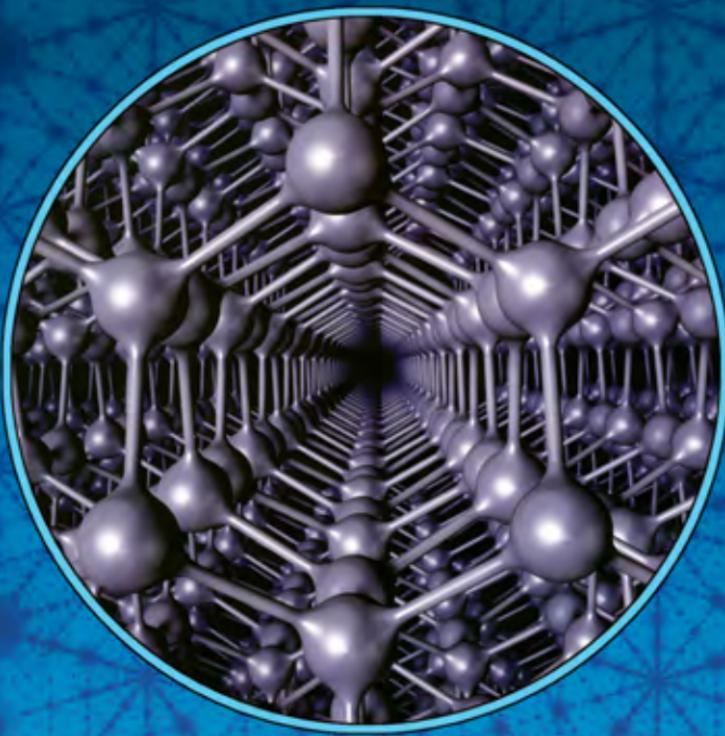


УЧЕБНИК ДЛЯ ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ

Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ



ИЗДАТЕЛЬСТВО
Бином

УЧЕБНИК ДЛЯ ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ

**Ю. А. Байков
В. М. Кузнецов**

**ФИЗИКА
КОНДЕНСИРОВАННОГО
СОСТОЯНИЯ**

Допущено
Научно-методическим Советом
по физике Министерства образования и науки
Российской Федерации
в качестве учебного пособия
для студентов высших учебных заведений,
обучающихся по техническим направлениям
подготовки и специальностям



Москва
БИНОМ. Лаборатория знаний
2011

УДК 538.9
ББК 22.37
Б18

Р е ц е н з е н т ы:
заведующий кафедрой наноматериалов и нанотехнологии
РХТУ им. Д. И. Менделеева, доктор хим. наук,
член-корреспондент РАН Е. В. Юртов;
заведующий кафедрой общей физики НИУ МФТИ,
доктор физ.-мат. наук, профессор А. Д. Гладун

Байков Ю. А.

Б18 Физика конденсированного состояния : учебное пособие / Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. — 293 с. : ил. — (Учебник для высшей школы).

ISBN 978-5-9963-0290-1

В учебном пособии помимо традиционно сложившихся разделов физики твердого тела отражены некоторые современные направления науки, такие как физика фотонных кристаллов, наномасштабная физика, фрактальные представления о структуре кристаллических тел. Теоретический материал каждой главы книги дополнен задачами с решениями.

Для студентов и аспирантов высших технических учебных заведений, а также преподавателей физики и других естественно-научных дисциплин в технических вузах.

УДК 538.9
ББК 22.37

По вопросам приобретения обращаться:
«БИНОМ. Лаборатория знаний»
Телефон: (499) 157-5272
e-mail: binom@Lbz.ru, <http://www.Lbz.ru>

ISBN 978-5-9963-0290-1

© БИНОМ. Лаборатория знаний,
2011

Оглавление

Предисловие	7
Введение	9
Глава 1. Структура твердых тел. Элементы кристаллографии	13
1.1. Силы Ван-дер-Ваальса, их классификация	13
1.2. Ионная, ковалентная и металлическая связи в твердых телах.	16
1.3. Кристаллическая решетка. Решетки Бравэ и с базисом. Обозначения узлов, направлений и плоскостей в кристаллах (индексы Миллера)	25
1.4. Классификация тел по кристаллическим структурам.	29
1.5. Элементы симметрии в кристаллах, трансляционная симметрия, ячейка Вигнера–Зейтца. Явление полиморфизма. Классификация твердых тел по кристаллографической симметрии	32
1.6. Периодические функции для трансляционных векторов. Обратная решетка и ее свойства	38
1.7. Несовершенства и дефекты кристаллической решетки	49
Задачи	51
Глава 2. Элементы физической статистики	56
2.1. Способы описания состояний макроскопической системы	56
2.2. Числа состояний для микрочастиц. Классическая и квантовая статистики, их особенности и условия применимости.	60
2.3. Невырожденные и вырожденные системы частиц. Критерий невырожденного идеального газа	64
2.4. Функции распределения вырожденных газов фермионов и бозонов	66

