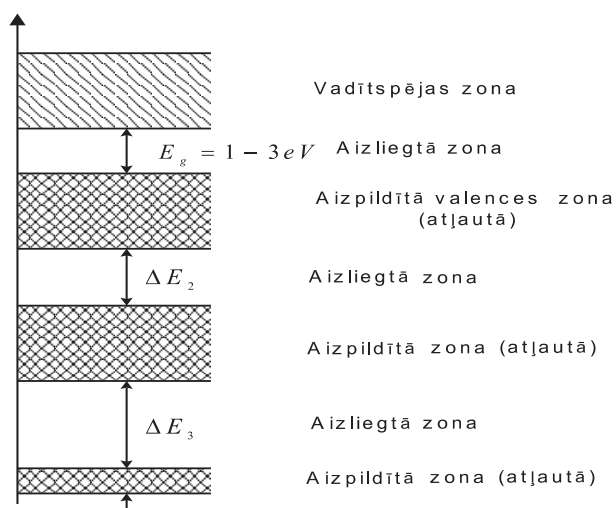
2.14. zīmējums. Nepilnīgi aizpildītās valentās zonas gadījums.

Mēs apskatījām, kādi ir iespējami valentās zonas un vadīspējas zonas izvietojuma gadījumi attiecībā vienai pret otru un arī aizliegtās zonas platumi starp tām.

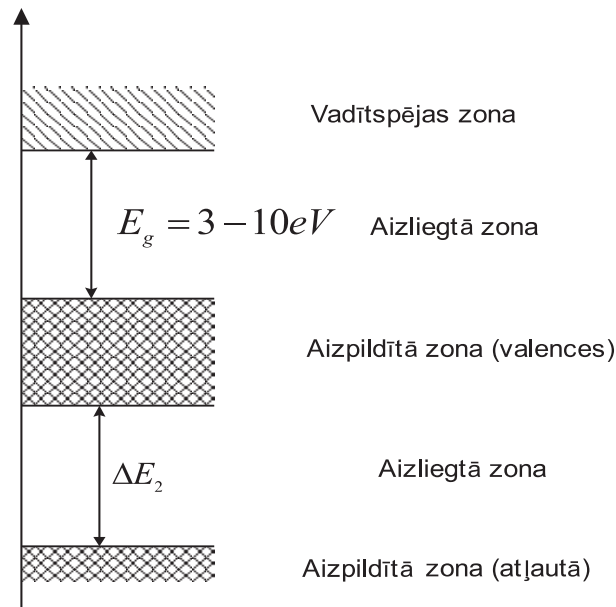
Pie absolūtās nulles temperatūras elektroni ieņem atbilstoši Pauli principam zemākos enerģētiskos līmeņus, jo sistēma vienmēr tiecas ieņemt stāvokli ar mazāko enerģiju.



2.15. zīmējums. Valentās zonas un vadītspējas zonas pārklāšanās gadījums.



2.16. zīmējums. Šaurās aizliegtās zonas ($E_g = 1 - 3 \text{ eV}$) gadījums.



2.17. zīmējums. Platas aizliegtās zonas ($E_g = 3 - 10 \text{ eV}$) gadījums.

Enerģija, zemāk par kuru visus stāvokļus ieņem elektroni pie $T=0^\circ \text{ K}$, bet augstāk par kuru visi stāvokļi ir tukši, tiek saukta par **Fermī enerģiju**.

Līmenis, kas atbilst tādai enerģijai, tiek saukts par Fermī līmeni (apzīmē - E_F). Visi līmeņi, kuros var atrasties elektroni ierosinātā stāvoklī, atrodas zemāk par Fermī līmeni.

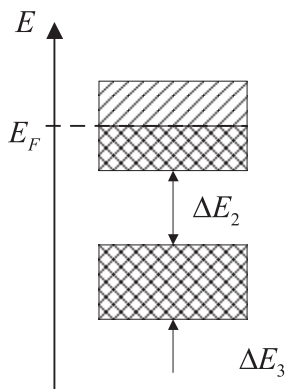
Apskatīsim pirmo gadījumu.

Valentā zona ir aizpildīta līdz pusei. Izskaidrosim to sekojošā veidā. Pieņemsim, ka pirmajā valentā atoma līmenī atrodas viens s - elektrons. Satuvinot N atomus, dotais līmenis sašķēļas N apakšlīmeņos, veidojot zonu. Tā kā, saskaņā ar Pauli principu, vienā no enerģētiskajiem līmeņiem var atrasties divi elektroni ar pretēji vērstiem spiniem, tad katram N apakšlīmenim pienākas $2N$ stāvokļi. Bet mums ārējā valentā līmenī atrodas nevis divi, bet viens elektrons, t.i., katrā apakšlīmeņī vienu kvantu stāvokli ieņem elektrons, bet otru - neieņem. Tādēļ katram N apakšlīmenim pienākas $2N$ stāvokļi, pavisam N - aizpildītu ar elektroniem un N - neaizpildītu.

Valentā zona, kas sastāv no N apakšlīmeņiem, ir aizpildīta ar elektroniem uz pusi. Absolūtās nulles gadījumā valentās zonas elektroni ieņem tās apakšējo pusi, jo tāds stāvoklis raksturojas ar vismazāko enerģiju. Fermī līmenis iet caur šīs zonas vidu. Elektroni kļūst brīvi, ja tie atrodas vadītspējas zonā, t.i., ierosināto stāvokļu zonā. Dotajā gadījumā ierosinātie stāvokļi ir līmeņi, kurus neieņem elektroni un kas atrodas virs Fermī līmeņa, bet tajā pašā valentajā zonā. Tātad elektroni, kas atrodas valentās zonas augšējā daļā, ir brīvie elektroni un var ņemt līdzdalību elektrovadītspējā un siltumvadītspējā. Reāli, kad temperatūra ir virs absolūtās nulles, elektroni var izkārtoties pa visu valento zonu (daļēji aizpildīta). To daļa atradīsies virs Fermī līmeņa un būs brīvi jau pateicoties tam, ka $T=0^\circ \text{ K}$.

Ņemot vērā, ka kristāla vienā molā ir 10^{23} atomi, kas veido zonu, tad šajā zonā apakšlīmeņu skaits - 10^{23} . Ja zonas platums ir 1 eV , tad starp apakšlīmeņiem būs 10^{-23} eV liela enerģētiskā sprauga. Šis lielums ir ļoti mazs, tāpēc var uzskatīt, ka elektroni pāriet no valentā līmeņa uz ierosināto līmeni bez jebkādiem enerģijas patēriņiem, t.i., bez šķēršļiem.

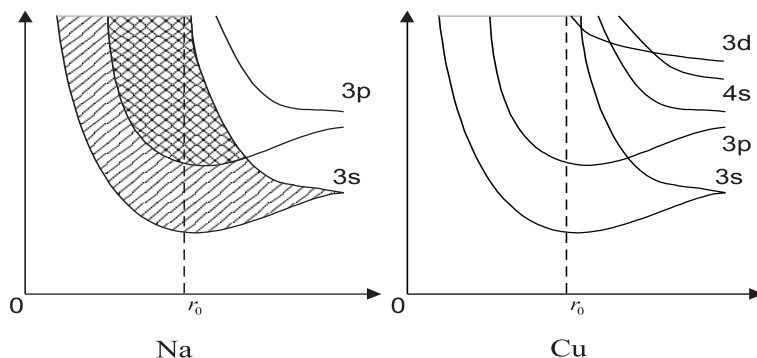
Liels elektronu daudzums, kas atrodas vadītspējas zonā, nodrošina dotā veida kristālu augstu elektrovadītspēju un siltumvadītspēju. Nepilnīgi aizpildītā valentā zona piemīt visiem kristāliem, kuru atomiem ārējā čaulā ir viens s - elektrons (bet dažos gadījumos viens p - elektrons), un raksturojas ar metālisko saiti.



2.18. zīmējums. Nepilnīgi aizpildīta valentā zona.

Tie ir tādi tipiskie vienvalences metāli kā varš, sudrabs, litijs, nātrijs, visi pārējie pirmās grupas elementi, kā arī alumīnijs.

Principā, kristāliem veidojoties no šiem elementiem, tuvojoties atomiem (atkarībā no attāluma starp atomiem), notiek arī sašķelto līmeņu apakšlīmeņu pārklāšanās. Tas nosaka vēl lielāku doto kristālu elektrovadītspēju un siltumvadītspēju.



2.19. zīmējums. Nātrija līmeņu sašķelšanās ($\text{Na } 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$)
un vara līmeņu sašķelšanās ($\text{Cu } 1s^1 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$)
atkarībā no starpatomu attāluma

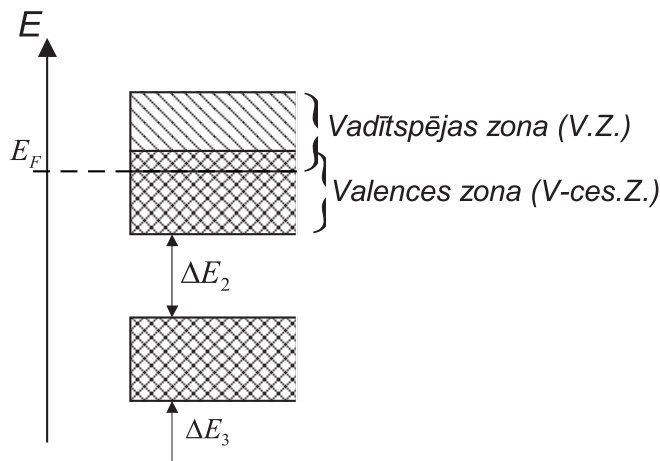
Zonu pārklāšanās - viena no metāliskās saites raksturīgām īpašībām.

Tagad apskatīsim otro gadījumu, kad valentā zona ir aizpildīta pilnīgi un tā pārklājas ar vadītspējas zonu (2.20. zīm.).

Kā jau iepriekš tika minēts, dotais gadījums ir raksturīgs metāliskai saitei, pie tam atomiem ārējā līmenī ir divi elektroni.

Dotajā gadījumā, Fermī enerģija atrodas pārklājušās enerģētiskajās zonās - elektronu valentajā zonā un vadītspējas zonā. Šo divu zonu pārklāšanās rezultātā, tās var apskatīt kā vienu daļēji aizpildītu zonu (sk. 1. gadījumu). Tātad elektroni atkal var būt brīvi,

nepievadot tam papildus enerģiju (pārejai no valentās zonas - vadītspējas zonā). Tāds zonu pārklāšanās tips ir raksturīgs kristāliem, kas veidojas no otrās grupas elementiem: kalcijam, cinkam, berilijam. Šajā gadījumā, brīvo elektronu lielā daudzuma dēļ, kristāli arī labi vadīs elektrisko strāvu un tiem būs augsta siltumvadītspēja.



2.20. zīmējums. Zonu pārklāšanās.

Tātad, pamatojoties uz iepriekš minēto, var teikt, ka metāliem piemīt augsta elektro- un siltumvadītspēja, tādēļ tos (precīzāk, pirmās un otrās grupas elementus) var nosaukt par vadītājiem.

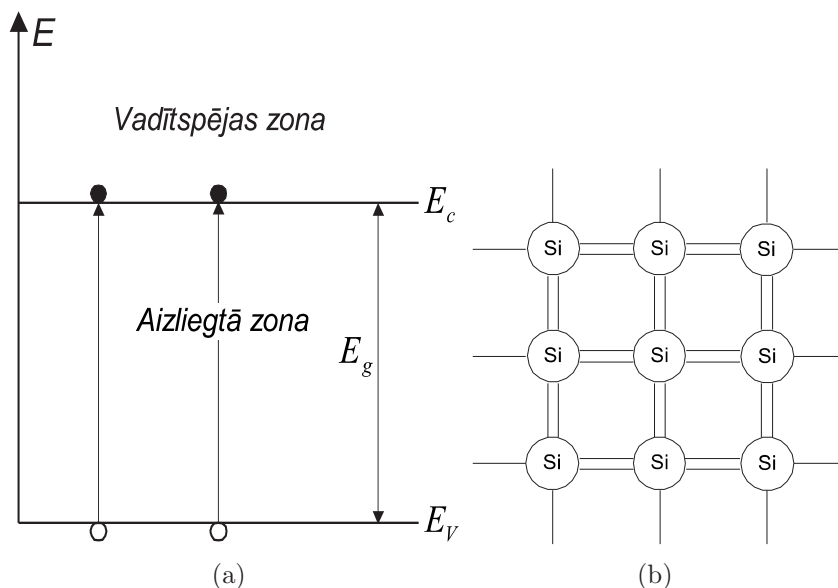
Vadītāju svarīgākā atšķirība no pārējiem - neeksistē aizliegto enerģiju zona starp valento zonu un vadītspējas zonu, un brīvo elektronu liels daudzums, kas pārnes elektriskā lauka, kā arī siltuma enerģiju, kas tiek pievadīta dotajam metālam. Tā kā jau pie zema temperatūrām vadītājs satur lielu brīvo elektronu daudzumu, siltumenerģija būtiski neietekmē elektrovadītspēju. Tādēļ, vadītājiem ir raksturīga elektrovadītspēja, kas gandrīz nav atkarīga no temperatūras.

Apskatīsim tagad gadījumu, kad starp valento zonu un vadītspējas zonu pastāv šaura aizliegto enerģiju zona (platums - $1 \div 3$ eV).

Pieņemsim, ka kristāls sastāv no viena elementa atomiem. Valentā zona ir aizpildīta pilnīgi. Absolūtās nulles gadījumā, visi elektroni ieņem tajā līmeņus, no kuriem pēdējais būs Fermi līmenis (E_F). Lai elektrons kļūtu brīvs, tam ir nepieciešams pievadīt enerģiju, kas pēc lieluma ir vienāda ar aizliegtās zonas platumu (E_1).

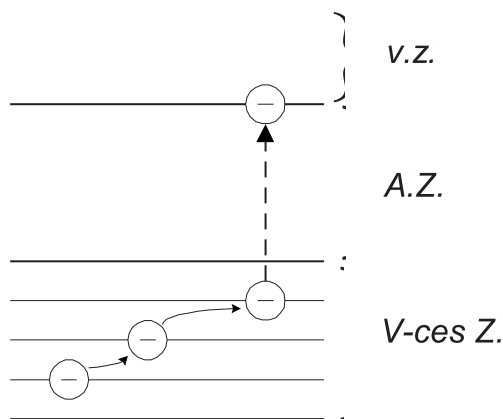
Tipiskākie kristāli ar šauru aizliegto zonu pārstāvji ir silīcijs un ģermānijs (ceturtās grupas elementi). Šo elementu atomi veido kristālu nevis ar metālisko, bet kovalento saiti, kurā ņem līdzdalību tikai valentie elektroni (2.21. zīm.). Vienam tādā kristāla atomam pienākas 4 savi valentie elektroni un 4 elektroni, kas kopēji dotajam atomam un tuvākajiem kaimiņiem, t.i., atoma valentā čaula tiek papildināta līdz astoņiem elektroniem (tiek pilnīgi aizpildīta).

Pie temperatūras, kas ir augstāka par absolūto nulli, elektronu enerģija pieaugs, jo aizliegtā zona ir šaura. Tad jau pie istabas temperatūrām daži no elektroniem iegūst enerģiju, kas ir pietiekama pārejai no valentās zonas vadītspējas zonā, un kļūst brīvi. Pusvadītājam vadītspēja rodas tikai pēc tam, kad daļā elektronu pāries no valentās zonas vadītspējas zonā. Pēc tam valentā zona paliek līdz galam neaizpildīta un tajā ir iespējama elektronu pārvietošanās, t.i., to enerģijas paaugstināšana pieliekot elektrisko lauku.



2.21. zīmējums. (a) - Patstāvīgā pusvadītāja enerģijas zonu shēma; (b) - silīcija režģa saišu izvietojuma divdimensionāls attēlojums

Tādā veidā, elektriskās strāvas plūšanas mehānismu apskatāmajā kristālā nosaka vienlaicīgā elektronu pārvietošanās gan vadītspējas zonā, gan valentajā zonā (2.22. zīm.).



2.22. zīmējums. Elektronu kustība patstāvīgajā pusvadītājā.

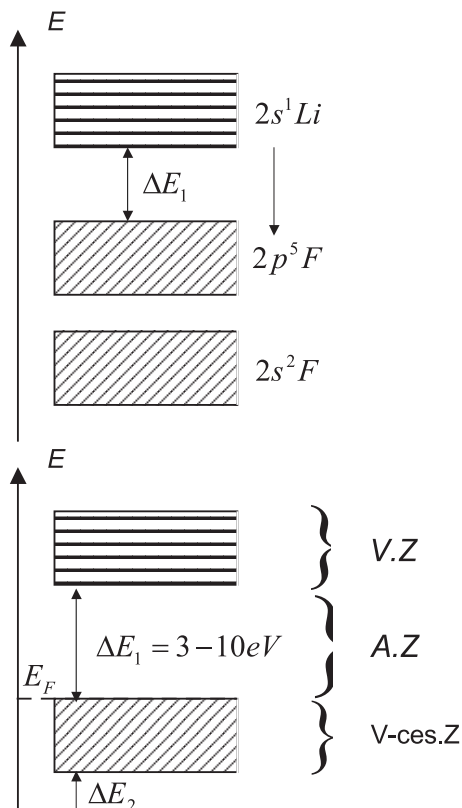
Līdz ar to, elektrona pāreja no valentās zonas vadītspējas zonā izveido kristāliskajā režģa mezglā pozitīvo jonu. Šis jons var neitralizēties, satverot blakusesošā atoma elektronu.

Tas ir tāpat kā, ja aizpildītajā zonā pastāv brīvs kvantu stāvoklis, kuru var ieņemt šīs zonas elektrons; tādu brīvo kvantu stāvokli nosauca par “caurumu”, tas kristālā uzvedas līdzīgi kā daļiņa ar pozitīvo lādiņu. Tādā veidā var teikt, ka elektronu pārvietošanās valentajā zonā ir ekvivalenta jēdzienam “caurumu” vadītspēja.

Tātad tīrā pusvadītājā, kas nesatur kādus cita veida atomus, notiek elektrona un caurumu vadītspēja, kas ir iespējama tikai tādā gadījumā, kad valentajam elektronam tiek pievadīta enerģija, kas ir pietiekama lai pārvarētu aizliegto zonu starp vadītspējas zonu un valento zonu. Šī enerģija var būt pievadīta kristālam to sildot, t.i., siltuma veidā.

Sildot kristālu, pieaug elektronu pāreja no valentās zonas uz vadītspējas zonu. Tādēļ elektrovadītspēja pieaug, paaugstinoties temperatūrai. Zemajās temperatūrās dotajiem kristāliem pārejas no zonas zonā nenotiek, tātad elektrovadītspēja, atšķirībā no vadītājiem, ir maza, jo ir ļoti mazs brīvo elektronu daudzums. Kristāli, kuriem piemīt tādas īpašības (stipra elektrovadītspējas atkarība no temperatūras), tiek saukti par pusvadītājiem.

Apskatīsim tagad pēdējo gadījumu, kad valento zonu un vadītspējas zonu atdala plata aizliegto enerģiju zona ($\Delta E_1 = 3 \div 10 \text{ eV}$).



2.23. zīmējums. Dielektriķa enerģētisko zonu shēma

Tāda veida kristāli tiek raksturoti ar jonu saiti, t.i., sastāv no joniem, piemēram, NaCl un LiF. Apskatīsim dotā kristāla (LiF) elektronu enerģētiskā spektra uzbūvi. Litija un fluora elektronformulas ir sekojošas: Li $1s^2s^1$ un F $1s^22s^22p^5$. Fluora valenta elektronu līmenis ($2p^5$) atrodas zemāk par litija līmeni – $2s^1$. Jona saites dēļ, fluors, kā vairāk negatīvs elements, pilnīgi aizpilda savu valento čaulu, pievienojot pie saviem valentajiem elektroniem $2s^1$ litija elektronu. Tādēļ litija $2s^1$ elektrons pāriet uz fluora līmeni $2p$.

Veidojas divi joni Li^+ un F^- . Rezultātā litija $2s$ zona kļūst pilnīgi tukša, bet fluora $2p$ zona – pilnīgi aizpildīta (2.23. zīm.). Tā kā šīs zonas pilnīgi nepārklājas, tad LiF kristālam nepiemīt elektronu vadāmība.

Valentā zona (mūsu gadījumā atbilst F līmeņiem – $2p^5$) ir aizpildīta pilnīgi, bet vadāmības zona ir tukša. Doto gadījumu var apskatīt tāpat kā pusvadītājus, tikai ar tādu atšķirību, ka šeit augšējās aizliegtās zonas platums ir būtiski lielāks. Tas nozīmē, ka lai pārvarētu šo zonu, valenta elektronam ir nepieciešams pievadīt lielu enerģiju.

Tātad, lai šādi kristāli sāktu vadīt, tie ir stipri jāuzkarsē. Brīvo elektronu, kas pārvar plato aizliegto enerģiju zonu, mazais daudzums norāda uz šo kristālu sliktu sil-

tumvadītspēju. Tomēr principiālu atšķirību no pusvadītājiem, doto kristālu vadītspējas procesā nav, tādēļ tos sauc par pusvadītājiem ar platu aizliegto zonu vai dielektriķiem (izolatoriem), to ļoti sliktās elektrovadītspējas dēļ.

2.7. Elektrona dinamika kristālā. Efektīvās masas metode. Caurumu stāvokļi

Apskatīsim elektrona kustību ārējā elektriskā lauka ietekmē. Sākotnēji pieņemsim, ka mums ir brīvs elektrons, kas ir ievietots homogēnā elektriskā laukā $\vec{\varepsilon}$. Uz elektronu no lauka puses darbojas spēks $\vec{F} = -e\vec{\varepsilon}$. Šī spēka ietekmē elektrons iegūst paātrinājumu:

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m} = -\frac{e\vec{\varepsilon}}{m}, \quad (2.30)$$

kur m - elektrona masa. Paātrinājuma vektors ir virzīts tāpat, kā ārējā spēka vektors, t.i., pretēji laukam $\vec{\varepsilon}$.

Tagad iegūsim elektrona, kas atrodas kristāla periodiskajā laukā, kustības vienādojumu. Uz elektronu ārējais lauks $\vec{\varepsilon}$ iedarbojas tāpat kā uz brīvo elektronu, ar spēku $\vec{F} = -e\vec{\varepsilon}$, kas ir vērsts pretēji laukam. Brīvā elektrona gadījumā, spēks $\vec{F}$ bija vienīgais, kas noteica daļiņas kustības raksturu. Uz elektronu, kas atrodas kristālā, bez spēka $-e\vec{\varepsilon}$, darbojas ievērojami iekšējie spēki, kurus rada režģa periodiskais lauks. Tāpēc šī elektrona kustība ir sarežģītāka nekā brīvā elektrona kustība.

Elektrona kustību kristālā var aprakstīt ar viļņa paketes palīdzību, kura izveidota no Bloha funkcijas (2.16). Vidējais elektrona kustības ātrums ir vienāds ar viļņu paketes grupas ātrumu:

$$V_{gr} = \frac{d\omega}{dk}. \quad (2.31)$$

Nemot vērā, ka grupas ātrumam $\omega = \frac{E}{\hbar}$, tad iegūstam:

$$V_{gr} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{dE}{d\rho}, \quad (2.32)$$

kur $\vec{\rho} = \hbar\vec{k}$ - elektrona kvaziimpulss. Redzams, ka elektrona vidējo ātrumu cietā ķermenī nosaka dispersijas likums $E(\vec{k})$. Nodiferencēsim (2.32) pēc laika:

$$\vec{a} = \frac{dV_{gr}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{d\vec{k}}{dt}. \quad (2.33)$$

Laikā intervālā Δt elektriskais lauks $\vec{\varepsilon}$ veic darbu ΔA , kas palielina elektrona enerģiju:

$$\Delta E = \Delta A = -e\vec{\varepsilon} \cdot V_{gr} \Delta t. \quad (2.34)$$

Nemot vērā to, ka

$$\Delta E = \frac{dE}{dk} \Delta k = \hbar V_{gr} \cdot \Delta k, \quad (2.35)$$

no (2.34) iegūstam:

$$\Delta \vec{k} = -\frac{e\vec{\varepsilon}}{\hbar} \Delta t, \quad (2.36)$$

vai

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{\varepsilon} = \vec{F}. \quad (2.37)$$

Pēdējā izteiksme izsaka elektrona kustības vienādojumu kristālā. Šajā gadījumā, atvasinājums $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$ ir vienāds ar spēku $\vec{F}$, kuru rada ārējs elektriskais lauks.

Ievietosim tagad no (2.37) $\frac{d\vec{k}}{dt}$ izteiksmē (2.33):

$$\vec{a} = -\frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{e\vec{\varepsilon}}{\hbar} = -\frac{e\vec{\varepsilon}}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}. \quad (2.38)$$

Vienādojums (2.38) saista elektrona paātrinājumu $\vec{a}$ ar ārējo spēku $-e\vec{\varepsilon}$. Ja pieņem, ka lielumam $\frac{\hbar^2}{(d^2 E/dk^2)}$ ir masas jēga, tad izteiksme (2.38) iegūst otrā Ņūtona likuma izskatu:

$$\vec{a} = -\frac{e\vec{\varepsilon}}{m^*}, \quad (2.39)$$

kur

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}. \quad (2.40)$$

Lielums m^* ieguva elektrona efektīvās masas nosaukumu. Tas atspoguļo režģa periodiskā potenciāla ietekmi uz elektrona kustību kristālā ārējā spēka ietekmē. No (2.39) seko, ka kristāla periodiskajā laukā ārējā spēka $\vec{F}$ ietekmē elektrons vidēji kustas tā, ka kustētos brīvs elektrons šī spēka ietekmē, ja tam būtu masa m^* . Tādā veidā, ja elektronam kristālā masas m vietā pierakstīt efektīvo masu m^* , tad to var uzskatīt par brīvu un šī elektrona kustību aprakstīt tā, kā apraksta brīva elektrona kustību, kas ievietots ārējā laukā. Atšķirību starp m un m^* nosaka elektrona mijiedarbība ar režģa periodisko lauku, un ieviešot elektronam efektīvo masu, mēs ņemam vērā šo mijiedarbību.

Izmantojot efektīvās masas jēdzienu, uzdevumu par elektrona kustību režģa periodiskā potenciālā $V(\vec{r})$ var reducēt līdz uzdevumam par brīvā elektrona kustību ar masu m^* . Tas nozīmē, ka Šrēdingera vienādojuma vietā ar periodisko potenciālu:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}),$$

ir jārisina vienādojums:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}). \quad (2.41)$$

Piemēram, ja enerģija ir kvadrātiska funkcija no k , tad to var uzrakstīt tā pat kā brīva elektrona gadījumā:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.42)$$

Ir viegli pamanīt, ka brīvam elektronam efektīvā masa ir vienāda ar tā parasto masu. Šajā gadījumā sakaru starp E un k nosaka izteiksme $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, no kurienes iegūstam:

$$\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m} \quad \text{un} \quad m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} = m. \quad (2.43)$$

Vispārīgā gadījumā efektīvā masa ir anizotrops lielums, un dažādiem viļņa vektora $\vec{k}$ virzieniem tā ir dažāda. To izsaka otrā ranga tenzors:

$$m_{ij}^* = \frac{1}{\hbar} \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{vmatrix}^{-1}. \quad (2.44)$$

Efektīvā masa, atšķirībā no parastās masas, nenosaka ne daļiņas inerciālās, ne gravitācijas īpašības. Tā ir tikai koeficients vienādojumā (2.39) un atspoguļo elektrona mijiedarbības lielumu ar kristālisko režģi. Efektīvā masa var būt gan lielāka, gan mazāka par parasto elektrona masu. Bez tam, m^* var būt arī negatīvs lielums. Lai to ilustrētu, apskatīsim sekojošo piemēru.

Pieņemsim, ka vienā no Briljuēna zonām $E(k)$ atkarībai ir izskats, kas attēlots (2.9.) (b) zīmējumā. Enerģijas minimums atbilst zonas centram ($k=0$), bet maksimums - zonas robežām ($k = \pm \frac{\pi}{a}$). Bieži vien zonas ar tādām $E(k)$ atkarībām tiek sauktas par standartām. Saskaņā ar (2.43), efektīvo masu nosaka pēc $E(k)$ liekuma. k vērtību, kuras atbilst funkcijas $E(k)$ ekstrēmiem, tuvumā dispersijas likumu var attēlot ar parabolisku atkarību, kas ir analoga brīvajam elektronam. Ja ekstrēmu sasniedz punktā $k = k_0$, tad izvirzot $E(k)$ rindā pēc $(k - k_0)$ pakāpēm, iegūsim

$$E(k) = E(k_0) + \left(\frac{\partial E}{\partial k} \right) \Big|_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \Big|_{k=k_0} (k - k_0)^2 + \dots \quad (2.45)$$

Ņemot vērā, ka ekstrēma punktā $dE/dk = 0$ un neievērojot izvirzījuma rindas locekļus ar reizinātājiem $(k - k_0)^n$, kur $n > 2$ (jo tiem ir mazas vērtības), no izteiksmes (2.45) iegūsim:

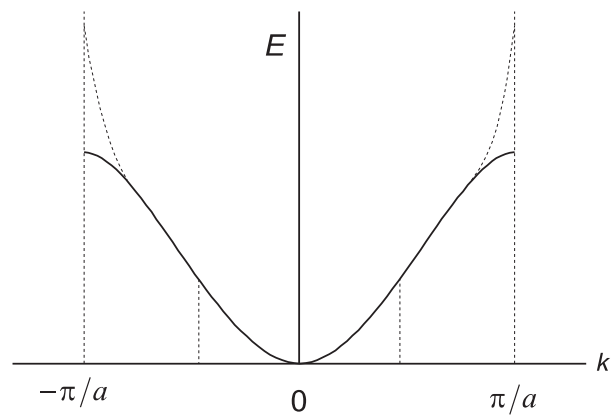
$$E(k) = E(k_0) + \hbar^2 \frac{(k - k_0)^2}{2m^*}. \quad (2.46)$$

Ja enerģijas atskaiti veikt no ekstrēma vērtības, tad Briljuēna zonas centram ($k_0 = 0$) izteiksmes (2.46) vietā iegūsim izteiksmi (2.42), kura sakrīt ar brīvā elektrona dispersijas likumu, tikai ar tādu atšķirību, ka m ir aizvietota ar m^* .

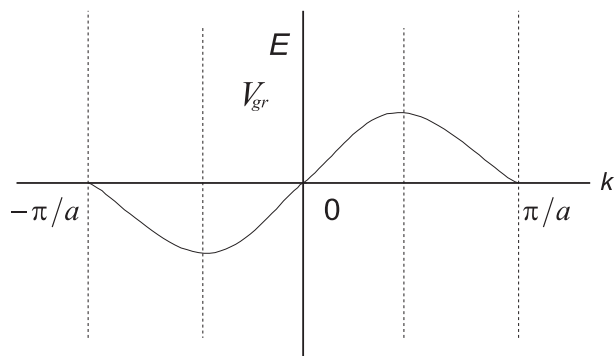
Diferencējot $E(k)$ pēc k , atrodam atkarības $V_{gr}(k)$ un $m^*(k)$, kas ir attēlotas 2.24. zīm. Redzams, ka elektronu, kuri izvietojas zonas apakšējā daļā, efektīvā masa ir pozitīva un tuva brīvā elektrona masai. Zonas vidū, kur tiek novērota liknes $E(k)$ pārliekšanās, efektīvā masa kļūst nenoteikta. Zonas augšējā daļā elektronam piemīt negatīvā efektīvā masa. Negatīvā efektīvā masa nozīmē to, ka elektrona paātrinājums vērsts pretēji ārējā spēka darbības virzienam. Pie k vērtībām, kas ir tuvas Briljuēna zonas robežai, neskatoties uz k pieaugšanu, elektrona ātrums samazinās.

Dotais rezultāts ir Brega atstarojuma sekas. Punktā $k = \frac{\pi}{a}$ elektrons tiek aprakstīts jau ne ar skrejošo vilni, bet ar stāvvilni un $V_{gr}=0$.

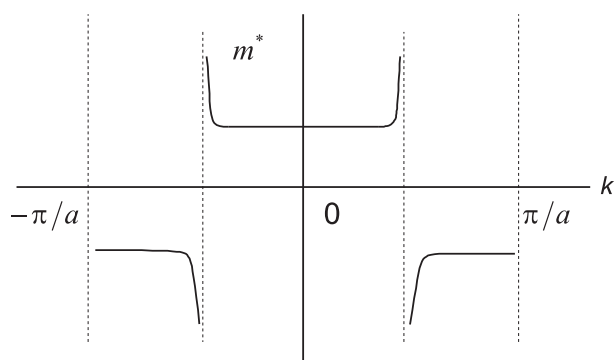
Tā kā elektronu ar negatīvo efektīvo masu īpašības ļoti atšķiras no “normālo” elektronu īpašībām, tad tos ir ērtāk aprakstīt, izmantojot priekšstatus par dažām kvazidaļiņām, kurām ir lādiņš $+e$, bet pozitīva efektīvā masa. Tāda kvazidaļiņa ieguva nosaukumu – caurums. Pieņemsim, ka zonā visus stāvokļus, izņemot vienu, ir ieņēmuši elektroni. Vakanto stāvokli zonas griestu tuvumā sauc par caurumu. Ja ārējais lauks ir vienāds ar nulli, tad caurums ieņem visaugstāko stāvokli. Lauka $\vec{\epsilon}$ darbības ietekmē, šajā vakantajā stāvoklī



(a)



(b)



(c)

2.24. zīmējums. (a) - enerģijas; (b) - ātruma; (c) - efektīvas masas atkarība no viļņu skaitļa. Ar raustītu līniju ir parādīta $E(k)$ atkarība brīvajam elektronam.

pāries elektrons no zemākā stāvokļa un caurums nolaidīsies. Tālāk cauruma stāvokli ieņems sekojošais elektrons utt. Tādā veidā, kristālos strāva var tikt pārnesta ne tikai ar elektroniem vadītspējas zonā, bet arī ar caurumiem valentajā zonā.

2.8. Lokālie līmeņi kristāliskos pusvadītājos

Atzīmēsim, ka iepriekš apskatītā cietā ķermeņa zonu struktūra bija kristālā eksistējošā iekšējā periodiskā lauka sekas, kurš līdz šim tika pieņemts ideāli pareizs, t.i., to izveidoja viena veida atomi, kas atrodas vienādos attālumos cits no cita.

Ja pastāvēs kādi periodiskā lauka idealitātes traucējumi, tad tiem sekos zonu struktūras traucējumi. Reālie kristāli vienmēr satur ievērojumu kristāliskā režģa traucējumu (defektu) daudzumu. Vislielāko ietekmi defekti atstāj uz pusvadītāju vadītspēju. Paskaidrosim to sekojošā veidā. Ja defektu daudzums kristālā nav liels, un tie atradīsies pietiekami lielos attālumos viens no otra, tad var uzskatīt, ka kristāla režģa defekti ir lokalizēti. To tuvumā kristāla iekšējo lauku var attēlot sekojošā veidā:

$$V = V_0 + V',$$

kur

V_0 - ideālā režģa potenciālā enerģija.

V' - papildus enerģija, kas atšķirīga no 0 tikai defekta lokalizētā apgabalā.

Līdz ar to, izmainās elektronu enerģētiskie stāvokļi, kas atrodas tikai defekta lokalizētā apgabalā, bet tas ir par iemeslu lokālo enerģētisko stāvokļu veidošanai, kuri izmaina ideālo zonu struktūru. Elektroni, kas atrodas šajos lokālajos enerģētiskajos līmeņos, ir saistīti, tāpēc tie nepiedalās elektrovadītspējā. Tas nozīmē, ka defektu līmeņi neatrodas ne vadītspējas zonā, ne valentā zonā, bet atrodas aizliegtajā zonā.

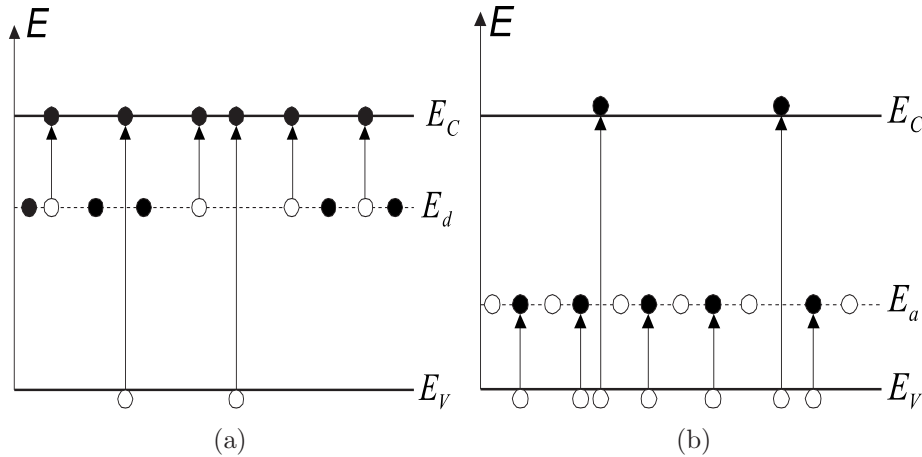
Tādi līmeņi, kas atrodas aizliegtajā zonā, tiek saukti par lokālajiem. Dotajos enerģētiskajos līmeņos var atrasties brīvie elektroni, jo tie ir vienkāršie enerģētiskie stāvokļi, kuros var atrasties kristāla dotā apgabala elektroni.

Pieaugot temperatūrai var apskatīt divus gadījumus: kad lokālie līmeņi ir aizpildīti ar elektroniem un kad tie ir tukši. Pirmajā gadījumā elektroni no lokālajiem līmeņiem pāriet vadītspējas zonā pat tad, ja nav pāreju no valentās zonas, t.i., tiek novērota elektronu elektrovadītspēja (2.25. (a) zīm.). Otrajā gadījumā - elektroni no valentās zonas pāriet lokālajos līmeņos, kā rezultātā valentajā zonā veidojas brīvs kvantu stāvoklis - "caurums", un rodas caurumu vadītspēja. (2.25. (b) zīm.).

Defekti, kas veido lokālus līmeņus vadītspējas zonas apakšas tuvumā un no kuriem elektroni pāriet vadītspējas zonā, tiek saukti par donorpiejaukumiem, un lokālie līmeņi, kas atbilst šiem defektiem - donorpiejaukumu līmeņi. Defekti, kas ir spējīgi uztvert elektronus no valentās zonas - akceptorpiejaukumi, bet lokālie līmeņi - akceptorpiejaukumu līmeņi.

Lokālie līmeņi stipri ietekmē kristālu vadāmību, kuriem ir aizliegtā zona. Pusvadītājos tā ir šaura, tāpēc šo līmeņu ietekme ir daudz spēcīgāka nekā tad, kad tā ir plata (dielektriska gadījumā).

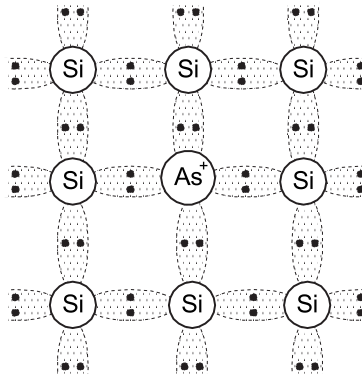
Apskatīsim sīkāk lokālo līmeņu veidošanās gadījumu pusvadītājos, ievadot tajā piejaukumus.



2.25. zīmējums. Donoru (a) un akceptoru (b) pusvadītāju enerģijas diagrammas

Tagad izskatīsim jautājumu par piejaukumu ievadīšanu pusvadītājā. Ir divi gadījumi, kad piejaukuma atomi pieder pie grupas ar lielāku numuru nekā kristāla atomi, un ar mazāku grupas numuru.

Pienēmsim, ka ir dots IV grupas Si pusvadītājs un tajā ir ievadīts piejaukums - V grupas P atoms (2.26. zīm.). Veidojoties kovalentai saitei, viens fosfora atoma elektrons paliek saistīts tikai ar šo atomu (lokālā defekta veidošanās), t.i., veidojas lokālais līmenis aizliegtajā zonā, kurā ir tikai viens elektrons. Tāds līmenis, kā jau tika teikts iepriekš, ir donorpiejaukuma līmenis. Tagad apskatīsim, kur izvietojas donorpiejaukuma līmenis.



2.26. zīmējums. Donoru pusvadītāja kristālrežģa shematisks zīmējums

Pierakstīsim Šrēdingera vienādojumu ideālajam kristālam, izmantojot efektīvās masas jēdzienu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \Psi = E\Psi, \quad (2.47)$$

Ψ - silīcija elektrona viļņa funkcija.

Šī vienādojuma atrisināšana dod silīcija elektrona divu līmeņu izvietojumu, viens no tiem atbilst valentās zonas (E_v) griestu enerģijai, cits – vadītspējas zonas (E_{VD}) apakšdaļas enerģijai.

Apzīmēsim aizliegtās zonas platumu kā $\Delta E_g = E_C - E_V$. Silīcijam E_g sastāda 1.1 eV.

Ievadot fosfora piejaukuma atomu, viens elektrons neņem līdzdalību kovalentā saitē. Tas ir vāji saistīts ar savu kodolu. Tādu atomu (fosfora kodols un dotais elektrons) var uzskatīt ūdeņraža atomam līdzīgu, un tāda atoma enerģētiskos līmeņus meklēt līdzīgi kā ūdeņraža jonam.

Kodola un elektrona mijiedarbības potenciālā enerģija tādā atomā:

$$U = \frac{Z_1 e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}. \quad (2.48)$$

Tad Šrēdingera vienādojums elektronam tādā atomā, kas atrodas kristālā, ir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{Z_1 e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} \right] \Psi = E\Psi, \quad (2.49)$$

Z_1 - fosfora atoma lādiņš,

Ψ - viļņu funkcija.

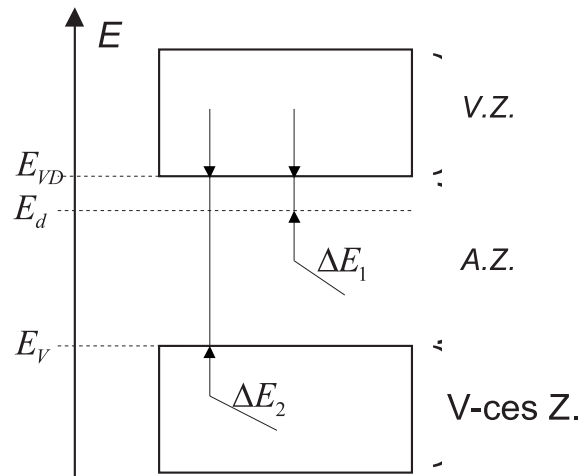
Lai tāds elektrons kļūtu brīvs, tam ir jānokļūst silīcija vadītspējas zonā, tāpēc vadītspējas zonas apakšējai daļai piemīt tāda pati enerģija E_{VD} , bet valentās zonas griesti būs citādi. Apzīmēsim tos ar E_D , tas ir, tas būs elektrona neierosinātā stāvokļa pēdējais līmenis fosfora atomā. Tad aizliegtās zonas platumu apzīmēsim kā $\Delta E_1 = E_C - E_D$. Risinot Šrēdingera vienādojumu fosfora elektronam silīcija kristālā, nonāksim pie šādas izteiksmes:

$$E_D = E_C - \frac{1}{2} \frac{Z_1^2 e^4 m^*}{\hbar^2 \epsilon_0^2 \epsilon^2} \frac{1}{n^2}. \quad (2.50)$$

Atradīsim aizliegtās zonas platumu:

$$\Delta E_1 = E_C - E_D = \frac{1}{2} \frac{Z_1^2 e^4 m^*}{\hbar^2 \epsilon_0^2 \epsilon^2} \frac{1}{n^2}. \quad (2.51)$$

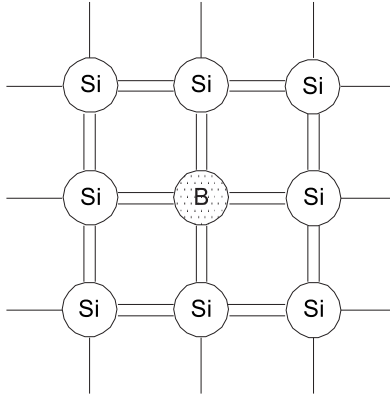
Maksimālā vērtība pie $n = 1$. Izmantojot aprēķinus iegūsim: $\Delta E_1 \approx 0.01$ eV (2.27. zīm.).



2.27. zīmējums. Donoru pusvadītāju enerģijas diagramma

Apskatīsim gadījumu, kad silīcija atoms tiek aizvietots ar III. grupas elementu, piemēram, boru (2.28. zīm.).

Šajā gadījumā, veidojoties kovalentai saitei, līdz pilnīgai silīcija atoma valentās čaulas aizpildīšanai trūkst viena elektrona, jo tam ārējā čaulā atrodas tikai trīs elektroni. Viena saite čaulā paliek nepabeigta, t.i., eksistē lokalizēts defekts.



2.28. zīmējums. Akceptoru pusvadītāja kristālrežģa shematisks zīmējums

Lokalizētais līmenis, kuru izveidoja tāds defekts, nav aizpildīts, bet to var aizpildīt tikai tad, ja tā vietā pāries jebkurš cits kristāla elektrons. Tāds vadītspējas veids tika apskatīts iepriekš un to sauca par caurumu vadītspēju. Atšķirībā no elektrona, caurums kustēsies lauka virzienā, tam ir m_D , kas ir vienāda ar elektrona m^* , un pozitīvs vienības lādiņš, kas skaitliski vienāds ar elektrona lādiņu.