2.5. Снятие вырождения. Невырожденный электронный газ	73
2.6. Правила статистического усреднения	74
Задачи	76
Глава 3. Зонная теория твердых тел	80
3.1. Энергетические уровни свободных атомов.	
Обобществление электронов в кристаллах	80
3.2. Энергетический спектр электронов в кристалле.	
Зависимость энергии электронов от волнового вектора (закон дисперсии)	86
3.3. Энергия электронов в периодическом поле кристаллов . . .	90
3.4. Эффективная масса электрона	93
3.5. Заполнение энергетических зон электронами	97
Задачи	99
Глава 4. Элементарные возбуждения в твердых телах.	
Динамика кристаллической решетки	103
4.1. Условия возникновения элементарных возбуждений в твердых телах. Время жизни элементарных возбуждений	103
4.2. Импульс фонона. Неупругое рассеяние фотонов на акустических фонах	107
4.3. Колебания в решетке, состоящей из одинаковых атомов, в приближении Борна–Кармана (БК-приближение)	110
4.4. Динамика решетки с двумя атомами в примитивной ячейке в приближении Борна–Кармана	117
4.5. Нормальные колебания решетки кристалла	121
4.6. Спектр нормальных колебаний решетки кристалла	125
4.7. Функция распределения фононов по энергиям	128
Задачи	132
Глава 5. Тепловые свойства твердых тел	135
5.1. Теплоемкость твердого тела. Области низких и высоких температур	135
5.2. Теплоемкость электронного газа. Ангармонические взаимодействия в кристаллах	139
5.3. Уравнение теплопроводности. Тепловое сопротивление решетки кристалла, его связь с процессами переброса. <i>N</i> - и <i>U</i> -процессы передачи импульса в кристаллической решетке	142

5.4. Теплопроводность диэлектриков в области высоких и низких температур	149
5.5. Теплопроводность металлов. Области высоких и низких температур	154
5.6. Тепловые свойства наночастиц в приближении Дебая	157
Задачи	160
Глава 6. Электрические свойства твердых тел	165
6.1. Равновесное состояние электронного газа. Дрейф электронов под влиянием внешнего электрического поля	165
6.2. Время релаксации и длина свободного пробега электронов	167
6.3. Электропроводность невырожденного и вырожденного электронного газа. Связь тепловых и электрических свойств кристаллов. Закон Видемана–Франца–Лоренца ..	170
6.4. Зависимость подвижности носителей зарядов от температуры	173
6.5. Электропроводность чистых металлов и металлических сплавов	179
6.6. Явление сверхпроводимости. Щели в энергетическом спектре сверхпроводника	183
6.7. Образование электронных пар Купера. Теория Бардина–Купера–Шриффера сверхпроводимости в металлах и сплавах (БКШ-теория)	189
6.8. Поведение сверхпроводника во внешнем электрическом и магнитном полях. Условия перехода от нормального к сверхпроводящему состоянию проводника	193
6.9. Разрушение сверхпроводимости внешним полем	197
Задачи	198
Глава 7. Магнитные свойства твердых тел	203
7.1. Магнитное поле в магнетиках	203
7.2. Магнитные свойства атомов. Классификация магнитных материалов. Полный магнитный момент атома	208
7.3. Магнитная восприимчивость диамагнетиков. Диамагнетизм	216
7.4. Классическая и квантовая модели парамагнетизма	219
7.5. Парамагнетизм электронного газа	223

7.6. Квантовая природа ферромагнетизма. Обменное взаимодействие и возникновение ферромагнетизма.	
Температуры Кюри и Нееля	225
7.7. Доменная структура ферромагнетизма	230
7.8. Антиферромагнетизм, ферримагнетизм, ферриты	232
Задачи	234
Глава 8. Фотонные кристаллы и их свойства	237
8.1. Классификация фотонных кристаллов. Особенности их поведения в микрорезонаторах и пленочных волноводах	237
8.2. Основы теории фотонных кристаллов в материалах с действительной положительной диэлектрической постоянной	244
8.3. Методы получения фотонных кристаллов и способы управления фотонами	251
Задачи	255
Глава 9. Некоторые аспекты фрактального описания макро- и наносостояний конденсированных сред	258
9.1. Модели наночастиц	258
9.2. Фрактальное представление теории Дебая для макро- и наноструктур	264
9.3. Теплоемкость фрактальных макро- и микроструктур	266
9.4. Теплоемкость фрактальных наноструктур	270
9.5. Решеточная теплоемкость конденсированных сред с фрактальным фононным спектром	276
9.6. Роль ангармонизма решеточных колебаний в макро- и наноструктурах	282
Заключение	286
Литература	288