Valentā zona caurumiem ir vadītspējas zona, un analogiski iepriekšējam gadījumam var izskaitļot, kur atrodas akceptorpiejaukuma līmeņi dotā kristāla enerģētiskajā spektrā. Nonākam pie sekojošā atrisinājuma:

$$\Delta E'_1 = E_A - E_v = \frac{1}{2} \frac{Z_2^2 e^4 m^*}{\hbar^2 \epsilon_0^2 \epsilon^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (2.52)$$

kur

E_A - akceptorpiejaukuma līmeņa enerģija,

E_V - valentās zonas griesti,

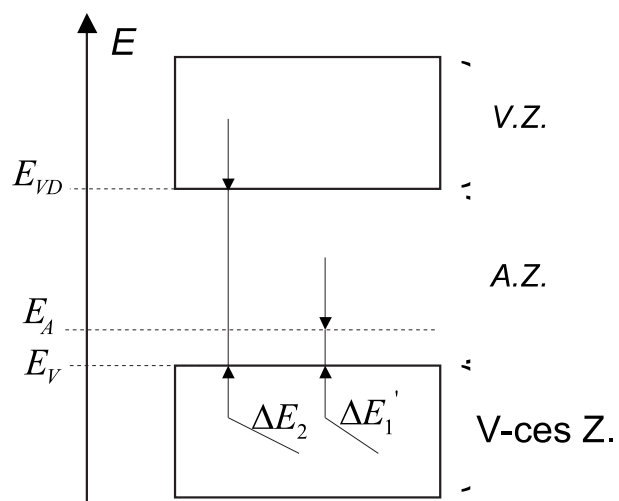
m^* - cauruma efektīvā masa,

Z_2 - akceptorpiejaukuma lādiņš,

E'_1 - aizliegtās zonas platums atomam.

Risinot, iegūsim sekojošo rezultātu $\Delta E'_1 = 0,01 \text{ eV}$ (2.29. zīm.).

Tas ļauj teikt, ka akceptorpiejaukuma līmeņi izvietojas valentās zonas griestu tuvumā.



2.29. zīmējums. Akceptoru pusvadītāja enerģijas diagrammas

III nodaļa

ELEKTRONU GĀZE METĀLOS

3.1. Mikrodaļiņas un to kolektīvs

Daļiņas atkarībā no to kolektīvā uzvedības rakstura var iedalīt divās grupās: fermionos un bozonos. Fermioni ir – elektroni, protoni, neitroni u.c.. Tās ir daļiņas ar pusveselu spinu: $\frac{\hbar}{2}; \frac{3\hbar}{2}; \dots$. Savukārt, bozoni ir fotoni, fononi u.c., t.i., tādas daļiņas, kurām piemīt vesels spins. Kolektīvā fermioniem ir raksturīga tieksme “nošķirties”. Ja dotajā kvantu stāvoklī jau atrodas fermions, tad nekāds cits dotā tipa fermions nevar atrasties šajā stāvoklī. Tāda ir Pauli principa būtība, kuram pakļaujas fermioni. Turpretī bozoni cenšas “apvienoties”. Tie var neierobežoti ieņemt vienu un to pašu stāvokli, pie tam, jo lielāks ir bozonu skaits šajā stāvoklī, jo “labvēlīgāk” tas notiek.

Pieņemsim, ka N vienādām daļiņām pienākas G dažādu stāvokļu, kuros var atrasties atsevišķa mikrodaļiņa. Lai aprakstītu “satikšanās” biežumu, var izmantot attiecību N/G . Mikrodaļiņas satiksies retāk, ja izpildīsies sekojošais nosacījums:

$$\frac{N}{G} \ll 1. \quad (3.1)$$

Šajā gadījumā dažādo vakanto stāvokļu skaits ir daudz lielāks par mikrodaļiņu skaitu ($G \gg N$). Tādos apstākļos fermionu un bozonu specifika nevar parādīties. Šādus kolektīvus sauc par nedeģenerētiem, bet nosacījumu (3.1) - par nedeģenerācijas nosacījumu.

Ja stāvokļu G skaitam ir tāda pati skaitļa kārtā kāda ir daļiņu N skaitam, t.i., ja izpildās nosacījums

$$\frac{N}{G} \approx 1, \quad (3.2)$$

tad tādus kolektīvus sauc par deģenerētiem. Šādi kolektīvi var veidoties tikai no kvantu mehānikas objektiem, jo tikai tādiem objektiem stāvokļa parametri mainās diskrēti, un līdz ar to iespējamo līmeņu G skaits var būt galīgs. Klasiskajiem objektiem, kuriem stāvokļa parametri mainās nepārtraukti, stāvokļu G skaits vienmēr ir bezgalīgi liels. Tā rezultātā tādi objekti var veidot tikai nedeģenerētus kolektīvus.

Fizikālo statistiku, kas pēta nedeģenerēto kolektīvu īpašības, sauc par klasisko statistiku (Maksvela-Bolcmaņa statistika). Fizikālo statistiku, kura pēta deģenerēto kolektīvu īpašības, sauc par kvantu statistiku. Fermionu kvantu statistiku apraksta Fermī - Diraka statistika, bet bozonu – Boze - Einšteina statistika.

Lai uzdotu kolektīva stāvokli, ir jānorāda tā termodinamiskie parametri. Daļiņu stāvokļa aprakstīšanai ir jānorāda to koordinātas un impulsu projekcijas vai arī daļiņu enerģijas.

Saistību starp šādiem diviem lielumu tipiem nodrošina statistiskā sadalījuma funkcija

$$N_{\mu,T}(E)dE, \quad (3.3)$$

kas izsaka daļiņu ar enerģiju no E līdz $E + dE$ skaitu sistēmā, kuras stāvokli apraksta termodinamiskie parametri m, T . Tādu funkciju sauc par pilnu statistiskā sadalījuma funkciju.

Pilnu sadalījuma funkciju var attēlot kā stāvokļu skaita $g(E)dE$, kas pienākas enerģiju intervālam dE , reizinājumu ar varbūtību, ka daļiņas ieņems šos stāvokļus. Apzīmēsim šo varbūtību ar $f(E)$. Tad

$$N(E)dE = f(E)g(E)dE, \quad (3.4)$$

funkciju $f(E)$ sauc par sadalījuma funkciju. Tādā veidā, lai atrastu daļiņu pilno sadalījuma funkciju pēc stāvokļiem, ir jāmeklē funkcija $g(E)dE$, kas apraksta stāvokļu sadalījumu pēc enerģijām, un funkciju $f(E)$, kura nosaka šo stāvokļu aizpildīšanās varbūtību.

Klasiskajā mehānikā daļiņas stāvokli nosaka trīs koordinātas (x, y, z) un trīs impulsa projekcijas (p_x, p_y, p_z) . Iedomāsimies sešdimensiju telpu ar koordinātu asīm x, y, z, p_x, p_y, p_z . Tādu telpu sauc par fāzu telpu, bet punktus (x, y, z, p_x, p_y, p_z) , kuri nosaka daļiņas stāvokli, sauc par fāzu punktiem. Lielumu

$$\Delta G = \Delta G_V \Delta G_p = dxdydzdp_xdp_ydp_z \quad (3.5)$$

sauc par fāzu telpas tilpuma elementu. $\Delta G_V = dxdydz$ ir koordinātu telpas tilpuma elements, $\Delta G_p = dp_xdp_ydp_z$ - impulsu telpas tilpuma elements. Tā kā klasiskās daļiņas koordinātes un impulsu projekcijas var mainīties nepārtraukti, tad elementi $\Delta G_V, \Delta G_p$, un līdz ar tiem arī elements ΔG , var būt pēc patikas mazi. Sistēmā, kurā daļiņas neatrodas savstarpējā mijiedarbībā, un kuru neietekmē ārējais lauks, daļiņu potenciālā enerģija ir vienāda ar nulli. Tādas daļiņas sauc par brīvajām. Šādām daļiņām ir ērti izmantot nevis sešdimensiju fāzu telpu, bet trīsdimensiju impulsu telpu. Šādā gadījumā elements ΔG_v ir vienāds ar tilpumu V , kurā kustas daļiņas.

Atšķirīgāka ir fāzu telpas dalīšana tilpuma elementos tādā gadījumā, ja daļiņa ir elektrons vai jebkurš cits mikroobjekts, kuram piemīt viļņējādās īpašības. Saskaņā ar nenoteiktības principu, šādu mikrodaļiņu viļņējādās īpašības izslēdz iespēju atdalīt divus stāvokļus (x, y, z, p_x, p_y, p_z) un $(x + dx, y + dy, z + dz, p_x + dp_x, p_y + dp_y, p_z + dp_z)$, ja $dxdydzdp_xdp_ydp_z$ reizinājums būs mazāks par h^3 . Tā kā šis reizinājums izsaka fāzu telpas tilpuma elementu, tad no šejienes seko, ka dažādiem sešdimensiju fāzu telpas tilpuma elementiem atbilst dažādi mikrodaļiņu kvantu stāvokļi tikai tad, ja tāda tilpuma elementa izmērs nav mazāks par h^3 . Tāpēc kvantu statistikā par sešdimensiju fāzu telpas elementāro šūnu pieņem tilpumu, kurš ir

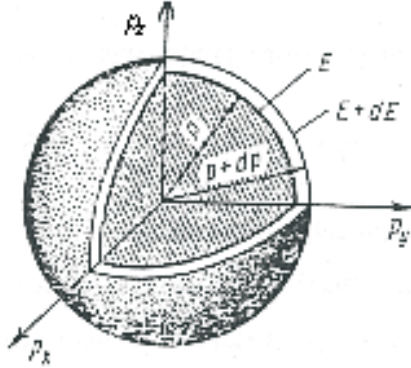
$$\Delta G = \Delta G_v \Delta G_p = h^3. \quad (3.6)$$

Brīvām mikrodaļiņām, kurām $\Delta G_v = V$, trīsdimensiju impulsu telpas elements ir

$$\Delta G_p = \frac{h^3}{V}. \quad (3.7)$$

Katram tādām elektronam atbilst no citiem atšķirīgs kvantu stāvoklis. Fāzu telpas dalīšanas procesu galīga lieluma šūnās (h^3 vai h^3/V) sauc par fāzu telpas kvantēšanu.

Aprēķināsim mikrodaļiņu stāvokļu skaitu enerģiju intervālā no E līdz $E + dE$. Šim nolūkam novilksim impulsu telpā divas sfēras ar rādiusu p un $p + dp$ (3.1. zīm.) Starp



3.1. zīmējums. Sfēras ar rādiusu p un $p + dp$ impulsu laukā.

šīm sfērām atrodas lodveidīgs slānis, kura tilpums ir vienāds ar $4\pi p^2 dp$. Fāzu elementāro šūnu skaits, kuras ir ietvertas šajā slānī, ir vienāds

$$\frac{4p^2 \pi dp}{\Delta G_p} = \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp. \quad (3.8)$$

Tā kā katrai šūnai atbilst viens mikrodaļiņas stāvoklis, tad stāvokļu skaits intervālā dp , kurš ir ietverts starp p un $p + dp$, ir

$$g(p)dp = \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp. \quad (3.9)$$

Brīvajām daļiņām, kuras neatrodas savstarpējā mijiedarbībā, $E = \frac{p^2}{2m}$, $dE = \frac{p}{m} dp$. Izsakot no šejienes p un dp un, ievietojot (3.9), iegūsim

$$g(E)dE = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE. \quad (3.10)$$

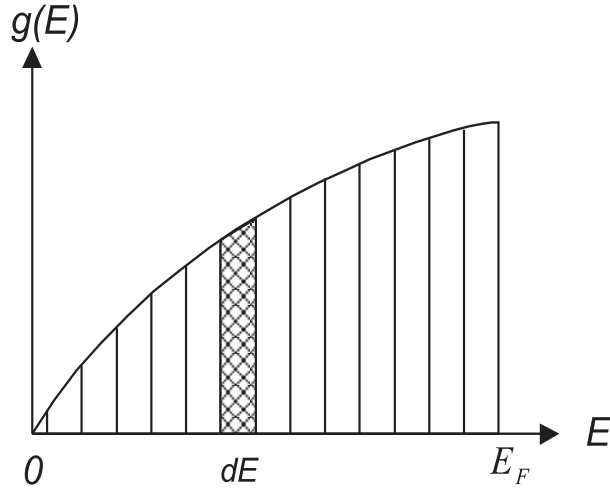
Tas arī ir mikrodaļiņu stāvoklis enerģiju intervālā dE , kas atrodas starp E un $E + dE$. Izdalot izteiksmes (3.10) labo un kreiso pusi ar dE , iegūsim stāvokļu blīvumu $g(E)$, kas izsaka mikrodaļiņu stāvokļu skaitu, kuri pienākas uz enerģijas intervāla vienību:

$$g(E) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}. \quad (3.11)$$

No (3.11) redzams, ka pieaugot E , stāvokļu blīvums palielinās proporcionāli $\sqrt{E}$ (3.2. zīm.).

Elektronu gadījumā, katrai fāzu šūnai atbilst nevis viens, bet divi stāvokļi, kas atšķiras cits no cita ar spina virzienu. Tos sauc par spina stāvokļiem. Tāpēc elektronu stāvokļu skaitu (3.9), (3.10) un stāvokļu blīvumu (3.11) ir jādivkāršo:

$$g(p) dp = \frac{8\pi V}{h^3} p^2 dp, \quad (3.12)$$



3.2. zīmējums. Stāvokļu blīvuma $g(E)$ atkarība no enerģijas.

$$g(E) dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE, \quad (3.13)$$

$$g(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}. \quad (3.14)$$

Integrējot (3.11) pēc enerģijas robežās no 0 līdz E , iegūsim mikrodaļiņu skaitu, kas ir ietvertas enerģiju intervālā no 0 līdz E

$$G = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} E^{\frac{3}{2}}.$$

Pieņemot, ka $E = \frac{3K_B T}{2}$, iegūsim

$$G = V \left(\frac{2\pi m K_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Ievietojot to (3.1), iegūsim nedeģenerācijas kritērija izteiksmi:

$$n \left(\frac{h^2}{2\pi m K_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \ll 1. \quad (3.15)$$

Izskaitļosim to elektronu gāzei metālā. Elektronu gāzei metālos $n \approx 5 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$, $m \approx 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$. Pie tādām n un m vērtībām elektronu gāze būs nedeģenerēta tikai pie temperatūrām, kas ir augstākas par 10^5 K . Līdz ar to, reālajos apstākļos elektronu gāze vienmēr ir deģenerēta, tāpēc to ir jāapraksta ar Fermi - Diraka statistiku.

No (3.15) redzams, ka nedeģenerēto stāvokli var iegūt ne tikai paaugstinot temperatūru, bet arī samazinot koncentrāciju. Ja $n \gg 10^{22} \text{ m}^{-3}$, tad elektroniem (3.15) kreisā puse ir $\gg 10^{-3}$ un elektronu gāze kļūst nedeģenerēta. Tādu un pat vēl mazāku elektronu koncentrāciju var novērot pusvadītājos. Tādus pusvadītājus sauc par nedeģenerētiem.

Tagad atradīsim sadalījuma funkciju $f(E)$. Šīs funkcijas izskats ir atkarīgs no tā, vai gāze ir deģenerēta vai nedeģenerēta, bet deģenerētai gāzei - no kādām daļiņām tā sastāv: no fermioniem vai bozoniem.

Nedeģenerētās gāzes gadījumā:

$$f(E) = e^{\frac{\mu}{K_B T}} e^{-\frac{E}{K_B T}}, \quad (3.16)$$

kur μ - ķīmiskais potenciāls. Izskaitļojumi rāda, ka nedeģenerētai gāzei μ vienāds ar

$$\mu = K_B T \ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m K_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right]. \quad (3.17)$$

Ievietojot šo izteiksmi formulā (3.16), atradīsim:

$$f_M(E) = \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m K_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E}{K_B T}}. \quad (3.18)$$

Atgādināsim, ka $f_M(E)dE$ izsaka varbūtību, ka daļiņas ieņems stāvokļus ar enerģijām, kuras ir intervālā starp E un $E + dE$. To sauc par Maksvela - Bolcmaņa sadalījuma funkciju.

3.2. Elektronu kvantu statistika metālos. Fermī enerģija

Fermionu deģenerētās gāzes sadalījuma funkciju pirmo reizi ieguva Fermī un Diraks, un tās izskats ir

$$f_F(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{K_B T}} + 1}, \quad (3.19)$$

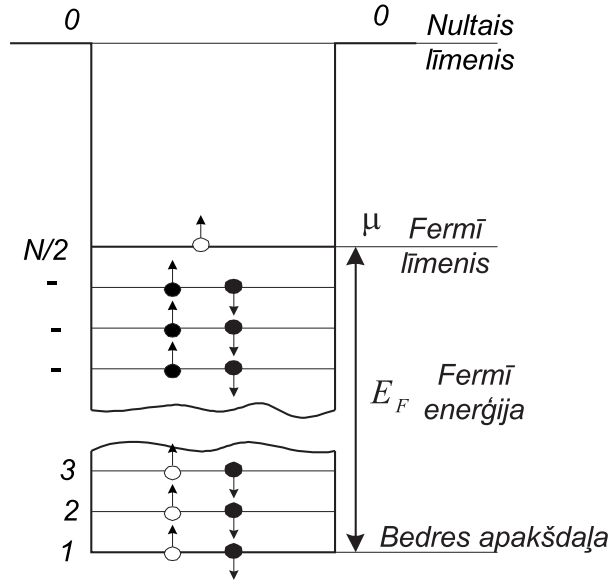
kur μ - fermionu deģenerētās gāzes ķīmiskais potenciāls, kuru biežāk sauc par Fermī līmeni. No (3.19) redzams, ka, ja $E = \mu$, tad sadalījuma funkcija ir $f_F(E) = 1/2$, jebkuras temperatūras gadījumā $T \neq 0K$. Tāpēc no statistikas viedokļa, Fermī līmenis ir enerģētisks līmenis, kura aizpildīšanās varbūtība ir $1/2$. Funkciju (3.19) sauc par Fermī - Diraka funkciju.

Uzskatāmāku priekšstatu par funkciju var iegūt, apskatot deģenerētu elektronu gāzi metālos pie absolūtās nulles.

Brīvajiem elektroniem metāls ir savdabīga potenciālā bedre. Lai izklūtu no bedres, ir jāpastrādā darbs saites spēku pārvarēšanai, kuri notur elektronus metālos. 3.3. zīm. ir attēlota tādas potenciālās bedres shēma. Horizontālās līnijas attēlo enerģētiskos līmeņus, kurus var ieņemt elektroni. Saskaņā ar Pauli principu, katrā tādā līmenī var atrasties divi elektroni ar pretēji vērstiem spiniem. Ja elektronu gāze satur N elektronus, tad pēdējais aizņemtais līmenis būs $N/2$. Šo līmeni arī sauc par deģenerētās elektronu gāzes Fermī līmeni. Tas atbilst maksimālajai kinētiskajai enerģijai E_F - Fermī enerģijai, kura var būt elektronam metālā pie absolūtās nulles.

Tādā veidā, absolūtās nulles gadījumā, visus līmeņus ar enerģijām $E < E_F$ ieņem elektroni, bet līmeņi ar enerģijām $E > E_F$ ir brīvi. Citiem vārdiem, pie $T = 0K$ varbūtība, ka elektroni ieņems līmeņus ar enerģiju $E \leq E_F$, ir vienāda ar 1, bet līmeņu ar enerģijām $E > E_F$ aizpildīšanas varbūtība ir nulle:

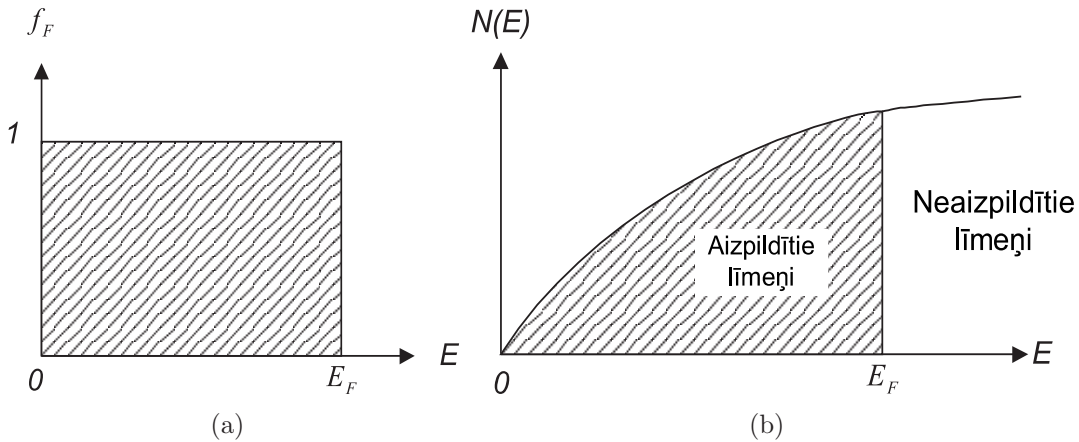
$$f_F(E) = \begin{cases} 1, & \text{ja } E \leq E_F, \\ 0, & \text{ja } E > E_F. \end{cases} \quad (3.20)$$



3.3. zīmējums. Potenciālā bedre elektroniem metālā.

Lai iegūtu šādu rezultātu no (3.19), ir nepieciešams pieņemt, ka pie $T = 0\text{K}$, elektronu gāzes ķīmiskais potenciāls, kas skaitīts no potenciālās bedres dibena, ir vienāds ar Fermī enerģiju E_F :

$$\mu = E_F. \quad (3.21)$$



3.4. zīmējums. (a)- Fermī - Diraka sadalījuma funkcijas atkarība no enerģijas absolūtās nulles gadījumā; (b) - funkcijas $N(E)$ atkarība enerģijas.

3.4.(a) zīmējumā ir parādīts Fermī - Diraka sadalījuma funkcijas grafiks absolūtās nulles gadījumā. Grafīkam ir kāpņveida izskats, kāds veidojas pie $E = E_F$.

Pareizinot (3.20) ar stāvokļu skaitu (3.13) $g(E)dE$, iegūsim pilno Fermī - Diraka sadalījuma funkciju pie absolūtās nulles:

$$N(E) dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE, \quad (3.22)$$

jo enerģiju intervālā no E līdz E_F ir $f_F(E) = 1$. Funkcijas $N(E)$ grafiks ir parādīts 3.4(b) zīm.; iesvītrotais apgabals ir aizpildītie līmeņi.

Integrējot izteiksmi (3.22) robežās no 0 līdz E_F , iegūsim:

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

No šejienes ir viegli izteikt Fermī enerģiju:

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (3.23)$$

kur $n = N/V$ - elektronu gāzes koncentrācija metālos.

Zinot elektronu sadalījuma funkciju pēc enerģijām, var noteikt vidējo elektronu enerģiju pie absolūtās nulles $\langle E_0 \rangle$. Aprēķini rāda, ka

$$\langle E_0 \rangle = \frac{3}{5} E_F = \frac{3h^2}{10m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (3.24)$$

Un beidzot, zinot E_F un $\langle E_0 \rangle$, var izskaitļot brīvo elektrona maksimālo V_F un vidējo kvadrātisko V_{kv} kustības ātrumu metālos absolūtās nulles gadījumā:

$$V_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m}}; \quad V_{kv} = \sqrt{\frac{2\langle E_0 \rangle}{m}}. \quad (3.25)$$

Jāatzīmē, ka Fermī enerģija ir brīvo elektronu virzes kustības kinētiskā enerģija, nevis to siltumkustības enerģija. Tai piemīt kvantu daba un tā parādās elektrona (Fermī daļiņas) specifisko īpašību dēļ.

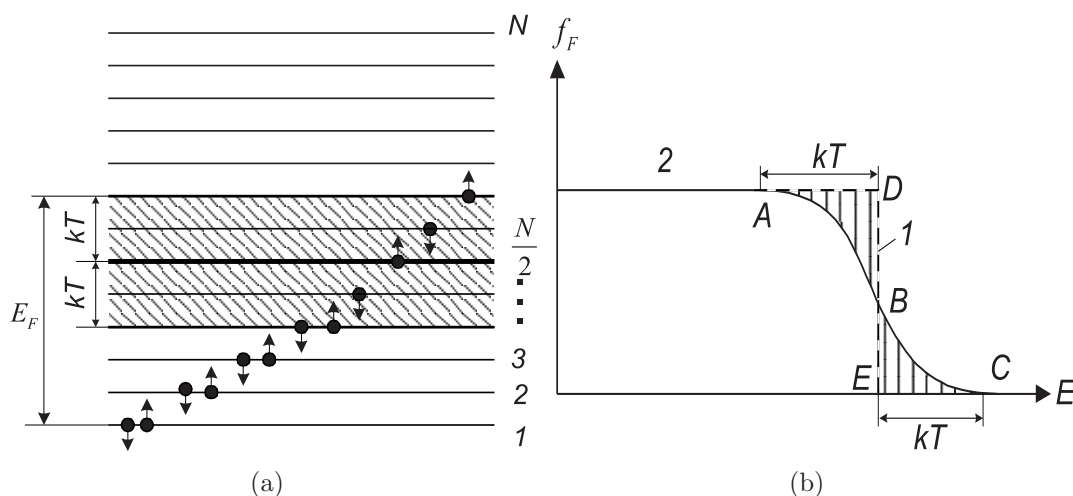
Pieaugot temperatūrai, elektroni tiek pakļauti siltumierosinājumam un pāriet uz augstāku enerģētisko līmeni, kā rezultātā mainās to sadalījuma raksturs pa līmeņiem. Tomēr temperatūru intervālā, kurā siltumkustības enerģija kT kļūst daudz mazāka par Fermī enerģiju $E = E_F$, siltumierosināšana var ietekmēt šaurās joslas kT elektronus, kura izvietojas tieši Fermī līmeņa tuvumā (3.5.(a) zīm. ierosinātie līmeņi ir iesvītroti). Dziļāko līmeņu elektroni paliek praktiski neskarti.

Siltumierosināšanas rezultātā daļa elektronu ar enerģiju, kas ir mazāka par E_F , pāriet uz līmeni ar enerģiju, lielāku par E_F , un tādējādi, veidojas jauns to sadalījums. 3.5.(b) zīm. redzams, ka temperatūras pieaugšana izsauc sadalījuma izplūšanu kT “dziļumā” un sadalījuma “astes” BC parādīšanos, kura izvietojas pa labi no E_F . Jo lielāka temperatūra, jo būtiskākām izmaiņām tiek pakļauta sadalījuma funkcija. 3.5.(b) zīm. iesvītrotais laukums ir proporcionāls elektronu skaitam, kuri pāriet no līmeņa ar enerģiju $E < E_F$ (ADB laukums) uz līmeņiem, kas ir izvietojušies augstāk par E_F (BEC laukums). Šie laukumi ir vienādi, jo izsaka vienu un to pašu elektronu skaitu.

Aptuvenus šo elektronu skaita novērtējums parāda, ka

$$\Delta N \approx \frac{K_B T}{2E_F} N. \quad (3.26)$$

Pie istabas temperatūrām $kT \approx 0.025\text{eV}$; $E_F = (3 \div 10)\text{eV}$, tāpēc $\frac{\Delta N}{N} < 1\%$; pie $T = 10^3\text{K}$ - $\frac{\Delta N}{N} \approx (1 \div 2)\%$. Tādējādi, visā temperatūru diapazonā, kurā elektronu gāze metālos ir deģenerēta, tās sadalījums maz atšķiras no sadalījuma absolūtās nulles gadījumā.



3.5. zīmējums. (a) - Elektronu skaita enerģētiskajos līmeņos atkarība no temperatūras samazināšanās. Iesvītrotais laukums raksturo ierosinātus stāvokļus; (b) - f_F pie $T = 0K$ (1. līnija) un $T > 0K$ (2. līnija) atkarība no enerģijas.

3.3. Vadāmības teorijas

1897. gadā Tomsons atklāja elektronu, bet 1900. gadā Drudē izstrādāja savu elektronu siltumvadāmības teoriju metālos. Pie tam viņš apskatīja elektronus metālā kā elektronu gāzi un pielietoja gāzu molekulāri - kinētisko teoriju. Teorijas pamatpieņēmumi.

1. Intervālā starp sadursmēm netiek ņemta vērā elektronu mijiedarbība ar citiem elektroniem un joniem. Citiem vārdiem sakot, tiek pieņemts, ka, ja nav ārējo elektromagnētisko lauku, katrs elektrons atrodas taisnvirziena kustībā ar konstantu ātrumu. Ja eksistē ārējie lauki, elektrons kustas saskaņā ar Ņūtona likumiem; pie tam ņem vērā tikai šo lauku ietekmi, neapskatot citu elektronu un jonu radītos sarežģītus laukus. Tuvinājums, kādā netiek ņemta vērā elektrona - elektrona mijiedarbība intervālā starp sadursmēm, tiek saukts par neatkarīgo elektronu tuvinājumu, bet tuvinājums, kurā neņem vērā elektrona - jona mijiedarbību, sauc par brīvo elektronu tuvinājumu.
2. Drude teorijā, tāpat kā molekulāri kinētiskajā teorijā, sadursme ir acumirkļīgs notikums, kas pēkšņi izmaina elektronu ātrumu.
3. Pieņem, ka laika vienībā elektrons saduras (t.i., notiek pēkšņa ātruma izmaiņa) ar varbūtību, kas ir vienāda ar $1/t$. Tiek uzskatīts, ka varbūtība tam, ka elektrons sadursies bezgalīgi mazā laika intervālā dt , ir vienāda ar dt/t . Laiku t sauc par brīvā ceļa laiku.
4. Pieņem, ka tikai pateicoties sadursmēm, elektrons nonāk siltumlīdzsvara stāvoklī kopā ar savu "apkārtni", pie tam elektrona ātrums uzreiz pēc sadursmes nav saistīts ar ātrumu līdz sadursmei. Tā virzienam ir gadījuma raksturs, bet vērtība atbilst tādai temperatūrai, kas ir noteicošā šajā apgabalā, kurā notika sadursme.

Pie tam Drude neņēma vērā elektronu sadalījumu pa ātrumiem. 1905. gadā Lorencs pielietoja elektronu Maksvela sadalījumu pēc siltumātrumiem.

Pamatojoties uz norādītajiem pieņēmumiem, izdevās izskaidrot Oma, Džoula - Lenca, Videmana - Franca likumus, siltumvadāmības koeficienta attiecību pret īpatnējo elektrovadāmību u.c. Taču, dažos gadījumos Drude teorijas ietvaros neizdevās iegūt sakritību ar eksperimentālajiem datiem. Tā, saskaņā ar Drude teoriju, īpatnējā elektrovadāmība σ ir apgriezti proporcionāla $\sqrt{T}$, bet tai pašā laikā eksperiments parāda to, ka pie zemām temperatūrām Videmana - Franca likums neizpildās. Klasiskā elektronu teorija nevar izskaidrot tādu faktu, ka dažiem metāliem Holla konstante ir pozitīva u.c.

1928. gadā Zommerfelds saglabāja brīvo elektronu modeli, bet klasiskās statistikas vietā, pielietoja tam Fermī - Diraka statistiku. Kvantu statistika ņem vērā, ka daļiņa, kas atrodas ierobežotā kustībā (kustībā, kas notiek ierobežotā telpas apgabalā) dotajā spēka laukā, var atrasties tikai noteiktos kvantu stāvokļos, kuriem atbilst noteiktas enerģijas vērtības. Šādas vērtības sauc par sistēmas enerģētiskajām vērtībām.

Elektronu ierobežotas kustības gadījumā, enerģētiskie līmeņi ir diskrēti, t.i., atrodas viens no otra noteiktā, galīga izmēra intervālā. Ideālās elektronu gāzes modelī kustības robežas un kvantēšanu nosaka lielie atgrūšanās spēki, kas iedarbojas uz elektroniem ķermeņa virsmas tuvumā.

Fermī - Diraka statistikas gadījumā, kurai pakļaujas elektronu gāze, ņem vērā Pauli principu, saskaņā ar kuru, katrā kvantu stāvoklī var atrasties ne vairāk kā viens elektrons. Pauli principa ievērošana nozīmē to, ka pat starp "brīvajiem" elektroniem notiek kaut kāda mijiedarbība. Tomēr šo mijiedarbību neizsauc spēks, tas ir vienīgi kvantu efekts.

Zommerfelda teorijai piemīt arī būtiski trūkumi. Šajā teorijā elektronu mijiedarbība ar joniem, tāpat kā klasiskajā teorijā, tiek ņemta vērā formāli ieviestās elektrona brīvā ceļa vidējā garuma $\bar{\lambda} = \langle \ell \rangle$ veidā. Kāda ir $\langle \ell \rangle$ izcelšanās, un kā tā ir atkarīga no temperatūras - uz šiem jautājumiem teorija atbildi nedod.

Lai iegūtu atbildi, šos jautājumus ir jāapskata pamatojoties uz Šrēdingeru elektronu kustības vienādojumiem, ņemot vērā tā mijiedarbību ar kristālrežģi. Bloha elektroni ideālā periodiskā potenciālā var uzturēt elektrisko strāvu pat tad, ja nav to izsaucošā elektriskā lauka, t.i., vadāmība, kuru tie noteica, $\sigma \rightarrow \infty$. Galīgo metālu vadāmību nosaka tikai novirzes no ideālā periodiskuma jonu režģī. Visbiežāk tādas novirzes ir saistītas ar jonu siltumkustību attiecībā pret to līdzsvara stāvokli.

Ar režģa svārstībām saistītās pretestības kvantitatīvās atkarības no temperatūras teorija pamatojas uz to, ka cieto jonu sistēmas periodiskais potenciāls

$$U_{per}(\vec{r}) = \sum_{\vec{T}} V(\vec{r} - \vec{T}) \quad (3.27)$$

ir tikai tuvinājums īstajam neperiodiskajam potenciālam:

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{T}} V\left[\left(\vec{r} - \vec{T}\right) - U(\vec{T})\right] = U_{per}(\vec{r}) - \sum_{\vec{T}} U(\vec{T}) \cdot \nabla V(\vec{r} - \vec{T}) + \dots \quad (3.28)$$

Starpību starp šīm divām izteiksmēm var uzskatīt par **perturbācijām**, kuras iedarbojas uz periodiska hamiltoniāna stacionārajiem vienelektrona līmeņiem, izraisot pārejas starp Bloha līmeņiem, tādējādi izsaucot strāvas izzušanu.

Kā parasti pāreju, kuras izraisa svārstības, gadījumos, tās var apskatīt kā procesus, kuros elektrons absorbē vai izstaro fononu (fononus), līdz ar to izmainot savu enerģiju par fonona enerģijas vērtību un viļņa vektoru (ar precizitāti līdz patvaļīgam inversā režģa

vektoram) par fonona viļņu vektora lielumu. Skaidrojot režģa ietekmi uz metāla pretestību vienkāršākajās teorijās pieņem, ka izkliedi, galvenokārt, ietekmē procesi, kuros elektrons izstaro (vai absorbē) vienu fononu.

Ja elektronu pāreja notiek no līmeņa ar viļņa vektoru $\vec{k}$ un enerģiju $E_{\vec{k}}$ uz līmeni ar viļņa vektoru $\vec{k}'$ un enerģiju $E_{\vec{k}'}$, tad no enerģijas un kvaziimpulsa nezūdamības likumiem seko, ka fonona enerģijai, kurš piedalās procesā, ir jāapmierina izteiksmi:

$$E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}'} \pm \hbar\omega(\vec{k} - \vec{k}'), \quad (3.29)$$

kur plus (mīnus) zīme atbilst fonona izstarošanai (absorbēšanai).

Augstu temperatūru gadījumā, fononu skaits katrā normālā modā tiek noteikts pēc formulas (1.65). Tāpēc pilnais fononu skaits uz atļauto viļņu vektoru virsmas, kas atbild par dotā elektrona izkliedi, ir tieši proporcionāls temperatūrai T .

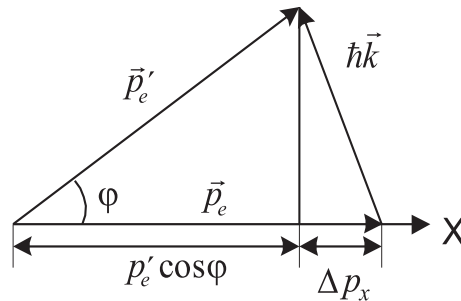
Tā kā izkliedētāju skaits aug lineāri līdz ar temperatūru, tāpat arī “uzvedas” arī īpatnējā pretestība:

$$\rho \sim T \quad (T \gg \rho). \quad (3.30)$$

Zemo temperatūru apgabalā no elektronu kvantu teorijas metālos var secināt, ka īpatnējā pretestība ρ ir proporcionāla T^5 . Šo rezultātu kvalitatīvi var izskaidrot sekojošā veidā. Zemo temperatūru apgabalā elektronu sadursme ar vienu fononu nevar būtiski izmainīt elektrona impulsu. Tāpēc brīvā ceļa vidējā garuma $\langle \ell \rangle$ vietā ir nepieciešams apskatīt brīvā ceļa transportgarumu:

$$L \sim \frac{n_{sad}}{n_f}, \quad (3.31)$$

kur n_f - fononu koncentrācija, n_{sad} - sadursmju skaits, kuri var būtiski izmainīt elektrona impulsu. Acīmredzami, ka $L = n_{sad} \langle \ell \rangle$. Zemo temperatūru apgabalā, kurā režģa enerģija $E_r \sim T^4$, bet fonona enerģija $\hbar\omega \approx K_B T$, fononu koncentrācijai ir jābūt proporcionālai T^3 . n_{sad} lielumu var novērtēt sekojošā veidā. 3.6. zīm. shematiski ir parādīta impulsa izmaiņa, kuru nosaka fonona ar impulsu $\hbar\vec{k}$ absorbcija. Zemo temperatūru ap-



3.6. zīmējums. Elektrona impulsa izmaiņa pēc elastīgas sadursmes ar fononu.

gabalā $\hbar\vec{k} \ll \vec{p}_e$. Tāpēc, pēc fonona absorbēšanas, elektrona impulss $\vec{p}_e$ maz atšķiras pēc moduļa un virziena no elektrona impulsa $\vec{p}_e$ pirms fonona absorbcijas. Elektrona impulsa izmaiņa sākotnējās kustības virzienā, tiek noteikta pēc vienādības:

$$\Delta p_x = p_e - p_e \cos \varphi = p_e (1 - \cos \varphi) \cong p_e \frac{\varphi^2}{2}, \quad (3.32)$$

kur pie mazā izkliedes leņķa φ izmantots tuvinājums $\cos \varphi \sim 1 - \frac{\varphi^2}{2}$. No citas puses, kā redzams no 3.6. zīm.:

$$\hbar k \approx p_e \varphi. \quad (3.33)$$

Izslēdzot φ , iegūst

$$\Delta p_x = \frac{(\hbar k)^2}{2p_e}. \quad (3.34)$$

No šejienes ir redzams, ka, lai sadursme ar fononu būtiski izmainītu vadāmības elektrona impulsu par lielumu p_e , ir nepieciešama vesela sadursmju virkne, kuru skaitu n_{sad} var noteikt izmantojot nosacījumu:

$$n_{sad} \Delta p_x \sim p_e \quad (3.35)$$

$$n_{sad} \sim \left(\frac{Up_e}{K_B T} \right)^2, \quad (3.36)$$

kur U - vidējais siltumkustības ātrums,

$$U = \sqrt{\frac{8K_B T}{\pi m}}, \quad (3.37)$$

$$L \sim \frac{1}{T^5}.$$

Tātad augsto temperatūru apgabalā:

$$\rho = aT, \quad \sigma = \frac{A}{T}, \quad (3.38)$$

bet zemo temperatūru apgabalā:

$$\rho = bT^5, \quad \sigma = \frac{B}{T^5}. \quad (3.39)$$

Šeit a, b, A, B - proporcionalitātes koeficienti, kurus var aprēķināt, veicot kvantu mehāniskos izskaitļojumus.

3.4. Metālu elektronu kustības vienādojums. Relaksācijas laiks. Vidējais ceļa garums

Ja kristālam nav pielikts elektriskais lauks, tad elektronu siltumkustības ātrumi $\bar{u}_i$ ir vērsti visdažādākajos virzienos. Ārējā elektriskā lauka ietekmē elektroni iegūst paātrinājumus $\vec{a}$ un ātrumus $\vec{v}$, kas vērsti lauka virzienā:

$$\vec{a} = -\frac{e\vec{E}}{m^*} \quad \vec{v} = \vec{a}\tau, \quad (3.40)$$

kur $\vec{E}$ - pieliktā elektriskā lauka intensitāte;
 τ - elektrona paātrināšanas laiks.

Ja laiks τ būtu neierobežots, tad ātrums augtu, līdz sasniegtu maksimāli iespējamo vērtību $v_{\max} = c$, kur c ir gaismas ātrums vakuumā.

Ja kristāls būtu ideāls (bez defektiem) un atomi kristāla režģa mezglapunktos nekustētos, tad tiešām būtu tā. Bet ideālu kristālu nav. Reālā kristālā vienmēr ir dažādi defekti, un atomi izdara svārstības, kuru amplitūda aug ar temperatūras paaugstināšanos. Tāpēc elektrons paātrinās tikai samērā īsu laika sprīdī τ līdz sadursmei ar režģa jonu jeb kristāla defektu un vidēji līdz sadursmei noiet attālumu I_0 , ko sauc par vidējo brīvā ceļa garumu ($I_0 \approx 10^{-5}$ cm). Pēc tam elektrons paātrināšanos sāk no jauna. Pie augstām temperatūrām brīvā ceļa garumu galvenokārt ierobežo jonu siltumkustība, bet pie zemām - piemaisījumi un citi cietvielas defekti.

Sākumā pieņemsim, ka kristālā ir tikai viena tipa nesēji ar lādiņu e un koncentrāciju n . Strāvas blīvums ir

$$\vec{j} = \sum_j en_j \vec{v}_j. \quad (3.41)$$

Šeit n_j ir nesēju koncentrācija ar ātrumu $\vec{v}_j$. Apzīmēsim ar $\vec{u}$ strāvas nesēja siltumkustības ātrumu. Uz nesēju darbosies ārējais lauks ar spēku $\vec{F}_e = e\vec{E}$ un “berzes” spēks, kas proporcionāls strāvas nesēja orientētajam ātrumam $\vec{F}_b = -f(\vec{v} - \vec{u})$ (šeit f ir berzes koeficients). Uzrakstīsim kustības diferenciālvienādojumu:

$$m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = e\vec{E} - f(\vec{v} - \vec{u}). \quad (3.42)$$

Ja izslēgsim ārējo elektrisko lauku, tad

$$m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = -f(\vec{v} - \vec{u}). \quad (3.43)$$

vienādojuma (3.43) atrisinājums ir $-\frac{f}{m^*}t$,

$$\vec{v} = \vec{u} + (\vec{v}_0 - \vec{u})e \quad (3.44)$$

Šeit $\vec{v}_0$ ir strāvas nesēja ātrums lauka izslēgšanas brīdī. Laika sprīdī

$$\tau = \frac{m^*}{f} \quad (3.45)$$

sauc par relaksācijas laiku. Šajā laika sprīdī otrais loceklis (3.44) samazinās e reizes un $\vec{v} \approx \vec{u}$. Ja ir ieslēgts elektriskais lauks, tad ātrums aug līdz $\vec{v} = \vec{v}_{\max}$. Šajā brīdī $\frac{d\vec{v}}{dt} = 0$ un no (3.42) seko

$$eE - (\vec{v} - \vec{u})f = 0. \quad (3.46)$$

No kurienes

$$\vec{v} = \vec{u} + \frac{e}{f}\vec{E} = \vec{u} + \frac{\tau e}{m^*}\vec{E} = \vec{u} + \Delta\vec{v},$$

kur

$$\Delta\vec{v} = \frac{e\tau}{m^*}\vec{E} = b\vec{E} \quad (3.47)$$

un $b = \frac{e\tau}{m^*}$ - nesēja kustīgums, un $\Delta\vec{v}$ - nesēju orientētās kustības ātrums lauka virzienā.

Apreķināsim strāvas blīvumu, ievietojot $\vec{v}_j = \vec{u}_j + \frac{\tau_j e}{m^*}\vec{E}$ izteiksmē (3.41):

$$\vec{j} = \sum_j en_j \vec{u}_j + \frac{e}{m^*} \sum_j \tau_j n_j \vec{E}. \quad (3.48)$$

Pirmais loceklis izteiksmē (3.48) vienāds ar nulli, siltumkustības ātrumu haotiskās orientācijas dēļ. Otrajā locekli ievēdīsim vidējo relaksācijas laiku:

$$\vec{\tau} = \frac{\sum_j \tau_j n_j}{\sum_j n_j} = \frac{\sum_j \tau_j n_j}{n}, \quad (3.49)$$

$$\vec{j} = \frac{e^2 \bar{\tau} n}{m^*} \vec{E} = \sigma \vec{E}, \quad (3.50)$$

no kurienes

$$\sigma = \frac{e^2 \bar{\tau} n}{m^*}. \quad (3.51)$$

No izteiksmes (3.51) redzam, ka strāvas virziens nav atkarīgs no lādiņa nesēja zīmes; σ ir atkarīgs no lādiņa kvadrāta, elektroni un caurumi dod viena un tā pašā virziena strāvu. Ja ir vairāku veidu nesēji, tad izteiksmes (3.51) vietā rakstām:

$$\sigma = \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}^2 \bar{\tau}_{\alpha} n_{\alpha}}{m_{\alpha}^*}. \quad (3.52)$$

Piemēram, ja strāvas nesēji pusvadītājā ir elektroni ar koncentrāciju n_p , tad

$$\lambda = e^2 \left(\frac{\bar{\tau}_n n_e}{m_n^*} + \frac{\bar{\tau}_p n_p}{m_p^*} \right). \quad (3.53)$$

Vidējo relaksācijas laiku $\bar{\tau}$ bieži izsaka ar nesēja vidējo ceļa garumu kristālā:

$$\bar{\tau} \cdot v = \bar{\lambda}. \quad (3.54)$$

Bet, tā kā $\vec{v} = \vec{u} + \Delta\vec{v}$ un $|\Delta\vec{v}| \ll \bar{u}$, tad izteiksmē (3.54) v var aizstāt ar vidējo siltumkustības ātrumu u , un $\bar{\tau} = \frac{\lambda}{u}$. Tad

$$\sigma = \frac{e^2 \bar{\tau} n}{m^*} = \frac{e^2 \lambda}{m^* u}. \quad (3.55)$$

Arī nesēju kustīgumu var izteikt ar u un λ :

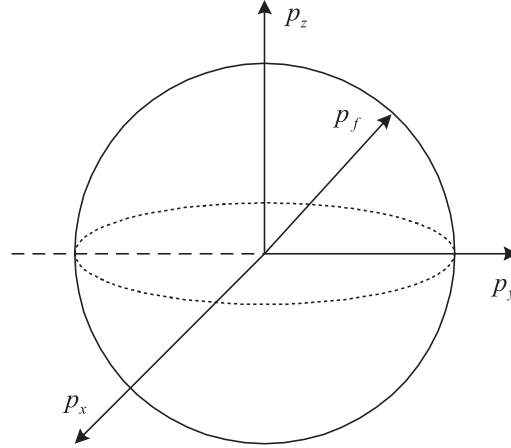
$$b = \frac{e \bar{\tau}}{m^*} = \frac{e \lambda}{m^* u}. \quad (3.56)$$

Precīzāk σ var aprēķināt sekojoši:

$$\sigma = \frac{e^2 \bar{\tau} n}{m^*} = \frac{e^2 n \bar{v} \tau}{m^* \bar{u}} = \frac{e^2 n \lambda}{p_F}. \quad (3.57)$$

Šeit $p_F = m^* \bar{v}$ - Fermī impulss, kas atbilst Fermī enerģijai pie $T = 0$.

Ja kristāla īpašības ir tādas, ka m^* ir skalārs lielums, nevis tenzors, tad Fermī virsma būs lode. Kā zināms, par Fermī virsmu sauc funkciju $E_{F/T} = 0 = E_0 = \frac{p_0^2}{2m^*}$, kas attēlota impulsu telpā. Šāda Fermī virsma (3.7. zīm.) ir, piemēram, kristālos Na, K, Rb, Cs (Li ir citāda Fermī virsma). Elektroni, kuriem pie $T = 0, E = E_0$, attēloti ar punktiem uz lodes virsmas. Visi pārējie elektroni atrodas sfēras iekšienē.



3.7. zīmējums. Fermi virsma Na, K, Rb, un Cs kristāliem.

3.5. Elektrona kvazimpulss kristāliskajā režģī

No Bloha viļņa funkcijas

$$\psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (3.58)$$

un cikliskajiem robežnosacījumiem seko, ka elektrona viļņa vektors režģī, tāpat kā arī elektrona viļņa vektors, kurš ir ietverts galīgu izmēru potenciālā bedrē, ir diskrets lielums. Elektrona kvaziimpulsa komponentes režģī var būt pierakstītas sekojošā veidā:

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x}n_x, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L_y}n_y, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L_z}n_z, \quad (3.59)$$

kur L_x, L_y, L_z - kristāla izmēri, $n_x, n_y, n_z - 0; \pm 1; \pm 2 \dots$

Fizikālo lielumu saglabāšanas likumi ir saistīti ar simetrijas un laika noteiktām telpas īpašībām. Tā, daļiņas impulsa $\vec{p}$ saglabāšanās likums brīvajā telpā ir tās homogenitātes sekas. Brīvās telpas izotropija noved pie kustības daudzuma momenta $\vec{M} = \vec{p} \times \vec{r}$ saglabāšanās likuma. No laika homogenitātes izriet enerģijas saglabāšanās likums. Kristāliskajā režģī nav telpas homogenitātes, jo potenciālā enerģija $V(\vec{r})$ ir koordinātu periodiskā funkcija $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{T})$. Ar šo potenciāla īpašību ir saistīts jauns kristāliskā režģa telpas simetrijas veids, kuru sauc par translācijas invariantitāti. Noskaidrosim, kāds saglabāšanās likums atbilst šādam simetrijas veidam.

No kvantu mehānikas ir zināms, ka kāds neatkarīgs lielums f saglabā laikā, ja tam atbilstošais operators komutē ar Hamiltona operatoru. Tā, piemēram, impulsa $\vec{p}$ pašvērtības saglabāšanās elektrona kustības gadījumā brīvajā telpā ir sekas tam, ka impulsa operators $p = -i\hbar\nabla$ komutē ar Hamiltona operatoru H , kas šajā gadījumā sakrīt ar kinētiskās enerģijas operatoru

$$\vec{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2. \quad (3.60)$$

Tajā pašā laikā impulsa operators nekomutē ar hamiltoniānu

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}). \quad (3.61)$$

Tādā veidā, kustoties elektronam režģī, tā impulss nesaglabājas (nav kustības integrālis režģa potenciālajā laukā).

Var parādīt, ka kristāliskā režģa telpas translācijas invariances sekas ir elektrona kvaziimpulsa $\vec{p}$ saglabāšanās likums. Kvaziimpulsa saglabāšanās potenciāla periodiskā režģa laukā norāda uz to, ka kvaziimpulss var mainīties attiecībā pret kristālu tikai ārējo spēku ietekmē, kura potenciālam nepiemīt režģa periodiskums:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}_{ar}. \quad (3.62)$$

Vienādojums norāda uz to principiālo kvaziimpulsa atšķirību no parastā elektrona impulsa, kura izmaiņu nosaka ārējo un iekšējo spēku (periodisko, ar režģa periodu) summu. Svarīgs ir tas, ka kvaziimpulss, atšķirībā no brīvā elektrona impulsa, ir noteikts neviennozīmīgi, bet tikai ar precizitāti līdz vektoram, kurš ir vektora $(2\pi/a_1^2)\vec{a}_1$ daudzkārtņis. Tādā veidā, kvaziimpulsi $\vec{p}$ un $\vec{p} \pm n_1(2\pi/a_1^2)\vec{a}_1$ fizikāli ir ekvivalenti, t.i., atbilst vienam un tam pašam elektrona fizikālajam stāvoklim.

Pie nosacījuma $n_i\lambda_D = 2a_i$, kur n_i - vesels skaitlis, λ_D - Debroļi viļņa garums, elektrona vilnis nevar izplatīties režģī. Pilnās atstarošanās nosacījums sakrīt ar zināmo Vulfa - Brega sakarību elektromagnētisko viļņu difrakcijai kristālos. Ja to pierakstīt elektrona viļņu vektoram $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$, tad mēs iegūsim vienādojumu, kas nosaka Briljuena zonas robežu $\vec{k}$ - telpā:

$$\frac{(\vec{k} \cdot \vec{a}_i)}{a_i} = \pm \frac{\pi}{a_i} n_i. \quad (3.63)$$

Tādā veidā, Briljuena zonu robežas atbilst tādām elektrona viļņu vektora (vai kvaziimpulsa) vērtībām, pie kurām elektronu vilnis nevar izplatīties režģī. Pietuvojoties Briljuena zonu robežai, režģis arvien vairāk bremzē skrejošo elektronu vilni, līdz tas kļūst par stāvvilni pie robežvērtībām $\vec{k}$, bet viļņa grupas ātruma komponente $|v_{gr}|_n = \left(\frac{\partial E}{\partial p}\right)_n$, kura ir Briljuena zonas robežas normāle, ir vienāda ar nulli.

Tas noved pie tā, ka enerģētiskās virsmas $E(p) = \text{const}$ nevar pieskarties Briljuena zonas robežām un tām ir jāšķērso normāles virzienā attiecībā pret robežu. Citiem vārdiem, normāle pret izoenerģētisko virsmu sakrīt pēc virziena ar elektrona ātrumu:

$$v_{gr} = \text{grad}_p E.$$

3.6. Fermī virsma

Kvantu mehānikā impulsam $\vec{p}$ atbilst operators $\hat{p} = -i\hbar\nabla$. Ja ar šo operatoru iedarboties uz viļņa funkciju:

$$\Psi_k(\vec{r}) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})},$$

tad iegūsim

$$\hat{p}\Psi_k(\vec{r}) = -i\hbar\nabla\Psi_k(\vec{r}) = \hbar\vec{k}\Psi_k(\vec{r}).$$

No šejienes seko, ka plakans vilnis $\Psi_k(\vec{r})$ ir impulsa operatora $\hat{p}$ īpašfunkcija, pie tam, impulsa operatora īpašvērtības ir $\hbar\vec{k}$. Daļiņas ātrumu stāvoklī ar viļņa vektoru $\vec{k}$, nosaka

attiecība:

$$\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}. \quad (3.64)$$

Sistēmas, kuras sastāv no N brīviem elektroniem, pamatstāvoklī ieņemtos līmeņus var aprakstīt ar punktiem sfēras iekšienē $\vec{k}$ - telpā. Enerģija, kas atbilst šīs sfēras virsmai, ir Fermī enerģija. Viļņu vektori, kas “atbalstās” pret lodes virsmu, ir vienādi ar k_F , bet pašu virsmu sauc par Fermī virsmu.

Tātad Fermī enerģijai:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_F^2. \quad (3.65)$$

Viļņu vektora $\vec{k}$ komponentes pieņem sekojošās vērtības: $k_x = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots$ un analogiskās vērtības pieņem arī k_y un k_z .

Citiem vārdiem, jebkurai vektora $\vec{k}$ komponentei ir sekojošais izskats $2\pi n/L$, kur n - vesels pozitīvs vai negatīvs skaitlis; L - kuba šķautne, ja elektroni ir ietverti noslēgtā tilpumā, kuram ir kuba forma. No nosacījuma k_x, k_y, k_z izriet, ka katram atļautajam viļņu vektoram, t.i., katram kvantu skaitļu k_x, k_y, k_z trijniekam atbilst tilpuma elements $\vec{k}$ - telpā ar vērtību $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$. Tāpēc sfērā ar tilpumu $\frac{4\pi k_F^3}{3}$ punktu skaits, kas apraksta atļautos stāvokļus, ir vienāds ar šūnu skaitu, kuru tilpums ir $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$, un tāpēc atļauto stāvokļu skaits ir

$$2 \frac{4\pi k_F^3}{3 \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 = N, \quad (3.66)$$

kur reizinātājs 2 ņem vērā divas pieļaujamās spina kvantu skaitļa S vērtības katrai atļautai $\vec{k}$ vērtībai. Pieņemsim, ka pilnais stāvokļu skaits ir vienāds ar elektronu skaitu N . Tātad

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.67)$$

Redzams, ka Fermī virsmas rādiuss k_F ir atkarīgs tikai no elektronu koncentrācijas n . Ievietojot (3.67) izteiksmē (3.65), iegūsim Fermī enerģiju:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}. \quad (3.68)$$

Šī sakarība nosaka Fermī enerģijas atkarību no elektronu koncentrācijas n un no to masas m^* .

No izteiksmes (3.64), Fermī virsmai atbilstošais elektronu ātrums:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*} = \frac{\hbar}{m^*} (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.69)$$

Fermī virsma atdala neieņemtos stāvokļus no ieņemtajiem pie absolūtās nulles. Lielāko daļu no metālu elektriskajām īpašībām nosaka tieši Fermī virsma, jo strāva rodas izmainoties ieņemto stāvokļu skaitam Fermī virsmas tuvumā.

3.7. Metālu elektronu kinētiskais vienādojums. Relaksācijas laiks

Fizikālās parādības, kuras nosaka elektronu kustība ārējo un iekšējo lauku vai temperatūras starpības ietekmē, sauc par kinētiskām parādībām. Pietiekami laba kinētisko parādību teorētisko pētījumu metode ir Bolcmaņa kinētiskā vienādojuma metode, kura apraksta daļiņas stāvokļa izmaiņu dažādu faktoru iedarbībā. Ideālā kristālā stāvoklis $\Psi_{\vec{K}}(\vec{r})$ paliek nemainīgs pēc patikas ilgā laikā. Līdz ar to elektronu sadalījuma funkcija $f(\vec{r}, \vec{k})$ pa stāvokļiem arī paliks nemainīga. Ja uz elektronu sistēmu ideālā kristālā iedarboties ar ārējo spēka lauku $V(\vec{r})$, tad katra elektrona stāvokli Briljuena zonā var aprakstīt ar sekojošo vienādojumu:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\nabla V; \quad \frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \vec{F}_a \quad (3.70)$$

vai

$$P(t) = \int_0^t \vec{F}_a(\zeta) d\zeta + \vec{P}_0(0). \quad (3.71)$$

Kvaziimpulsa izmaiņa laikā t nav atkarīga no $\vec{P}_0$, bet to nosaka tikai spēka impulss:

$$\Delta \vec{P} = \vec{P}(t) - \vec{P}_0(0) = \int_0^t \vec{F}_a(\zeta) d\zeta. \quad (3.72)$$

Izteiksme (3.72) norāda, ka, ja kādā momentā $t = 0$ elektroni ieņēma stāvokli, kurus noteica funkcija $f(\vec{r}, \vec{k}) = f(\vec{r}, \frac{\vec{P}_0}{\hbar})$, tad laika momentā t , elektronu sadalījumu noteiks ar citu funkciju, kuras izskats ir

$$f\left[\vec{r}, \vec{k}(t) - \frac{1}{\hbar} \int_0^t \vec{F}_a(\zeta) d\zeta\right] = \tilde{f}(\vec{r}, \vec{k}). \quad (3.73)$$

Citiem vārdiem, ārējie (attiecībā pret periodisko lauku) spēki noved pie elektronu sadalījuma funkcijas izmaiņas. Pierakstīsim vienādojumu, kas nosaka sadalījuma funkcijas izmaiņu laikā, t.i. pierakstīsim tās pilno diferenciāli pēc laika:

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{k}, t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} + (\nabla_r f \cdot \vec{v}) + \frac{1}{\hbar} (\nabla_k f \cdot \vec{F}_a). \quad (3.74)$$

Mēs ņemām vērā izteiksmi (3.70) un to, ka $\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}$ - elektrona ātrums. Saskaņā ar Liuvila teorēmu par fāzu tilpuma nemainīgumu sistēmai kustoties gar fāzu trajektoriju vai ņemot vērā stāvokļu skaita saglabāšanos, varam pierakstīt

$$\frac{df}{dt} = 0 \quad (3.75)$$

vai

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = (\nabla_r f \cdot \vec{v}) + \left(\nabla_k f \cdot \frac{\vec{F}_a}{\hbar} \right). \quad (3.76)$$

Vienādojums (3.76) parāda, ka sadalījuma funkcijas izmaiņu laikā, katrā fāzu telpas punktā $(\vec{r}, \vec{k})$ nosaka daļiņu kustība parastā telpā un viļņu vektora telpā. Spēku $\vec{F}_a$ nosaka kā ārējie lauki, tā arī jebkuri ideālā režģa kropļojumi - vakances, piemaisījumu joni un atomi, režģa siltumkustība.

Vairumā praktiski svarīgos gadījumos ir nepieciešams zināt cietā ķermeņa “uzvedību” ārējo makroskopisko lauku iedarbības rezultātā. Tādā gadījumā visi spēki, kurus nosaka jebkuras lokālās režģa periodiskuma izmaiņas, ir iekšējie spēki dotajiem kristāliem, un tiem ir jābūt izdalītiem īpašu spēku klasē. Iedalīsim spēkus $\vec{F}_a$ divās klasēs: 1) spēki, kurus izsauc ārējie makroskopiskie lauki, tos apzīmēsim ar $\vec{F}$; 2) spēki, kurus nosaka lokālās režģa lauka periodiskuma izmaiņas, apzīmēsim ar $\vec{F}_D$. Ārējie spēki $\vec{F}$ izraisa daļiņu virzīto kustību kvaziimpulsa telpā un koordinātu telpā. Tiešām, katrai daļiņai:

$$\Delta \vec{P} = \int_0^t \vec{F}(\zeta) d\zeta = \vec{F}t. \quad (3.77)$$

Tieši tādu pašu izteiksmi var pierakstīt spēkam $\vec{F}_D$:

$$\Delta \vec{P} = \int_0^t \vec{F}_D(\zeta) d\zeta. \quad (3.78)$$

Bet katrā punktā $\vec{F}_D$ ir daudzu lokālo lauku rezultējošais spēks. Tāpēc nav iespējams ņemt vērā iekšējo spēku $\vec{F}_D$ ietekmi uz sadalījuma funkciju pamatojoties uz dinamiskajām likumsakarībām, tās ir nepieciešams aizvietot ar statistiskajām likumsakarībām. Ja ārējā lauka spēks $\vec{F}$ rada “lēnas” daļiņu stāvokļu izmaiņas, tad iekšējo lauku spēki $\vec{F}_D$ var radīt straujas stāvokļu izmaiņas mazā laika sprīdī, kad elektrons iziet mazu lokālā ierosinājuma apgabalu.

Tiešām, ja lokālo ierosinājumu iedarbības apgabala izmēri ir daži režģa periodi, t.i., ar kārtu 10^{-7} cm, bet daļiņas ātrums ir ap 10^7 cm/s (siltumātrums), tad mijiedarbība ar lokālo centru ilgs tikai 10^{-14} s. Tāda īslaicīga mijiedarbība noved pie būtiskas elektrona ātruma un kvaziimpulsa izmaiņas, kas ir līdzīga sitienam mehānikā, tāpēc to sauc par sadursmi. Sakarā ar to, ka sadursme izmaina daļiņu skaitu, kurām piemīt virzīta kustība, sadursmes procesus sauc arī par izkliedes procesiem. Lai aprakstītu ārējo un iekšējo spēku darbības raksturu, pārrakstīsim vienādojumu (3.76), ņemot vērā divu spēku $\vec{F}_D$ un $\vec{F}$ klases:

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = (\vec{v} \cdot \nabla_r f) + \frac{1}{\hbar} (\vec{F} \cdot \nabla_k f) + \frac{1}{\hbar} (\vec{F}_D \cdot \nabla_k f). \quad (3.79)$$

Apzīmēsim sadalījuma funkcijas izmaiņas, pateicoties daļiņu kustībai un ārējo spēku iedarbībai, ar $-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{lauka}$, tad:

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{lauka} = (\vec{v} \cdot \nabla_r f) + \frac{1}{\hbar} (\vec{F} \cdot \nabla_k f). \quad (3.80)$$

Šeit $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{lauka}$ sauc par Bolcmaņa lauka vienādojumu.

Apzīmēsim ar $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sad}$ sadalījuma funkcijas izmaiņas sadursmes rezultātā:

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sad} = \frac{1}{\hbar} (\vec{F}_D \cdot \nabla_k f). \quad (3.81)$$

Lielumu $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sad}$ sauc par sadursmju integrāli. Tādā veidā, sadalījuma funkcijas izmaiņa laikā ir attēlota divu locekļu veidā - lauka locekļa $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{lauka}$ un sadursmes integrāļa $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sad}$ veidā:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{lauka} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sad}. \quad (3.82)$$

Stacionārajam stāvoklim $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$, tad kinētiskais vienādojums ir :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{lauka} = - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sad}. \quad (3.83)$$

Redzams, ka stacionārajā stāvoklī sadalījuma funkcijas izmaiņas, kuras izsauc ārejie lauki un daļiņu kustība, kompensē lādiņnesēju sadursmes ar lokāliem režģa lauka periodiskuma traucējumiem. Ja $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{lauka} \neq - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sad}$, tad $\frac{\partial f}{\partial t} \neq 0$ un sadalījuma funkcija mainās laikā kādā no virzieniem, atkarībā no tā, kāds process ir noteicošais.

Kinētiskā vienādojuma vispārīgā atrisinājuma iegūšana ir ļoti sarežģīts uzdevums, kuru būtiski var vienkāršot tajā gadījumā, ja var ieviest tā saucamo relaksācijas laiku. Pieņemsim, ka kādā laika momentā $t = 0$ lauka loceklis kļūst vienāds ar nulli (lauks izslēdzas):

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{lauka} = 0. \quad (3.84)$$

No (3.82) seko, ka sadalījuma funkcija izmainās sadursmju iedarbības rezultātā:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sad}. \quad (3.85)$$

Lauka izslēgšanas momentā daļiņu sistēma atradās stacionārā nelīdzsvara stāvoklī. Pēc lauka izslēgšanas sadursmes procesiem sistēmā ir jāatjauno līdzsvara stāvoklis, kuru bija izjaukuši lauki. Vienkāršākais pieņēmums, kurš attiecināts uz relaksācijas procesu, ir tas, ka līdzsvara atjaunošanās ātrums ir proporcionāls novirzes lielumam $\left[f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k})\right]$ no līdzsvara:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sad} = - \frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k})}{\tau}. \quad (3.86)$$

Izteiksmē (3.86) f_0 ir sadalījuma funkcija līdzsvara stāvoklī, $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ - nelīdzsvara stāvoklī, kur $1/\tau$ - proporcionalitātes koeficients. Uzskatot τ par pozitīvu lielumu, mēs izteiksmi (3.86) ņemsim negatīvu. Tas nodrošina sistēmas atgriešanos līdzsvara stāvoklī. Vienādojums (3.86) ir atrisināms elementāri:

$$f(\vec{r}, \vec{k}, t) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) = \left[f(\vec{r}, \vec{k}, 0) - f_0(\vec{r}, \vec{k})\right] e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (3.87)$$

Lielums τ parāda, cik ātri atjaunojas līdzsvara stāvokli, kurus izjauca lauki, tāpēc to sauc par relaksācijas laiku.

Izmantojot relaksācijas laika jēdzienu, Bolcmaņa vienādojumu var pierakstīt relaksācijas laika tuvinājumā:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \vec{F} = \frac{f - f_0(n)}{\tau} \quad (3.88)$$

Bieži vien mēs interesēsimies par sistēmas laukiem un meklēsim tikai lineāro iedarbību uz tiem, tāpēc pierakstīsim sadalījuma funkciju:

$$f = f_0(\vec{n}) + f_1, \quad (3.89)$$

kur $f_0(\vec{n})$ - sadalījuma funkcijas līdzsvars, kuru izskaitļoja vidējam elektronu blīvumam (tā nav koordinātu funkcija), bet f_1 - novirze no līdzsvara. Šo izteiksmi var ievietot Bolcmaņa vienādojumā (3.88) un atstāt tikai pielikto lauku pirmās kārtas locekļus. Rezultātā iegūst linearizēto Bolcmaņa vienādojumu:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} \cdot \vec{F} + \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{v} = -\frac{f_1}{\tau} + \frac{\delta_n f_0}{\tau}, \quad (3.90)$$

kur starpību starp līdzsvara sadalījuma funkciju ar lokālo blīvumu $f_0(n)$ un līdzsvara sadalījuma funkciju ar sistēmas vidējo blīvumu $f_0(\vec{n})$ apzīmējām ar

$$\delta_n f_0 = f_0(n) - f_0(\vec{n}). \quad (3.91)$$

Rakstot linearizēto Bolcmaņa vienādojumu, šo locekli bieži vien neņem vērā. Tomēr, ja blīvums ir atkarīgs no koordinātas, ir svarīgi šo locekli ietvert.

Izmantosim linearizēto Bolcmaņa vienādojumu konkrētas īpašības izskaitļošanai. Apskatīsim vadāmību homogēnā elektriskā laukā, kura intensitātes vektors ir $\vec{\epsilon}$. Tad elektroniem pielikto spēku nosaka sekojoša izteiksme

$$\vec{F} = -e\vec{\epsilon}. \quad (3.92)$$

Mēs apskatīsim stacionāro stāvokli, tāpēc pirmais loceklis izteiksmē (3.90) pazūd. Bez tam, sadalījuma funkcija nav atkarīga no koordinātas, tātad trešais loceklis, tāpat kā loceklis $\delta_n f_0$, pārveidojas par nulli. Tāpēc iegūstam

$$\frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} \cdot \vec{F} = -\frac{f_1}{\tau}. \quad (3.93)$$

Ērtāk ir pārrakstīt šī vienādojuma kreiso pusi, izmantojot to, ka

$$\frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v}. \quad (3.94)$$

Tagad mēs uzreiz iegūstam sadalījuma funkcijas pirmās kārtas locekli:

$$f_1 = \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \vec{v} \cdot \vec{F} = \pm e\tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \vec{v} \cdot \vec{\epsilon}, \quad (3.95)$$

kur pirmā zīme atbilst elektroniem, otrā - caurumiem.

Varam tieši atrast plūstošo strāvu, summējot katra aizņemtā stāvokļa ieguldījumus. Līdzsvara sadalījuma funkcija nedod nekādu strāvu, tāpēc izskaitļojumos var ņemt pirmās kārtas labojumu. Tad

$$\vec{j} = \frac{2}{h^3} \int d^3p f_1(\pm e) \vec{v} = \frac{2e^2\tau}{h^3} \int d^3p \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\vec{v} \cdot \vec{\epsilon}) \vec{v}. \quad (3.96)$$

Lādiņnesēju zīme atkrīt un formula ir spēkā jebkuraizonu struktūrai. Pieņemsim, ka zonas ir izotropas. Ērtības labad pieņemsim, ka lauks $\vec{\varepsilon}$ ir virzīts gar Z asi. Tāpēc $\vec{v}$ var aizvietot ar v_z . Ņemot vidējo vērtību pēc leņķa, ievērosim, ka

$$\langle v_z^2 \rangle = \frac{v^2}{3}.$$

Rezultātā iegūsim, ka strāvas blīvums

$$j_z = \frac{2e^2\tau\varepsilon_z}{3h^3} \int d^3p v^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right). \quad (3.97)$$

Šo integrāli var viegli izskaitļot, integrējot pa daļām. Pirmkārt, pierakstīsim, ka $d^3p = 4p^2 dp$.

Tagad uzskatīsim zonu par parabolisku ar enerģiju:

$$E = \frac{p^2}{2m^*},$$

un pārrakstīsim pirmo reizinātāju v sekojošā izskatā - p/m^* , bet otro - $\partial E/\partial p$. Tad

$$\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \left(\frac{\partial E}{\partial p} \right) = -\frac{\partial f_0}{\partial p}. \quad (3.98)$$

Izmantojot šo galīgo formulu, var veikt integrēšanu pa daļām:

$$f_z = \frac{2e^2\tau\varepsilon_z}{3h^3m^*} \int_0^\infty dp 4\pi p^3 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial p} \right) = \frac{2e^2\tau\varepsilon_z}{3h^3m^*} \left(-4\pi p^3 f_0 \Big|_0^\infty + 3 \int_0^\infty dp 4\pi p^2 f_0 \right).$$

Pirmais loceklis kļūst par nulli kā apakšējā robežā, kur $p = 0$, tā arī augšējā, kur $f_0 = 0$. Paliekošo integrāli pareizinot ar $2/3h^3$ iegūst vienkārši elektronu skaitu N zonā tilpuma vienībā. Tādā veidā, mēs varam uzreiz atrast īpatnējo vadītspēju σ , kas saista strāvas blīvumu ar lauku ($\vec{j} = \sigma \vec{E}$):

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau}{m^*}. \quad (3.99)$$

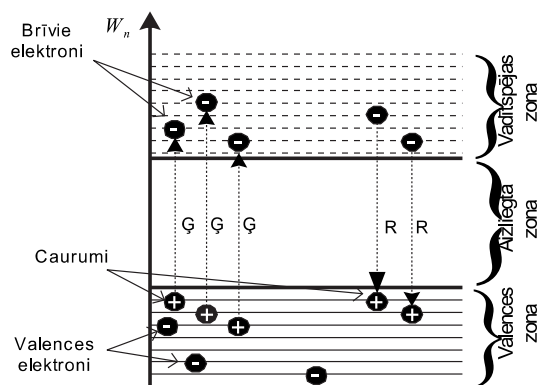
Mēs uzskatījām zonas par izotropām un paraboliskām, bet nepieņemām nekādus ierobežojumus f_0 formai. Tāpēc rezultāts zināmā mērā ir pielietojams kā parastajiem metāliem, tā arī elektroniem un caurumiem pusvadītājos.

IV nodaļa

PUSVADĪTĀJI

4.1. Pamatpusvadītāji. Jēdziens par caurumiem

Par pamatpusvadītājiem sauc ķīmiski tīrus pusvadītājus. Pie tādiem var attiecināt veselu virkni tīru ķīmisku elementu (ģermānijs, silīcijs, selēns, telūrs u.c.) un daudzus ķīmiskus savienojumus, piemēram, tādus kā gallija arsenīds (GaAS), indija arsenīds (InAS), indija antimonīds (InSb), silīcija karbīds (SiC) u.c.



4.1. zīmējums. Pamatpusvadītāja zonu struktūras shēma. Brīvo lādiņnesēju siltumģenerācija (G) un rekombinācija (R).

4.1. zīm. attēlota vienkāršota pamatpusvadītāja zonu shēmas struktūra. Pie absolūtās nulles, tā valences zona ir aizpildīta pilnīgi, bet vadītspējas zona, kas atrodas virs valences zonas attālumā E_g , ir tukša. Tāpēc pie absolūtās nulles pamatpusvadītājam, tāpat kā dielektriķim, piemīt nulles vadāmība. Tomēr pieaugot temperatūrai, valences zonas elektronu siltumierosinājuma dēļ, daļa no tiem iegūst enerģiju, kas ir nepieciešama, lai pārvarētu aizliegto zonu un pārietu vadītspējas zonā (4.1. zīm.). Līdz ar to vadītspējas zonā parādās brīvie elektroni, bet valences zonā - brīvi līmeņi, uz kuriem var pāriet šīs zonas elektroni. Pieliekot tādām kristālam ārējo lauku, tajā rodas vadītspējas un valences zonas elektronu virzīta kustība, kā rezultātā veidojas elektriskā strāva.

Apskatīsim valences zonas, kurā izveidojās brīvie līmeņi, pateicoties elektronu daļas pārejai vadītspējas zonā, elektronu uzvedību (4.1. zīm.). Ārēja lauka iedarbībā valences zonas elektroni tagad ir iespēja pāriet uz brīvajiem līmeņiem un veidot kristālā elektris-

ko strāvu. Noteiksim tās momentāno lielumu. Strāvas lielums, ko rada viens elektrons, kas kustas ar ātrumu $\vec{v}_i$, ir vienāds ar

$$I_i = -q\vec{v}_i.$$

Momentānās strāvas rezultējošais spēks, ko rada visi valences zonas elektroni, ir vienāds ar

$$I_p = -q \sum_i \vec{v}_i,$$

kur summēšana notiek pa visiem stāvokļiem, kurus aizņem elektroni. Pilnīgi elektronu aizņemtai zonai $I_p=0$, jo jebkuram elektronam, kuram piemīt ātrums $+\vec{v}_i$, var attiecināt elektronu ar ātrumu $-\vec{v}_i$.

Pieņemsim, ka valences zonā ir aizņemti visi stāvokļi, izņemot vienu, kas raksturojas ar ātrumu $\vec{v}_s$. Rezultējošais strāvas stiprums tādā zonā ir

$$I = -q \sum_{i \neq s} \vec{v}_i = -q \sum_i \vec{v}_i + q\vec{v}_s.$$

Tā kā pirmais saskaitāmais labajā pusē ir vienāds ar nulli, tad

$$I = q\vec{v}_s. \quad (4.1)$$

Tādā veidā, visu valences zonas, kurā ir viens vakants stāvoklis, elektronu rezultējošais strāvas stiprums ir ekvivalents ar strāvas stiprumu, ko nosaka vienas daļiņas ar pozitīvo lādiņu $+q$, kas ir ievietota šajā stāvoklī, kustība tajā.

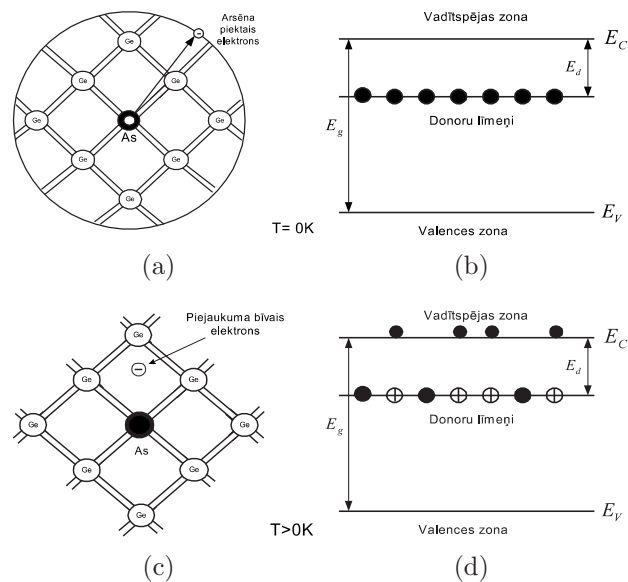
Tādu fiktīvu daļiņu sauc par caurumu. Pieņemsim, ka caurumam ir pozitīvs lādiņš $+q$, kas skaitliski ir vienāds ar elektrona lādiņu. Tad caurumam ir arī pozitīva efektīva masa m_p^* , kas ir skaitliski vienāda ar negatīva elektrona efektīvo masu m_n^* , kurš iepriekš ieņēma doto vakanto stāvokli valences zonas augšdaļas tuvumā.

4.2. Piejaukumu pusvadītājs

Jebkuras tīrības pusvadītāji vienmēr satur piejaukumus, kas veido savus enerģētiskus līmeņus, kurus nosauca par piemaisījuma līmeņiem. Šie līmeņi var izvietoties kā atļautajās, tā arī aizliegtajās pusvadītāja zonās dažādos attālumos no valences zonas augšdaļas un no vadāmības zonas apakšdaļas. Apskatīsim piemaisījuma līmeņu pamattipus.

Pieņemsim, ka ģermānija kristālā, daļa ģermānija atomu ir aizvietota ar piecvaleņā arsēna atomiem. Ģermānijam piemīt dimanta tipa režģis, kurā katrs atoms ir aizvietots ar četriem blakusesošiem atomiem, kas saistīti ar kovalentajiem spēkiem. (4.2.(a) zīm.)

Lai izveidotu saiti ar šiem blakusesošajiem atomiem, arsēna atoms izlieto četrus valences elektronus; piektais elektrons saites veidošanā līdzdalību neņem. Tas turpina kustēties arsēna atoma laukā, kas ir novājināts ar ģermāniju $\varepsilon = 16$ reizes (ε -ģermānija dielektriskā caurlaidība). Lauka novājināšanas dēļ, elektrona orbītas rādiuss pieaug 16 reizes, bet tā saites enerģija ar arsēna atomiem samazinās aptuveni $\varepsilon \approx 256$ reizes, kļūstot vienāda ar $E_d \approx 0.01$ eV. Pievadot elektronam tādu enerģiju, tas atraujas no atoma un iegūst spēju brīvi pārvietoties ģermānija režģī, kļūstot par vadītspējas elektronu (4.2.(c) zīm.).



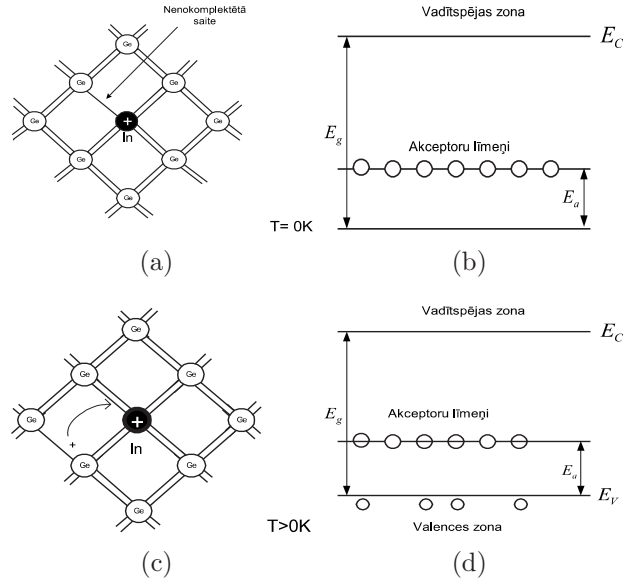
4.2. zīmējums. Enerģijas shēma pusvadītājam ar donorpiejaukumiem.

Zonu teorijas valodā šo procesu var attēlot sekojošā veidā. Starp aizpildīto valento zonu un tukšu vadītspējas zonu izvietojas arsēna atoma piektā elektrona enerģētiskie līmeņi (4.2.(b) zīm.). Šie līmeņi izvietojas pie vadītspējas zonas apakšdaļas, attālumā $E_d \approx 0.01$ eV no tās. Pievadot elektroniem tādu piejaukumu līmeņu enerģiju E_d , tie pāriet vadītspējas zonā (4.2.(d) zīm.). Piejaukumi, kas ir vadītspējas elektronu avots, tiek saukti par donorpiejaukumiem, bet šo piejaukumu enerģētiskie līmeņi - par donorpiejaukumu līmeņiem. Donorpiejaukumu saturošos pusvadītājus sauc par elektronu pusvadītājiem vai par n-tipa pusvadītājiem; bieži vien tos sauc arī par donoru pusvadītājiem.

Tagad pieņemsim, ka ģermānija režģī, daļa ģermānija atomu ir aizvietota ar trīs valentiem indija atomiem (4.3.(a) zīm.). Lai izveidotu saiti ar četriem blakusesošiem atomiem, indija atomam trūkst viena elektrona. To var "aizņemt" no viena ģermānija atoma.

Aprēķini rāda, ka šim nolūkam ir nepieciešama enerģija ar kārtu $E_a \approx 0.01$ eV. Izjauktā saite rada caurumu (4.3.(c) zīm.), jo tā atbilst vakantā stāvokļa izveidošanai ģermānija valences zonā. 4.3.(b) zīm. attēlota ģermānija zonas struktūra, kas satur indija piejaukumu. Tiešā valentās zonas augšdaļas tuvumā, attālumā $E_a \approx 0.01$ eV atrodas neaizpildītie indija atomu līmeņi. Tā kā šie līmeņi atrodas tuvu pie valences zonas, tad jau pie relatīvi zemām temperatūrām, elektroni no valences zonas pāriet uz piejaukuma līmeņiem (4.3.(d) zīm.).

Veidojot saiti ar indija atomiem, tie zaudē spēju pārvietoties ģermānija režģī un vadāmībā līdzdalību neņem. Lādiņa nesēji ir tikai caurumi, kuri rodas valences zonā. Piejaukumi, kas satver elektronus no valentās zonas, tiek saukti par akceptorpiejaukumiem, bet šo piejaukumu enerģētiskie līmeņi - par akceptorpiejaukumu līmeņiem. Pusvadītājus, kas satur tādus piemaisījumus, sauc par caurumu pusvadītājiem jeb p-tipa pusvadītājiem; bieži vien tos sauc par akceptorpiejaukumu pusvadītājiem.



4.3. zīmējums. Enerģijas shēma pusvadītājam ar akceptorpiejaukumiem.

4.3. Fermī līmeņa izvietojums un brīvo lādiņnesēju koncentrācija pusvadītājos

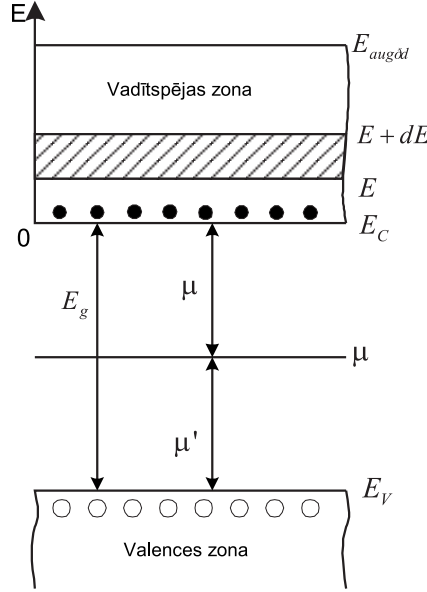
Viens no parametriem, kas raksturo brīvo lādiņnesēju gāzi pusvadītājos, ir ķīmiskais potenciāls μ . Attiecībā pret elektronu un caurumu gāzi parasti to sauc par Fermī līmeni. Metālos Fermī līmenis (sk.3.nodaļu) ir pēdējais aizpildītais līmenis pie absolūtās nulles. Elektronu gāzes koncentrācija metālos ir salīdzināma pēc lieluma kārtas ar stāvokļu skaitu vadāmības zonā, kā rezultātā šī gāze ir deģenerēta un elektronu sadalījums pa stāvokļiem tiek aprakstīts ar Fermī - Diraka kvantu statistiku. Tādas gāzes elektronu koncentrācija praktiski nav atkarīga no temperatūras.

Pamatpusvadītājos un vāji leģētos piejaukuma pusvadītājos elektronu (caurumu) gāze ir nedeģenerēta un elektronu sadalījums pa stāvokļiem tiek aprakstīts ar Maksvela- Bolcmaņa klasisko statistiku. 4.4. zīm. attēlota nedeģenerēta pusvadītāja struktūra. Pie temperatūras T , atšķirīgas no absolūtās nulles, tāda pusvadītāja vadītspējas zonā atrodas elektroni, bet valentā zonā - caurumi. Apzīmēsim atbilstoši to koncentrāciju ar n un p . Pieņemsim par elektronu kinētiskās enerģijas nulles atskaites līmeni vadītspējas zonas viszemāko līmeni. Izdalīsim ap šo līmeni šauru enerģiju intervālu dE , kas atrodas starp E un $E + dE$. Tā kā elektronu gāze pusvadītājā ir nedeģenerēta, tad elektronu skaitu dn , kas atrodas enerģiju intervālā dE , var noteikt, izmantojot (3.18):

$$dn = \frac{4\pi}{h^3} (2m_n^*)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-\frac{E}{k_B T}} E^{\frac{1}{2}} dE. \quad (4.2)$$

Nedeģenerētos pusvadītājos μ ir negatīvs lielums. Tas nozīmē, ka tādos pusvadītājos Fermī līmenis izvietojas zemāk par vadītspējas zonas apakšdaļu, kā tas ir parādīts 4.4. zīm. Apzīmēsim attālumu no vadītspējas zonas apakšējā līmeņa līdz Fermī līmenim un no Fermī līmeņa līdz valentās zonas augšdaļai atbilstoši ar μ un μ' . Acīmredzams, ka

$$\mu + \mu' = -E_g, \quad \mu' = -(E_g + \mu), \quad (4.3)$$



4.4. zīmējums. Fermī līmeņa atrašanās pamatpusvadītājā.

kur E_g - pusvadītāja aizliegtās zonas platums.

Pilnu elektronu skaitu n , kas atrodas vadītspējas zonā pie temperatūras T , iegūsim integrējot (4.2) pēc visām enerģijas vērtībām, kuras atbilst vadītspējas zonai, t.i., robežās no 0 līdz $E_{\text{augš.}}$:

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{E_{\text{augš.}}} e^{\frac{\mu}{K_B T}} e^{-\frac{E}{K_B T}} E^{\frac{1}{2}} dE.$$

Tā kā pieaugot E , funkcija $e^{-\frac{E}{K_B T}}$ samazinās ļoti ātri, tad integrēšanas augšējo robežu var tuvināti aizvietot ar bezgalību:

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu}{K_B T}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{K_B T}} E^{\frac{1}{2}} dE.$$

Izskaitļojot šo integrāli, iegūsim sekojošu rezultātu:

$$n = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* K_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu}{K_B T}}. \quad (4.4)$$

Līdzīgi aprēķinot caurumu, kas radās valences zonā, gadījumā, iegūstam izteiksmi:

$$p = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* K_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(E_g + \mu)}{K_B T}} = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* K_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu'}{K_B T}}, \quad (4.5)$$

kur m_p^* - caurumu efektīvā masa.

No (4.4) un (4.5) seko, ka brīvo lādiņnesēju koncentrāciju kristāla dotajā zonā nosaka šīs zonas attālums no Fermī līmeņa. Jebkuram nedeģenerētam pusvadītājam, n reizinājums ar p , saskaņā ar izteiksmēm (4.4) un (4.5), ir vienāds ar:

$$np = 4 \left(\frac{2\pi k T}{h^2} \right)^3 (m_n^* m_p^*)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{K_B T}}. \quad (4.6)$$

Formula (4.6) parāda, ka pie fiksētas temperatūras elektronu un caurumu koncentrācijas reizinājums dotajam pusvadītājam ir konstants lielums. Šeit arī parādās aktīvo masu likuma būtība brīvo lādiņnesēju gāzei pusvadītājos.

Tagad atsevišķi apskatīsim Fermī līmeņa atrašanās vietu un brīvo lādiņnesēju koncentrāciju pamatpusvadītājos un piejaukuma pusvadītājos. Pamatpusvadītājos elektronu koncentrācija n_i vadībspējas zonā ir vienāda ar caurumu koncentrāciju p_i valentā zonā:

$$n_i = p_i, \quad (4.7)$$

jo katrs elektrons, kas pāriet vadībspējas zonā, pēc pārejas “atstāj” pēc sevis caurumu. Pielīdzinot formulu (4.4) un (4.5) labās puses, iegūsim, ka

$$2 \left(\frac{2\pi m_n^* K_B T}{h^2} \right) e^{\frac{\mu}{k_B T}} = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* K_B T}{h^2} \right) e^{\frac{\mu'}{k_B T}}.$$

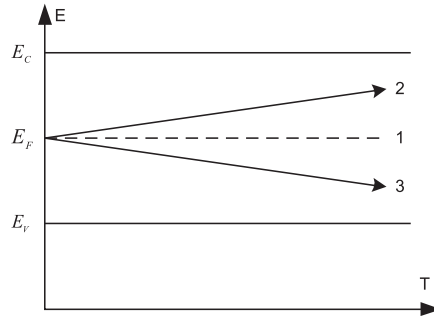
Risinot šo vienādojumu attiecībā pret μ , iegūsim

$$\mu = -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} K_B T \ln \frac{m_p^*}{m_n^*}. \quad (4.8)$$

Šī attiecība arī nosaka Fermī līmeņa atrašanās vietu pamatpusvadītājos. Pie absolūtās nulles ($T = 0$):

$$\mu = -\frac{E_g}{2}, \quad (4.9)$$

t.i., Fermī līmenis izvietojas aizliegtās zonas vidū (4.5).



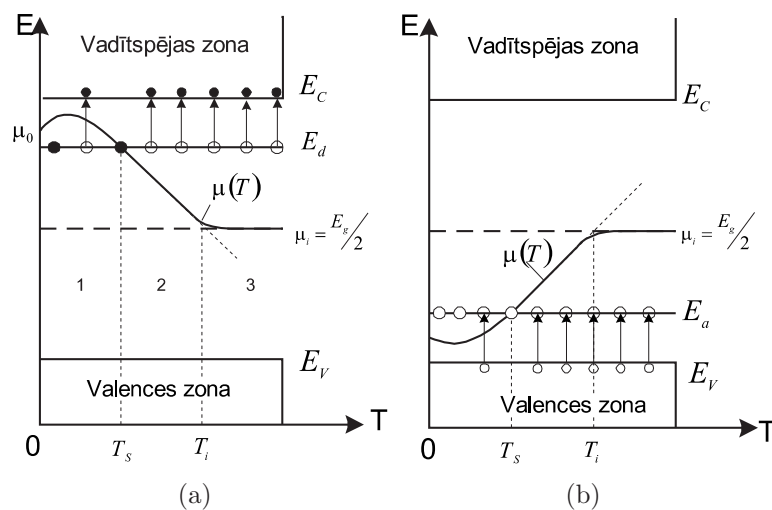
4.5. zīmējums. Fermī līmeņa izmaiņa pamatpusvadītājā.