Предисловие

Интенсивное развитие современных наукоемких технологий, в частности нанотехнологий, требует усиленной подготовки студентов по математике и физике по сравнению с той, которая предусмотрена существующими образовательными стандартами, принятыми для общетехнических вузов.

В связи с этим на кафедре физики Российского химико-технологического университета им. Д. И. Менделеева в контакте с кафедрой наноматериалов и нанотехнологий был разработан усиленный курс физики объемом 500 аудиторных часов.

Работа проводилась в соответствии с решением Министерства образования и науки Российской Федерации о подготовке специалистов по направлению «наноматериалы и нанотехнологии» в ряде технических вузов, в том числе и в РХТУ им. Д. И. Менделеева.

Основу нововведений в нем составляет лабораторный практикум по физике твердого тела и теоретические курсы «Физика конденсированного состояния» и «Квантовая механика».

Эти нововведения вызваны значимостью упомянутых направлений для развития науки и техники в XXI веке, для создания новых материалов и технологий. Важно, что они находят отражение в общеобразовательных курсах и, прежде всего, в физике, составляющей основу фундаментального образования.

Настоящее учебное пособие по физике конденсированного состояния является частью нового учебного комплекса. В нем, помимо традиционно сложившихся разделов физики твердого тела, отражены некоторые развивающиеся современные направления, такие как физика фотонных кристаллов, наномасштабная физика, фрактальные представления о структуре кристаллических тел и т. д.

*Президент РХТУ им. Д. И. Менделеева
академик П. Д. Саркисов*

Введение

Современные технологии производства материалов нового поколения, обладающих заданными физико-химическими, механическими и эксплуатационными свойствами, требуют ясного представления о свойствах уже имеющихся материалов. Это прежде всего технологии получения наноматериалов, которым свойственны уникальные, присущие только им качества и отличительные признаки, проявляемые в различных, порой экстремальных условиях их эксплуатации. Будущим специалистам, которым предстоит заниматься наноматериалами и технологиями их получения, необходим базовый комплекс знаний в области классического материаловедения, связанного с общепризнанными представлениями о квантовой природе структурных элементов, составляющих любой материал.

В настоящей книге изложены современные представления о физических свойствах твердых тел, описаны структуры материалов и типов существующих в них взаимодействий. Методы исследования структуры конденсированных материалов основаны на общепризнанных моделях идеальных и реальных кристаллических систем. Это, прежде всего, основные представления кристаллографической науки о кристаллах и их физических свойствах. Кроме того, в книге даются основные понятия и методы статистической физики, описывающие физические (квантовые) состояния больших коллектиvos, состоящих из тождественных по своим физико-химическим и структурным характеристикам элементов. Существенное внимание уделено общим представлениям о типах элементарных возбуждений в конденсированных средах и условиях их возникновения.

В основных разделах книги изложены фундаментальные физические свойства кристаллических тел: тепловые, электрические,

магнитные, а также их взаимосвязи. Динамика кристаллической решетки рассмотрена в гармоническом приближении с учетом силового влияния ближайших соседей. Различия в физических характеристиках макроскопических кристаллических систем и наночастиц представлены исследованиями их тепловых свойств. Математический аппарат, использованный в книге, не требует специальных знаний в области формализма квантовой механики. Изложение материала основано на представлениях о многомерном координатно-импульсном фазовом пространстве Гильберта и известных моделях квантовой физики Дебая, Пайерлса и др.

Материал книги проиллюстрирован схемами и графиками, помогающими осмыслить суть описываемых физических процессов. Особое внимание уделено рисункам разделов кристаллографии и межатомных взаимодействий в конденсированных системах. Это же относится к графическому материалу, демонстрирующему изменения электрических и магнитных свойств кристаллических систем, в частности, при переходе проводника из нормального в сверхпроводящее состояние или при воздействии внешних электрических и магнитных полей на сверхпроводник. Часть информации о физических свойствах рассматриваемых материалов представлена в виде таблиц, где содержатся теоретические и экспериментальные данные для конкретных химических элементов и их соединений. Эти данные подтверждают правомочность схем и моделей, используемых в квантовой теории для описания наблюдаемых экспериментально реальных физических процессов в веществе. Теоретический материал каждой главы заканчивается задачами с решениями, помогающими лучше усвоить излагаемый в книге материал.