Pieaugot temperatūrai, tas nobīdās uz augšu pie vadībspējas apakšdaļas, ja $m_p^* > m_n^*$, un uz leju pie valences zonas augšdaļas, ja $m_p^* < m_n^*$. Tomēr pārsvarā šī nobīde ir nebūtiska, to var neņemt vērā un uzskatīt, ka Fermī līmenis pamatpusvadītājos vienmēr izvietojas aizliegtās zonas vidū.

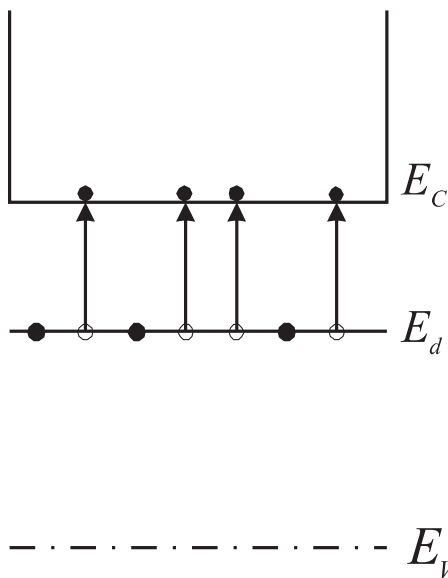
Ievietojot μ no (4.8) izteiksmē (4.4) un (4.5), iegūsim, ka

$$n_i = p_i = 2 \left(\frac{2\pi \sqrt{m_n^* m_p^*} K_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{2K_B T}}. \quad (4.10)$$

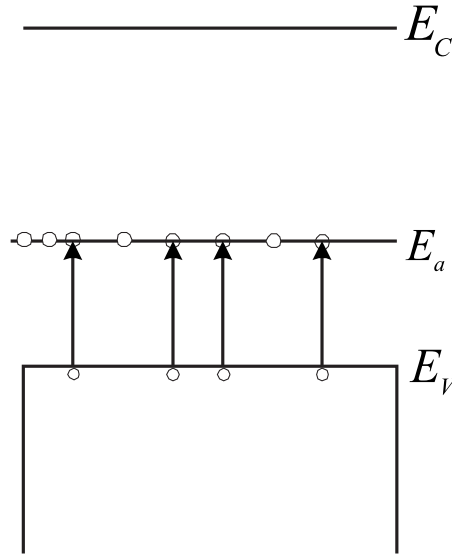
No izteiksmes (4.10) redzams, ka strāvas nesēju līdzsvara koncentrāciju pamatpusvadītājos nosaka aizliegtās zonas platums un pusvadītāja temperatūra.



4.6. zīmējums. Fermī līmeņa izmaiņa pieaugot temperatūrai donoru (a) un akceptoru (b) pusvadītājā. T_S - piejaukumu izsīkšanas temperatūra, T_i - parējas uz patstāvīgo vadītspēju temperatūra.



4.7. zīmējums. Elektronu pusvadītāju enerģijas diagrammas.



4.8. zīmējums. Caurumu pusvadītāju enerģijas diagramma.

Izmantojot izteiksmi (4.10), aktīvo masu likumu (4.6) var pārrakstīt sekojoši:

$$np = n_i^2. \quad (4.11)$$

4.6. zīm. attēlota Fermī līmeņa izmaiņa pieaugot temperatūrai donoru tipa (a) un akceptoru tipa (b) piejaukumu pusvadītājos. Pie zemām temperatūrām, režģa siltumsvārstību vidējā temperatūra $K_B T$ ir daudz mazāka par aizliegtās zonas E_g platumu. Tā rezultātā, šīs svārstības nevar nodrošināt būtisku valences elektronu ierosinājumu un to pāriešanu vadītspējas zonā. Taču šīs enerģijas ir pietiekami, lai notiktu elektronu ierosināšana un pāreja no donoru līmeņiem E_d uz vadītspējas zonu (4.7. zīm.) un caurumu pāreja no akceptorlīmeņiem E_a uz valences zonu (4.8. zīm.), jo tad ir nepieciešama 100 reizes mazāka enerģija par E_g . Tāpēc piejaukuma pusvadītāju zemo temperatūru apgabalā notiek praktiski tikai “piejaukuma” lādiņnesēju ierosināšana: elektronu n elektronu pusvadītājos un caurumu p caurumu pusvadītājos.

Aprēķini parāda, ka Fermī līmeņa izvietojumu šajā temperatūru apgabalā nosaka šādas izteiksmes elektronu pusvadītājam:

$$\mu = -\frac{E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left[\frac{N_d h^3}{2 (2\pi m_n^* K_B T)^{\frac{3}{2}}} \right], \quad (4.12)$$

un caurumu pusvadītājam:

$$\mu' = -\frac{E_a}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left[\frac{N_a h^3}{2 (2\pi m_p^* K_B T)^{\frac{3}{2}}} \right], \quad (4.13)$$

kur N_d un N_a - atbilstoši donoru un akceptoru piejaukumu koncentrācija. Atkarības $\mu(T)$ grafiki, kas atbilst šīm funkcijām ir attēloti 4.6. zīmējumā. Ievietojot μ un μ' no (4.12) un (4.13) atbilstoši izteiksmēs (4.4) un (4.5), iegūsim sekojošās izteiksmes elektronu koncentrācijai elektronu pusvadītājā:

$$n = \sqrt{2N_d} \left(\frac{2\pi m_n^* K_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_d}{2K_B T}}, \quad (4.14)$$

un caurumu koncentrācijai caurumu pusvadītājā:

$$n = \sqrt{2N_a} \left(\frac{2\pi m_p^* K_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_a}{2K_B T}}. \quad (4.15)$$

Pieaugot temperatūrai, elektronu koncentrācija vadītspējas zonā palielinās, bet elektronu koncentrācija donoru līmeņos samazinās - donoru līmeņi izsīkst. Tā pat arī tas notiek caurumu pusvadītāju akceptoru līmeņos. Pie pilnīgas piejaukuma izsīkšanas, elektronu koncentrācija pusvadītāja vadītspējas zonā praktiski kļūst vienāda ar donoru piejaukuma koncentrāciju:

$$n \approx N_d, \quad (4.16)$$

bet caurumu koncentrācija caurumu pusvadītājā - ar akceptora piejaukuma koncentrāciju N_a :

$$p \approx N_a. \quad (4.17)$$

Piejaukumu izsīkšanas temperatūra ir lielāka, jo lielāka ir piejaukuma aktivācijas enerģija E_d un E_a un to koncentrācija.

Pie turpmāka temperatūras pieauguma sākas arvien intensīvāka pamatlādiņnesēju ierosināšana, pusvadītājs vairāk tuvojas pie pamatpusvadītāja stāvokļa, kā rezultātā Fermī līmenis tuvojas Fermī līmeņa izvietojumam pamatpusvadītājā. Bet kamēr pamatlādiņnesēju koncentrācija paliek daudz mazāka par N_d ($n_i \ll N_d$), pusvadītāja nesēju summārā koncentrācija $n = n_i + n_d$ paliek praktiski nemainīga un vienāda ar N_d .

Tomēr pie pietiekami augstām temperatūrām, pamatnesēju koncentrācija var ne tikai sasniegt lielumu N_d , bet arī būtiski pārsniegt to ($n_i \gg N_d$). Šajā gadījumā

$$n = n_i + N_d \approx n_i.$$

Tas atbilst pārejai uz pusvadītāja pamatvadītspēju. Pārsniedzot tādas pārejas temperatūru, piejaukuma pusvadītājā Fermī līmenis sakrīt ar pamatpusvadītāja Fermī līmeni un kvantitatīvi tiek aprakstīts ar formulu (4.8), bet nesēju koncentrācija praktiski sakrīt ar nesēju koncentrāciju pamatpusvadītājā pie šīs temperatūras un tiek izteikta ar formulu (4.10).

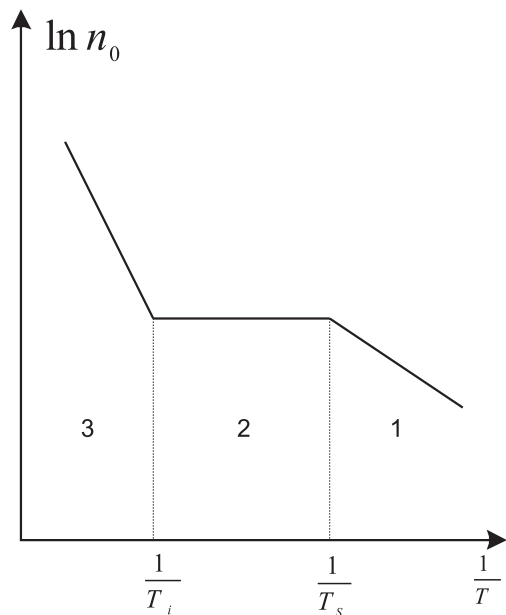
4.9. zīm. shematiski ir attēlota naturālā logaritma no elektronu koncentrācijas elektronu pusvadītāja vadītspējas zonā atkarība no apgrieztās temperatūras.

Līknē var izdalīt trīs apgabalus: 1, kas atbilst pusvadītāja piejaukuma vadītspējai; 2, kurš atbilst piejaukuma izsīkšanai, un 3 - pusvadītāja pamatvadītspējai.

Noslēgumā atzīmēsim, ka atšķirībā no pamatpusvadītājiem, kuriem vadāmību veic vienlaicīgi elektroni un caurumi, piejaukuma pusvadītājos vadāmību nosaka pamatā vienas zīmes nesēji: donoru tipa pusvadītājos - elektroni un akceptoru tipa pusvadītājos - caurumi. Šos nesējus sauc par pamatnesējiem. Bez tiem pusvadītāji vienmēr satur arī nepamatnesējus: donoru pusvadītājs - caurumus, akceptoru pusvadītājs - elektronus. Ērtības labad apzīmēsim nesēju līdzsvara koncentrāciju sekojoši: n - pusvadītājā n_{no} un p_{no} - elektronu (pamatnesēju) un caurumu (nepamatnesēju) koncentrācija; caurumu pusvadītājā p_{po} un n_{po} - caurumu (pamatnesēju) un elektronu (nepamatnesēju) koncentrācija.

Izmantojot tādus apzīmējumus, aktīvo masu likumu (4.9) var pierakstīt sekojošā veidā:

$$n_{no} p_{no} = n_i^2; \quad p_{po} n_{po} = n_i^2. \quad (4.18)$$



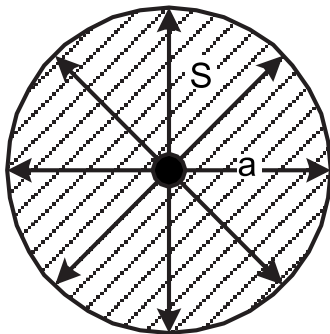
4.9. zīmējums. Naturālā logaritma no elektronu pusvadītāja vadītspējas elektronu koncentrācijas atkarība no apgrieztās temperatūras.

No (4.18) seko, ka pusvadītāja leģēšana ar aktīvu piejaukumu, paaugstinot pamatnesēju koncentrāciju, neizbēgami radīs nepamatnesēju koncentrācijas samazināšanos, tā, lai šo nesēju koncentrācijas reizinājums paliktu nemainīgs.

4.4. Lādiņnesēju kustīguma atkarība no temperatūras

Tagad apskatīsim vienu no cieto ķermeņu elektrovadāmības teorijas pamatjautājumiem – lādiņnesēju kustīguma atkarību no temperatūras. Izskatīsim atsevišķi augsto un zemo temperatūru apgabalus.

Augsto temperatūru apgabalā pamatnozīme ir elektronu izkliedei uz režģa siltumsvārstībām (fononiem). Katrs režģa atoms veic haotiskas svārstības ap līdzsvara stāvokli (4.10. zīm.), paliekot sfēras, kuras rādiuss ir vienāds ar svārstību amplitūdu a , robežās. Šīs sfēras šķērsriezuma laukumu, vienādu ar $S = \pi a^2$, var pieņemt par svārstību kustībā



4.10. zīmējums. Sfēra ar rādiusu, kas ir vienāds ar režģa atomu svārstību amplitūdu.

esošā atoma izkļiedes šķērsgrizumu; elektrons, izejot cauri vielai un trāpot vienā no tādiem diskiem, izkļiedēsies. Citos savstarpēji vienādos apstākļos, elektrona trāpīšanas varbūtība tādā diskā būs proporcionāla diska laukumam, bet elektrona brīvā noskrējiena garums - apgriezti proporcionāls šim laukumam:

$$\lambda \sim \frac{1}{S} \sim \frac{1}{a^2}.$$

Svārstībā esošā atoma enerģija ir proporcionāla svārstību amplitūdas kvadrātam: $E \sim a^2$. No citas puses, vidējā atomu enerģija, kas cietā ķermenī veic siltumsvārstības, ir proporcionāla ķermeņa absolūtai temperatūrai T : $E \sim T$. Tādēļ augsto temperatūru apgabalā elektronu brīvā noskrējiena garumam, kuru nosaka izkļiede uz fononiem, ir jābūt proporcionālam ķermeņa absolūtajai temperatūrai:

$$\lambda \sim \frac{1}{T}. \quad (4.19)$$

Šo rezultātu varēja iegūt uzreiz, izmantojot to, ka augsto temperatūru apgabalā fononu koncentrācija ir proporcionāla T : $n_F \sim T$. Elektroniem izkļiedējoties uz fononiem, brīvā noskrējiena garumam ir jābūt apgriezti proporcionālam absolūtai temperatūrai T : $\lambda \sim \frac{1}{n_F} \sim \frac{1}{T}$. No citas puses, augstajās temperatūrās fononiem piemīt tik liels vidējais impulss, ka jau vienreizējās sadursmēs ar elektroniem (t.i., pie $\nu=1$) elektroni praktiski zaudē ātrumu sākotnējā virzienā. Ņemot vērā izteiksmi (4.19), iegūsim sekojošu elektronu kustīguma izteiksmi:

nedeģenerētai gāzei -

$$u \sim \frac{\bar{\lambda}}{\bar{v}} \sim \frac{T^{-1}}{T^{\frac{1}{2}}} \sim T^{-\frac{3}{2}}; \quad (4.20)$$

deģenerētai gāzei -

$$u \sim \frac{\lambda_f}{v_f} \sim \frac{T^{-1}}{const} \cong T^{-1}. \quad (4.21)$$

Līdz ar to augsto temperatūru apgabalā, kur pamatnozīme ir izkļedei uz fononiem, nedeģenerētās gāzes nesēju kustīgums (elektronu un caurumu) ir apgriezti proporcionāls $T^{\frac{3}{2}}$, deģenerētās gāzes nesēju kustīgums ir apgriezti proporcionāls T .

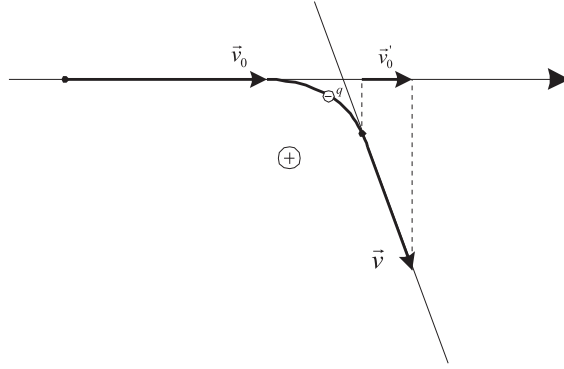
Zemo temperatūru apgabalā pamatnozīme ir izkļedei uz jonizētiem piejaukuma atomiem. Izkļiedes būtība ir tāda, ka piejaukuma joni novirza elektronus, kas kustas tiem garām, un līdz ar to, samazina to kustības ātrumu sākotnējā virzienā (4.11. zīm.).

Kā redzams no 4.11. zīm., līdz elektrona novirzes ar pozitīvi lādētu jonu, tā ātrums lauka virzienā ir vienāds ar v_0 , pēc novirzīšanas, tas samazinājās līdz v'_0 . Uzdevumu par lādēto daļiņu izkļedi uz uzlādētiem centriem, pētot α - daļiņu izkļedi uz ķīmisko elementu kodoliem, pirmo reizi atrisināja E. Rezenfords. Izmantojot to mūsu gadījumam, sadursmju skaita ϑ formulai, kas ir nepieciešama, lai izmainītu kustību sākotnējā virzienā ir šāds izskats:

$$\vartheta \sim v^4 \left(\frac{\varepsilon}{Zq} \right)^2 m_n^*, \quad (4.22)$$

kur v - elektrona ātrums, ε - kristāla dielektriskā konstante, Zq - izkļiedējošā jona lādiņš.

No citas puses, elektrona brīvā noskrējiena garums, tiem izkļiedējoties uz jonizētiem piejaukumiem, ir apgriezti proporcionāls piejaukuma atomu koncentrācijai un no temperatūras nav atkarīgs. Ņemot to vērā, iegūsim:



4.11. zīmējums. Elektrona novirze ar pozitīvi lādētu jonu.

nedeģenerētai gāzei -

$$u \sim \frac{\vartheta \bar{\lambda}}{\bar{v}} \sim \bar{v}^3 \sim T^{\frac{3}{2}}; \quad (4.23)$$

deģenerētai gāzei -

$$u \sim \frac{\vartheta_f \lambda_f}{v_f} \sim v_f^3 \sim \text{const}, \quad (4.24)$$

kur v_f - elektrona ātrums, kurš atrodas uz Fermī virsmas. Līdz ar to, zemo temperatūru apgabalā lādiņnesēju kustīgums, kuru nosaka izkliede uz jonizētiem piejaukumiem, vielām ar nedeģenerētu gāzi ir proporcionāls $T^{\frac{3}{2}}$ un ķermeņiem ar deģenerētu gāzi nav atkarīgs no T .

4.5. Pusvadītāju pamatvadītspēja

Augstas tīrības pakāpes pusvadītājiem, ne īpaši zemo temperatūru apgabalā, piemīt elektriska vadītspēja, kuru nosaka tajos esošie strāvas pamatnesēji – elektroni un caurumi. Tādu vadītspēju sauc par pusvadītāja pamatvadītspēju. Saskaņā ar to, ka pamatpusvadītājā pastāv divu tipu lādiņnesēji – elektroni un caurumi, tad tā īpatnējā elektrovadītspēja sastāv no vadītspējas $\sigma_n = qn_i u_n$, kuru nosaka brīvo elektronu ar koncentrācijas n_i un kustīguma u_n pastāvēšana, un vadītspējas $\sigma_p = qp_i u_p$, kuru nosaka caurumi ar koncentrāciju p_i un kustīgumu u_p . Tā kā $n_i = p_i$, tad pilnā pamatpusvadītāja vadītspēja ir

$$\sigma_i = \sigma_n + \sigma_p = qn_i (u_n + u_p). \quad (4.25)$$

Saskaņā ar izteiksmi (4.10), elektronu un caurumu koncentrācija pamatpusvadītājā ir vienāda ar

$$n_i = 2 \left(\frac{2\pi \sqrt{m_n^* m_p^*} K_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{2K_B T}}.$$

Pamatvadītspējas apgabalā nesēju kustīgumu nosaka izteiksme (4.20). Ievietojot (4.10) un (4.20) izteiksmē (4.25), iegūsim:

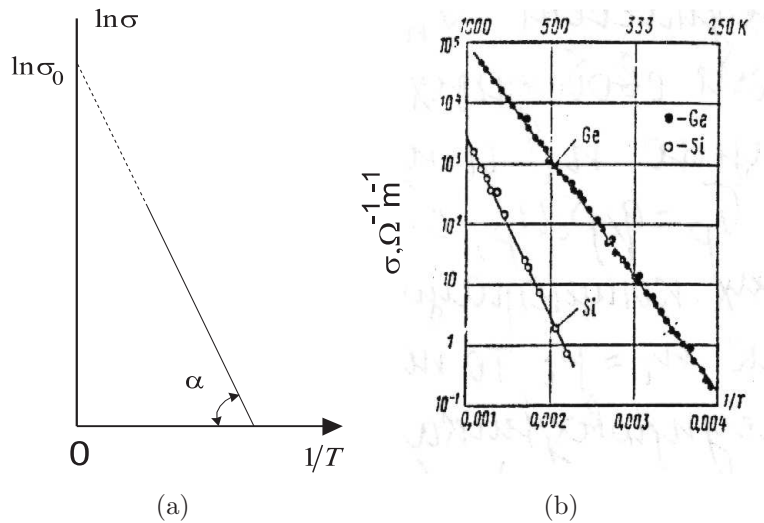
$$\sigma_i = \sigma_0 e^{-\frac{E_g}{2K_B T}}, \quad (4.26)$$

kur ar σ_0 ir apzīmēta izteiksme, kas atrodas pirms eksponentes. No izteiksmes (4.26) redzams, ka pie $T \rightarrow \infty$, $\sigma_i \rightarrow \sigma_0$. Tātad, ja likumsakarība (4.26) būtu spēkā pie jebkurām pēc patikas augstām temperatūrām, tad σ_0 izteiktu īpatnējo vadītspēju pie $T \rightarrow \infty$.

σ_i atkarību no temperatūras ērti ir attēlot puslogaritmiskajās koordinātās. Logaritmējot (4.26), iegūsim:

$$\ln \sigma_i = \ln \sigma_0 - \frac{E_g}{2K_B T}. \quad (4.27)$$

Ja uz abscisu ass atlikt $\frac{1}{T}$, bet uz ordinātu ass $\ln \sigma_i$, tad iegūsim taisni, kas atdala uz ordinātu ass nogriezni $\ln \sigma_0$ (4.12. zīm.). Šīs taisnes slīpuma pret abscisas asi leņķa α



4.12. zīmējums. Īpatnējās elektrovadāmības naturālā logaritma atkarība no apgrieztās temperatūras pamatpusvadītājā.

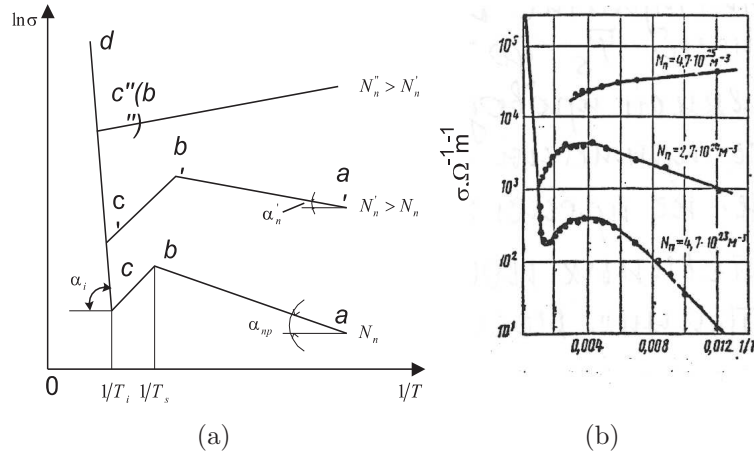
tangenss ir vienāds ar $E_g/(2K_B)$. Konstruējot tādu grafiku, var noteikt konstanti σ_0 un aizliegtās zonas platumu. Kā piemēru apskatīsim 4.12.(b) zīm. attēloto eksperimentāli iegūto $\ln \sigma_i$ atkarību no $1/T$ tīram ģermānijam un silīcijam.

Šajā nodaļā iegūto rezultātu salīdzināšana ar iepriekšējās apakšnodaļas rezultātiem norāda, ka starp metāliem un pusvadītājiem pastāv sekojošā principiāli svarīga atšķirība. Metālos, kuros elektronu gāze ir deģenerēta, lādiņnesēju koncentrācija praktiski nav atkarīga no temperatūras un to vadītspējas atkarību no temperatūras kopumā nosaka nesēju kustīguma atkarība no temperatūras. Pusvadītājos ir otrādi – lādiņnesēju gāze ir nedeģenerēta un to koncentrācija ir diezgan strauji atkarīga no temperatūras (4.10). Tā rezultātā, pusvadītāju vadītspējas atkarību no temperatūras praktiski pilnībā nosaka nesēju koncentrācijas temperatūras atkarība (4.26). Dotajā temperatūrā pamatpusvadītāju strāvas nesēju koncentrāciju un vadītspēju nosaka to aizliegtās zonas platums.

4.6. Pusvadītāju piejaukuma vadītspēja

Nedeģenerētu piejaukuma pusvadītāju elektrovadāmības atkarību no temperatūras, tāpat kā arī pamata pusvadītājiem, galvenokārt, nosaka nesēju koncentrācija. 4.13.(b)

zīmējumā shematiski attēlota piejaukuma pusvadītāja atkarības $\ln(1/T)$ likne. Šajā liknē var izdalīt trīs raksturapgabalus: ab , bc , cd .



4.13. zīmējums. Naturālā logaritma no īpatnējās elektrovadāmības atkarība no apgrieztās temperatūras piejaukuma pusvadītājā.

Apgabals ab atbilst zemām temperatūrām un to ierobežo piejaukuma izsīkšanas temperatūra T_s . Šajā apgabalā nesēju koncentrāciju apraksta ar formulu (4.14), bet kustīgumu nosaka izkliede uz piejaukumiem, kas saskaņā ar (4.23), ir proporcionāla $T^{\frac{3}{2}}$. Līdz ar to

$$\sigma_n = \sigma_n^{(0)} e^{-\frac{E_d}{2K_B T}}, \quad (4.28)$$

kur $\sigma_n^{(0)}$ - koeficients, kas ir vāji atkarīgs no temperatūras (salīdzinājumā ar eksponenti). Logaritmējot izteiksmi (4.28), iegūsim, ka

$$\ln \sigma_n = \ln \sigma_n^{(0)} - \frac{E_d}{2K_B T}. \quad (4.29)$$

Atliekot uz abscisu ass $1/T$, bet uz ordinātu ass $\ln \sigma_n$, iegūsim taisni, kas veido ar abscisu asi leņķi α_n , kura tangenss ir $\tan \alpha_n = E_d/(2K_B)$. Līdz ar to, apgabals ab atbilst pusvadītāja piejaukuma vadītspējai, kura rodas piejaukuma atomu jonizācijas dēļ.

Apgabals bc atrodas temperatūru intervālā no piejaukumu izsīkšanas temperatūras T_s līdz temperatūrai T_i sasniedzot kuru, notiek pāreja uz pamatvadītspēju. Ārpus šī apgabala visi piejaukuma atomi ir jonizēti, taču vēl nenotiek būtiska pamatnesēju ierosināšana. Tā rezultātā, nesēju koncentrācija saglabājas aptuveni nemainīga un vienāda ar piejaukumu koncentrāciju N_d . Tāpēc šajā apgabalā pusvadītāja vadītspējas atkarību no temperatūras nosaka nesēju kustīguma temperatūras atkarība. Ja apskatāmajā apgabalā izkļedes pamatmehānisms ir izkliede uz fononiem, kuriem ir raksturīga kustīguma samazināšanās līdz ar temperatūras pieaugumu, tad vadītspēja šajā apgabalā samazināsies. Tāds gadījums ir attēlots 4.13. (a) zīmējumā. Taču, ja izkļedes pamatmehānisms būs izkliede uz jonizētiem piejaukumiem, tad vadītspēja apgabalā bc pieaugs līdz ar temperatūras palielināšanos.

Apgabals cd atbilst pārejai uz pusvadītāja pamatvadītspēju. Šajā apgabalā nesēju koncentrācija ir vienāda ar pamatnesēju koncentrāciju. Tādēļ pusvadītāja vadītspēja ir

$$\sigma = \sigma_i = \sigma_0 e^{-\frac{E_g}{2K_B T}}.$$

Puslogaritmiskās koordinātās šīs atkarības $\ln \sigma \left(\frac{1}{T} \right)$ grafiks ir taisne, kas virzīta uz abscisu asi zem leņķa α_i , kura tangenss ir proporcionāls aizliegtās zonas platumam E_g : $\operatorname{tg} \alpha_i = E_g / (2K_B)$.

4.13. (b) zīm. ir attēlota ar fosforu leģēta silīcija vadītspējas eksperimentālā atkarība.

Termistori. Pusvadītāju pretestības straujā atkarība no temperatūras tiek izmantota lielai pusvadītāju iekārtu klasei - termistoriem. Tie būtībā ir apjomīgas pusvadītāju pretestības ar lielu pretestības temperatūras koeficientu un nelineāro volt-ampēru raksturlielni. Termistorus izmanto temperatūras mērīšanai, elektromagnētiskā starojuma jaudas un dažādu elektriskās ķēdes elementu temperatūras kompensācijas noteikšanai.

4.7. Pusvadītāju fotovadītspēja

Novirzīsim uz pusvadītāju gaismas staru kūlīti ar intensitāti I_0 (4.14.(a) zīm.). Gaisma, iekļūstot pusvadītāja iekšienē, pakāpeniski tiek absorbēta un tās intensitāte samazinās. Apskatīsim pusvadītāja iekšienē attālumā x no virsmas bezgalīgi plānu slāni dx . Gaismas enerģijas daudzums dI , ko absorbēs slānis dx , ir proporcionāls gaismas, kas krīt uz šo slāni, intensitātei I un slāņa biezumam:

$$dI = -kI dx. \quad (4.30)$$

Mīnusa zīme norāda uz enerģijas samazināšanos; proporcionalitātes koeficientu k sauc par absorbcijas koeficientu. Pie $dx = 1$ $k = -\frac{dI}{I}$. Līdz ar to, absorbcijas koeficients skaitliski ir vienāds ar gaismas intensitātes relatīvo izmaiņu noietajā absorbējošās vielas ceļa garuma vienībā. Tā dimensija ir apgriezta garumam (m^{-1}). Integrējot izteiksmi (4.30), iegūsim:

$$I = I_0 e^{-kx}. \quad (4.31)$$

Gaisma, absorbējoties pusvadītāja iekšienē, var veicināt nekompensēto lādiņu nesēju veidošanos, kas palielina brīvo lādiņnesēju kopīgo koncentrāciju. 4.14. (b) zīm. ar bultām 1 ir parādīts elektronu un caurumu ierosinājums, pusvadītāja pamatabsorbcijas gadījumā. Fotons ar enerģiju $h\nu$, kas ir vienāda vai ir lielāka par aizliegtās zonas platumu E_g , pārceļ elektronu gāzi no valences zonas vadītspējas zonā. Pāri elektrons - caurums, kas veidojas šajā procesā, ir brīvi un piedalās pusvadītāju vadītspējas veidošanā.

Piejaukuma atomu ierosināšanai fotonam ir jāpiemīt enerģijai $h\nu \geq E_n$, kur E_n - šo atomu aktivācijas enerģija. 4.14. (b) zīm. piejaukuma līmeņi ir E_1 un E_2 . Šo līmeņu elektronu ierosināšana ir attēlota ar bultiņām 2 un 3. Līdz ar to, ja pamatpusvadītājiem

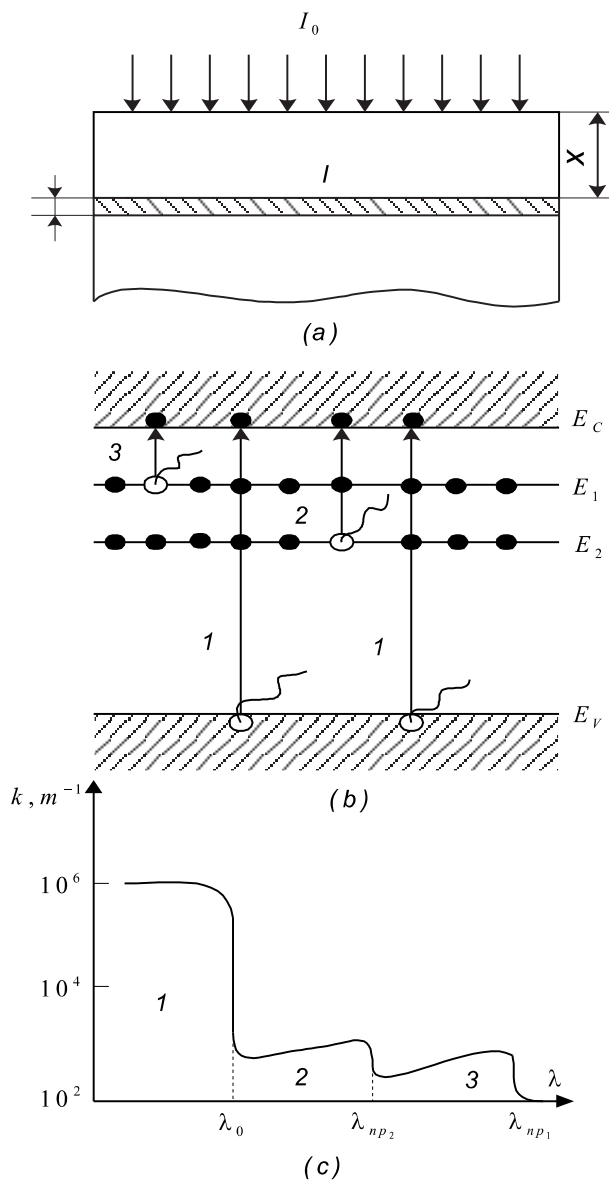
$$h\nu \geq E_g,$$

un piejaukuma pusvadītājiem

$$h\nu \geq E_n, \quad (4.32)$$

tad pusvadītājā veidojas papildus strāvas nesēji un tā vadītspēja paaugstinās.

Iekšējais elektronu atbrīvošanas process gaismas iedarbībā tiek saukts par iekšējo fotoefektu. Papildus vadītspēju, kuru ieguva ar gaismu apstarots pusvadītājs, sauc par fotovadītspēju. Vadītspēja, kuru nosaka nesēju siltumģenerācija, tiek saukta par tumsas



4.14. zīmējums. Pusvadītāju fotovadītspēja. (a) - gaismas absorbcija pusvadītājā, (b) - elektronu pārejas procesi gaismas iedarbībā, (c) - gaismas absorbcijas koeficienta k shematiska atkarības līkne no gaismas viļņa λ garuma pusvadītājam, kuram piemīt divi piejaukuma līmeņi E_1 un E_2 .

vadītspēju. Izšķir pamatfotovadītspēju un piejaukuma fotovadītspēju. No izteiksmēm (4.32) var noteikt šīs vadītspējas sarkano robežu, t.i., viļņa maksimālo garumu, pie kura gaisma ir vēl fotoelektriski aktīva:

$$\begin{aligned}\lambda_0 &= \frac{ch}{E_g} && \text{— pamatpusvadītājiem;} \\ \lambda_0 &= \frac{ch}{E_n} && \text{— piejaukuma pusvadītājiem.}\end{aligned}\tag{4.33}$$

4.14.(c) zīm. ir attēlota shematiska gaismas absorbcijas koeficienta k atkarības likne no gaismas viļņa λ pusvadītājam ar diviem piejaukuma līmeņiem E_1 un E_2 . Tāda pusvadītāja absorbcijas spektram ir trīs absorbcijas joslas - pamatabsorbcijas josla 1, kas atbilst elektronu pārejai no valentās zonas vadītspējas zonā gaismas iedarbībā, un divas piejaukuma absorbcijas joslas 2 un 3. Tās atbilst elektronu pārejai no piejaukuma līmeņiem E_1 un E_2 vadītspējas zonā (4.14.(b) zīm.).

Piejaukuma fotoefekts ir iespējams tikai tādā gadījumā, ja piejaukuma līmeņi E_1 un E_2 ir aizpildīti ar elektroniem, t.i., ja pusvadītāja temperatūra ir zemāka par piejaukuma izsīkšanas temperatūru T_s . Tāpēc lai novērotu piejaukuma fotovadītspēju, pusvadītājus ir nepieciešams atdzesēt.

Ja uz pusvadītāju krītošās gaismas intensitāte ir vienāda ar I , tad gaismas enerģijas daudzums (fotonu skaits), kas laika vienībā tiek absorbēts tilpuma vienībā, būs vienāds ar kI , bet nekompensēto brīvo nesēju skaits, kuri rodas laika vienībā tilpuma vienībā, t.i., to ģenerācijas ātrums, būs:

$$g = Ik\beta,\tag{4.34}$$

kur β - kvantu izeja, kas parāda cik veidojas brīvo lādiņnesēju, absorbējot vienu fotonu.

Ja nepastāvētu rekombinācija, nekompensēto nesēju skaits nepārtraukti pieaugtu laika gaitā. Rekombinācijas dēļ, kuras ātrums pieaug līdz ar nekompensēto nesēju koncentrācijas palielināšanos, pusvadītājā izveidojās stacionārs stāvoklis, kurā nesēju ģenerācijas ātrums ir vienāds ar to rekombinācijas ātrumu:

$$g = R = \frac{\Delta n_0}{\tau}.\tag{4.35}$$

Šim stāvoklim atbilst nekompensēto nesēju koncentrācija Δn_0 , kas ir vienāda ar

$$\Delta n_0 = g\tau_n = Ik\beta\tau_n.\tag{4.36}$$

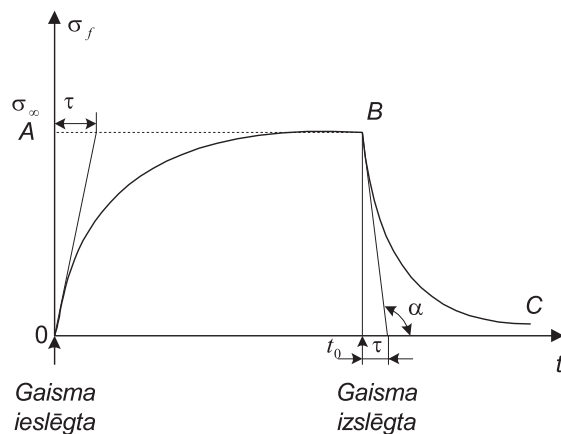
Tā kā nekompensētiem nesējiem ir praktiski tāds pats kustīgums kā līdzsvara nesējiem, tad stacionārā vadītspēja būs

$$\sigma_{f0} = q\beta kIU_n\tau_n.\tag{4.37}$$

No izteiksmes (4.37) redzams, ka stacionārā fotovadītspēja, tātad arī fotojūtība pusvadītāju sensoriem ir proporcionāla nekompensēto lādiņnesēju dzīves laikam τ_n . No šī viedokļa ir izdevīgi tiekties iegūt maksimāli lielas τ_n vērtības. Tomēr, pie tam būtiski var palielināties fotoutzvērēja inerce.

Apskatīsim fotovadītspējas samazināšanās raksturu pēc gaismas avota izslēgšanas (4.15. zīm.). Rekombinācijas procesa dēļ, nekompensēto nesēju koncentrācija samazinās:

$$\Delta n = \Delta n_0 e^{-\frac{t}{\tau_n}}.\tag{4.38}$$



4.15. zīmējums. Pusvadītāja fotovadītspējas samazināšanās pēc gaismas avota izslēgšanās.

Pēc tāda paša likuma notiks arī fotovadītspējas samazināšanās:

$$\sigma_f = \sigma_{f0} e^{-\frac{t}{\tau_n}}. \quad (4.39)$$

No izteiksmes (4.39) redzams, ka jo lielāks ir dzīves laiks τ_n , jo lēnāk notiek fotovadītspējas samazināšanās, jo inertāks būs starojuma fotouztvērējs.

Ir viegli saprast, ka pieskare, kas novilkta pret fotovadītspējas liknes $\sigma_f(t)$ kritumu punktā t_0 , atšķelš laika asī nogriezni, kurš skaitliski ir vienāds ar τ_n .

4.8. Ideāla un reāla p-n pāreja

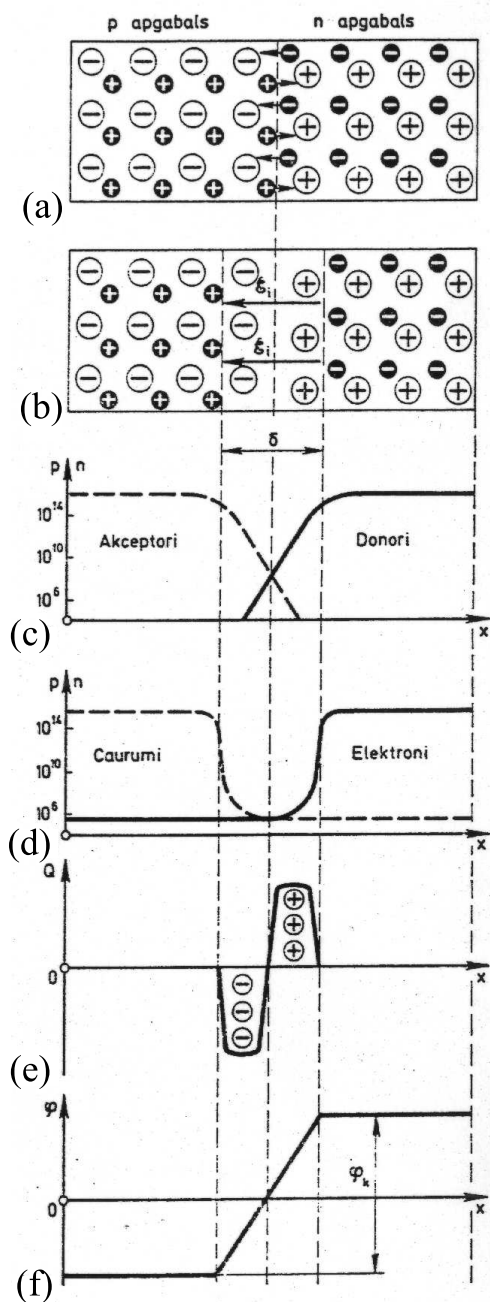
4.8.1. Kontaktpotenciāls p-n pārejā

Ja pusvadītāja monokristālā ar piejaukumiem izveido p tipa un n tipa apgabalus, tad šo apgabalu robežslāni sauc par $p - n$ pāreju. Jāievēro, ka $p - n$ pāreju nevar izveidot, mehāniski savienojot p tipa un n tipa pusvadītājus, jo savienojuma vietā vienmēr ir sprauga, mehāniski defekti un citu ķīmisku elementu plēves. Ideālu kontaktu starp p tipa un n tipa apgabaliem var realizēt tikai monokristālā, kurā ar noteiktu tehnoloģisku paņēmieni ievada donorpiejaukumus un akceptorpiejaukumus.

Tā kā p tipa apgabalā ir daudz brīvo caurumu, bet n tipa apgabalā to skaits ir niecīgs, tad sākas caurumu koncentrāciju izlīdzināšanās starp abiem apgabaliem - difūzija (4.16.(a) zīm.).

Arī elektroni difundē no n tipa apgabala uz p tipa apgabalu, jo p tipa apgabalā ir maza brīvo elektronu koncentrācija. Difūzijas rezultātā pārejas vienā pusē paliek nekompensēti nekustīgi akceptoru joni, bet otrā pusē - donoru joni (4.16.(b),(c) zīm.), kuru radītais kontaktpotenciāls φ_k rada pārejā iekšējo elektrisko lauku ξ_1 , kas vērsts virzienā no pozitīvajiem donorjoniem uz negatīvajiem akceptorjoniem. Pārejas kontaktpotenciāla lielumu nosaka p tipa un n tipa pusvadītāju Fermī līmeņu starpība:

$$\varphi_k = \frac{F_d - F_a}{q}, \quad \text{kur } q - \text{elektrona lādiņš.} \quad (4.40)$$



4.16. zīmējums. Fizikālie procesi $p - n$ pārejā:

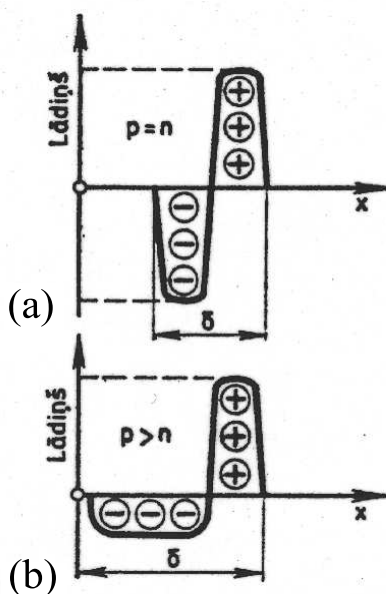
(a) - brīvo lādiņnesēju difūzija $p - n$ pārejā, (b) - piekontakta zona, (c) - donoru un akseptoru koncentrācija, (d) - elektronu un caurumu koncentrācija, (e) - telpas lādiņš, (f) - kontaktpotenciāls.

Tā kā, piejaukumu koncentrācijai pieaugot, Fermī līmeņi attālinās viens no otra, tad kontaktpotenciāls palielinās, bet, pieaugot temperatūrai, Fermī līmeņi tuvojas un kontaktpotenciāls samazinās. Praktiski istabas temperatūrā kontaktpotenciāls ģermānijam ir $0,3 \dots 0,4$ V, bet silīcijam - $0,7 \dots 0,8$ V.

4.8.2. Strāva $p - n$ pārejā

Kontaktpotenciāla radītais elektriskais lauks kavē majoritātes (vairākuma) lādiņnesēju difūziju. Šo kontaktpotenciāla radīto potenciāla barjeru spēj pārvarēt tikai tie majoritātes lādiņnesēji, kuru siltumkustības enerģija ir ļoti liela. Nedaudzie majoritātes lādiņnesēji, kas pārvarējuši potenciāla barjeru, veido difūzijas strāvu I_{dif} . Kaut arī difūzijas strāvu $p - n$ pārejā rada pretēji vērstas caurumu un elektronu plūsmas, difūzijas strāvas virzienu nosaka tikai caurumu plūsmas virziens, jo par strāvas plūšanas virzienu ir pieņemts pozitīvo lādiņu pārvietošanās virziens (4.16.(a) zīm.), un difūzijas strāva plūst virzienā no p tipa pusvadītāja uz n tipa pusvadītāju.

Tā kā kontaktpotenciāla radītais iekšējais elektriskais lauks kavē majoritātes lādiņnesēju difūziju caur $p - n$ pāreju, tad akceptoru un donoru jonu radītajā telpas lādiņu zonā nav brīvu lādiņnesēju un šo zonu sauc par piekontakta (tukšināto) zonu, bet šīs zonas biezumu par $p - n$ pārejas biezumu δ . Pārejas biezumu nosaka piejaukumu koncentrācija $p - n$ pārejā. Pie tam, jo lielāka piejaukumu koncentrācija, jo lielāks telpas lādiņa blīvums, un kontaktpotenciālu var radīt mazākā tilpumā esošie lādiņi - tātad pāreja kļūst plānāka. Pāreju, kuru veido pusvadītājs ar skaitliski vienādām piejaukumu koncentrācijām ($n = p$), sauc par simetrisku $p - n$ pāreju (4.17.(a) zīm.), bet pāreju, kuru veido pusvadītājs ar dažādām piejaukumu koncentrācijām ($n \neq p$), sauc par nesimetrisku $p - n$ pāreju (4.17.(b) zīm.). Mazākā piejaukuma koncentrācija ir nesimetriskās pārejas biezākajā daļā, bet lielākā piejaukumu koncentrācija - plānākajā daļā.

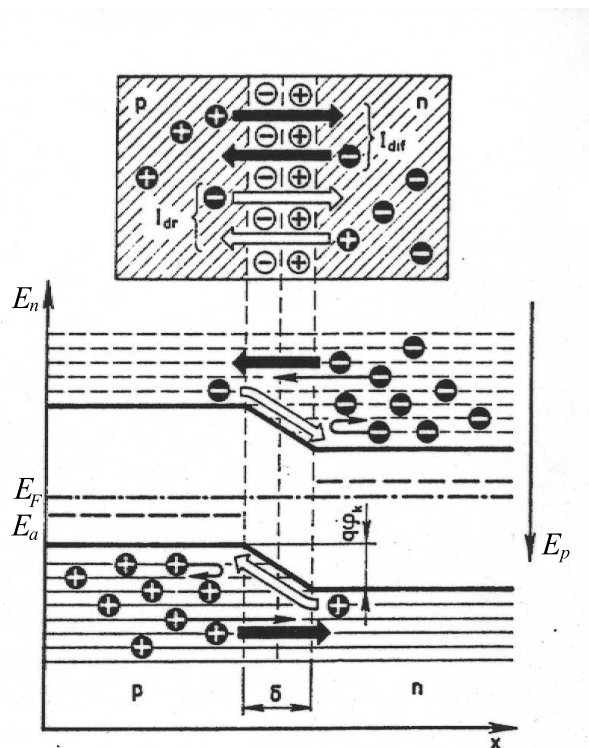


4.17. zīmējums. Telpas lādiņa sadalījums atkarībā no koordinātas x simetriskā $p - n$ pārejā (a) un nesimetriskā $p - n$ pārejā (b).

Atkarībā no piejaukumu izveidošanas tehnoloģijas piejaukumu koncentrācija $p - n$ pārejā var mainīties vairāk vai mazāk strauji (4.16.(c) zīm.). Ja piejaukumu koncentrācijas maiņas zona ir samērojama ar pārejas biezumu, tad šādu pāreju sauc par plūstošu $p - n$ pāreju, bet, ja pārejas biezums ir ievērojami lielāks par piejaukumu koncentrācijas maiņas zonu, tad šādu pāreju sauc par asu $p - n$ pāreju.

Piejaukumu pusvadītājā bez majoritātes lādiņnesējiem ir arī minoritātes (mazākuma) lādiņnesēji, kas radušies siltumģenerācijas dēļ un atrodas nepārtrauktā haotiskā siltumkustībā.

Siltumkustības rezultātā minoritātes lādiņnesēji var nokļūt $p - n$ pārejā. Tur tie pārejas iekšējā elektriskā lauka iedarbībā pārvietojas pārejas otrā pusē un kļūst par majoritātes lādiņnesējiem (caur pāreju difundējušies majoritātes lādiņnesēji pārejas otrā pusē kļūst par minoritātes lādiņnesējiem un tie rekombinējas ar šajā pusē esošajiem majoritātes lādiņnesējiem). Pārejas iekšējā elektriskā lauka ietekmē dreifējošo minoritātes lādiņnesēju plūsma $p - n$ pārejā rada dreifa strāvu I_{dr} , kas vērsta pretēji difūzijas strāvai (4.18. zīm.). Dreifa strāvas lielumu nosaka tikai minoritātes lādiņnesēju siltumģenerācija, respektīvi, temperatūra. Temperatūrai paaugstinoties, siltumģenerācija kļūst arvien intensīvāka un dreifa strāva pieaug. Dreifa strāvas virzienu nosaka pozitīvo minoritātes lādiņnesēju kustības virziens un tā plūst caur $p - n$ pāreju virzienā no n tipa pusvadītāja uz p tipa pusvadītāju.



4.18. zīmējums. $p - n$ pārejas zonu diagramma.

Nemainīgas temperatūras apstākļos abām pretēji vērstajām difūzijas un dreifa strāvām jābūt vienādām, jo pārejas ārējā ķēdē strāva neplūst (4.18. zīm.), tad:

$$I_{dif} - I_{dr} = 0.$$

Konstruējot $p - n$ pārejas zonu diagrammu, jāievēro, ka divu pusvadītāju kontaktā to Fermi līmeņi zonu diagrammā atrodas vienādā augstumā. Tad abu pusvadītāju enerģijas

zonas pārbīdās par $\Delta W = q\varphi_k$. Lai n tipa pusvadītāja brīvie elektroni varētu nokļūt p tipa pusvadītājā, tiem vadītspējas zonā jāpārvar enerģijas barjera $q\varphi_k$. Arī p tipa pusvadītājā caurumiem, radot difūzijas strāvu, jānokļūst n tipa pusvadītājā, pārvarot barjeru valences zonā (cauruma enerģija ir lielāka, ja tā atrodas uz zemāka enerģijas līmeņa). Turpretī p tipa pusvadītāja minoritātes lādiņnesējiem - elektroniem, radot dreifa strāvu, “jāievelas” vadītspējas zonas “enerģijas bedrē” kļūstot par p tipa pusvadītāja majoritātes lādiņnesējiem.

4.8.3. Caurlaides virzienā ieslēgta $p - n$ pāreja

Ja $p - n$ pārejai pieslēdz sprieguma U_F avotu ar pozitīvo polu pie p tipa apgabala, bet ar negatīvo polu pie n tipa apgabala, tad sprieguma avota radītais ārējais elektriskais lauks ξ_a darbojas pretēji pārejas iekšējam elektriskajam laukam ξ_i un samazina enerģijas barjeras augstumu no $q\varphi_k$ līdz $q(\varphi_k - U_F)$ (4.19. zīm.). Tā rezultātā majoritātes lādiņnesēji pārejas abās pusēs tuvojas piejaukumu joniem un daļēji neitralizē to radīto telpas lādiņu. Tāpēc samazinās piekontakta zonas, respektīvi, $p - n$ pārejas biezums, un pārejā sāk plūst majoritātes lādiņnesēju radīta liela difūzijas strāva.

Spriegumu, kas samazina $p - n$ pārejas iekšējo elektrisko lauku, sauc par $p - n$ pārejas caurlaides spriegumu, un šī sprieguma radīto strāvu - par $p - n$ pārejas caurlaides strāvu:

$$I_F = I_{dif} - I_{dr} > 0.$$

4.8.4. Sprostvirzienā ieslēgta $p - n$ pāreja

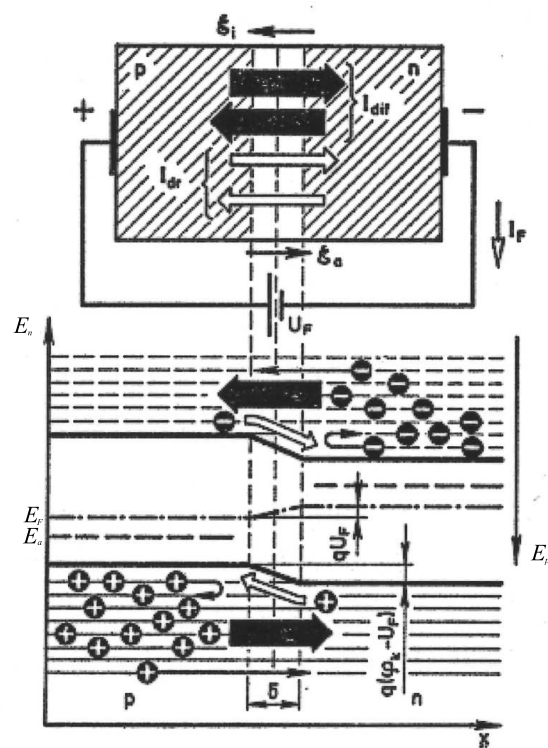
Ja $p - n$ pārejai pieslēdz sprostspriegumu U_R ar pozitīvo polu pie n tipa apgabala un ar negatīvo polu pie p tipa apgabala, tad sprieguma avota radītais ārējais elektriskais lauks pastiprina iekšējo elektrisko lauku un palielina enerģijas barjeras augstumu no $q\varphi_k$ līdz $q(\varphi_k + U_R)$ (4.20. zīm.). Lielais elektriskais lauks atgrūž no pārejas abām pusēm majoritātes lādiņnesējus, kā rezultātā palielinās pārejas biezums un difūzijas strāva kļūst mazāka par dreifa strāvu.

Sprostspriegumu palielinot, enerģijas barjera kļūst tika augsta, ka to vairs nevar pārvarēt neviens majoritātes lādiņnesējs, un difūzijas strāva kļūst skaitliski vienāda ar nulli. Pārejā plūst tikai dreifa strāva un $I_R = I_{dr}$. Dreifa strāvu rada pārejas ārpusē ģenerētie minoritātes lādiņnesēji, kuri siltumkustības dēļ nonāk tukšinātajā zonā, kur tie pārejas elektriskā lauka iedarbībā pārvietojas uz pārejas otru pusi.

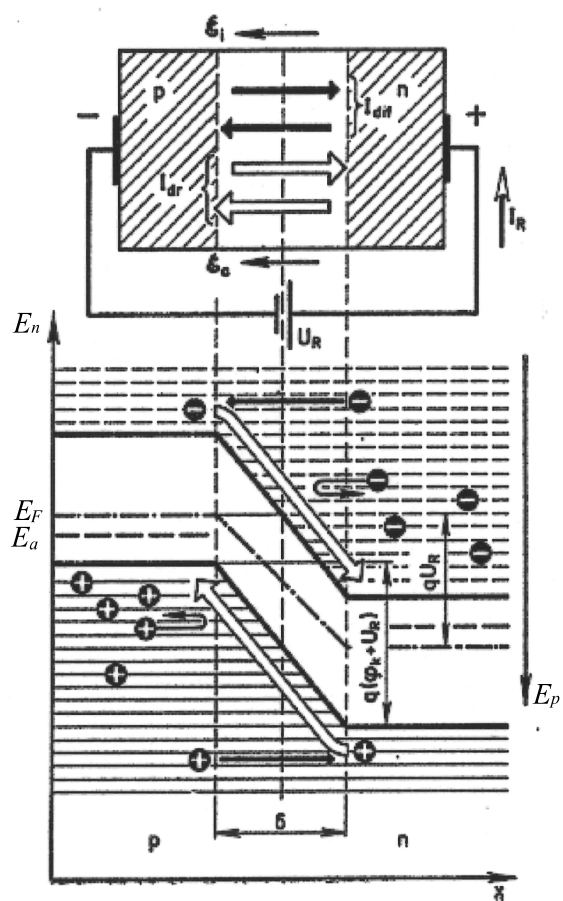
4.8.5. Ideālas $p - n$ pārejas VA raksturlīkne

Ideālas $p - n$ pārejas ārpusē esošo kristāla apgabalu elektrovadītspēja tiek uzskatīta par bezgala lielu, un tāpēc kristālam pievienotā avota spriegums rada elektrisko lauku tikai piekontakta zonā, kuras elektrovadītspēja ir ļoti maza.

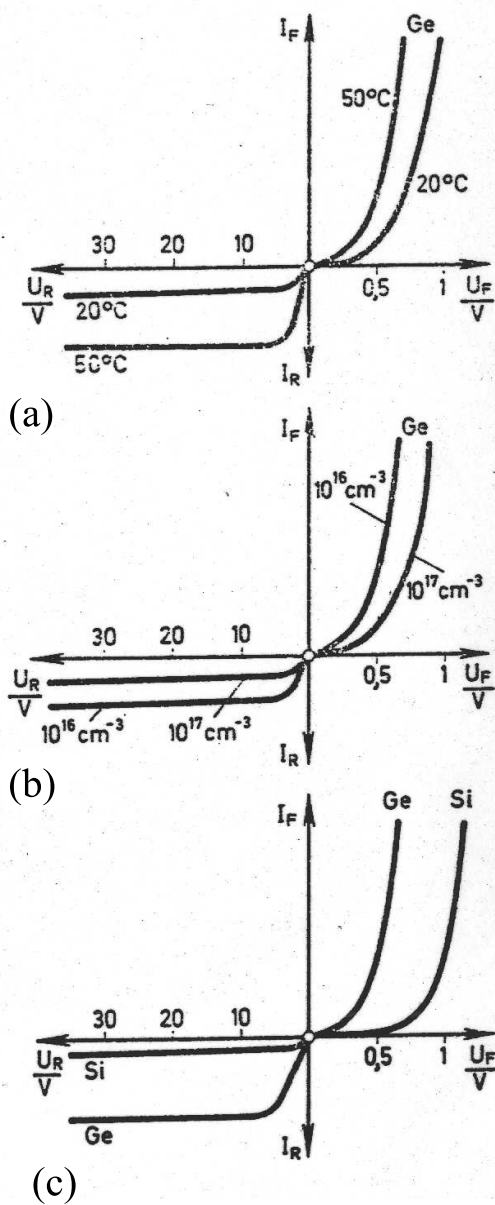
Aplūkojot 4.21. zīm. parādītās $p - n$ pāreju VA raksturlīknes, redzams, ka caurlaides strāva sāk strauji pieaugt tad, kad caurlaides sprieguma skaitliskā vērtība kļūst vienāda ar kontaktpotenciāla skaitlisko vērtību. Ja $\varphi_k = U_F$, tad zonu diagrammā enerģijas barjera pazūd un majoritātes lādiņnesēji difundē uz pārejas otru pusi bez šķēršļiem.



4.19. zīmējums. Caurlaides virzienā pieslēgtas p-n pārejas zonu diagramma.



4.20. zīmējums. Sprostvirzienā ieslēgtas p-n pārejas zonu diagramma.



4.21. zīmējums. $p-n$ pārejas VA raksturlieknes dažādā temperatūrā (a), ar dažādu piejaukumu koncentrāciju (b) uz ar dažādiem pamatpusvadītājiem (c).

Pārejas temperatūras palielināšanās ietekmē abi Fermī līmeņi $F_{F,a}$ un $F_{F,d}$ tuvojas viens otram (sk.4.8.1.) un $p - n$ pārejas kontaktpotenciāls samazinās, bet caurlaides strāva kļūst lielāka (4.21.(a) zīm.).

Piejaucumu koncentrācijas palielināšana attālina abus Fermī līmeņus un līdz ar to palielina kontaktpotenciālu, kā rezultātā caurlaides strāva samazinās (4.21.(b) zīm.).

Tā kā vienādos apstākļos silīcija pārejas kontaktpotenciāls ir apmēram divreiz lielāks par ģermānija pārejas kontaktpotenciālu, tad silīcija pārejā caurlaides strāvas strauja pieaugums sākas tad, kad caurlaides spriegums ir divreiz lielāks nekā ģermānija pārejā (4.21.(c) zīm.).

Ja no viena un tā paša materiāla izgatavotas $p - n$ pārejas atrodas vienādā temperatūrā un tām pieslēgti vienādi caurlaides spriegumi, tad to caurlaides strāvu skaitliskās vērtības nosaka pāreju laukumi. Lieljaudas pusvadītāju ierīcēm ir lieli pāreju laukumi un to caurlaides strāvas sniedzas simtos ampēru, turpretī nelielas jaudas pusvadītāju ierīcēs caurlaides strāvas ir tikai daži miliampēri.

Pieslēdzot pārejai sprostspriegumu, pārejā sāk plūst sproststrāva, kas sākumā nedaudz pieaug, bet pēc tam paliek nemainīga, jo jau neliela sprostsprieguma gadījumā majoritātes lādiņnesēju difūzija caur pāreju izbeidzas un pārejā plūst tikai dreifa strāva, bet tā nav atkarīga no sprostsprieguma. Tā kā ideālās pārejas sproststrāva praktiski nav atkarīga no sprieguma, tad to sauc par sātstrāvu jeb siltumstrāvu, jo tās lielumu nosaka tikai pārejas temperatūra (4.21.(a) zīm.). Ģermānija pāreju sproststrāva ir aptuveni 10^3 reizes mazāka par caurlaides strāvu, bet silīcija pāreju sproststrāva - aptuveni 10^6 reizes mazāka par caurlaides strāvu.

Salīdzinot pārejas ar dažādām piejaucumu koncentrācijām (4.21.(b) zīm.), lielāka sproststrāva novērojama pārejās ar mazu piejaucumu koncentrāciju, jo piejaucumu koncentrācijas palielināšana samazina minoritātes lādiņnesēju skaitu.

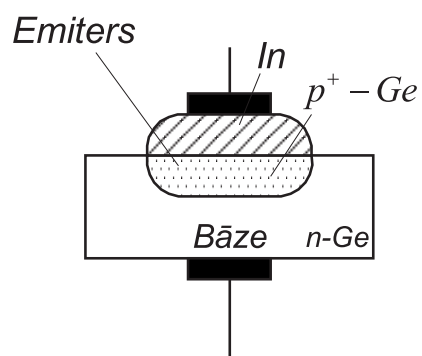
Tā kā silīcijam aizliegtā zona ir platāka nekā ģermānijam, tad silīcija pārejas sproststrāva ir par vairākām kārtām mazāka nekā ģermānija pārejās. Temperatūras palielināšanās ietekmē radušies sproststrāvu pieaugumi ģermānija un silīcija pārejās nav vienādi. Pārejas temperatūrai pieaugot par 10°C , sproststrāva ģermānija pārejās palielinās aptuveni 2 reizes, bet silīcija pārejās - aptuveni 2.5 reizes.

Sproststrāvas, tāpat kā caurlaides strāvas, skaitlisko vērtību nosaka pārejas laukums, un tā ir tieši proporcionāla pārejas laukumam.

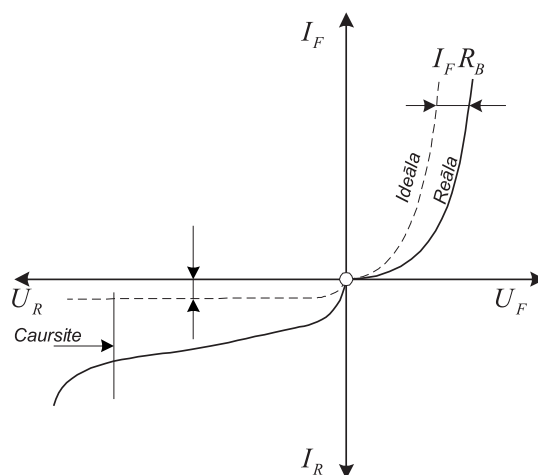
4.8.6. Reāla $p - n$ pāreja

Kā reālas $p - n$ pārejas piemēru aplūkosim 4.22. zīm. attēloto ģermānija diodi. Tā izgatavota no n tipa ģermānija, iekausējot tajā Mendeļejeva periodiskās sistēmas 3.grupas elementu indiju. Izkusušais indijs difundē n tipa ģermānijā un izveido tajā stipri leģētu p^+ apgabalu (stipri leģētu apgabalu ar lielu piejaucumu koncentrāciju apzīmē ar zīmi “+”, piemēram, p^+ vai n^+).

Reālas $p - n$ pārejas caurlaides virziena VA raksturlikne (4.23. zīm.) atrodas zemāk par ideālas pārejas raksturlikni, jo reālā pārejā bāze ir vāji leģēta un tai ir liela pretestība R_B . Tāpēc pārejas piekontakta zonai pieslēgtais spriegums salīdzinājumā ar ideālu pāreju ir par lielumu $I_F R_B$ mazāks un mazāka ir arī caurlaides strāva.



4.22. zīmējums. Reālas $p - n$ pārejas uzbūve.

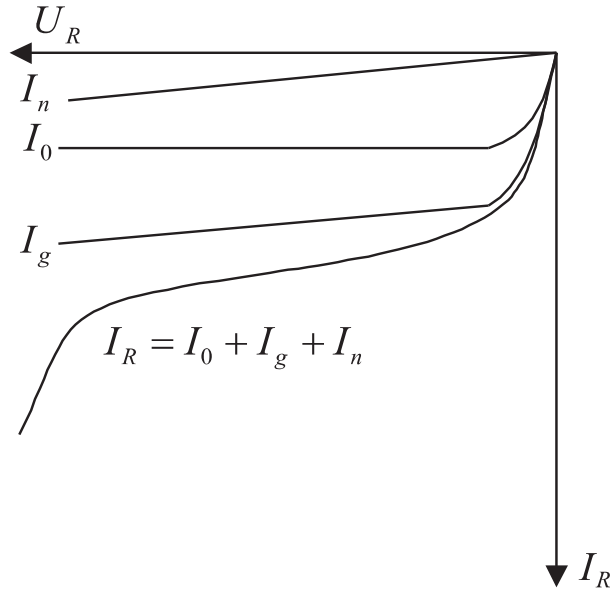


4.23. zīmējums. Reālas un ideālas $p - n$ pārejas VA raksturlīknes.

Reālas $p - n$ pārejas sproststrāva sastāv no vairākām komponentēm (4.24. zīm.):

$$I_R = I_0 + I_g + I_n,$$

kur I_0 - siltumstrāva, ko rada pārejas ārpusē ģenerēto minoritātes lādiņnesēju dreifs, I_g - siltumģenerācijas strāva, ko rada piekontakta zonā siltumģenerācijas dēļ radušos brīvo lādiņnesēju pāru dreifs, I_n - pa pārejas virsmu plūstoša noplūdes strāva. Siltumstrāva I_0 nav atkarīga no sprostsprieguma lieluma. Turpretī siltumģenerācijas strāva I_g , sprostspriegumam pieaugot, palielinās, jo palielinās pārejas (piekontakta zonas) biezums un tur ģenerēto brīvo lādiņnesēju pāru skaits.



4.24. zīmējums. Reālas $p - n$ pārejas sproststrāva un tās komponentes.

Tā kā siltumģenerācijas ātrums piekontakta zonā un ārpus tās ir atkarīgs no temperatūras, tad, temperatūrai palielinoties, palielinās arī siltumstrāva un siltumģenerācijas strāva. Noplūdes strāvas I_n izraisītāji ir kristāliskā režģa defekti, citu vielu klātbūtne un virsmas plēves. Tā ir proporcionāla sprostspriegumam un maz atkarīga no temperatūras. Noplūdes strāvas izmaiņa rada sproststrāvas nestabilitāti.

4.8.7. Reālas $p - n$ pārejas caursite

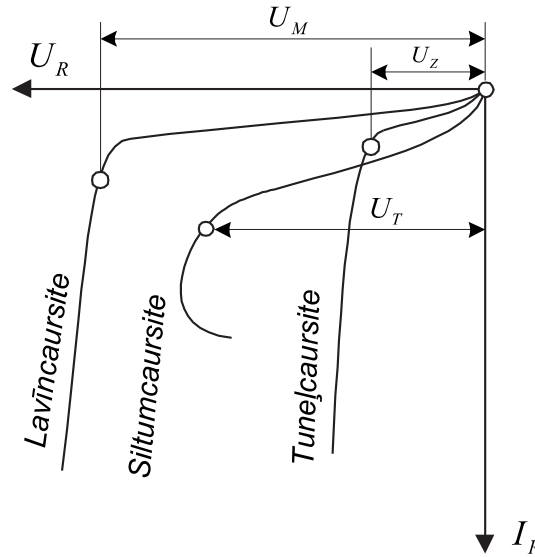
Sprostspriegumam sasniedzot noteiktu robežvērtību, $p - n$ pārejā sākas ļoti straujš strāvas pieaugums, t.i., sākas pārejas caursite.

Siltumcaursite pārejā sākas tad, kad sproststrāvas radītais un pārejai pievadītais siltuma daudzums $P_{piev} = I_R U_R$ ir lielāks par siltuma daudzumu, kuru konvekcijas un izstarošanas veidā aizvada no pārejas. Aizvadīto siltuma daudzumu P_a nosaka pēc formulas:

$$P_a = \frac{T_j - T_a}{R_{thja}}, \quad (4.41)$$

kur T_j - ārejas temperatūra, T_a - vides temperatūra, R_{thja} - siltumpretestība starp pāreju un apkārtējo vidi. Siltumpretestību mēra K/W, un tā raksturo temperatūras starpību, kas nepieciešama 1 W siltuma daudzuma aizvadei no pārejas uz apkārtējo vidi.

Ja $P_{piev} > P_a$, tad pārejas temperatūra pieaug un palielinās minoritātes lādiņnesēju siltumģenerācijas ātrums un sproststrāva, kas savukārt palielina pārejas temperatūru utt. Rodas līdzsaite starp sproststrāvu un temperatūru, kā rezultātā katastrofāli pieaug sproststrāva, bet pārejas spriegums samazinās (4.25. zīm.).



4.25. zīmējums. $p - n$ pārejas VA raksturlīknes caursites rajonā.

Augstās temperatūras dēļ pārejā rodas kristāliskās struktūras izmaiņas un pāreja kļūst nelietojama. Siltumcaursites spriegumu U_T nosaka pārejas temperatūra un temperatūrai palielinoties, U_T strauji samazinās. Ģermānija pārejās siltumcaursite ir noteicošā, bet silīcija pārejās platās aizliegtās zonas dēļ ir mazas sproststrāvas un siltumcaursite tajās parasti nav novērojama.

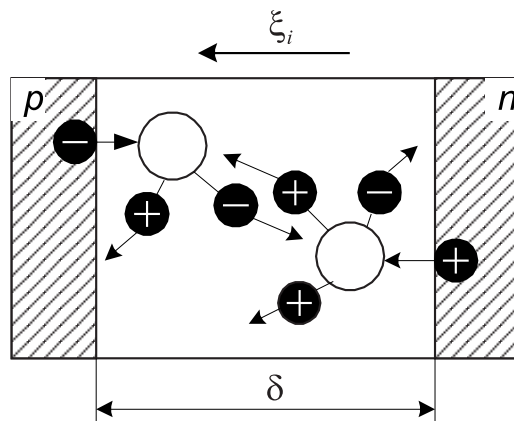
Lavīncaursite rodas vāji leģētās un tāpēc biežās $p - n$ pārejās, kurās minoritātes lādiņnesēja brīvais noskrējienis ir mazāks par pārejas biezumu. Šādas pārejas elektriskajā laukā minoritātes lādiņnesēji var iegūt tik lielu ātrumu un kinētisko enerģiju, ka, saduroties ar pamatpusvadītāja atomiem, tie tiek jonizēti. Sadursmju rezultātā piekontakta zonā rodas daudzi brīvo lādiņnesēju pāri, kas lavīnveidīgi palielina sproststrāvu. Lavīncaursites dēļ, pārejā ieejošo minoritātes lādiņnesēju skaits n_0 ir mazāks par izejošo lādiņnesēju skaitu n (4.26. zīm.). Lavīncaursiti raksturo ar lādiņnesēju pavairošanas koeficientu M , kura lielumu nosaka pēc empīriskas formulas:

$$M = \frac{n}{n_0} = \frac{I_R}{I_0} = \frac{1}{1 - \left(\frac{U_R}{U_M}\right)^n}, \quad (4.42)$$

kur I_0 - siltumstrāva, I_R - sproststrāva, U_R - sprostsprriegums, pie kura nosaka M , U_M - sprostsprriegums, pie kura sākas lavīncaursite, n - koeficients, kurš atkarībā no pamatpusvadītāja materiāla ir no 2 līdz 6.

Tā kā elektriskā lauka intensitāte piekontakta zonā ir tieši proporcionāla pārejas biezumam ($\xi = U_R/\delta$), tad piemaisījumu koncentrācijas palielināšana samazina pārejas biezumu un stipri leģētas pārejas lavīncaursite sākas pie mazākiem sprostsprriegumiem nekā vāji leģētās pārejas.

Pārejas temperatūras palielināšanās rezultātā palielinās pusvadītāja kristāliskā režģa siltumsvārstību amplitūdas, kas samazina minoritātes lādiņnesēju dreifa ātrumu, un lavīncaursite sākas pie lielāka sprostsprrieguma.



4.26. zīmējums. Brīvo lādiņnesēju pāru rašanās piekontakta zonā.

Tunelcaursite rodas ļoti plānās $p-n$ pārejās, kas izgatavotas no deģenerēta (ļoti stipri leģēta) pusvadītāja. Deģenerētam p tipa pusvadītājam Fermī līmenis pārvietojas valences zonā, bet deģenerētam n tipa pusvadītājam - vadībspējas zonā.

Pieslēdzot deģenerētai $p-n$ pārejai sprostsprriegumu (4.27. zīm.), p - tipa pusvadītāja valences zona novietojas vienā līmenī ar n tipa pusvadītāja vadībspējas zonu. Tā kā visi enerģijas līmeņi zem Fermī līmeņa ir aizņemti, bet virs tā - brīvi, tad rodas ļoti intensīva elektronu aizplūšana no p tipa apgabala valences zonas uz n tipa apgabala vadībspējas zonu, pie tam var uzskatīt, kas elektroni nonākuši no valences zonas vadībspējas zonā it kā pa tuneli, jo elektronu enerģija nav izmainījusies. Parādību, kad lādiņi pārvar enerģijas barjeru bez enerģijas izmaiņas, sauc par tuneļefektu. Tunelcaursites spriegums, temperatūrai palielinoties, samazinās, tāpēc ka samazinās aizliegtās zonas plātums un enerģijas līmeņi valences un vadībspējas zonās izlīdzinās mazāku sprostsprriegumu apstākļos. Lavīncaursite un tunelcaursite neizraisa neatgriezeniskas izmaiņas pusvadītājā un tāpēc ir atgriezeniski procesi, kas kļūst neatgriezeniski tikai tad, ja sproststrāvas ir ļoti lielas, t.i., kad pārejā sākas siltumcaursite. Ģermānija pārejās lielo sproststrāvu dēļ parasti novērojama tikai siltumcaursite, bet silīcija pārejās siltumcaursite sākas tikai pēc lavīncaursites vai tuneļcaursites.

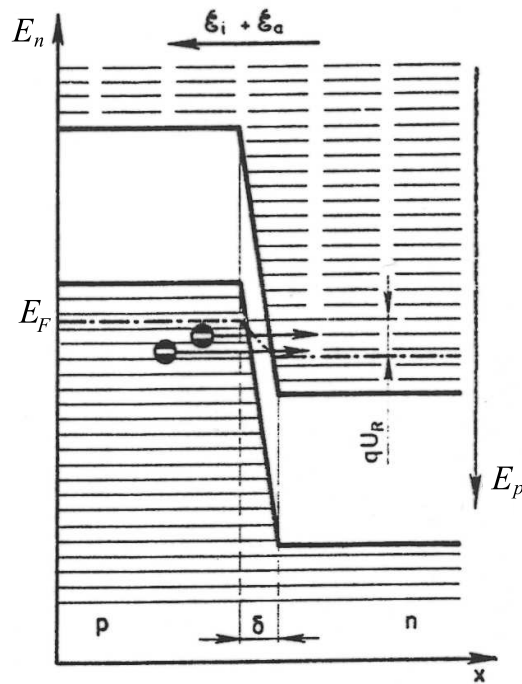
4.8.8. Reālas $p-n$ pārejas kapacitātes

Caurlaides virzienā ieslēgtā reāla $p-n$ pārejā rodas caurumu difūzija virzienā no stipri leģēta emitera uz bāzi. Bāzē caurumi kļūst par minoritātes lādiņnesējiem un sāk rekombinēties ar elektroniem. Tā kā bāze ir vāji leģēta, tad visi caurumi nespēj rekombinēties un pārejas tuvumā rodas caurumu pārpalikums, kas uzlādē bāzi pozitīvi. Šo pozitīvo lādiņu radīto kapacitāti sauc par difūzijas kapacitāti. Izmainot caurlaides spriegumu par ΔU_F , lādiņš bāzē izmainās par ΔQ . Tad difūzijas kapacitāti C_{dif} izsaka formula:

$$C_{dif} = \frac{\Delta Q}{\Delta U_F}. \quad (4.43)$$

Difūzijas kapacitāte raksturo lādiņu uzkrāšanos bāzē, un tā ir proporcionāla caurlaides strāvai.

Sprostvirzienā ieslēgtas $p-n$ pārejas piekontakta zonā esošie nekustīgie piejaukumu joni rada pārejas abās pusēs pretēju polaritāšu telpas lādiņus. Telpas lādiņu radīto ka-



4.27. zīmējums. Sprostvirzienā slēgtas deģenerētas p-n pārejas zonu diagramma.

pacitāti sauc par barjerkapacitāti C_b . Tā ir proporcionāla pārejas laukumam S un apgriezti proporcionāla pārejas biezumam δ . Tās lielumu nosaka pēc plakana kondensatora formulas:

$$C_b = S \frac{\epsilon \epsilon_0}{\delta}. \quad (4.44)$$

Barjerkapacitātes lielumu nosaka sprostsprieguma lielums, un, sprostspriegumam palielinoties, barjerkapacitāte samazinās, jo palielinās pārejas biezums.

V nodaļa

CIETU ĶERMEŅU MAGNĒTISKĀS ĪPAŠĪBAS

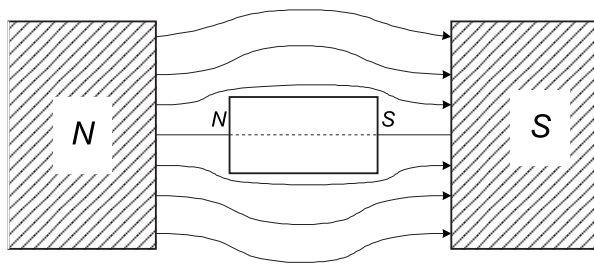
5.1. Diamagnētiķi, paramagnētiķi, feromagnētiķi

Visus ķermeņus pēc magnētiskās uzņēmības vērtības un zīmes var iedalīt trijās grupās: diamagnētiķi, paramagnētiķi, un feromagnētiķi.

Par diamagnētiķiem sauc ķermeņus, kuriem magnētiskā uzņēmība ir mazāka par nulli, $\chi < 0$, $|\chi| < 1$. Diamagnētiķiem katram atomam visu orbitālo un spina magnētisko momentu summa ir vienāda ar nulli.

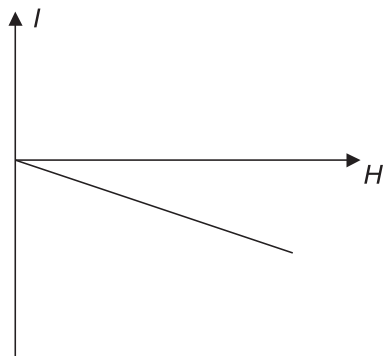
Diamagnētiķī, kas ir ievietots magnētiskā laukā (5.1. zīm.) rodas iekšējais magnētiskais lauks, kas ir vērsts pretēji ārējam laukam. Diamagnētiķis pavājina ārējo lauku (diamagnētiķis tiek izstumts no magnētiskā lauka).

Diamagnētiķi ir varš, sudrabs, zelts, cinks, dzīvsudrabs, svins, ūdens, inertās gāzes un citas vielas.

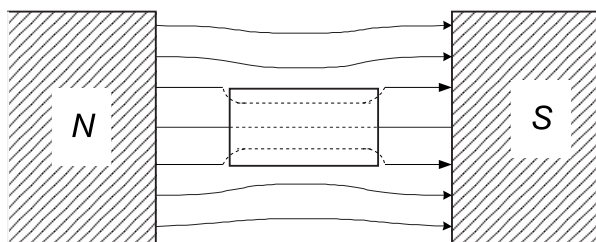


5.1. zīmējums. Magnētiskais lauks, kas rodas pārklājoties uzmagnetizētā diamagnētiķa laukam un ārēja magnētiskajam laukam.

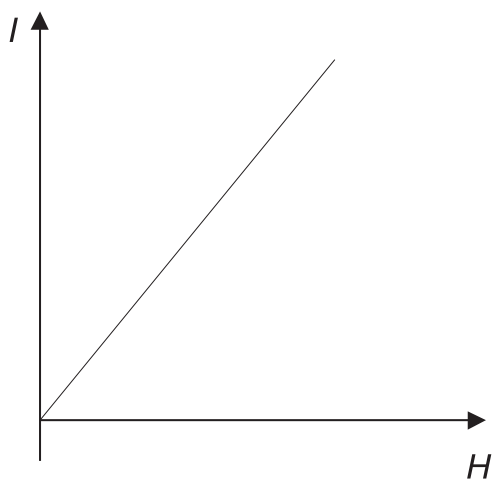
Par paramagnētiķiem sauc ķermeņus, kuriem magnētiskā uzņēmība ir lielāka par nulli, $\chi > 0$, $|\chi| < 1$. Paramagnētiķiem katra atoma kopējais magnētiskais moments ir atšķirīgs no nulles. Nepastāvot ārējam magnētiskajam laukam, magnētisko momentu orientācijai ir gadījuma raksturs, tāpēc paramagnētisks ķermenis pats par sevi nav magnēts. Bet ārējā magnētiskā laukā atomu magnētiskie momenti tiecas pagriezties pa lauka spēka līnijām. Paramagnētiķis, nokļūstot magnētiskā laukā, to pastiprina (5.3. zīm).



5.2. zīmējums. Atkarības $I(H)$ grafiks diamagnētiķiem.



5.3. zīmējums. Magnētiskais lauks, kas rodas pārklājoties magnetizēta paramagnētiķa laukam un ārējam magnētiskajam laukam.



5.4. zīmējums. Atkarības $I(H)$ grafiks paramagnētiķiem.

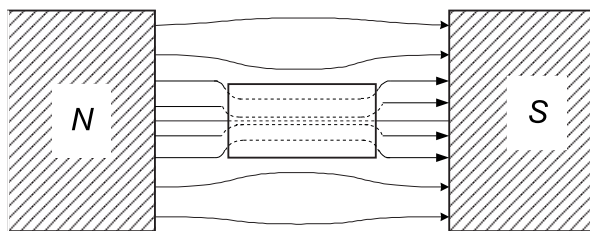
Paramagnētiskām vielām nepiemīt paliekošā magnetizācija pēc magnetizējošā lauka noņemšanas. Pie paramagnētiskām vielām pieder magnijs, kalcijs, hroms, alumīnijs, mangāns, molibdēns, platīns. Diamagnētiķi un paramagnētiķi ir magnētiski vājas vielas.

Spēcīgs magnētisms tiek novērots vielām, taču ne visām, kas atrodas cietā stāvoklī: ir nepieciešams (bet nav pietiekami), lai vielas kristālais režģis ietvertu atomus ar nepilnīgajām iekšējām čaulām. Tādas vielas sauc par feromagnētiķiem, jo to visplašāk pazīstamais pārstāvis ir dzelzs. No D. I. Mendeļejeva periodiskās sistēmas elementiem, kuriem piemīt feromagnētiskās īpašības, ir dzelzs, kobalts, niķelis, gadolīnijs, un pie ļoti zemām temperatūrām - erbijs un disprozijs.

Daudzi sakausējumi arī ir feromagnētiķi, tai skaitā arī sakausējumi no neferomagnētiskiem elementiem. Tos sauc par geisleriem.

Feromagnētiķi - cieti ķermeņi, kuru atsevišķajiem apgabaliem piemīt spontānā magnetizācija, t.i, tie ir jau magnetizēti bez magnētiskā lauka klātbūtnes.

Neskatoties uz to, ka feromagnētiķi ārējā magnētiskā laukā magnetizējas līdzīgi paramagnētiķiem, magnētiskais lauks feromagnētiskās vielas iekšienē ir daudz reiz spēcīgāks, nekā paramagnētiskajās vielās. Feromagnētiķa lauks izsauc lielas ārējā lauka izmaiņas. Rezultējošā magnētiskā lauka izskats ir tāds, it kā tā spēka līnijas būtu ievilkas feromagnētiķī (5.5. zīm.).



5.5. zīmējums. Magnētiskais lauks, kas rodas pārklājos magnetizētājam feromagnētiķa laukam ar ārējo magnētisko lauku.

Nosauksim galvenās feromagnētiķu īpašības, kuras novēroja pētījumu laikā.

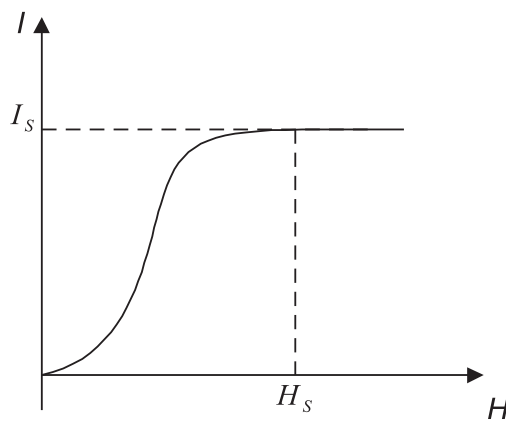
1. Feromagnētiķiem piemīt ļoti liela magnētiskā uzņēmība $\chi \sim 10^3 \div 10^5$ un pat jau vājos laukos tie nonāk magnētiskā piesātinājuma stāvoklī (5.6. zīm., kur I_s un H_s - magnetizācija un piesātinājuma intensitāte). Feromagnētiķa vislielāko magnetizācijas stāvokli sauc par magnētisko piesātinājumu.

Eksperimentāli atkarību $\chi(H)$ (5.7. zīm.) pirmo reizi noteica Stoļetovs (1878.g.), kurš, lai izvairītos no polu atmagnetizējošas ietekmes, izmantoja toroidālus paraugus.

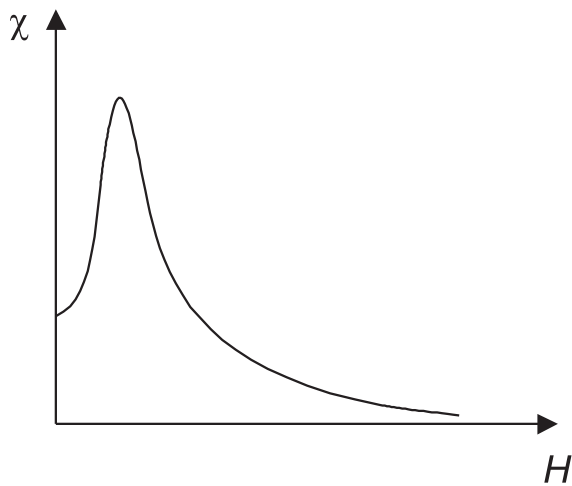
Magnētiskās caurlaidības likne atšķirsies no magnētiskās uzņēmības tikai ar mērogu. Feromagnētiķiem nevar definēt magnētisko uzņēmību un magnētisko caurlaidību kā noteiktus, pastāvīgus lielumus, jo eksistē nelineāra saite starp magnetizāciju $\vec{I}$ un intensitāti $\vec{H}$, kā arī starp indukciju $\vec{B}$ un intensitāti $\vec{H}$:

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \vec{I}. \quad (5.1)$$

2. Feromagnētiķiem ir raksturīgas histerēzes parādības, kas tiek novērotas pārmagnetizējot paraugus. Feromagnētiķu magnetizācija ir atkarīga no visas iepriekšējās

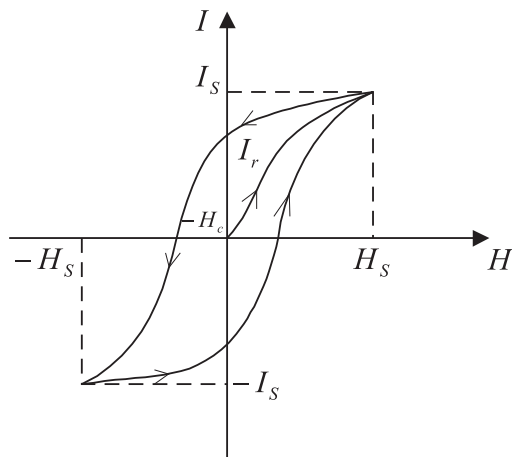


5.6. zīmējums. Atkarības $I(H)$ grafiks feromagnētiķa vislielākā magnetizācijas stāvoklī.



5.7. zīmējums. Atkarības $\chi(H)$ grafiks feromagnētiķiem.

magnetizējošā lauka intensitātes $\vec{H}(t)$ izmaiņas. Tā, piemēram, izslēdzot ārējo magnētisko lauku, novēro paliekošo magnetizāciju $\vec{I}_r = \vec{I}(0)$, kuras novērsšanai ir nepieciešams pielikt pretēji vērstu lauku H_c , ko sauc par aizturošo lauku vai par koercitīvo spēku (5.8. zīm.).



5.8. zīmējums. Histerēzes cilpa.

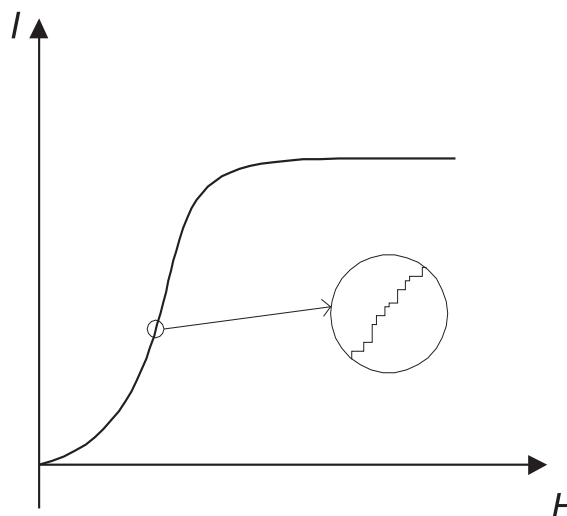
5.8. zīm. attēlotā noslēgtā likne tiek saukta par histerēzes cilpu. Dažādiem feromagnētiķiem šīs līknes izskats ir atšķirīgs, histerēzes cilpas laukums ir proporcionāls enerģijai patēriņam, kas ir nepieciešams vienreizējai parauga tilpuma vienības pārmagnetizēšanai. Šī procesa darbs pilnīgi pāriet siltumā. Tāpēc daudzkārtīgi pārmagnetizējot, feromagnētiķis sakarst un, jo intensīvāk, jo lielāka histerēzes cilpa tam ir raksturīga. Atkarībā no histerēzes cilpas formas un laukuma feromagnētiskos materiālus iedala “mīkstos” un “cietos”, vai augstkoercitīvos. Magnētiski mīkstiem materiāliem, kas tiek izmantoti elektrisko mašīnu un iekārtu serdes izgatavošanai, piemīt mazs koercitīvs spēks un augsta caurlaidība. Šī tipa labākajiem sakausējumiem μ sasniedz vērtību ap $\approx 10^5$, bet koercitīvais spēks $H_c \approx 0.32$ A/m.

Augstkoercitīvi materiāli raksturojas ar lielu koercitīvo spēku un paliekošo magnetizāciju. Tā, *magnīto* sakausējumam, kuru izmanto pastāvīgu magnētu izgatavošanai, $H_c \approx 5 \cdot 10^4$ A/m.

3. Monokristāliskajiem feromagnētiskiem paraugiem tika novēroti pašmagnetizācijas (spontānās magnetizācijas) apgabali, kurus nosauca par domēniem. Parasti tie ir pareizas formas apgabali, kuru magnetizācija sasniedz piesātinājumu pat tad, ja nav ārējo magnētisko lauku. Tomēr kopumā apgabalam, kas satur daudzus dažādā virzienā magnetizētus domēnus, praktiski nepiemīt magnetizācija. Domēnu pastāvēšana tika pierādīta vairākos pētījumos. Viens no eksperimentiem - pulverveida figūru jeb Akulova - Bitlera metode. Ar šo figūru palīdzību var novērot magnetizācijas sadalījumu uz feromagnētiķa kristālu virsmas. Feromagnētisko vielu domēnu struktūru sīkāk apskatīsim šajā darbā vēlāk.

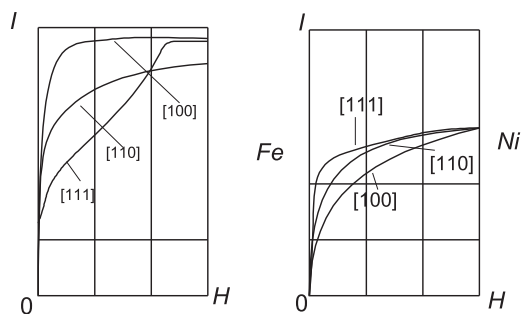
Bez tam, magnetizācijas līknes detalizēta analīze tās visstāvākajā apgabalā parādīja, ka magnetizācija mainās lēcienveidīgi, pakāpeniski pieaugot H (Barkgauzena pakāpieni, 1919).

Šie pakāpieni rodas pārmagnetizējot atsevišķus domēnus (5.9. zīm.)



5.9. zīmējums. Lēcienveida magnetizācija magnetizācijas līknes stāvākajā apgabalā.

4. Feromagnētisko kristālu magnētiskās īpašības ir ļoti anizotropas. Monokristālos pastāv virzieni, gar kuriem magnetizācija notiek visvieglāk un magnētisko piesātinājumu sasniedz pie nelielām ārējā magnētiskā lauka H vērtībām. Šos virzienus sauc par vieglās magnetizācijas virzieniem. Dzelzij tādi ir $[100]$, niķelim - $[111]$ (5.10. zīm.). Dzelzij virzienos $[110]$ un $[111]$ un niķelim virzienos $[100]$ un $[110]$ magnetizācija notiek daudz grūtāk un magnētiskais piesātinājums tiek sasniegts pie daudz lielākas ārējā magnētiskā lauka intensitātes.



5.10. zīmējums. Kristālu magnetizācijas līknes dažādos kristalogrāfiskajos virzienos.

5. Feromagnētisko ķermeņu magnetizācija notiek, izmainoties to formai un izmēriem. Šī parādība ieguva magnetostrīkijas nosaukumu.
6. Feromagnētiskās īpašības paraugos novēro tikai kristāliskā stāvoklī, pie temperatūras, kas nepārsniedz robežtemperatūru, kuru sauc par feromagnētisko Kīrī punktu. Sasniedzot temperatūras vērtību virs šīs temperatūras, spontānā magnetizācija pazūd un feromagnētiķis kļūst par paramagnētiķi.

5.2. Landau diamagnētisms

Ja metāla vadāmības elektrons kustas magnētiskā laukā, tad saskaņā ar klasisko statistiku, magnētiskā uzņēmība ir vienāda ar nulli. Šo rezultātu nosaka tas, ka Lorenca spēks ir perpendikulārs elektrona ātrumam, un tāpēc tas neveic darbu. Pie tam elektronu sadalījums pa enerģijas līmeņiem paliek tāds pats kā bez magnētiskā lauka, un magnētiskais moments kļūst vienāds ar nulli.

Brīvo elektronu diamagnētisma problēmas risinājumu deva Landau. 1930. gadā viņš parādīja, ka saskaņā ar kvantu teoriju magnētiskais lauks izmaina enerģijas līmeņu sadalījumu. Šos līmeņus var atrast, risinot Šrēdingerā vienādojumu elektronam pastāvīgā magnētiskā laukā.

Elektrona hamiltoniānam ar lādiņu $-e$ un masu m magnētiskajā laukā, kura vektoriālais potenciāls ir vienāds ar $\vec{A}$, ir sekojošs izskats:

$$H = \frac{(\vec{P} + e\vec{A})^2}{2m}. \quad (5.2)$$

Atbilstošu operatoru iegūst aizvietojot impulsu $\vec{p}$ ar operatoru $-i\hbar\nabla$. Tad no laika neatkarīgs, Šrēdingerā vienādojums iegūst sekojošu izskatu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{ie\hbar\vec{A}\cdot\nabla}{m}\psi + \frac{e^2A^2}{2m}\psi = E\psi. \quad (5.3)$$

Šeit E - elektrona enerģija. Uzskatīsim, ka pastāvīgs magnētiskais lauks $\vec{B}$ ir virzīts gar asi z . Šī lauka vektoriālo potenciālu var noteikt dažādi. Pēc Landau:

$$A_x = A_z = 0, \quad A_y = Bx. \quad (5.4)$$

Līdz ar to, var noteikt pareizu magnētiskās indukcijas vērtību, kuru nosaka izteiksme $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$. Izteiksmi (5.4) ievietojot (5.3), iegūsim sekojoša veida Šrēdingerā vienādojumu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{ie\hbar B}{m}x\frac{\partial\psi}{\partial y} + \frac{e^2B^2}{2m}x^2\psi = E\psi. \quad (5.5)$$

Šo vienādojumu var atrisināt, pieņemot, ka

$$\psi = U(x) \exp[i(k_y y + k_z z)]. \quad (5.6)$$

Ievietojot iegūto izteiksmi Šrēdingerā vienādojumā (5.5), atradīsim, ka

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U}{dx^2} + \frac{e^2B^2}{2m}\left(x + \frac{k_y\hbar}{eB}\right)^2 U = \left(E - \frac{k_z^2\hbar^2}{2m}\right) U. \quad (5.7)$$

Ieguvām Šrēdingerā vienādojumu harmoniskajam oscilatoram, kura leņķiskais ātrums ω ir tāds pats kā vienādība $\omega = \frac{e}{m}B$.

Tāpēc enerģiju var izteikt šādi:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{k_z^2\hbar^2}{2m}, \quad (5.8)$$

kur n - galvenais kvantu skaitlis.

Funkcija $U(x)$ - lineāra oscilatora uzdevuma atrisinājums. Tā ir atkarīga no argumenta $(x + k_y)/eB$, jo dotajam k_y funkcijas $U(x)$ centrs atrodas nevis koordinātu sākumpunktā, bet p -tā - $k_y\hbar/eB$.

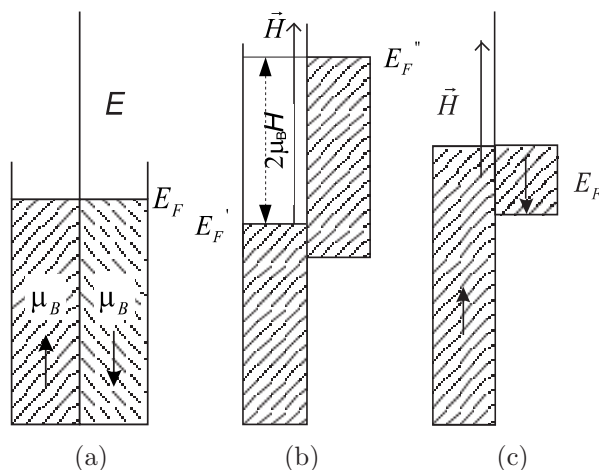
Mēs redzam, ka magnētiskā lauka kustība plaknē xy ir kvantēta. Atbilstošos līmeņus sauc par Landau līmeņiem. Tie ir cieši saistīti ar ciklotrona frekvenci, kuru noteica ciklotronās rezonances pētījumos. Balstoties uz kvantu mehānikas robežnosacījumiem, var noteikt, ka starojuma laiks ar ciklisko frekvenci ω izsauc pārejas starp stāvokļiem ar dažādām kvantu skaitļa n vērtībām.

Tā kā mēs apskatām lineāra oscilatora tipa uzdevumu, tad ir spēkā izvēles likums, kas ierobežo izmaiņas ar vērtībām ± 1 . Elektronu enerģija nav atkarīga no kvantu skaitļa, kas noved pie daudzkārtīgas līmeņu deģenerācijas. $\hbar k_z = p_z$ elektrona impulsa projekcija virzienā $\vec{B}$.

5.3. Pauli paramagnētisms

Metālos magnētiskās uzņēmības veidošanā ieguldījumu dod ne tikai joni, kas atrodas režģa mezglos, bet arī vadāmības kolektīvizētie elektroni. Eksperimentālie dati norāda uz to, ka visi sārnu metāli ir paramagnētiski. Pie tam to paramagnētiskā uzņēmība nav atkarīga no temperatūras. Tā kā sārnu metālu režģis ir diamagnētisks, paramagnētismu var radīt tikai elektronu gāzes paramagnētisms.

Elektronu gāzes paramagnētisms ir saistīts ar to, ka elektroniem piemīt spina magnētiskais moments, kas vienāds ar Bora magnetonu. Bez ārējā magnētiskā lauka ($\vec{B} = 0$) elektronu gāzes rezultējošais magnētiskais moments pie $T = 0\text{K}$ ir vienāds ar nulli. Elektroni ieņem vadāmības zonā visus līmeņus līdz Fermī līmenim tā, ka katrā līmenī atrodas tikai divi elektroni ar pretēji vērstiem spiniem. Tas ir attēlots 5.11.(a) zīm., kur vadāmības zona ir sadalīta divās puszonās, kas atšķiras pēc spinu virziena.



5.11. zīmējums. Vadāmības elektronu paramagnētiskās uzņēmības aprēķiniem.

Pie $H = 0$ elektronu skaits šajās puszonās ir vienāds un elektronu gāzes rezultējošais magnētiskais moments ir nulle. Pieliekot lauku, katrs kreisās puszonas elektrons iegūst

papildus enerģiju $U' = -\mu_B H$, bet labās puszonas elektrons - enerģiju $U'' = +\mu_B H$. Tas izraisa diferenci starp Fermī līmeņiem $E_F'' - E_F' = 2\mu_B H$ (5.11. (b) zīm.), kura izlīdzinās pateicoties tam, ka daļai labās puszonas elektronu spini “apgriežas” un tie pāriet kreisajā puszonā (5.11. (c) zīm.). Tā kā visi iekšējie līmeņi puszonās ir aizņemti, tad spinu apgriešanās var piedalīties tikai tie elektroni, kas atrodas Fermī sadalījuma līknes izplūdušajā zonā, kura satur brīvus līmeņus. Tādu elektronu skaits ir vienāds ar

$$\Delta n = \frac{K_B T}{E_F} n, \quad (5.9)$$

kur n - elektronu gāzes koncentrācija.

No šī daudzuma $\Delta n' = C e^{\mu_B H / K_B T}$ elektroniem magnētiskie momenti būs orientēti gar H , bet $\Delta n'' = C e^{-\mu_B H / K_B T}$ elektroniem - pretēji H (C - konstante).

Metāla tilpuma vienības magnētiskais moments, kuru nosaka spinu apgriešanās, ir vienāds:

$$I = (\Delta n' - \Delta n'') \mu_B = C \mu_B (e^\beta - e^{-\beta}), \quad (5.10)$$

kur $\beta = \frac{\mu_B H}{K_B T}$. Tā kā $\Delta n = \Delta n' + \Delta n'' = C(e^\beta + e^{-\beta})$, tad $C = \frac{\Delta n}{e^\beta + e^{-\beta}}$. Ievietojot to izteiksmē (5.10), atradīsim, ka

$$I = \Delta n \mu_B \frac{e^\beta - e^{-\beta}}{e^\beta + e^{-\beta}} = \Delta n \mu_B \operatorname{th} \beta.$$

Pie $\beta \ll 1$, $\operatorname{th} \beta \approx \beta$ un

$$I = \frac{\Delta n \mu_B^2}{K_B T} H. \quad (5.11)$$

Ievietojot izteiksmi (5.11) no (5.9), iegūsim

$$I \cong \frac{n \mu_B^2}{E_F} H. \quad (5.12)$$

Elektronu gāzes paramagnētiskā uzņēmība

$$\chi \cong n \frac{\mu_B^2}{E_F}. \quad (5.13)$$

Daudz precīzāki aprēķini parāda, ka

$$\chi = \frac{3}{2} \frac{n \mu_B^2}{E_F}. \quad (5.14)$$

5.4. Veisa molekulārais lauks

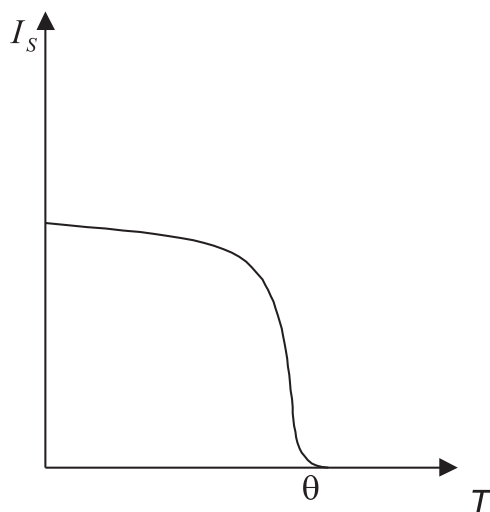
Ilgu laiku nevarēja rast skaidrojumu feromagnētiķu pamatīpašībai - to spējai magnetizēties pat relatīvi vājos laukos. Pirmais soli šajā virzienā spēra krievu fiziķis Rozings (1892), kurš pieņēma, ka feromagnētiķī pastāv īpaši spēki, kuri rada dažādu feromagnētiķa apgabalu magnetizāciju bez ārēja lauka.

Pēc franču fiziķa Veisa (1907) teorijas, šī pašmagnetizēšanās, vai, citiem vārdiem, spontānā magnetizācija dažādos feromagnētiķa apgabalos ir vērsta dažādi, tāpēc bez

magnētiskā lauka feromagnētisks materiāls kopumā ir nemagnetizēts. Pieliekot magnētisko lauku, magnetizētie apgabali orientējas lauka virzienā, tādējādi notiek magnetizēšanās process.

Veiss mēģināja izveidot kvantitatīvu pašmagnetizācijas pastāvēšanas teoriju feromagnētiķos. Veisa attīstītā pusfenomenoloģiskā teorija, vēl līdz kvantu mehānikas izveidošanas, ļāva izskaidrot feromagnētiķu uzvedību mainoties temperatūrai un ārējam laukam, kā arī magnetizēšanas piesātinājuma atkarību no temperatūras.

Magnetizēšanas piesātinājuma atkarību no temperatūras pirmo reizi eksperimentāli izpētīja franču fiziķis Kirī. Pēc viņa datiem, magnetizācijas piesātinājums (5.12. zīm.) jebkurā feromagnētiķī samazinās pieaugot temperatūrai, šis samazinājums ir ļoti nebūtisks, gandrīz nepamanāms.



5.12. zīmējums. Atkarības $I_s(T)$ grafiks.

Pieaugot temperatūrai magnetizācijas piesātinājums sāk samazināties arvien ātrāk un ātrāk. Augsto temperatūru apgabalā šis kritums notiek ļoti ātri, un, kā jau iepriekš tika minēts, pie kādas kritiskas temperatūras, kuru sauc par Kirī feromagnētisko punktu, feromagnētiķa specifiskās īpašības pazūd, pašmagnetizācija kļūst vienāda ar nulli.

Lai izskaidrotu norādītās likumsakarības, Veiss pieņēma, ka feromagnētiķu iekšā pastāv īpašs iekšējais molekulārs lauks, kurš uzmagnetizē atsevišķus feromagnētiķa apgabalus līdz piesātinājumam. Iekšējais molekulārais lauks jeb Veisa lauks ir ekvivalents mijiedarbībai, kas liek jonu un atomu magnētiskajiem momentiem orientēties vienā virzienā. Orientējošajai Veisa lauka iedarbībai pretī darbojas elementāro magnētisko momentu siltumkustība. Veisa lauku mēs uzskatām par ekvivalentu kādam efektīvam magnētiskam laukam H_I , kas iedarbojas uz elektronu spiniem. Ir jāuzskata, ka lauks H_i ir proporcionāls magnetizācijai:

$$H_i = \lambda I, \quad (5.15)$$

kur λ - molekulārā lauka konstante.

Virš Kirī punkta uzņēmību var iegūt, pieņemot Kirī likuma $\chi = \frac{C}{T}$ pareizību, ja uzskatīt magnētisko lauku vienādu ar ārējā lauka H un lauka H_i summu.

Tad

$$\frac{I}{H + \lambda I} = \frac{C}{T} \quad (5.16)$$

vai

$$\chi = \frac{I}{H} = \frac{C}{T - C\lambda}. \quad (5.17)$$

No šejienes seko, ka pie temperatūras $\theta = C\lambda$ un pie nulles ārējā lauka, parādās magnetizācija, kas nav vienāda ar nulli:

$$\chi = \frac{C}{T - \theta}. \quad (5.18)$$

Šī izteiksme, kas pazīstama kā Kirī - Veisa likums, labi apraksta novērojamo uzņēmības izmaiņu virs Kirī punkta.

Bet, neskatoties uz labu un kvalitatīvu feromagnētiķī notiekošo parādību aprakstu, jautājums par molekulārā lauka dabu palika atklāts.

Fiziķa J. G. Dorfmana (1927) elektronu izkliedes pētījumos tika parādīts, ka līdz piesātinājumam magnetizētos feromagnētiķos Veisa molekulārajam laukam ir nemagnētiska daba. Noslēpumainā Veisa lauka daba tika izskaidrota vēlāk Frenkeļa un Heizenberga darbos, pamatojoties uz Einšteina un de Gaza eksperimentiem.

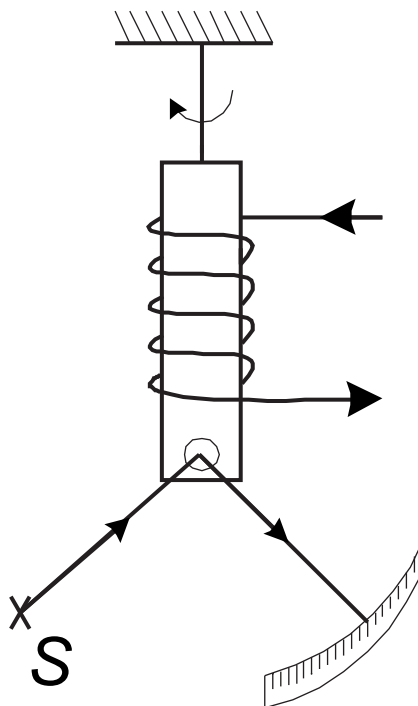
5.5. Žiromagnētiskie pētījumi

Jau tika atzīmēts, ka atbildi uz vēl vienu jautājumu, kurš radās pētot feromagnētisma parādību: kas tad ir elementārais feromagnētisma nesējs? - deva Einšteina un de Gaza pētījumi (1916).

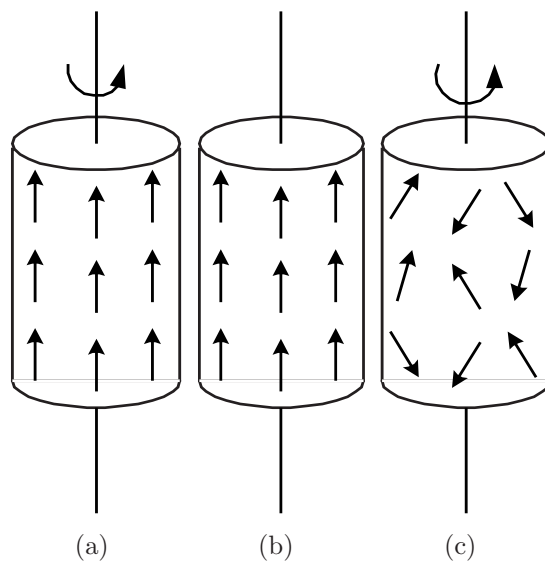
Einšteina un de Gaza eksperimentos pirmo reizi tika noteikta magnētiskā momenta parādīšanās magnetizējot ķermeni, kura ieguva magnetomehāniskā efekta nosaukumu. Šajos pētījumos neliels dzelzs stienis, kas bija piekārts tievā elastīgā diegā, tika ievietots solenoīda iekšienē un tam tika pievadīta pietiekami stipra strāva (5.13. zīm.). Tad solenoīda iekšienē veidojas spēcīgs magnētiskais lauks, un tajā ievietots dzelzs stienis magnetizēties. Magnetizējoties stienis pagriežas un savērpj diegu. Izmainot strāvas virzienu solenoīdā, dzelzs stienis pārmagnetizējas un sāk griezties uz citu pusi. Diega savērpšanas leņķis būs ļoti neliels un, lai to novērotu, pie diega ir jāpiestiprina spogulītis un jānovēro gaismas “zaķīša” stāvoklis uz skalas (5.13. zīm.). Šajā eksperimentā varēja izmērīt kā mehāniskā, tā arī magnētiskā momenta izmaiņu un noteikt to attiecību pie pārmagnetizēšanas.

Barnets veica eksperimentu, kas bija pretējs Einšteina un de Gaza eksperimentam, viņš novēroja dzelzs stienī magnetizēšanos pie tā ātras rotācijas. Šo magnetizēšanos izraisa elektronu, tādu kā savdabīgu “vilciņu”, kuriem piemīt kustības daudzuma moments, tiešanās izvietoties stienī ass rotācijas virzienā (5.14.(a) zīm.).

Savukārt, A. F. Joffe un P. L. Kapica ātri uzkarsēja magnetizētu stieni virs Kirī punkta. Līdz uzkarsēšanai “elektronu vilciņi” bija orientēti secīgi (5.14.(b) zīm.) un to summārais kustības daudzuma moments bija atšķirīgs no nulles, bet pēc uzkarsēšanas virs Kirī punkta “vilciņu” izvietojums kļuva haotisks (5.14.(c) zīm.) un summārais kustības daudzuma moments kļuva vienāds ar nulli. Atmagnetizējot stieni, tas ieguva griezes impulsu, kuru varēja eksperimentāli noteikt. Izmērot magnetizētā stienī magnētisko momentu, varēja atrast *žiromagnētisko* attiecību.



5.13. zīmējums. Einšteina un de Gaza eksperimenta shēma.



5.14. zīmējums. (a) - Barneta eksperimenta shēma; (b), (c) - Joffe un Kapicas eksperimenta shēma.

Veiktie pētījumi parādīja, ka feromagnētiķiem *žiomagnētiskā* attiecība ir vienāda ar

$$\frac{\mu_{sH}}{P_{SH}} = -\frac{e}{m}, \quad (5.19)$$

t.i., vienāda ar elektronu pašmomentu *žiomagnētisko* attiecību. Tas norāda uz to, ka feromagnētismu nosaka nevis orbitālais, bet magnētiskais elektronu moments.

5.6. Dažas magnētisma kvantu teorijas metodes

Feromagnētisko vielu magnētiskos momentus pamatā veido neaizpildīto čaulu elektronu magnētiskie momenti. Šis makroskopiskais magnētiskais moments rodas tādēļ, ka noteiktos apstākļos veidojas atomu neaizpildīto čaulu elektronu spinu sakārtotība. Šī sakārtošanās ir saistīta ar elektronu savstarpējo mijiedarbību.

Šis pieņēmums, kuru pirmo reizi formulēja J. I. Frenkels (1928) un Heizenbergs (1928), kļuva par mūsdienu feromagnētisma kvantu teorijas pamatu. Spinu sakārtošanās veidojas spontāni, tiklīdz temperatūra kļūst zemāka par Kirī temperatūru. Frenkela - Heizenberga modelis detalizētāk tiks apskatīts vēlāk.

Feromagnētisma parādība vielās noteiktā veidā ir saistīta ar kristāliskā režģa pastāvēšanu. Feromagnētiskajos ķermeņos īpašu interesi izraisa kubiskais un heksagonālais režģis, jo šajos režģos kristalizējas gandrīz visi pamata, praktiski svarīgie, feromagnētiskie sakausējumi. Vielās kristāliskās struktūras ietekme uz tās magnētiskām īpašībām izpaužas tādējādi, ka dotajā kristāla orientācijā magnētiskie raksturlielumi ir atkarīgi no tā, kādā virzienā tie tiek mērīti. Citiem vārdiem, magnētiskajās vielās pastāv magnētiski - kristalogrāfiskā anizotropija.

Blakusesošo atomu elektronu spinu orientāciju nosaka elektronu savstarpējās mijiedarbības raksturs. Kulona mijiedarbība starp elektroniem var nodrošināt sakārtošanu savstarpējā spinu izvietojumā, tomēr to kopējās orientācijas virziens netiek fiksēts. Spina - spina un spina - orbitālā mijiedarbība zināmā mērā novērš šo deģenerāciju pa virzieniem. Tā rezultātā kristāliskajos režģos ir tikai daži virzieni, kuriem piemīt tāda īpašība, ka sistēmas termodinamiskais potenciāls būs minimāls pie spinu (vai spinu grupu) orientācijas kādā no virzieniem. Šie virzieni ieguva vieglās magnetizācijas virzienu nosaukumu. Monokristālu magnetizācijas līknes dažādos virzienos aprēķināja N. S. Akulovs (1939).

Jebkādā monokristāliskā paraugā bez ārējā magnētiska lauka spini var izvietoties pēc jebkuras no viegli magnetizējamā virziena asīm. Izrādās, ka enerģētiski izdevīgs ir gadījums, kad monokristāls tiek sadalīts apgabalu virknē, kur katrā spini ir orientēti vienādi. Šos monokristāla apgabalus sauc par domēniem jeb spontānās magnetizācijas apgabaliem. Domēnu izmērus, to formu un savstarpējo izvietojumu nosaka sistēmas termodinamiskā potenciāla minimuma nosacījumi. Domēnu struktūru kvantitatīvu teoriju attīstīja L. D. Landau un E. M. Lifšics.

5.7. Feromagnētisma daba

Mēs jau noteicām, ka feromagnētisma elementārie nesēji ir elektronu magnētiskie pašmomenti (elektronu spini). Tomēr rodas jautājums: kāpēc elektronu spini neveido feromagnētismu visās vielās, bet tikai dažās, pie tam tādu vielu skaits ir neliels? Kāpēc feromagnētiski ir dzelzs un niķelis, bet kāpēc sudrabs un varš nav feromagnētisks? Arī varam elektroni riņķo apkārt kodolam, gan arī tiem piemīt orbitālais magnētiskais moments, gan arī magnētiskais pašmoments.

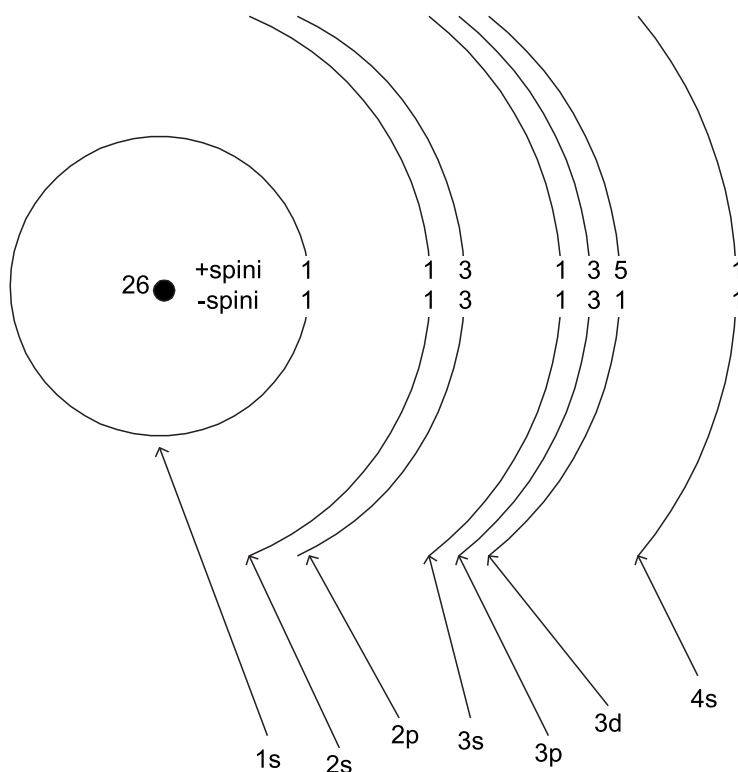
Atbildi, acīmredzot, ir jāmeklē feromagnētisko vielu atomu uzbūvē. Ir zināms, ka jebkura ķīmiskā elementa atoms sastāv no kodola un atkārt tam riņķojošiem elektroniem. Elektroni atomos tiecas apvienoties pāros ar pretēji vērstiem spiniem, tādēļ magnētiskie

lauki, kurus veido šādi elektroni, vispārīgā gadījumā kompensē viens otru. Tātad atoms var izrādīt magnētiskās īpašības tikai tādā gadījumā, ja tajā pastāv nokompensētie elektronu spini. Nekompensētu spinu pastāvēšana var būt tikai divos gadījumos: vai nu atomā ir nepāra elektronu skaits, vai nu elektronu grupai spini ir vienādi orientēti. Kā piemēru apskatīsim dzelzs atomu (5.15. zīm.).

Apkārt dzelzs atoma kodolam, kas satur 26 protonus, sadalās pa “mākonīšiem” (koncentriskas riņķa līnijas) tāds pats elektronu skaits.

Elektroniem piemīt pretēji vērsti spini, kas zīmējumā ir apzīmēti kā “+” spini un “-” spini. Šos spinus var uzskatīt par maziem magnētiem. Dzelzs atomā pilnīgi ir aizpildīta pirmā un otrā čaula, ar vienādu “+” un “-” spinu skaitu katrā. Tāpat vienāds “+” un “-” spinu daudzums ir ārējā, ceturtajā čaulā. Īpašu uzmanību ir jāpievērš trešajai čaulai: tajā pilnīgi aizpildītas ir $3s$ un $3p$ apakščaulas ar vienādu “+” un “-” spinu skaitu, bet apakščaula $3d$ nav aizpildīta un satur 5 pozitīvus un 1 negatīvu spinu.

Citiem feromagnētiķiem arī ir raksturīgas neaizpildītas iekšējas čaulas. Dzelzij, niķelim un kobaltam neaizpildīta ir $3d$ - apakščaula, gadolīnijam - $4f$ - apakščaula.



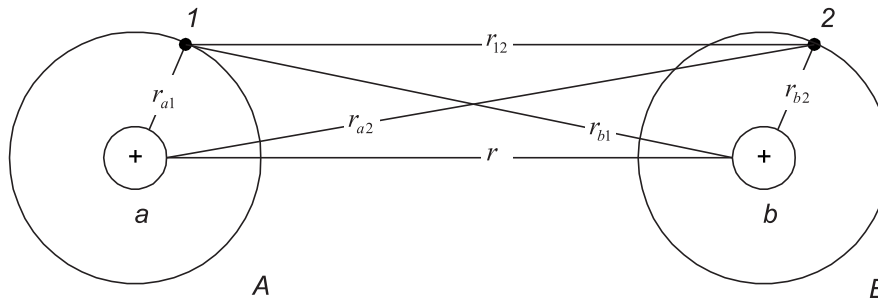
5.15. zīmējums. Dzelzs atoma elektronu čaulas un apakščaulas.

Iepriekš bija atzīmēts, ka iekšējo neaizpildīto čaulu pastāvēšana atomā ir nepieciešams, bet ne pietiekams feromagnētisma nosacījums. Tas, ka viela satur atoma magnētus, vēl nenozīmē, ka šī viela būs magnēts. Būtība ir tāda, ka mazie atomu magnēti tiecas neitralizēt viens otru: siltuma kustības dēļ, šo atomu magnētiskie momenti ir orientēti haotiski. Lai vielu magnetizētu, ir nepieciešami orientējošie spēki, kas spētu pārvarēt siltuma kustību un sakārtot atomu magnētiskos momentus vienā virzienā.

Kāda ir orientējošo spēku, kas secīgi izvieto atomu magnētus un tajā pašā laikā, magnetizē vielu, daba? Atbilde uz šo jautājumu tika sniegta kvantu mehānikas ietvaros.

Divu elektronu savstarpējās elektriskās mijiedarbības, ņemot vērā to spinu momentus, detalizētie kvantu - mehāniskie aprēķini ļauj secināt – rezultējošā mijiedarbības enerģija kopā ar tīri klasisko kulona mijiedarbības locekli vēl satur papildus kvantu locekli, kas ir atkarīgs no spinu savstarpējās orientācijas. Šī papildus enerģija ieguva apmaiņas enerģijas nosaukumu. Apmaiņas mijiedarbības dabu ir grūti populāri izskaidrot, jo šai mijiedarbībai nav klasiskā analoga. Apmaiņas mijiedarbības veidošanās ir daļiņu neatšķirības un Pauli principa sekas, to pilnībā nosaka elektrona kvantu īpašības. Tomēr to ar pietiekamu precizitāti var izskaidrot, izmantojot vienkāršāko magnētiskās sistēmas modeli, kas sastāv no diviem joniem un diviem elektroniem, kuri ir apvienoti vienā molekulā - Londona un Gaitslera modelis (1927).

Apskatīsim divus atomus, kur katrā ir pa vienam elektronam. Elektronu stāvokļa analīze parāda: nevar apgalvot, ka viens elektrons atrodas pirmajā atomā, bet cits - otrajā. Abi elektroni vienlaicīgi pieder abiem atomiem, tie visu laiku it kā mainās vietām, it kā pārlecot no viena atoma citā (neatdalāmi). Dažādu stāvokļu atlase notiek saskaņā ar Pauli principu. Elektronu “kolektivizācija” tiek pavadīta ar elektronu blīvuma pārdalīšanos un sistēmas enerģijas izmaiņu salīdzinājumā ar izolēto elektronu summāro enerģiju $2E_0$.



5.16. zīmējums. Ūdeņraža molekula:

Atoms A sastāv no kodola a un elektrona 1,

Atoms B sastāv no kodola b un elektrona 2..

Šrēdingera vienādojumam ūdeņraža molekulai (5.16. zīm.) ir sekojošs izskats:

$$\left[-\frac{\hbar}{2m} (\nabla_1 + \nabla_2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b2}} + \frac{1}{r_{12}} \right) \right] \Psi = E\Psi, \quad (5.20)$$

kur

∇_1 - Laplasa operators pēc pirmā elektrona koordinātām,

∇_2 - Laplasa operators pēc otrā elektrona koordinātām,

E - molekulas enerģijas pašvērtība.

Šie aprēķini parādīja, ka sistēmai, kas sastāv no diviem satuvinātiem ūdeņraža atomiem, atkarībā no to spina virziena, var būt divas enerģijas vērtības:

$$U_S = 2E_0 + \frac{k + A}{1 + S^2} \quad (5.21)$$

pie spinu virzienu antiparalelītātes un

$$U_a = 2E_0 + \frac{k - A}{1 - S^2} \quad (5.22)$$

- pie spinu virzienu paralelītātes.

Šajās formulās:

$2E_0$ - divu izolēto ūdeņraža atomu (5.16. zīm.) summārā enerģija;

k - elektronu mijiedarbības ar kodoliem, savā starpā un starp kodoliem elektrostātiskā enerģija, pēc zīmes tā ir negatīva;

A - apmaiņas mijiedarbības enerģija, rodas apmainoties atomiem ar elektroniem, pēc zīmes tā ir negatīva, pēc absolūtās vērtības tā pārsniedz k ($|A| > |k|$) un būtiski ir atkarīga no spinu savstarpējā izvietojuma;

S - neortogonalitātes integrālis, kura vērtība atrodas $0 \leq S \leq 1$, tas ir atkarīgs no attāluma starp ūdeņraža kodoliem un raksturo viļņu funkciju pārklāšanos, pirmajā tuvinājumā $S = 0$.

Apmaiņas mijiedarbības enerģiju var izteikt sekojoši:

$$A = -I \left(\vec{S}_i \vec{S}_j \right), \quad (5.23)$$

kur $\vec{S}_i$ un $\vec{S}_j$ - mijiedarbojošos atomu rezultējošie spēki. I - apmaiņas integrālis; tas izsaka apmaiņas ar elektroniem, pie kuras elektrons 1 pāriet no atoma A pie atoma B , bet elektrons 2 - no atoma B pie atoma A , varbūtību.

Divu ūdeņraža atomu mijiedarbības gadījumā tas ir vienāds ar

$$I = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \left(\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} \right) \psi_a(1) \psi_b(2) \psi_a(2) \psi_b(1) dV_1 dV_2. \quad (5.24)$$

Šeit $\frac{e^2}{r}$ un $\frac{e^2}{r_{12}}$ atbilstoši savstarpējā kodolu un elektronu mijiedarbības enerģija; $-\frac{e^2}{r_{a1}}$ un $-\frac{e^2}{r_{b2}}$ elektrona 1 pievilkšanās enerģija pie kodola a un elektrona 2 pievilkšanās enerģija pie kodola b ;

$\psi_a(1)$ un $\psi_b(2)$ - viļņu funkcijas, kas apraksta atbilstoši elektrona 1 un 2 kustību apkārt kodoliem a un b ;

$\psi_a(2)$ un $\psi_b(1)$ - viļņu funkcijas, kas izsaka elektrona 2 atrašanās varbūtību pie kodola a un elektrona 1 - pie kodola b , t.i., atomu A un B "apmaiņas" iespējamību ar elektroniem; dV_1 un dV_2 - tilpuma elementi.

No izteiksmes (5.24) redzams, ka apmaiņas integrālis ietver kā "+", tā arī "- saskaitāmos. Tāpēc apmaiņas integrāļa zīme var būt kā pozitīva, tā arī negatīva. Apmiņas integrālis ļoti stipri ir atkarīgs no attāluma starp atomiem kristāliskā režģī. Pie diezgan lieliem attālumiem, šī mijiedarbība ir vienāda ar nulli. Samazinoties attālumam mijiedarbība pieaug, apmaiņas integrālis ir pozitīvs. Pie pozitīvas apmaiņas integrāļa vērtības, mijiedarbība izraisa paralēlu spinu orientāciju, kura, savukārt, rada vielas spontānu vai patvaļīgu magnetizāciju – feromagnetisma pamatīpašību. Ja turpināt tālāk samazināt attālumu, apmaiņas integrālis, izejot maksimālo vērtību, sāk samazināties un kļūst negatīvs. Pie negatīvas apmaiņas integrāļa vērtības, elektronu spini patvaļīgi izvietojas antiparalēli attiecībā viens pret otru, kā rezultātā rodas antiiferomagnētisms.

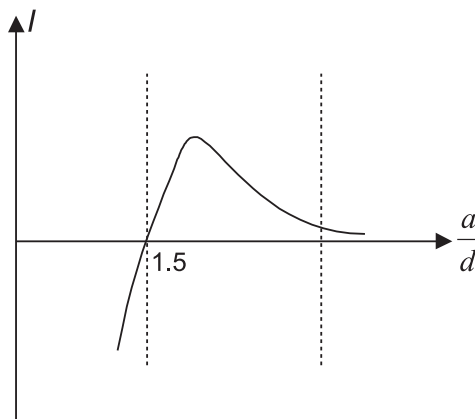
Pētījumi parāda, ka apmaiņas integrālis ir pozitīvs, t.i., vielai piemīt feromagnētiskas īpašības, ja režģa konstantes attiecība, (atoma a diametra) pret neaizpildītās čaulas d diametru, ir lielāka par 1.5 (5.17. zīm.).

Tātad var izdarīt sekojošus secinājumus.

1. Feromagnētisma elementārie nesēji ir elektronu spini.

2. Feromagnētisma veidošanās un pastāvēšanas nepieciešamie un pietiekamie nosacījumi ir:

- (a) neaizpildītu iekšējo elektronu čaulu eksistēšana;
- (b) apmaiņas integrāļa pozitīvā zīme, kas nosaka spinu paralēlo orientāciju.



5.17. zīmējums. Atkarības $I \left(\frac{a}{d} \right)$ grafiks.

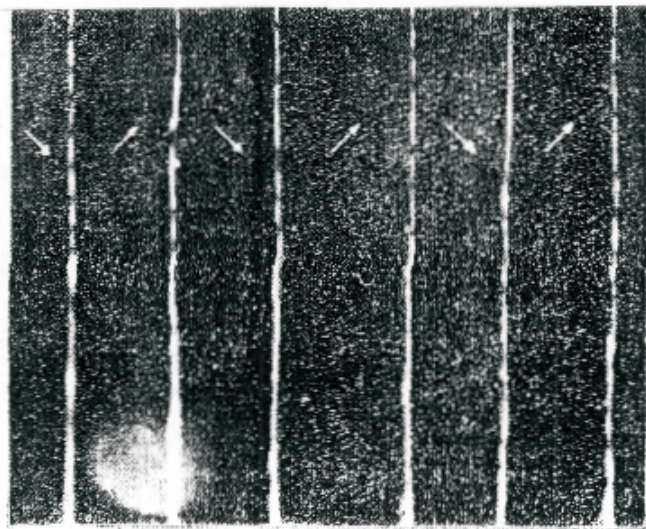
5.8. Domēnu struktūras izskaidrojums feromagnētiskās vielās

Tomēr apmaiņas mijiedarbība tomēr pilnībā neizskaidro magnētismu. Ja apmaiņas spēki tiešām ir atbildīgi par visu, tad kāpēc dzelzs gabals pats pa sevi nekļūst par magnētu? Kāpēc tas sāk darboties kā magnēts tikai tad, kad ir magnetizēts vai nu ar citu magnētu, vai arī ar spēcīgas elektriskās strāvas palīdzību? Lai to izskaidrotu tika piedāvāta un attīstīta hipotēze par vielas savstarpējo dažādu magnetizācijas apgabalu neitralizāciju. Šo hipotēzi izteica Veiss.

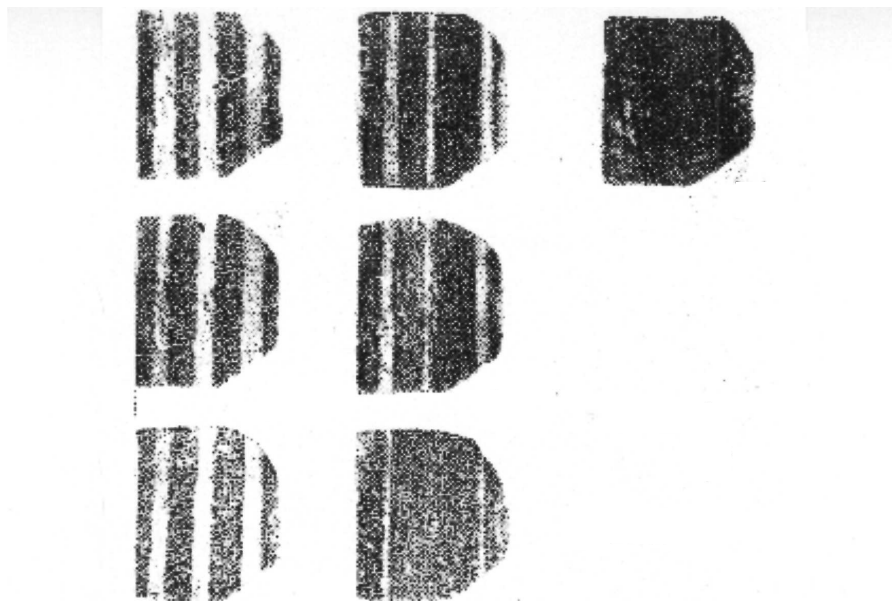
Feromagnētisks kristāls tiek sadalīts daudzos apgabalos, kurus sauc par domēniem (vai spontānās magnetizācijas apgabaliem), kur katrs no tiem ir magnetizēts līdz piesātinājumam, t.i., katra domēna iekšpusē visi magnētiskie momenti, apmaiņas mijiedarbības ietekmē, novietojas paralēli, pie tam domēna magnetizēšana notiek pa vieglākās magnetizācijas asīm. Kopējā ķermeņa magnetizācija ir atsevišķo domēnu magnetizācijas summa; katra ieguldījums ir proporcionāls tā tilpumam. Seko, ka rezultējošā ķermeņa magnetizācijai var būt dažādas vērtības no nulles (kad vektoru summa ir vienāda ar nulli) līdz kādai maksimālai vērtībai, kad ķermeni kopumā var uzskatīt kā vienu domēnu, kurā visi atomu magnētiskie momenti ir orientēti dotajā virzienā.

Jau tika pieminēts, ka domēnus var novērot izmantojot Akulova - Bittera pulvera figūru metodi (5.18. zīm.). Mēs varam tieši novērot magnetizācijas procesu (5.19. zīm.).

Kas tad nosaka domēnu struktūru un to veidošanos? Šī problēma tika apskatīta balstoties uz četrām hipotētiskām struktūru piemēriem, kurām tika izskaitļota to relatīvā stabilitāte. Šos aprēķinus veica izmantojot enerģijas vērtības, kas ir nepieciešamas, lai dotās



5.18. zīmējums. Vienkāršās Fe - Si monokristāla domēnu struktūras pulvera figūru piemērs.



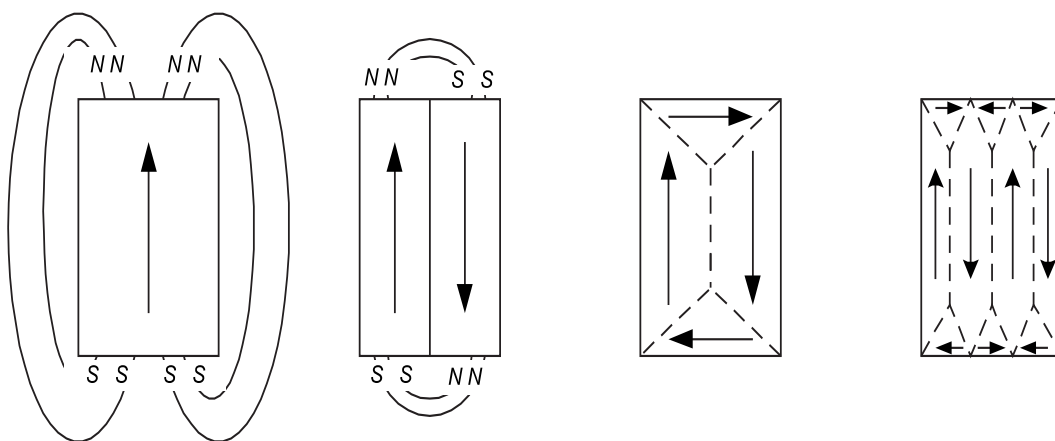
5.19. zīmējums. Pulvera figūras uz Fe-Si monokristāla virsmas, kas paralēla plaknei [100], kuras novēro polarizētā gaismā.

struktūras veidotos un pastāvētu (5.20. zīm.). Pieņemsim, ka mums ir dzelzs gabals. Ja viss dzelzs gabals būtu magnetizēts kā viens liels domēns (5.20. zīm.), tad tam būtu spēcīgs ārējais lauks. Tā kā

$$W = \frac{1}{2} \int_V \vec{B} \cdot \vec{H} dV, \quad (5.25)$$

šī lauka uzturēšanai būtu nepieciešama liela enerģija. Kā zināms, dabā ar lielāku varbūtību realizējas struktūras, kurām lai veidotos un pastāvētu ir nepieciešamas minimālas enerģijas.

Ja pieņemtu, ka viss dzelzs gabals sastāv no diviem domēniem, kas ir magnetizēti pretējos virzienos (5.20. zīm.), tad nepieciešamais enerģijas daudzums būtu aptuveni divas reizes mazāks, taču būtiski lielāks par iespējamo minimumu.



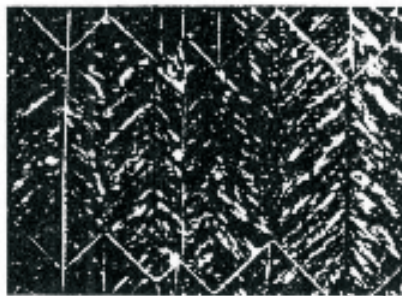
5.20. zīmējums. Shēma, kas attēlo domēnu struktūras veidošanos.

Var pieņemt nedaudz stabilāku struktūru, kurā ir četri domēni, kas ir magnetizēti horizontālā un vertikālā virzienā, pretēji viens otram un paralēli kristalografiskām asīm. Lai izveidotu šādu struktūru, ir nepieciešama cita enerģijas vērtība. Kad viela ir magnetizēta, tās izmēri nedaudz izmainās (magnetostrikcijas parādība). Tā rezultātā visi domēni, kas tādā struktūrā ir magnetizēti horizontālā virzienā, telpu starp domēniem, kas ir magnetizēti vertikālā virzienā, neaizpildīs pilnīgi, kā arī struktūra būs deformēta un izkropļota.

Samazinot enerģijas magnetostrikcijas daļu, mēs nonākam pie teorētiski iespējamā ceturtā savstarpējās struktūras veida (5.20. zīm.). Sadalīšanas process norisināsies tiktāl, kamēr enerģija, kas ir nepieciešama jaunu robežslāņu vai iekšējo virsmu, kas atdala vienu no otras dažādi magnetizētus domēnus, veidošanai, nekļūs lielāka par magnētiskā lauka enerģijas samazināšanos, kas nepieciešama turpmākai dalīšanai.

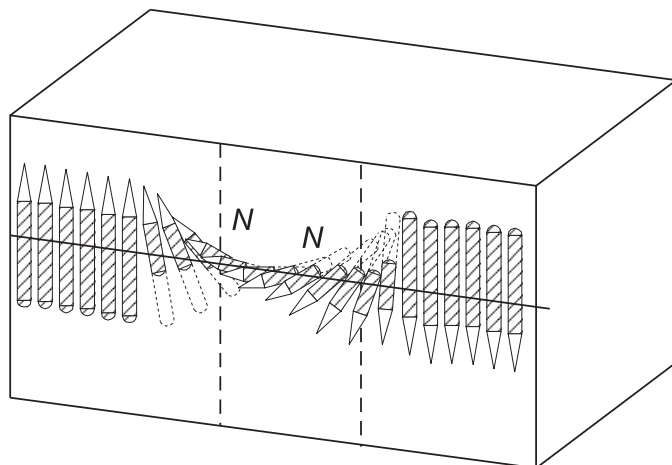
Reālas domēnu struktūras, kas tika novērotas ar pulvera figūru metodes palīdzību, bieži vien izrādījās daudz sarežģītākas nekā vienkāršie gadījumi (5.21. zīm.), kurus mēs apskatījām. Tomēr jebkuras domēnu struktūras veidošanās vienmēr ir saistīta ar sistēmas enerģijas samazināšanās iespējamību, pārejot no lielas magnētiskās enerģijas konfigurācijas pie zemās enerģijas domēnu konfigurācijas.

Domēni ir atdalīti ar “sienām” - pārejas apgabaliem, kas atdala divus dažādos virzienos magnetizētus domēnus. Priekšstata par “Bloha sienām” pamatideja ir saistīta ar to, ka spinu virzienu maiņa pie pārejas no viena domēna uz cita magnetizācijas virziena domēnu, nevar notikt lēcienveidīgi kādā atomu plaknē (5.22. zīm.). Šīs pārejas pakāpeniskuma



5.21. zīmējums. Reāls magnētisko domēnu izvietojums.

iemeslu nosaka tas, ka, lai pilnīgi izmainītu doto spinu virzienu, apmaiņas enerģija ir mazāka tad, ja izmaiņa ir sadalījusies pa daudziem spiniem nekā, ja šī izmaiņa notiek lēcienveidīgi.



5.22. zīmējums. Pārejas slāņa struktūra starp domēniem.

Šo procesu var aprakstīt sekojošās izteiksmes veidā:

$$E_{apm} = IS^2\varphi^2, \quad (5.26)$$

kura dod apmaiņas enerģijas vērtību starp diviem spiniem, kuriem savā starpā ir mazs leņķis φ . Šeit I - apmaiņas integrāls, bet S - spinu kvantu skaitlis.

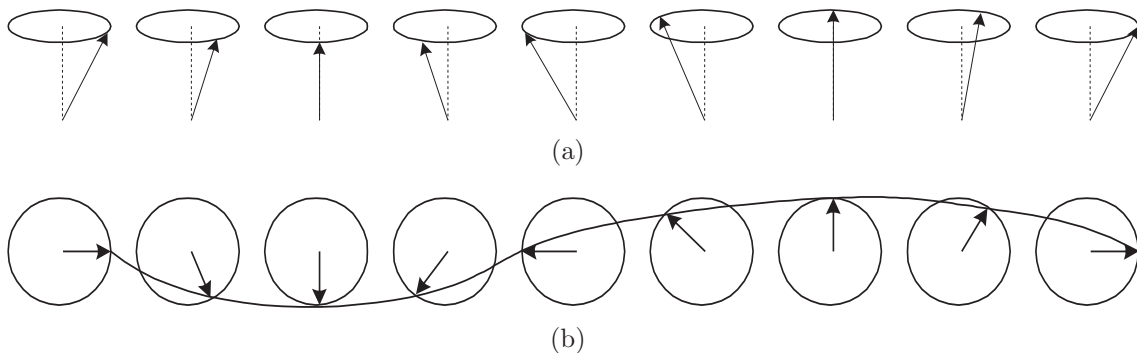
Pārejas slāņa reālo platumu un tā enerģiju nosaka līdzsvars starp apmaiņas un anizotropijas spēkiem; pirmie tiecas palielināt pārejas slāņa platumu, bet otrie - samazināt to. Domēnu sienas platums kļūst tāds, ka šo divu enerģiju summārā izmaiņa dod pilnās enerģijas minimumu. 180 grādu sienai dzelzī, pilnās enerģijas minimums atbilst ap 1000 Å; pie tam sienas enerģijas blīvums uz virsmas vienību sastādīs ap 10^{-3} J/mm².

5.9. Spinu viļņi. Magnoni

Spinu stingrā paralēlā orientācija feromagnētiķos tiek novērota tikai pie $T = 0$ K. Tāds spinu izvietojums atbilst enerģijas minimumam. Pie tam rezultējošā magnetizācija ir vienāda ar piesātinājuma magnetizāciju. Pieaugot feromagnētiķa temperatūrai tā enerģija

pieaug uz “apgrieztu” spinu rēķina. Atšķirībā no pamatstāvokļa (pie $T = 0\text{K}$) stāvoklis ar “apgrieztiem” spiniem ir ierosinājuma stāvoklis. Ja blakusesošie spini ir saistīti ar (5.23) mijiedarbību veidu, tad viena spina pagriešana pretējā virzienā pieprasa papildus enerģiju $\approx 4Js^2$. Citiem vārdiem, apmaiņas mijiedarbības dēļ, stāvoklis ar apgrieztiem spiniem vienā no režģa mezgliem ir enerģētiski neizdevīgs. Blakusesošie spini tiecas atgriezt “apgrieztu” spinu sākotnējā stāvoklī. Apmāņas mijiedarbība noved pie tā, ka blakusesošais spins apgriežas pats. Pa kristālu iziet spinu apgriešanās vilnis. Tādu viļņu pastāvēšanu 1930.gadā noteica F.Blohs, bet paši viļņi ieguva spina viļņu nosaukumu.

Daudz mazākas enerģijas ierosinājumi veidojas tikai tādā gadījumā, kad visi spini apgriežas tikai daļēji. Tāds spinu vilnis shematiski ir attēlots 5.23. zīm. No zīmējuma



5.23. zīmējums. Spinu vilnis: (a) - spinu ķēdītes skats no sāna; (b) - no augšas.

redzams, ka spinu viļņi atveido spinu relatīvās orientācijas svārstības kristālā. Tie ir līdzīgi elastīgiem viļņiem kristālā, kuru kvantus iepriekš mēs saucām par fononiem. Spinu viļņi arī ir kvantēti. Spinu viļņa enerģijas kvants ieguva magnona nosaukumu. Pieaugot temperatūrai magnonu skaits pieaug. Pie maza magnonu blīvuma, to mijiedarbību vienam ar otru var neņemt vērā un magnonus var uzskatīt par ideālu gāzi. Magnonu gāze, tāpat kā fononu gāze, pakļaujas Bozē - Einšteina statistikai. Ja ir zināmas magnonu statistiskās īpašības, tad var atrast ierosināto magnonu skaita atkarību no temperatūras. Izrādās, ka magnonu skaits aug līdz ar temperatūru, proporcionāli $T^{\frac{3}{2}}$. Atbilstoši proporcionāli $T^{\frac{3}{2}}$ samazinās feromagnētiķa magnetizācija:

$$I(T) = I_S \left[1 - \beta \left(\frac{T}{\theta} \right)^{\frac{3}{2}} \right], \quad (5.27)$$

pie $T \ll \theta$. Šeit I_S - piesātinājuma magnetizācija; β - koeficients, kura vērtība ≈ 1 . Attiecību (5.27) sauc par Bloha $T^{\frac{3}{2}}$ likumu. Magnoni, tāpat kā citas kvazidalīņas, ietekmē siltumietilpību, elektronu izkliedi utt. Ir jāatzīmē, ka zemajās temperatūrās, magnonu siltumietilpības ietekme ir lielāka nekā fononiem, jo fononu gāzes siltumietilpība, samazinoties temperatūrai, samazinās daudz ātrāk - proporcionāli T^3 .

VI nodaļa

SUPRAVADĀMĪBAS FIZIKA

6.1. Supravadāmības atklāšana

1908. gadā Leidenes universitātes fizikas laboratorijā Geikes Kamerlinga - Onnesa vadībā tika iegūts šķidrums hēlijs. Hēlijs atšķiras ar to, ka tam piemīt ļoti zema vārīšanās temperatūra (ap 4 K), un tāpēc tā sašķidrināšana ļāva izpētīt vielas īpašības pie temperatūrām, kuras agrāk nevarēja iegūt.

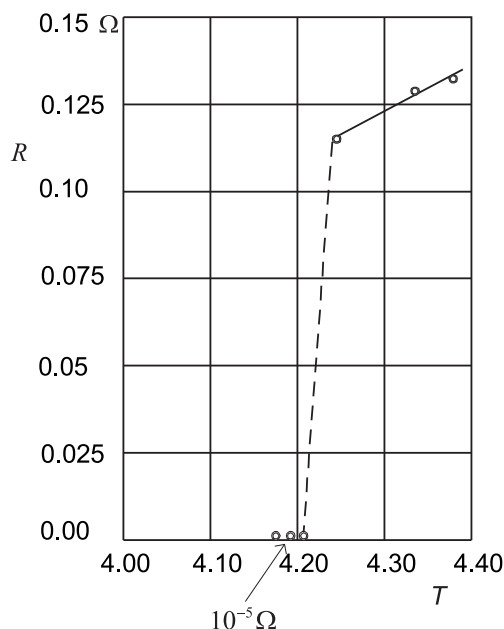
Metālu fizika tad vēl bija tikai attīstības sākumā. Viens no metāla pamatraksturojumiem ir elektriskā pretestība. Fizikāļi ļoti interesēja jautājums par šī lieluma atkarību no temperatūras un parauga tīrības pakāpes. 1911. gadā holandiešu fiziķis Kamerlings - Onness, pētot piemaisījumu ietekmi uz metālos paliekošo pretestību, novēroja jaunu parādību, kura ieguva supravadāmības nosaukumu. Pētot dzīvsudraba pretestību no temperatūras, viņš noteica, ka pie ļoti zemām temperatūrām parauga pretestība pēkšņi pazuda. Pie $T = 4.2$ K elektriskā pretestība strauji kļuva vienāda ar nulli (6.1. zīm.). Tātad supravadāmības efekts ietver parādību, kad pie galīgas, atšķirīgas no 0 K, temperatūras, kuru nosauca par kritisko temperatūru un apzīmēja ar T_k , pazūd elektriskā pretestība.

“Nav šaubu, - rakstīja Kamerlings - Onness, - par dzīvsudraba jaunā stāvokļa eksistenci, kurā pretestība gandrīz pazūd. Dzīvsudrabs pāriet jaunā stāvoklī, kuru saskaņā ar tā neparastajām elektriskām īpašībām var nosaukt par supravadāmības stāvokli.”

Negaidīti bija arī tas, ka piemaisījumu pievienošana dzīvsudrabam neizraisīja paliekošo pretestību, t.i., paraugi tāpat pārgāja supravadāmības stāvoklī.

Supravadāmības atklāšana veicināja daudzus pētījumus, kas bija vērsti ne tikai uz jaunu supravadošu vielu atklāšanu, bet arī uz to fizikālo īpašību izpēti.

Elektriskās pretestības pazušana ir galvenā, bet ne vienīgā supravadāmībai raksturīgā pazīme. Tiek novērota strauja magnētisko, siltuma un virkne citu īpašību anomālijas, t.i., it kā īpaša stāvokļa veidošanās pie zemām temperatūrām.



6.1. zīmējums. Pretestības pazušana zemās temperatūrās.

6.2. Supravadītāju pamatīpašības

Lai gan arī supravadāmības parādības izskaidrojums tapa tikai 50 gadus pēc tās atklāšanas, visu šo laiku notika eksperimentālo faktu vākšana. Visi šie fakti raksturo supravadītāju pamatīpašības. Iepazīsimies ar dažām no tām.

1. Nulles pretestība.

Pie $T < T_k$ supravadītāja pretestība ir vienāda ar nulli. Tas nozīmē to, ka, ja caur supravadošo gredzenu laist strāvu un vēlāk atslēgt to no avota, tad strāva saglabāsies gredzenā pēc patikas ilgi. Tā, piemēram, supravadošā gredzenā netika novērota strāvas samazināšanās vairāk nekā divu gadu ilgā laika periodā līdz pat eksperimenta izbeigšanai. Šie eksperimenti ļāva Kollinzam noteikt supravadītāja īpatnējās pretestības augšējo sliekšni, kas ir vienāds ar $10^{-23} \Omega \cdot \text{m}$. Kuins un Ittners samazināja šo augšējo sliekšni līdz $10^{-25} \Omega \cdot \text{m}$. Tīrāko vara paraugu īpatnējā pretestība pie zemām temperatūrām bija vienāda ar $10^{-11} \Omega \cdot \text{m}$.

2. Kristāliskā struktūra.

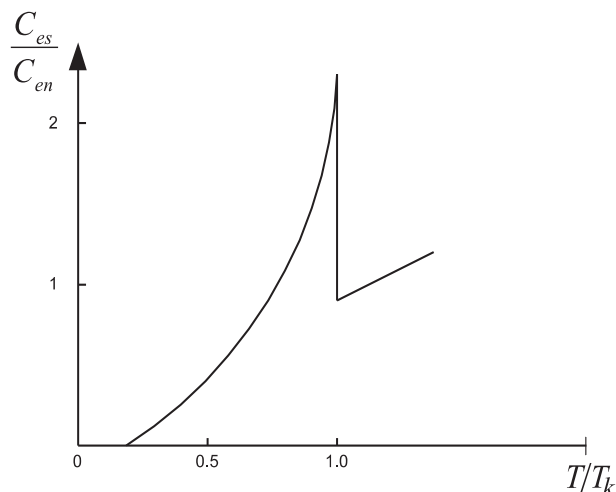
Varētu pieņemt, ka pāreja supravadošajā stāvoklī ir saistīta ar kādām kristāliskās struktūras izmaiņām. Tomēr supravadītāju kristāliskās struktūras pētīšanā, izmantojot rentgena pētīšanas metodes, novēroja, ka samazinot metāla temperatūru līdz vērtībai, kas ir mazāka par T_k , nenotiek nekādas izmaiņas ne režģa simetrijā, ne parametros. Bez tam, noteica, ka tās cietā ķermeņa īpašības, kas ir atkarīgas no kristāliskā režģa svārstībām, arī paliek nemainīgas. Piemēram, Debaja temperatūra, režģa ieguldījums siltumietilpībā – viens un tas pats normālajā un supravadošajā fāzē. Tas ļāva secināt, ka supravadāmība nav saistīta ar kādām kristāliskā režģa izmaiņām.

3. Elektronu ieguldījums siltumietilpībā.

Normālā (nesupravadošā) metāla siltumietilpības atkarībai no temperatūras zemo temperatūru apgabalā ir sekojošs veids: $C = A(T/\Theta)^3 + \gamma_{el} \cdot T$, kur Θ - De-baja temperatūra, un, kur pirmais loceklis - režģa siltumietilpība, otrais loceklis - gāzes siltumietilpība. Supravadītāja atdzesēšana noved pie tā, ka, pirmkārt, pie $T = T_k$ notiek lēcienveida siltumietilpības pāreja bez apslēptā siltuma parādīšanās (6.2. zīm.). Tas nozīmē to, ka pāreja supravadāmībā – ir otrās kārtas fāzes pāreja. Otrkārt, pie $T < T_k$ siltumietilpības atkarību no T nosaka sekojošā izteiksme:

$$C = A(T/\Theta)^3 + ae^{-b/K_B T}.$$

Režģa ieguldījums siltumietilpībā paliek tāds pats, kā arī normālā metāla gadījumā, bet elektronu gāzes ieguldījums stipri izmainās. No šejienes seko, ka supravadāmība ir saistīta ar kādām vadāmības elektronu uzvedības būtiskām izmaiņām.



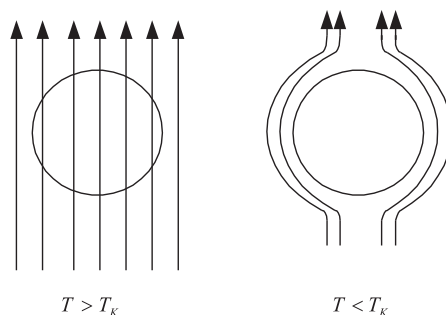
6.2. zīmējums. Siltumietilpības lēcienveida izmaiņa.

4. Izotopiskais efekts.

1950. gadā E. Maksvels un, neatkarīgi, Č. Reinolds ar līdzautoriem bija noteikuši, ka supravadītāja paraugiem, kas bija izgatavoti no viena un tā paša elementa izotopiem, piemīt dažādas kritiskās temperatūras. Daudzos gadījumos T_k ir apgriezti proporcionāla kvadrātsaknei no izotopa masas. Izotopiskais efekts apliecina to, ka kaut arī pie pārejas supravadāmības stāvoklī kristāliskais režģis nemainās, tomēr tam ir būtiska loma elektronu gāzes īpašību izmaiņā. T_k atkarība no izotopa masas parāda, ka supravadāmības parādībai ir svarīga elektronu mijiedarbība ar režģa svārstībām. Citu iemeslu T_k atkarībai no neitronu skaita atoma kodolā nav.

5. Meissnera - Oksenfelda efekts.

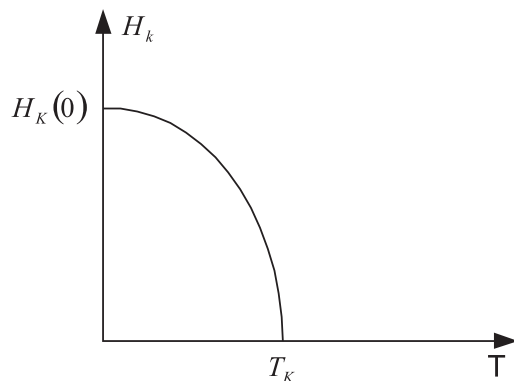
Pētot supravadītājus magnētiskā laukā, V. Meisners un R. Oksenfelds noteica, ka, ja supravadītāja paraugu atdzesē magnētiskajā laukā līdz $T < T_k$, tad supravadāmības pārejas punktā magnētiskais lauks tiek izgrūsts no parauga (izņemot virskārtu). Citiem vārdiem, supravadītāja magnētiskā indukcija B ir vienāda ar nulli, t.i., supravadītājs ir ideāls diamagnētiķis (6.3. zīm.). Ideāls diamagnētisms, tāpat kā nulles pretestība ir supravadītāja fundamentāla īpašība.



6.3. zīmējums. Meisnera efekts.

6. Magnētiskās īpašības.

Ne visi supravadītāji uzvedas vienādi magnētiskajā laukā. Pēc savām magnētiskajām īpašībām tie iedalās pirmā un otrā veida supravadītājos. Meisnera - Oksenfelda efekts tiek novērots visiem pirmā veida supravadītājiem, pie kuriem attiecināmi elementārie supravadītāji, izņemot niobiju. Otrā veida supravadītājos (niobijs, supravadītāju sakausējumi un ķīmiskie savienojumi) novēroja Meissnera - Oksenfelda efektu. Magnētiskais lauks tajos iekļūst, bet savdabīgā veidā. Supravadāmību var



6.4. zīmējums. Kritiskā laukā atkarība no temperatūras.

izjaukt ar magnētiskā lauka palīdzību, kura intensitāte ir lielāka par kādu kritisko H_k . Lielums H_k ir atkarīgs no T (6.4. zīm.) pēc sekojošā likuma:

$$H_k(T) = H_k(0) [1 - (T/T_k)^2].$$

Ja $T = 0\text{K}$, tad $H_k = H_k(0)$, bet ja $T = T_k$, tad $H_k = 0$.

7. Džozefsona efekti.

1962. gadā B. Džozefsons paredzēja tā saucamās vājās supravadišanas efektus, kurus vēlāk nosauca par Džozefsona efektiem. Izšķir stacionāro un nestacionāro Džozefsona efektu. Stacionārā Džozefsona efekta būtība ir tāda, ka supravadāmības strāva var plūst bez elektriskā lauka klātbūtnes caur divu supravadītāju spraugu, kas ir aizpildīta ar izolatoru, ja izolatora slāņa biezums ir pietiekami mazs (1-2 mm). Tas nozīmē, ka “supravadāmības” elektroni ir spējīgi iziet caur plānajiem izolējošajiem slāņiem (tunela efekts). Ja palielināt strāvu caur līdzīgu supravadītāju kontaktu, tad tas sasniedz kādu maksimālo vērtību pēc kuras kontakta vietā rodas elektriskais spriegums. Saskaņā ar Džozefsona pareģojumu, tādus apstākļos

kontaktā jāparādās augstfrekvences maiņstrāvai ar frekvenci: $\nu = 2eV/h$. Tas ir nestacionārais Džozefsona efekts. Džozefsona efektā mēs tieši sastopamies ar supravadītāju svarīgāko īpašību - tā elektronu saskaņotu, koherentu uzvedību. Divu supravadītāju elektroni ar vājās saites palīdzību apvienojas vienā kvantu kolektīvā.

8. *Elektromagnētiskā lauka absorbēšana.*

Vēl 30-tajos gados tika norādīts uz to, ka supravadošais stāvoklis var tikt izjaukts ar atbilstošās frekvences elektromagnētiskā starojuma palīdzību. Pie tam supravadītājam ir jāabsorbē starojums. Dotos pieņēmumus vēlāk apliecināja veiktie eksperimenti. Izrādījās, ka pie $T < T_k$ elektromagnētisko viļņu absorbēšana rodas pie frekvencēm, kas ir lielākas par 10^{11} Hz. Analoģiska “absorbēšanas robeža” tiek novērota arī pusvadītājos. Tā ir saistīta ar elektronu pānesi pāri enerģētiskajai spraugai (aizliegtajai zonai). “Absorbēšanas robeža” supravadītājos liecina par kādas enerģētiskās spraugas pastāvēšanu to spektrā. Atšķirībā no pusvadītājiem, šīs spraugas platums supravadītājos ir ļoti neliels ($\sim 10^{-4}$ eV). Ja šo lielumu izteikt caur $K_B T$, tad T ir jābūt ap 1 K. Pēc lieluma kārtas tas atbilst supravadamības pārejas kritiskajām temperatūrām.

9. *Strāvas kritiskā vērtība.*

Ja vadītājā plūst strāva, tad tā izveido savu magnētisko lauku. Pieaugot strāvai, tās radītais magnētiskais lauks arī pieaug un pienāk moments, kad tas sasniedz vērtību, kas ir vienāda ar kritisko. Ja ārējais magnētiskais lauks $B = B_k$, supravadamība tiek izjaukta. Atbilstošo strāvas vērtību nosauca par kritisko. Kritiskā strāva ir jo mazāka, jo ir spēcīgāks vienlaicīgi supravadītājam pieliktais ārējais magnētiskais lauks vai arī jo tuvāka supravadītāja temperatūra kritiskajai temperatūrai.

6.3. Supravadišanas teorija

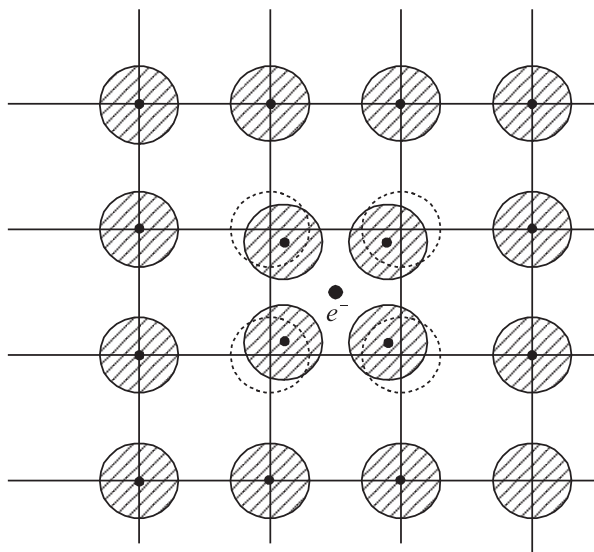
Tikai 1957. gadā Dž. Bardins, L. Kupers un Dž. Šrifers publicēja teoriju (BKŠ), kas izskaidroja supravadišanas mikroskopisko mehānismu. Lielu ieguldījumu supravadišanas teorijas izveidošanā un attīstībā deva N. N. Bogolubovs un L. P. Gorkovs. BKŠ teorija ir ļoti sarežģīta, tāpēc apskatīsim tikai fizikālās idejas, kas ņemtas teorijas pamatā, kā arī rezultātus.

6.3.1. Pievilkšanās starp elektroniem

No augstāk minētām supravadītāju īpašībām seko, ka supravadišana ir saistīta ar kādām vadāmības elektronu uzvedības izmaiņām. Pie tam kristāliskais režģis aktīvi piedalās supravadošā stāvokļa veidošanā (izotopiskais efekts!).

Viena no supravadamības teorijas veidošanas pamatgrūtībām bija tāda, ka nebija skaidrs, kāda mijiedarbība elektronu sistēmā ir par iemeslu saskaņotai elektronu uzvedībai. Vadāmības elektroniem metālā ir daži elektronvolti liela enerģija ($\sim E_F$), bet supravadošais stāvoklis tiek izjaukts pie $K_B T \approx 10^{-4}$ eV. Līdz ar to bija nepieciešams atrast pietiekami vāju mijiedarbību ar režģa piedalīšanos, kas būtu spējīga sakārtot elektronu sistēmu, neskatoties uz lielām elektronu enerģijām.

Teorētiskā analīze parādīja, ka tāda mijiedarbība ir pievilksnās starp elektroniem, kura tiek nodota caur režģa svārstībām. Kā var iedomāties tādu mijiedarbību? Metāla kristāliskā režģa mezglos atrodas pozitīvi uzlādēti joni. Elektroni tādos režģos tiecas pievilkt pie sevis pozitīvos jonus. (6.5. zīm.). Tādā veidā, ap elektronu esošajā apgabalā veidojas pozitīvo lādiņu sakopojums. Ir pieņemts teikt, ka negatīvā elektrona lādiņa ietekmē režģis polarizējas. Otrs elektrons, kas atrodas tuvumā, tiek pievilkts pie polarizētā apgabala, tātad, pie pirmā elektrona. Protams, ka starp elektroniem pastāv Kulona atgrūšanās spēki, tomēr, ja pievilksnās spēki izrādīsies lielāki par atgrūšanās spēkiem, tad rezultējošā mijiedarbība būs pievilksnās. Kā piemēru izmantosim mehānisko analogiju. Elastīgi deformējošos jonu režģi aizvietosim ar elastīgu membrānu, piemēram, ar nostiepto plānu gumijas plēvi.



6.5. zīmējums. Režģa polarizācija elektrona tuvumā.

Uz šīs membrānas uzliksim divas lodītes. Katra lodīte, ja tā ir pietiekami attālināta no citas, ar savu svaru deformē membrānu. Tas atbilst režģa polarizācijai. Ja abas lodītes atradīsies vienā uz tajā pašā bedrītē, tad kopējās sistēmas, kas sastāv no membrānas un divām lodītēm, enerģija samazināsies. Pie tam tās atradīsies zemāk, kas atbilst smaguma lauka mazākajai potenciālajai enerģijai, tātad arī mazākajai kopīgai enerģijai. Tādā veidā, ar elastīgās membrānas palīdzību mēs starp lodītēm izveidojām mijiedarbību, kas ir par iemeslu saistītam stāvoklim, t.i., stāvoklim, kurā lodītes ir maksimāli satuvinātas savā starpā. Modelis parāda, ka pievilksnās mijiedarbība var realizēties pateicoties elastīgām deformācijām.

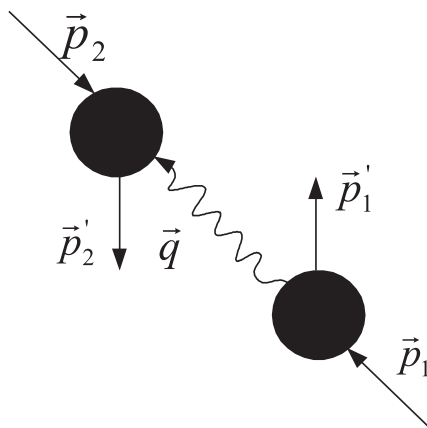
Tā kā elektroniem metālā piemīt būtiski ātrums, tad režģa polarizācija nav statiska. Polarizācija, kas veidojas elektronu kustības laikā, ir atkarīga no tā, cik ātri režģis var reaģēt uz elektrona polarizējošo darbību. Būtisks ir laiks, kurā atomu pamatstāvu režģī var notikt nobīde, t.i., režģa polarizēšana ir atkarīga no atomu pašsvārstību frekvences. Smagie izotopi svārstās nedaudz mazāk nekā viegie izotopi, pie tam, režģim piemīt zemāka frekvence. Tā kā uz polarizējošo darbību tie reaģē lēnāk nekā viegie izotopi, tad to polarizācija būs vājāka. Var sagaidīt, ka pievilksnās starp elektroniem būs vājāka, tātad arī zemāka temperatūra, pie kuras notiks pāreja supravadošā stāvoklī. Pieaugot izotopu masai, T_K samazinās. To arī apstiprina eksperiments.

Otrs elektrons kustas pa jau polarizēto pirmā elektrona ceļu un tam ir pazemināta enerģija, jo režģis ir jau polarizētā stāvoklī. Rodas divi varianti. Abiem elektroniem var būt vienādi impulsi, tad abus elektronus apskata kā vienu daļiņu, precīzāk, elektronu pāri. Summārais impulss ir vienāds ar viena elektrona divkārtšo impulsu. Cits variants, elektroniem ir pretēji vērsti impulsi. Ja domāt abstrakti, tad tos arī var attēlot kā vienu daļiņu - elektronu pāri. Pirmajā gadījumā $\vec{p}_1 = \vec{p}_2$, bet otrajā $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2$. Šī pāra summārais impulss ir vienāds ar nulli. Tādu pāri sauc par Kuperu pāri – L. Kuperu vārdā, kurš pirmais parādīja, ka līdzīga korelācija noved pie kopējās enerģijas samazināšanas.

Lai izskaitļotu elektronu mijiedarbības pievilkšanās spēku caur režģi, visvienkāršāk to attēlot kā fononu izstarošanu ar vienu elektronu un absorbēšanu ar citu elektronu.

Apskatīsim metālu pie $T = 0$ K. Kā mijiedarbojas elektroni, ja pie 0K nekādu fononu nav?

Pieņemsim, ka elektrons, kuram piemīt $\vec{P}_1$ (vai arī viļņa vektors $\vec{k}_1$), kustas kristālā. Kādā laika momentā tas ierosinās režģa svārstības (t.i., izstaros fononu), bet pats pāries citā stāvoklī ar kvaziimpulsu $\vec{P}'_1$ (vai arī ar viļņa vektoru $\vec{k}'_1$). Fonona izstarošanas procesa laikā kvaziimpulss saglabājas: $\vec{P}_1 = \vec{P}'_1 + \vec{q}$, kur $\vec{q}$ - fonona kvaziimpuls. Šo fononu absorbēs otrs elektrons, kuram līdz mijiedarbībai piemita kvaziimpulss $\vec{P}_2$. Fonona absorbēšanas rezultātā, otrs elektrona pāries stāvoklī $\vec{P}'_2$. Pie tam $\vec{P}_2 + \vec{q} = \vec{P}'_2$. Tādā veidā, fonona apmaiņas rezultātā, kura shematiski ir attēlota 6.6. zīmējumā, elektroni no stāvokļiem $\vec{P}_1$ un $\vec{P}_2$ ($\vec{k}_1$ un $\vec{k}_2$) pārgāja stāvoklī $\vec{P}'_1$ un $\vec{P}'_2$ ($\vec{k}'_1$ un $\vec{k}'_2$). Tātad notika elektronu izkliede. Pie tam, $\vec{P}_1 + \vec{P}_2 = \vec{P}'_1 + \vec{P}'_2$ vai $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2$. Bet divu daļiņu izkliede var notikt tikai



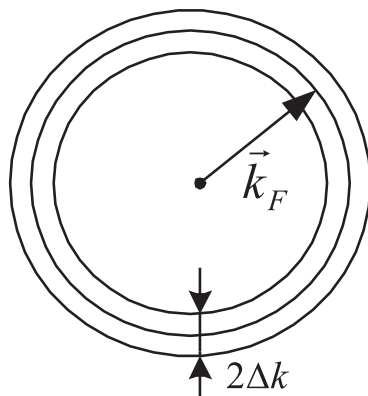
6.6. zīmējums. Elektronu mijiedarbība ar fonona palīdzību.

tādā gadījumā, ja tās mijiedarbojas. Fonons, ar kuru apmainās elektroni, tiek saukts par virtuālo fononu. Atšķirībā no reālā fonona, tas ir saistīts ar režģa polarizāciju un var eksistēt tikai pārejā no viena elektrona pie cita. Pretēji reālajam fononam, virtuālie fononi nevar izplatīties režģī neatkarīgi no elektroniem.

Uz fononu piedalīšanos supravadāmības veidošanā norāda izotopiskais efekts. Jo spēcīgāka ir elektrona - fonona mijiedarbība normālajā metālā, jo mazāka ir šī metāla vadāmība.

Tā, piemēram, svins ir slikts vadītājs, bet tajā pašā laikā spēcīgās elektrona - fonona mijiedarbības dēļ, tam piemīt augsta kritiskā temperatūra (tīram metālam). Cēlmetāli ir labi vadītāji. Tiem ir vāja elektrona - fonona mijiedarbība. Tie nepāriet supravadāmības stāvoklī pat pie ļoti zemām temperatūrām, kuras ir iegūtas mūsdienās.

Vai visi elektroni pievelkas viens pie otra? Lai izprastu to, atgriezīsimies pie iepriekš aprakstītajiem elektroniem. Fonona izstarošanas procesā, pirmais elektrons pāriet no stāvokļa $\vec{k}_1$ stāvoklī $\vec{k}'_1$. Acīmredzami, ka stāvoklim $\vec{k}'_1$ ir jābūt brīvam. No Pauli principa seko, ka tas ir iespējams tikai Fermī virsmas, kas $\vec{k}$ telpā ir sfēra ar rādiusu $\vec{k}_F$, tuvumā. Līdz ar to, caur fononu var mijiedarboties tikai tie elektroni, kuri atrodas šaurā sfēriskā slānī $2\Delta k$ pie Fermī virsmas (6.7. zīm.). Pārējie elektroni nemijiedarbojas. Šī slāņa



6.7. zīmējums. Elektronu mijiedarbība ar fonona palīdzību.

biezumu $2\Delta k$ nosaka Debaja enerģija $\hbar\omega_D$: $\frac{\Delta k}{k_F} \sim \frac{\hbar\omega_D}{E_F}$, kur $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$. Elektroniem, kuriem enerģija atrodas ārpus šī intervāla, režģis kustas pārāk lēni un nepaspēj atsaukties uz kustībā esošā elektrona polarizējošo iedarbību.

6.3.2. Kupera pāri

Normālā metālā pie $T = 0K$ vismazākā enerģija piemīt stāvoklim, kurā visi elektroni $\vec{k}$ telpā atrodas Fermī sfēras iekšienē. Visi stāvokļi ārpus šīs sfēras ir brīvi. Šajā gadījumā elektroni nemijiedarbojas savā starpā, t.i., to potenciālā enerģija ir vienāda ar nulli.

Elektronu apmaiņa ar virtuālo fononu, kā jau tika minēts, rada to savstarpējo pievilkšanos. Šī efekta attēlošanai var izmantot klasisko analogiju. Divi slidotāji uz ledus nepārtraukti met viens otram bumbu. Atsitiena dēļ notiek savstarpējā atgrūšanās. Bet tā var kļūt par pievilkšanos, ja bumbu aizvietot ar bumerangu. Slidotājiem ir jāapstājas ar muguru vienam pret otru, un katram bumerangu ir jāmet uz partnerim pretējo pusi. Bumeranga kustību ietekmēs gaisa vide, kurā tas tika mests. Fonona gadījumā par tādu vidi kalpo kristālisks režģis.

Tādā veidā, parādās saistītu elektronu pāru veidošanās iespēja. Šo elektronu pievilkšanās enerģija negatīvi ietekmē kopējo sistēmas enerģiju, t.i., samazina to. Lai to novērotu, ir nepieciešams nodrošināt elektronu izkliedi no stāvokļa $(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ stāvoklī $(\vec{k}'_1, \vec{k}'_2)$. Tāda izkliede ir iespējama, ja sākotnēji stāvoklis $(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ ir aizpildīts, bet $(\vec{k}'_1, \vec{k}'_2)$ - brīvs. Tāpēc minimālajai enerģijai pie $T=0K$ jau atbilst nevis daļēji aizpildīta Fermī sfēra, bet kāda "izsmērēta" Fermī virsma. Daļa stāvokļu $\vec{k}$ telpā virs Fermī sfēras būs aizpildīti, un tajā pat laikā daļa stāvokļu zem Fermī virsmas būs brīvi.

No detalizētākas kvantu - mehāniskās pieejas seko, ka sistēmas vislielāko enerģijas samazinājumu iegūst tad, kad saistītie pāri veido elektronus ar vienādiem, bet pretēji vēršiem impulsiem un pretējiem spiniem, t.i., kad veidojas pāri $\{+\vec{k}_\uparrow, -\vec{k}_\downarrow\}$, kurus, kā jau tika minēts iepriekš, nosauca par Kupera pāriem.

Atšķirībā no elektroniem, kuriem ir pusvesels spins, Kupera pāris, būtībā, ir jauna daļiņa, kuras spins ir nulle. Tādas daļiņas pakļaujas Boze - Einšteina statistikai. Tām nepastāv Pauli principa aizliegums. Bozē daļiņām piemīt sekojoša īpašība: vienu un to pašu stāvokli var ieņemt pēc patikas daudz daļiņu, pie tam jo vairāk to atrodas šajā stāvoklī, jo grūtāk kādai daļiņai pāriet citā stāvoklī. Notiek tā saucamā Bozē - kondensācija.

Tā kā visām daļiņām, kas atrodas kondensātā, ir vienādi fizikālie raksturlielumi (visas vienā stāvoklī), tās var aprakstīt ar vienu viļņa funkciju no viena telpiskā mainīgā $\Psi(r)$. Šīs viļņa funkcijas amplitūdas kvadrāts dod Kupera pāru blīvumu $n_s/2$, kur n_s - "supravadošo elektronu" koncentrācija. Samazinoties temperatūrai n_s pieaug.

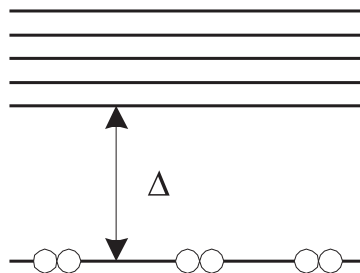
Tāda kondensāta plūšana ir supraplūstoša. Tiešām, tagad jebkurai daļiņai no Bozē - kondensāta nav tik viegli izkliedēties uz kāda defekta. Pārējās kondensāta daļiņas pretojas tādai darbībai.

Tādā veidā, supavadāmību var attēlot kā Kupera pāru, kurām ir lādiņš $2e$, supraplūstamību.

Tā rezultātā mijiedarbība, kas veicināja pāru veidošanos, ir vāja, un Kupera pāru izmērs, ko sauc par koherences garumu ξ , ir ļoti liels. Aprēķini rāda, ka $\xi = 10^2$ nm. Tas norāda uz to, ka apgabala iekšienē, kuru ieņem jebkurš pāris, atradīsies miljoniem citu pāru centri. Līdz ar to, Kupera pārus nevar iedomāties kā neatkarīgas daļiņas. Pāru viļņu funkciju pārklāšanās palielina sapārošanas efektus. Tādā veidā, Kupera pāru veidošanās process ir kolektīvs efekts.

6.4. Enerģētiskā sprauga

Visi Kupera pāri, kas izveidojās pie $T = 0K$, ir koncentrēti vienā līmenī, kurš raksturo supravadītāja pamatstāvokli. (6.8. zīm.).



6.8. zīmējums. Enerģētiskā sprauga supravadītājā.

Veidojoties Kupera pāriem, sistēmas enerģija samazinās uz elektronu pāru saites enerģijas rēķina, kuru parasti apzīmē ar $2\Delta_0$ (apzīmējums Δ_0 atbilst gadījumam $T = 0K$). Nesapārots elektrons, kas atbilst elementārajam ierosinājumam supravadītājā, nevar atrasties šajā līmenī un tam ir jāieņem elementāro ierosinājumu spektrā pirmo neaizņemto līmeni. Pārrauot saiti starp šiem elektroniem, katram no tiem ir jāpāriet elementāro ierosinājumu līmenī un, tādēļ ir nepieciešama liela enerģija, kura ir lielāka par $2\Delta_0$. Citiem vārdiem, enerģētiskā sprauga $2\Delta_0$ atdala elementāro ierosinājumu spektru (normālo elektronu) no enerģētiskā līmeņa, kurš atbilst supravadītāja pamatstāvoklim. Aprēķini pēc BKŠ teorijas parāda, ka spraugas platums pie $T = 0K$: $2\Delta_0 = 3.52K_B T_K$.

Spraugas platums pie šīs temperatūras ($T = 0\text{K}$) nav liels, tā kārtā ir $10^{-3} \div 10^{-4}\text{eV}$. Galīga platuma enerģētiskā sprauga norāda par noteiktu Kupera pāra un visa to kolektīva “nelokamību” attiecībā pret ārējām iedarbībām. Izteiksmei, kas izsaka enerģētiskās spraugas platumu, ir sekojošs izskats:

$$\Delta = 2\hbar\vartheta_{\max} \exp\{-1/N(E_F)V_{e-f}\},$$

kur

$\vartheta_{\max}$ - fononu maksimālā Debaja frekvence;

$N(E_F)$ - elektronu enerģētisko līmeņu blīvums Fermī robežas tuvumā;

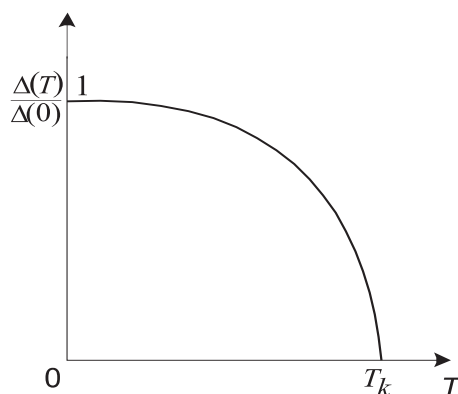
V_{e-f} - elektronu mijiedarbības intensitāte caur fononiem.

Kristālais režģis šajā formulā ir attēlots ar fononu maksimālo enerģiju, elektronu gāze kristālā - ar elektronu enerģētisko līmeņu blīvumu Fermī robežas tuvumā, bet elektronu gāzes un režģa svārstības - ar elektronu mijiedarbības intensitāti caur fononiem.

Enerģētiskās spraugas platums samazinās pieaugot temperatūrai. Tiešām, lai izjauktu Kupera pāri un izveidot divus elementārus ierosinājumus ir nepieciešama enerģija 2Δ . Ja supravadītāja temperatūra ir atšķirīga no nulles un ir tāda, ka $K_B T \sim 2\Delta$, tad daudzi Kupera pāri izjuks siltuma iedarbības dēļ. Pie tam $\vec{k}$ telpā ir daudz stāvokļu, kas ir aizpildīti ar atsevišķiem elektroniem (vai, kā mēs tos nosaucām, ar elementārajiem ierosinājumiem). Šie aizpildītie stāvokļi vairs nepiedalās pāra veidošanā, tātad, neietekmē sistēmas enerģijas samazināšanu. Supravadītāja enerģija pieaug. Tagad tie paši stāvokļi nepiedalās enerģētiskās spraugas veidošanā. Tātad, jo vairāk ir pārrautu pāru, jo vairāk elementāro ierosinājumu. Līdz ar to, jo mazāk paliek pāru, kas ietekmē pievilkšanos, jo enerģētiskā sprauga kļūst šaurāka un vājāka. Pie $T = T_k$ tā pazūd. BKŠ teorija paredz, ka kritiskās temperatūras tuvumā, pieaugot T , enerģētiskā sprauga samazinās pēc sekojošā likuma:

$$\Delta(T) = 1.74\Delta_0(1 - T/T_k)^{\frac{1}{2}}.$$

Enerģētiskās spraugas platuma izmaiņu atkarībā no temperatūras var attēlot grafiski (6.9. zīm.).



6.9. zīmējums. Enerģētiskās spraugas platuma atkarība no temperatūras.

Enerģētiskās spraugas eksistence izskaidro daudzas supravadītāju īpašības, arī Meisnera - Oksenfelda efektu.

Analoģisku iedarbību izraisa arī supravadītāja apstarošana ar elektromagnētiskiem kvantiem. Kamēr šiem kvantiem ir pārāk maza frekvence, Kupera pāri tos nesaista un supravadītājs atstaro atpakaļ tāpat, kā normālais metāls. Bet tiklīdz kvantu enerģija kļūst

vienāda ar spraugas divkāršoto platumu 2Δ , katrs no pāra elektroniem iegūst iespēju saņemt enerģiju, pāris pārvar spraugu un izjūk. Šajā momentā tiek novērots spēcīgs starojuma absorbējums. Nosacījums $\hbar\vartheta = 2\Delta$ atbilst kvantiem, kuru frekvences atrodas infrasarkanā starojuma diapazona robežās. Izmērot pie dažādām supravadītāja temperatūrām tās frekvences, pie kurām supravadītājā sākās spēcīga fononu absorbēšana, izdevās iegūt atkarību, kas labi saskaņojas ar to atkarību, kuru paredzēja BKŠ teorija.

6.5. Bezspaugas supravadišana

Izrādās, ka enerģētiskās spraugas klātbūtne nav supravadītāju fundamentālā īpašība. L. Gorjkovam kopā ar kolēģi A. Abrikosovu izdevās paredzēt tā saucamo bezspaugas supravadišanu.

Ja tīrā supravadītājā ievadīt magnētisko atomu piemaisījumus, tad tie var būtiski pazemināt pārejas supravadošā stāvoklī temperatūru. Magnētiskā piemaisījuma atomiem piemīt spins, tātad arī, spina magnētiskais moments, un, kad tiem garām kustas Kupera pāri, tajos ietverto elektronu spini mijiedarbojas ar piemaisījuma atomu spiniem. Spinu mijiedarbības enerģija ir minimāla tad, kad daļiņu spini ir vērsti pretējos virzienos. Bet, ja viens no Kupera pāra elektroniem var “pielāgot” sava spina virzienu attiecībā pret atoma spinu, tad otram pāra elektronam tas principiāli nav iespējams. Elektrons to var izdarīt tikai izjaucot pāri.

Rezultātā, ja palielinātu magnētiskā piemaisījuma atomu koncentrāciju supravadītājā, tad tiks izjaukts arvien lielāks pāru skaits, un, saskaņā ar to, enerģētiskās spraugas platumus samazināsies. Izrādās, ka ievadot magnētisko piemaisījumu, sprauga samazinās ātrāk nekā T_k , un sasniedzot kādu koncentrāciju n_0 , kas ir vienāda ar $0.91n_{kp}$ (n_{kp} - koncentrācijas vērtība, pie kuras pilnīgi pazūd supravadišanas stāvoklis), enerģētiskā sprauga kļūst vienāda ar nulli, tajā pat laikā, kad viela paliek supravadošajā stāvoklī.

Viens no skaidrojumiem ir sekojošs. Pieņem, ka kustoties magnētiskā atoma tiešā tuvumā, Kupera pāris sadalās atsevišķos elektronos, bet attālinoties no atoma, elektroni atkal savienojas pāri, samazinoties spina mijiedarbībai ar atomu. Tādai sadalīšanai pēc laika atbilst lokālo enerģētisko līmeņu parādīšanās enerģētiskās spraugas robežās. (Par lokālajiem tos sauc tādēļ, ka atbilst nevis visam supravadītājam kopumā, kā pāru kopējam līmenim, bet tikai atsevišķam apgabalam tajā, kurš atbilst atsevišķiem magnētiskajiem atomiem). Tad pieaugot magnētiskā piejaukuma koncentrācijai, sprauga sašaurinās, un līdz ar to, arvien blīvāk “aizaug” ar lokālajiem līmeņiem, kamēr pavisam pazūd. Bet, tajā pat laikā, paliek kāds supravadošo pāru skaits, kuri arī pārnes strāvu bez pretestības. Bezspaugas vadāmības rašanās iespējamība norāda uz to, ka supravadošā stāvokļa rašanās obligāts nosacījums ir nevis spraugas pastāvēšana, bet Kupera pāru elektronu saistītais stāvoklis, kurš var ietekmēt supravadošās īpašības arī bez enerģētiskās spraugas.

6.6. Nulles pretestība. Magnētiskās plūsmas kvantēšana

Tagad atgriezīsimies pie supravadītāju īpašību apskatīšanas, izmantojot supravadišanas teoriju. Īsumā apskatīsim, kā ir jāizprot elektriskās pretestības rašanās. Saskaņā ar Luija de Broļī hipotēzi, kustībā esošai daļiņai var attiecināt vilni $\lambda = h/p$, kur λ - viļņa garums, h - Planka konstante, p - daļiņas impulss. Tātad elektronus apraksta ar viļņiem, kas kristālā izplatās visos virzienos. Strāvas plūšana nozīmē, ka kādā virzienā izplatās vairāk viļņu nekā pretējā. Mijiedarbību ar joniem izsaka elektronu viļņu izkliede. Daļiņu valodā, šī izkliede atbilst sadursmēm. Stingri periodiskajā režģī izkliede nenotiek. Elektronu stāvokļi, kas ir Šrēdingeru vienādojuma atrisinājumi, ir stabili kvantu stāvokļi. Elektronu viļņu izkliede, t.i., kvantu stāvokļu aizpildīšanas izmaiņas, var notikt tikai periodiskā potenciāla traucējuma gadījumā, kuru rada atomu siltumsvārstības, defekti režģa struktūrā vai piejaukuma atomi. Izkliede uz siltumsvārstībām dod to pretestības daļu, kas ir atkarīga no temperatūras, bet izkliede uz struktūras defektiem un piejaukuma atomiem nosaka paliekošo pretestību.

Ja metāliskā gredzenā ierosina elektrisko strāvu, tad pie istabas temperatūrām strāva gredzenā ātri vājināsies, jo strāvas plūšana notiek ar siltuma zaudējumiem.

Pavisam pretēja aina vērojama gadījumā, kad temperatūra ir tuva absolūtajai nullei un metāls ir supravadītājs. Strāva, kas tādos apstākļos plūst gredzenā, kļūst nerimstoša.

Pirmajā acu uzmetienā viss ir vienkārši. Patiešām, supravadītājos strāva plūst bez kādas pretestības. Pie tam nepastāv Džoula zudumi. Tādēļ elektroni, kas nezaudē savu enerģiju, var pēc patikas ilgi kustēties metāliskā gredzenā. Īstenībā situācija ir sarežģītāka. Protams siltuma zudumi supravadītājā nepastāv, bet tomēr aina paliek pavisam nesaprotama no klasiskās fizikas viedokļa.

Apskatīsim šo jautājumu sīkāk. Lietas būtība ir tāda, ka elektronu kustība, kas veido strāvu gredzenā, nav vienmērīga un taisnvirziena. Elektroni kustas pa riņķa līniju ar centrīces paātrinājumu. Paātrinātu elektronu lādiņa kustību vienmēr pavada elektromagnētisko viļņu izstarošana. Elektromagnētiskos viļņus jāizstaro arī elektroniem, kas kustas ar centrīces paātrinājumu apskatāmajā metāliskajā gredzenā. Pakāpeniskai enerģijas izstarošanai, pat bez siltuma zaudējumiem, ir jārada strāvas rimšana gredzenā. Bet, kā bija aprakstīts iepriekš, eksperiments parāda, ka strāva nerimst un var cirkulēt pēc patikas ilgi.

Fizikāliem līdzīga problēma jau pastāvēja agrāk. 1911. gadā Rezerfords, pamatojoties uz rezultātiem, kas iegūti α daļiņu izkļedes eksperimentos, piedāvāja planetāro atoma modeli. Viņš piedāvāja, ka atoms sastāv no kodola un elektroniem, kas riņķo apkārt tam pa riņķveida orbītām.

Planetārā atoma modeļa pamatgrūtības bija saistītas ar elektronu kustības apkārt elektronam paātrinājumu. Elektronam, kurš kustas ar centrīces paātrinājumu, ir jāizstaro elektromagnētiskie viļņi. Līdz ar to, elektrona enerģija samazinās un tam ir “jānokrīt” uz kodola. Citiem vārdiem, no fizikas pamatnostādņēm par elektromagnētiskām parādībām seko, ka atoma planetārais modelis ir nestabils.

Šīs problēmas risinājums bija Bora kvantu teorijas izveidošana. Saskaņā ar Bora postulātiem pastāv noteiktas orbītas, pa kurām kustoties, elektrons neizstaro elektromagnētiskos viļņus.

Atgriezīsimies pie gredzena, pa kuru plūst nerimstoša strāva. Šajā gadījumā elektromagnētisko viļņu izstarošana nenotiek tā pašā iemesla dēļ, kāpēc neizstaro arī elektrons, kas kustas apkārt atoma kodolam. Abos gadījumos pamatloma ir kvantu fizikas likumiem. Pētot atoma īpašības, mēs redzam kvantēšanu mikropasaulē, bet supravadošana parāda mums makroskopiskā lieluma – strāvas stipruma, kvantēšanas piemēru. Ar supravadošā gredzena palīdzību mēs varam novērot pēc saviem mērogiem gigantisku kvantu efektu. Strāvas stiprums supravadošā gredzenā nevar izmainīties nepārtraukti un pieņemt jebkuru skaitlisku vērtību. Visam elektronu kolektīvam, kas kustas gredzenā, rodas gigantiska Bora orbīta. Tā kā supravadošā strāva ir saistīta ar magnētisko lauku, tad tā intensitāte var pieņemt tikai diskretu vērtību virkni.

Tātad tiks kvantēta arī magnētiskā plūsma $\Phi = \pi r^2 H$ caur gredzena šķēsgriezum. Citiem vārdiem $\Phi = N\Phi_0$, kur N - vesels skaitlis, Φ_0 - kāda minimāla porcija - magnētiskās plūsmas kvants. Magnētiskā plūsma – makrospisks lielums, un tā kvantēšanas iespēja norāda uz pāreju pie gigantiskiem, salīdzinājumā ar atomu, kvantēšanas mērogiem. Veicot aprēķinus, iegūsim:

$$\Phi = N\Phi_0, \quad \text{kur} \quad \Phi_0 = \frac{h}{2e}, \quad N = 1, 2, 3, \dots$$

Tādā veidā magnētiskās plūsmas kvants ir vienāds ar $\Phi_0 = h/2e$ un pēc vērtības $\Phi_0 = 2 \cdot 10^{-15}$ Wb.

1950. gadā, vēl līdz supravadošanas teorijas izveidošanas, F. Londons paredzēja magnētiskās plūsmas kvantēšanu. Izteiksme, kuru viņš ieguva kvantam, bija divreiz lielāka. Bet tajā laikā vēl nekas nebija zināms par elektronu pāriem, un Londons neietvēra izteiksmē reizinātāju “2” elektronu impulsam. Eksperiments apliecināja supravadošanas pamatnostādnes pareizību, par saistīto elektronu pāru pastāvēšanu supravadošajos.

6.7. Izotopiskais efekts

Mūsdienu kodolfizika pietiekamā daudzumā ļāva kodolreaktoros iegūt izotopus ar stipri atšķirīgām masām. 1950. gadā, gandrīz vienlaicīgi, E. Maksvels un C. Reinolds, B. Serinš, V. Raits un L. Nesbits noteica dzīvsudraba pārejas temperatūras atkarību no kodola masas. Izrādījās, ka, dzīvsudrabam ar masas skaitli 199.7 līdz 203.4, tiek novērota T_k maiņa no 4.161 līdz 4.126 K, t.i., $T_k \sim M^{-1/2}$. Dotie rezultāti apliecināja elektronu - fononu mijiedarbības ideju. Tādu pašu atkarību dod, pēc septiņiem gadiem izveidotā, BKŠ teorija:

$$T_k = 1,13 \frac{\hbar \omega_D}{K_B} \exp \left(-\frac{1}{N(E_F) V_{e-f}} \right), \quad (6.1)$$

kur $\hbar$ - Planka konstante, kas dalīta ar 2π ,

ω_D - Debaja frekvence,

K_B - Bolcmaņa konstante,

$N(E_F)$ - enerģētisko līmeņu blīvums Fermī robežas tuvumā,

V_{e-f} - konstante, kas raksturo elektronu - fononu mijiedarbību.

Pirmajā BKŠ teorijas formulējumā, mijiedarbības parametrs V_{e-f} tika uzskatīts par nemainīgu lielumu. Tad pārejas temperatūras atkarību no izotopa masas noteica Debaja

frekvence. Tālāk, ja apskatīt Debaja frekvenci kā jonu svārstību frekvenci, tad harmonisku svārstību gadījumā iegūsim: $\omega_D \sim \frac{1}{\sqrt{M}}$.

Tad $T_k \sim M^{1/2}$. Šis rezultāts norāda uz to, ka izotopu masa ir kristāla režģa raksturlielums un var ietekmēt tā īpašības. Tā, piemēram, režģa svārstību frekvence ir saistīta ar jonu masu pēc sekojošas izteiksmes $\omega \sim M^{1/2}$. Supravadišanu, kas ir metāla elektronu sistēmas īpašība, izotopiskā efekta dēļ saista ar kristāliskā režģa stāvokli. Tātad supravadišanas efektu nosaka elektronu mijiedarbība ar kristāla režģi.

Pastāv vesela supravadītāju virkne, kuriem atkarībā $T_k \sim M^{-\beta}$ tiek novērota lieluma β novirze no 1/2 un pat pilnīga T_k neatkarība no M , bet to nevar apskatīt kā elektronu - fononu mijiedarbības nepastāvēšanas pierādījumu šajos supravadītājos.

Tātad izotopiskais efekts ļauj teikt, ka supravadišanu pamatā nosaka elektronu - fononu mijiedarbība, ja ne visos, tad lielākajā supravadītāju daļā.

Mēs apskatījām supravadišanas fiziku un noskaidrojām, ka metālos to nosaka elektronu mijiedarbība caur fononiem. Bet var arī pamanīt, ka temperatūras, pie kurām notiek pāreja supravadošajā stāvoklī, ir ļoti zemas. Labākai supravadītāju izmantošanai ir nepieciešams, lai supravadišana saglabātos pie istabas temperatūras (diapazona vidus aptuveni atbilst celsija skalas nullei, t.i., 273 K). Pagaidām, lai iegūtu supravadītājus ir nepieciešama spēcīga atdzesēšana, bet tas, savukārt, nav izdevīgi.

Tāpēc zinātnieki meklē iespējas paaugstināt T_k . Šī problēma, kas pastāv fizikā, ieguva “augsttemperatūras” supravadišanas nosaukumu. Pastāv divi pamatvirzieni šīs problēmas risinājumā. Pirmais pamatojas uz parastā mehānisma iespēju izmantošanu, otrais ir saistīts ar jaunu supravadišanas augsttemperatūras mehānismu meklēšanu.

6.8. Jaunas teorijas meklējumos

Parasti supravadišanas mehānisms ir saistīts ar kristāliskā režģa deformāciju un polarizāciju ar metāla elektronu sistēmu. Elektronu mijiedarbība ar režģi noved pie starpelektronu pievilkšanās supravadišanas stāvokļa iestāšanos. Kristāla režģiem piemīt starpvides loma, kas izjūt kvantu pārejas, pie tam temperatūra T_k atbilst to maksimālai enerģijai. T_k zemā vērtība ir saistīta ar kristāliskā režģa īpatnībām. Ja izmainīt kristāliskā režģa struktūru tā, lai elektroni spēcīgāk saistītos viens ar otru, tad T_k var paaugstināt arī ar parastā elektrona - jona mijiedarbības mehānisma palīdzību.

Elektrona - fonona mijiedarbības pamatā T_k nosaka kā :

$$T_k \approx \Theta \exp [-1/N(E_F)V_{e-f}],$$

kur Θ - Debaja temperatūra, $N(E_F)$ - elektronu enerģētisko līmeņu blīvums Fermī robežas tuvumā, V_{e-f} - elektronu mijiedarbības intensitāte caur fononiem (skat. 6.1). Eksponentfunkcija negatīvo vērtību argumentam ir mazāka par vieninieku un ļoti ātri samazinās ar tā pieaugumu. Līdz ar to, T_k vienmēr ir mazāka par Θ , bet Θ kārtā metāliem ir ap simts grādiem. Saskaņā ar BKŠ teoriju, $N(E_F)$ nevar pārsniegt $\sim 1/2$, bet faktiski tā ir vēl mazāka, un T_k atbilstoši sastāda ne mazāk kā 0.14Θ . Šo T_k nosaka valento elektronu vidējais skaits uz atomu. Bez tam, T_k ietekmē arī atoma tilpums un kristāliskā režģa struktūra. Pētījumi parādīja, ka par supravadītājiem kļūst kristāli tikai

ar visblīvāko atomu pakojumu, kur katrs atoms ieņem minimālu tilpumu. Vēl vairāk, ja dažus supravadošos elementus pakļauj spēcīgai vispusīgai spiedei (pie desmitu miljardu Paskālu liela spiediena), tie kļūst par supravadītājiem. Kas attiecas uz konkrēta kristāla struktūras veida ietekmi uz supravadīšanu, tad, vispārīgi, atsevišķas likumsakarības netiek izdalītas. Kaut arī vislielākā T_k piemīt, tā saucamai, beta - volframa struktūrai, vēl nav skaidrs, kāpēc tieši šī, bet nekāda cita struktūra, dod vislielāko kritisko temperatūru. Pēdējie pētījumi parādīja, ka pieņēmums par to, ka T_k pie dotā mehānisma ir ierobežota ar $25^0 - 40^0\text{K}$ kārtu, ir nepareizs, bet lielākā zinātnieku daļa uzskata, ka tomēr T_k ir neliela vēriba. Bet tas ir tad, ja runa iet par supravadīšanu, kuru nosaka elektronu mijiedarbība caur fononiem.

Tad, lai sasniegtu augsttemperatūras supravadīšanu ir nepieciešams apskatīt jaunus supravadīšanas mehānismus.

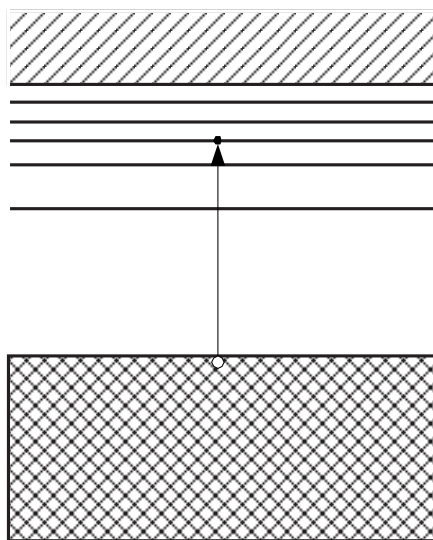
Elektronu mijiedarbība caur fononiem, kura nosaka supravadīšanu metālos, nav vienīgā mijiedarbība cietajos ķermeņos. Kristālos notiek arī citi procesi, kuros bez fononiem uz diezgan īsu laiku parādās citas daļiņas un kvanti. Viena no tādām daļiņām ir eksitons. Tas rodas sekojošā veidā. Metālos tukšie enerģijas līmeņi, kurus var aizņemt elektroni pie $T \neq 0$ vai arī pēc patikas vājā elektriskā laukā, izvietojas tieši Fermī robežas tuvumā. Dielektriķos šie tukšie līmeņi ir atdalīti no Fermī robežas ar diezgan platu aizliegtās enerģijas joslu, tā ir 1000 reizes platāka par atbilstošo spraugu supravadītājos. Parastajos apstākļos, piemēram, pie istabas temperatūras vai bez elektriskā lauka, līmeņi virs spraugas nav aizpildīti, tas arī nozīmē, ka dielektriķis nevada elektrisko strāvu. Ja dielektriķi apstarot ar augstfrekvences gaismu, tad tā kvanti var pārnest elektronus pāri aizliegto enerģiju zonu neaizpildītajos enerģijas līmeņos. Pie tam vienā enerģijas līmenī zem spraugas veidojas tukša vieta jeb caurums. Elektriskā laukā šo caurumu tiecas ieņemt cits elektrons no zemākas enerģijas joslas, pie tam, tas atbrīvo aizņemto vietu. Veidojas elektronu lēcienu sērija - telpiskā attēlojumā šī lēcienu sērija notiek virzienā, kas ir pretējs tam, kurā kustas elektrons, kas ir iemests pāri spraugai augšējā enerģijas joslā. Tāpēc saka, ka caurums ir lādēts pozitīvi.

Tomēr, ir iespējama arī cita procesa norise, kad ierosināts elektrons neizjauc saiti ar caurumu, kas rodas valentajā zonā, bet veido kopā ar to kopēju saistītu sistēmu. Tādu sistēmu J. Frenkels nosauca par eksitonu. Eksitons ir līdzīgs ierosinātam ūdeņraža atomam: abos gadījumos apkārt vienam pozitīvam lādiņam kustas elektrons un enerģētiskais spektrs ir diskrets (6.10. zīm.).

Eksitonu enerģijas līmeņi izvietojas pie vadāmības zonas apakšējās daļas, jo eksitoni ir elektriski neitrālas sistēmas, tad to izvietojšanās pusvadītājos neizraisa papildus lādiņnesēju veidošanos. Izveidojoties eksitonam, tas kādu laiku pārvietojas pa visu pusvadītāja tilpumu. Saduroties ar fononiem, piejaukuma centriem un citām režģa traucējumiem, eksitoni vai nu rekombinē, vai "izjūk". Pirmajā gadījumā atomi pāriet normālajā stāvoklī, bet ierosinājuma enerģija tiek nodota režģa mezgliem vai arī tiek izstarota gaismas kvantu veidā (luminiscē).

Otrajā gadījumā veidojas nesēju pāris - elektrons un caurums, kas noteiks pusvadītāju vadāmību.

Ginzburgs piedāvāja ietvert plānu metālisku plēvi dielektriķī un izveidot daudzslāņu plēvi. Uz metāla un dielektriķa robežas brīvo elektronu un eksitonu viļņu funkcijas dielektriķī daļēji pārklāsies: tās strauji netiek pārtrauktas uz robežas, bet nedaudz pāriet citā vidē. Viļņu funkciju pārklāšanās nozīmē elektronu un eksitonu mijiedarbības

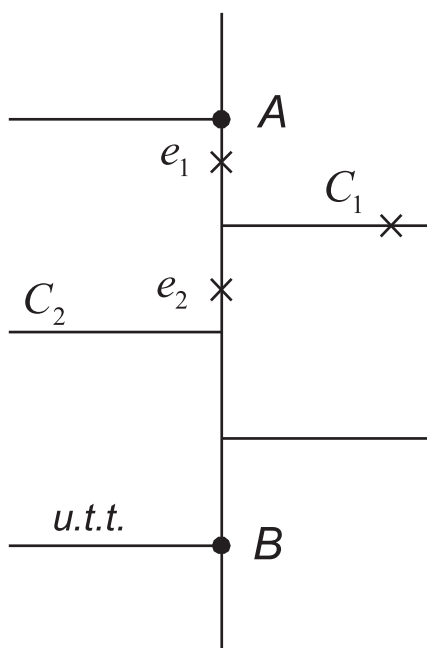


6.10. zīmējums. Enerģētiskais spektrs.

iespējamību. Tad metāliskā plēvē, kas ir aptverta ar dielektriķi, varētu veidoties augsttemperatūras supravadīšana. Šī ir interesanta ideja, taču eksperimentāli tā nav pierādīta.

Elektronu pievilkšanās, kas noved pie supravadīšanas, tiek veidota pateicoties starpvidei, un parastā gadījumā par tādu vidi kalpo kristālais režģis. Rodas jautājums: vai nevar atrast kādu citu vidi, kas nodrošinātu stiprāku pievilkšanos starp molekulām?

1964. gadā parādījās amerikāņu fiziķa Littla darbs, kurā tika iegūts rezultāts, kas izraisīja milzīgu interesi. Viņš piedāvāja modeli ar $T_k=2400$. Littla modelis ir polimērs ar galveno asi AB , gar kuru arī pārvietojas vadāmības elektroni (6.11. zīm). Šim polimēram



6.11. zīmējums. Littla modelis: polimēru shēma.

ir arī sānu atzarojumi, un elektroni, kas atbilst tiem, veic svārstību kustību. Šī modeļa

pamats – divu elektronu grupu eksistēšana. Viens no vadāmības elektroniem (piemēram, e_1), parasto Kulona spēku ietekmē izsauc elektronu kustību sānu atzarojumā. Tas ietekmē cita vadāmības elektrona (e_2) stāvokli. Tāds ir elektronu e_1 un e_2 papildus mijiedarbības mehānisms. Aina ir līdzīga tai, kuru novēro parastajos supravadītājos, bet režģa jonu loma tagad ir sānu atzarojumu elektroniem. Tie veido to papildus sistēmu, kas izveido pievilkšanos starp vadāmības elektroniem un galvenajā asī veidojas supravadošs stāvoklis. Apskatāmajā elektronu mehānismā jonu masas vietā figurēs elektronu masa: $T_k \sim m_{el}^{-\frac{1}{2}}$, t.i., ir iespējama daudz lielākā T_k vērtība.

Šī mehānisma realizācija saskaras ar principiālām grūtībām. Tās ietver sevī ne tikai visai garas organiskās struktūras izveidošanās nepieciešamību. Pamatgrūtības ir saistītas ar Littla modeļa viendimensijas raksturu. Supravadošs sakārtojums viendimensijas gadījumā nav iespējams.

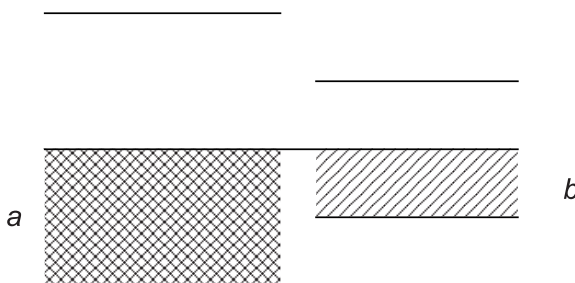
80 - jos gados tika atklāts pirmais supravadošais polimērs: $(\text{Sn})_X$, $T_k \approx 0.26K$, bet tomēr var runāt par jaunu supravadošo materiālu sintēzes sākumu [1].

Ja mums ir divdimensiju sistēma, tad tādu sistēmu ir grūti izjaukt. Tagad jau vajag izjaukt atomu plakni. Tādēļ fiziski supravadišana ir iespējama divdimensiju sistēmās (plānās metāliskās plēves, slāņainos dielektriķos).

Citu supravadišanas mehānismu, kas attiecas uz reālām trīsdimensijas sistēmām, 1965. gada sākumā piedāvāja B. Geilikmans. Šo iespēju realizēja sakausējumos, kas satur pārklātās enerģētiskās zonas.

Saskaņā ar cietā ķermeņa zonu teoriju, elektrona stāvokli raksturo ar visai noteiktiem diskrētiem enerģijas līmeņiem, kas ir analogiski izolēta atoma elektrona līmeņiem. Šiem diskrētajiem līmeņiem piemīt svarīga īpašība: tie sadalās grupās, kuras sauc par zonām.

Elektroni, kas pieder šaurākai zonai (6.12. zīm.) ir mazāk kustīgāki un tiek raksturoti ar lielāku efektīvo masu. Elektroni, kas pieder zonām a un b , atšķiras kā ar savām efektīvajām masām, tā arī ar viļņu funkcijām, kas apraksta kvantu mehānisko stāvokli.



6.12. zīmējums. Pārklātās enerģētiskās zonas.

Abās zonās ir neaizpildītie līmeņi, pateicoties kuriem, ir iespējamas elektronu pārejas. Kulona mijiedarbība starp elektroniem, kas pieder dažādām zonām, noved pie Kuperu supravadošo pāru veidošanas. Papildus starpelektronu mijiedarbības parādīšanās, piemēram: (supravadošā stāvokļa izveidošanās apstākļi ir labvēlīgāki platākajā zonā) var attēlot sekojoši. Elektrons, kas pieder zonai a , Kulona spēku ietekmē, izsauc b elektrona pāreju ierosinātā stāvoklī. Pretēja b elektrona pāreja izmaina cita – a elektrona stāvokli, kas, rezultātā, nozīmē papildus starpelektronu mijiedarbības parādīšanos zonā a . Sistēma kļūst supravadoša, ja ar norādīto mehānismu noteiktā pievilkšanās būs intensīvāka, nekā parastā a elektronu Kulona atgrūšanās. Apstākļi, kuros noris šis elektronu mehānisms,

ir daudz sarežģītāki, nekā parastajā gadījumā. Tieši tādēļ tāda mehānisma meklēšana ir visai sarežģīts eksperimentāls uzdevums. Šis mehānisms arī ir analogisks parastajam, bet kristāliskā režģa loma tagad ir elektroniem, kas pieder šaurai zonai. To efektīvā masa, būtiski pārsniedz brīvā elektrona masu. Tādā veidā gandrīz brīvie a - elektroni, kas pieder platai zonai, veido supravadošu sistēmu pateicoties mijiedarbībai ar “smagajiem” elektroniem, bet parastajā mehānismā supravadāmību nosaka smagie joni, kuriem $T_k \sim M^{-1/2}$. Jaunajā elektronu mehāniskā supravadišanā figurē b - elektrona masa. Tā ir lielāka par brīvā elektrona masu, bet ir mazāka par jonu masu. Tā kā $T_k \sim m_{el}^{1/2}$, bet $M \gg m_{el}$, tad T_k būs daudz augstāka.

Zonu platums metālos pēc sava lieluma būtiski pārsniedz $K_B \Theta$ - kristāla režģa maksimālo ierosinājuma enerģiju.

6.9. Jaunās supravadošās keramikas

Jau vairāk kā desmit gadu atpakaļ B. Ravo ar kolēģiem no Kaenas universitātes Francijā uzsāka eksperimentus lantāna, bārija, vara un skābekļa savienojumu iegūšanai. Ja dažus no šiem savienojumiem atdzesētu līdz temperatūrai 40 K, tad viņi varētu novērot to, ka viņu sintezētie ķermeņi pilnīgi zaudē elektrisko pretestību. Tomēr tikai nedomājamam daudziem fizikāļiem bija pamats pieņemt, ka šiem materiāliem piemīt supravadišanas īpašība, un vēl mazāk zinātnieku apgalvoja, ka supravadiņi ar tik lielu supravadišanas pārejas kritisko temperatūru kādreiz tiks iegūti. Vēlāk 1986. gadā fiziķi K. Millers un Dž. Bednorts no IBM pētījumu laboratorijas Čīrihē nonāca pie secinājuma, ka šie keramiķi ir atslēga jaunās augsttemperatūras supravadiņu klases iegūšanai, kas ir spējīga aktivizēt turpmākos teorētiskos un lietišķos pētījumus supravadišana jomā. Šo zinātnieku atklājums ieguldīja pamatus revolucionārām izmaiņām cieta ķermeņa fizikas nozarē.

Iespēja iegūt nepārspētu augsttemperatūras supravadiņu, iedvesmoja 1987. gadā daudzus pētniekus neparastu savienojumu veidošanai uz vara un skābekļa pamata.

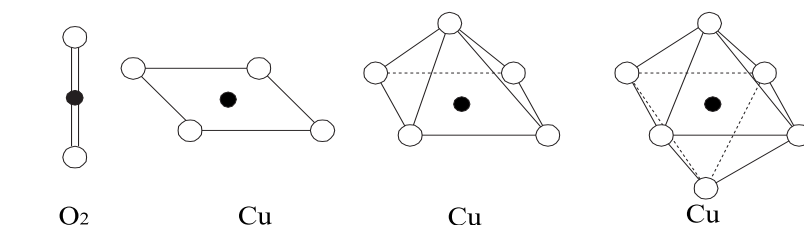
1987.gada februārī Mo - Kuens U no Alabamas štata Universitātes Hjūstonā un tā darbinieki iegūstot supravadiņu ar kritisko temperatūru 90K aizvietoja Bednorca - Millera savienojumā lantānu ar nātriju - retzemju elementu ar mazāku atomāro numuru. Drīz B. van Duvers, B. Batlogs un Roberts Dž. Kava pirmie noteica, ka šis supravadiņš ir ķīmisks savienojums, kuru tagad pazīst kā 1 - 2 - 3 (ciparu secībā norāda ītrija, bārija un vara atoma kvantitatīvo attiecību savienojumā atbilstoši). Materiāls 1 - 2 - 3 bija pirmais supravadiņš ar kritisko temperatūru, kas ir lielāka par 77 K, tāpēc to var viegli un bez lieliem ieguldījumiem atdzesēt ar šķidro slāpekli. Labākiem no parastajiem metāliskiem supravadiņiem, tādiem, kā neobijam un alvas sakausējumiem, bija nepieciešama tāpat, kā pirmajam Bednorca un Millera atklātajam augsttemperatūras supravadiņam, atdzesēšana ar daudz dārgāko šķidro hēliju.

Palielinot pūles, laikā periodā no 1986. gada līdz 1990. gadam, tika iegūts vairāk par 10 supravadošajiem materiāliem ar kritisko temperatūru virs 40 K un daži materiāli, kuriem piemita supravadāmība pie temperatūras virs 77 K. Gandrīz visi augsttemperatūras supravadiņi tika atklāti nejauši. Šajā periodā maksimālā $T_K=125K$ bija savienojumam no tallija, bārija, kalcija, vara, un skābekļa ($Tl_2, Ba_2, Ca_2, Cu_3, O_2$). 1993. gadā jau bija iegūts ap 40 šādu materiālu. Savienojumiem pārejas temperatūra $T_k=135K$ pie normālā spiediena, 153K pie spiediena 150 tūkstoši atmosfēru un ap 164K (-109C) - pie spiediena

310 tūkstoši atmosfēru. Līdzīgi kā keramikās, šajās struktūrās arī ir plaknes, kuras izveido vara un skābekļa atomi un nodrošina elektronu bezšķēršļu kustību.

Zinātnieki nezin, kādas T_k robežas pastāv keramiskajos supravadītājos, un pat nesaprot, kādas fundamentālās mijiedarbības ir par iemeslu to supravadītspējai. Bet var noteikt molekulu struktūras īpašības, kas veicina supravadīšanas veidošanos un, otrādi, traucē tās rašanos.

Vēlreiz atzīmēsim, ka visu augsttemperatūras supravadītāju kristāliskajiem režģiem piemīt vara un skābekļa atomu plaknes (6.13. zīm), kas seko pēc citu elementu slāņiem. Kad augsttemperatūras supravadītājs tiek atdzesēts līdz temperatūrai, kas ir zemāka par kritisko, šīs vara un skābekļa atomu plaknes izveido iespēju netraucētai elektronu kustībai.



6.13. zīmējums. Vara un skābekļa atomu savienojuma veidi.

Citus elementus tādā kristāliskā režģī var atlasīt un izvietot tā, lai paaugstinātu vai pazeminātu T_k .

PIELIKUMS

Determinanta izskaitļošanai 2.5. nodaļā. Kroniga - Penni modelis.

$$D_{et} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \lambda & -\lambda & -i\chi & i\chi \\ -e^{ikl-\lambda b} & -e^{ikl+\lambda\chi} & e^{i\chi a} & e^{-i\chi a} \\ -\lambda e^{ikl-\lambda b} & -\lambda e^{ikl+\lambda b} & i\chi e^{i\chi a} & -i\chi e^{i\chi a} \end{vmatrix} = 0.$$

Pieņemsim, ka ir dots 4-ās kārtas determinants:

$$Det_{a_n} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix}.$$

Izskaitļošanai izmantosim determinanta īpašību, kuru sauc par determinanta izvirzīšanu rindā:

$$Det_{a_n} = a_{11} |A_1| - a_{12} |A_2| + a_{13} |A_3| - a_{14} |A_4|,$$

kur ar $|A_n|$ apzīmēts 3-ās kārtas determinants, kuru iegūst no determinanta Det_{a_n} , izsvītrojot no matricas pirmo rindu un j -to kolonnu, kur $j = 1, 2, 3, 4$.

Rezultātā, veicot tādus pārveidojumus, iegūstam:

$$e^{ikl} + e^{-ikl} = \left(\frac{e^{\lambda b} + e^{-\lambda b}}{2} \right) \left(\frac{e^{i\chi a} + e^{-i\chi a}}{2} \right) + \left(\frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \right) \left(\frac{e^{\lambda b} - e^{-\lambda b}}{2} \right) \left(\frac{e^{i\chi a} - e^{-i\chi a}}{2} \right).$$

Veicot vienkāršus matemātiskus pārveidojumus un izmantojot hiperboliskā sinusa (sh) un kosinusa (ch) formulas:

$$\frac{e^{\lambda b} + e^{-\lambda b}}{2} = \text{ch}(\lambda) \quad , \quad \frac{e^{\lambda b} - e^{-\lambda b}}{2} = \text{sh}(\lambda b),$$

kā arī sin un cos formulas:

$$\frac{e^{ikl} + e^{-ikl}}{2} = \cos(kl) \quad , \quad \frac{e^{ikl} - e^{-ikl}}{2i} = \sin(kl),$$

iegūstam meklējamo izteiksmi (2.28).

LITERATŪRA

- [1] В.И. Фистуль. Введение в физику полупроводников. – М: Высшая школа, 1975 г. – 295 с.
- [2] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. – М: гос. издание технико-теоретической литературы, 1976 г. – 640 с.
- [3] А.С. Давыдов. Теория твердого тела. – М: Наука, 1976 г. – 640 с.
- [4] А.Ф. Гашин. Прикладная квантовая механика. – М: Просвещения, 1975 г. – 290 с.
- [5] И.В. Савельев. Курс общей физики. т. III. – М: Наука, 1968 г. – 416 с.
- [6] А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. – М: Наука, 1968 г. – 416 с.
- [7] У. Харрисон. Теория твердого тела. /Пер. с англ./ – М: Мир, 1972 г. – 616 с.
- [8] А. Анималу. Квантовая теория кристаллических твердых тел. /Пер. с англ./ под редакцией канд. физ. - мат. наук Е.Л. Иванченко. – М: Мир 1981г. – 574 с.
- [9] Г.Б. Бойкий. Кристаллохимия. – М: Наука 1971 г. – 400 с.
- [10] Г.С.Жданов. Физика твердого тела. – М: Издательство Московского университета, 1961 г. – 502 с.
- [11] В.И. Гербрер, В.И. Чадаев. Лабораторные работы по физике полупроводников. – Даугвпилс. Даугавпилсский педагогический институт. 1992 г. – 80 с.
- [12] Г.Джонс. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах. /Пер. с англ./ под редакцией В.Л. Бонч – Бруевича. – М: Мир, 1968 г. – 264 с.
- [13] Л.Г. Гречко, В.И. Сугаков, О.Ф. Томасевич, А.М. Федорченко. Сборник задач по теоретической физики. – М: Высшая школа. 1972 г. – 335 с.
- [14] Брандт, Чудинов. Электроны и фононы в металлах. Учебное пособие для Вузов. Изд. МГУ, 1990 г. – 335 с.

SATURS

I	KRISTĀLISKĀ REŽĢA TEORIJA	3
1.1.	Kristāliskā režģa translācijas simetrija	3
1.2.	Inversais (apgrieztais) režģis	4
1.3.	Režģa dinamika. Harmoniskais tuvinājums	6
1.3.1.	Vienatomu lineārās ķēdītes svārstību spektrs	7
1.3.2.	Trīsdimensiju režģa atomu svārstības	11
1.4.	Viendimensijas režģa svārstības ar bāzi	12
1.5.	Kristāla normālsvārstības	16
1.6.	Svārstību kvantēšana. Fononi	18
1.7.	Kristāliskā režģa siltumietilpība. Einšteina un Debaja modeļi	21
II	ZONU TEORIJA	25
2.1.	Šrēdingera vienādojums kristālam	25
2.2.	Adiabātiskais tuvinājums	26
2.3.	Vienelektrona tuvinājums	28
2.4.	Bloha viļņu funkcijas	30
2.5.	Kroniga - Penni modelis	31
2.6.	Cieto ķermeņu klasifikācija pamatojoties uz to zonu struktūru	44
2.7.	Elektrona dinamika kristālā. Efektīvās masas metode. Caurumu stāvokļi	54
2.8.	Lokālie līmeņi kristāliskos pusvadītājos	58
III	ELEKTRONU GĀZE METĀLOS	63
3.1.	Mikrodaļiņas un to kolektīvs	63
3.2.	Elektronu kvantu statistika metālos. Fermī enerģija	67
3.3.	Vadāmības teorijas	70
3.4.	Metālu elektronu kustības vienādojums. Relaksācijas laiks. Vidējais ceļa garums	73
3.5.	Elektrona kvazimpulss kristāliskajā režģī	76
3.6.	Fermī virsma	77
3.7.	Metālu elektronu kinētiskais vienādojums. Relaksācijas laiks	79
IV	PUSVADĪTĀJI	85
4.1.	Pamatpusvadītāji. Jēdziens par caurumiem	85
4.2.	Piejaukumu pusvadītājs	86
4.3.	Fermī līmeņa izvietojums un brīvo lādiņnesēju koncentrācija pusvadītājos	88
4.4.	Lādiņnesēju kustīguma atkarība no temperatūras	94
4.5.	Pusvadītāju pamatvadītspēja	96
4.6.	Pusvadītāju piejaukuma vadītspēja	97

4.7.	Pusvadītāju fotovadītspēja	99
4.8.	Ideāla un reāla p-n pāreja	102
4.8.1.	Kontaktpotenciāls p-n pārejā	102
4.8.2.	Strāva $p - n$ pārejā	104
4.8.3.	Caurlaides virzienā ieslēgta $p - n$ pārejā	106
4.8.4.	Sprostvirzienā ieslēgta $p - n$ pāreja	106
4.8.5.	Ideālas $p - n$ pārejas VA raksturlikne	106
4.8.6.	Reāla $p - n$ pāreja	110
4.8.7.	Reālas $p - n$ pārejas caursite	112
4.8.8.	Reālas $p - n$ pārejas kapacitātes	114
V	CIETU ĶERMEŅU MAGNĒTISKĀS ĪPAŠĪBAS	117
5.1.	Diamagnētiķi, paramagnētiķi, feromagnētiķi	117
5.2.	Landau diamagnētisms	123
5.3.	Pauli paramagnētisms	124
5.4.	Veisa molekulārais lauks	125
5.5.	Žiromagnētiskie pētījumi	127
5.6.	Dažas magnētisma kvantu teorijas metodes	129
5.7.	Feromagnētisma daba	129
5.8.	Domēnu struktūras izskaidrojums feromagnētiskās vielās	133
5.9.	Spinu viļņi. Magnoni	136
VI	SUPRAVADĀMĪBAS FIZIKA	139
6.1.	Supravadāmības atklāšana	139
6.2.	Supravadītāju pamatīpašības	140
6.3.	Supravadišanas teorija	143
6.3.1.	Pievilkšanās starp elektroniem	143
6.3.2.	Kupera pāri	146
6.4.	Enerģētiskā sprauga	147
6.5.	Bezspaugas supravadišana	149
6.6.	Nulles pretestība. Magnētiskās plūsmas kvantēšana	150
6.7.	Izotopiskais efekts	151
6.8.	Jaunas teorijas meklējumos	152
6.9.	Jaunās supravadošās keramikas	156
PIELIKUMS		159
LITERATŪRA		161