Книга состоит из девяти глав. В первой главе описаны структуры регулярных кристаллических систем с использованием понятий современной кристаллографии о периодических функциях с трансляционной симметрией. Особое место отведено свойствам обратной решетки, составляющей основу кристаллографии пространства, обратного реальному физическому. Обратное пространство непосредственно связано с определением зон Бриллюэна, необходимых при введении фундаментального понятия квантовой теории твердых тел — поверхности Ферми.

Во второй главе рассмотрены вопросы статистической физики больших коллективов тождественных микрочастиц, составляющих основу любого реального кристалла, и ее методы — классической и квантовой статистик. Представлены свойства невырожденного и вырожденного коллективов квантовых объектов и методы их статистического усреднения, необходимые для изучения структурных характеристик кристаллических систем.

В третьей главе даны базовые понятия зонной теории твердых тел, определяющей энергетические спектры электронов, находящихся в периодическом поле кристаллической решетки регулярного кристалла. Рассмотрены законы дисперсии электронного газа и заполнение энергетических зон электронами. Эта глава является ключевой для понимания всей квантовой теории твердых тел, поскольку в ней изложена классификация кристаллических систем по электрическим свойствам.

В четвертой главе рассмотрены различные типы элементарных возбуждений, допускаемых квантовой теорией в кристаллических макросистемах, и условия их возникновения. Большое внимание удалено тепловым колебаниям кристаллической решетки, или фононному газу. Кроме того, подробно рассмотрена динамика колебаний одного и двух атомов в элементарной ячейке кристаллической решетки с учетом взаимодействия с ближайшими соседями. Динамические свойства кристаллической решетки представлены энергетическим спектром нормальных колебаний кристалла.

В пятой главе изложены квантовые теории поглощения тепловой энергии и ее распространения в пределах кристаллических макросистем с помощью моделей Дебая и Пайерлса. Особое место отведено вопросу поглощения тепловой энергии наночастицами и свойствам этого процесса.

Шестая глава посвящена изучению электрических свойств кристаллических материалов, находящихся в нормальном и сверхпроводящем состояниях. Детально изложена теория сверхпроводников в представлении Бардина–Купера–Шриффера (БКШ–теория). Рассмотрены случаи воздействия на сверхпроводники внешних электрических и магнитных полей.

В седьмой главе описаны магнитные свойства кристаллов и их общепринятая классификация с позиций классической и квантовой теорий. Представлены модель прецессии электронной орбиты

во внешнем магнитном поле, приводящая к возникновению диамagnetизма, классическая и квантовая теории парамагнетизма, в том числе парамагнетизм электронного газа. Отдельно дана квантовая теория ферромагнетизма и особенности внутренней структуры ферромагнитных твердых тел*.

Восьмая глава охватывает основы одного из актуальных направлений развития физики твердого тела — фотонных кристаллов и их свойств. Данна основная классификация структур фотонных кристаллов и особенности их существования в специфических условиях физического эксперимента. Теоретические представления о фотонных кристаллах ограничены рассмотрением случая недиссипативных материалов с действительной положительной диэлектрической постоянной (теория С. Джона).

В заключительной, девятой главе изложены понятия о наномасштабной физике, фрактальной геометрии и ее приложении к теории теплоемкости Дебая для макро- иnanoструктур.

Авторы признательны профессору НИУ МФТИ Ю. В. Петрову за просмотр рукописи и ряд полезных замечаний.

* Материалы первых семи глав являются традиционными для физики конденсированного состояния и содержатся в различных по объему и глубине многочисленных учебниках и монографиях. Изложение этих разделов в данной книге ближе всего к известным руководствам Г. И. Епифанова «Физика твердого тела» и И. Киттеля «Введение в физику твердого тела».

Глава 1

Структура твердых тел. Элементы кристаллографии

1.1. Силы Ван-дер-Ваальса, их классификация

Силы Ван-дер-Ваальса характеризуют взаимодействие на расстояниях $\sim 10^{-9}$ м между центрами электронейтральных атомов и молекул. Силы Ван-дер-Ваальса носят дальнодействующий характер и определяют межатомное или межмолекулярное взаимодействие, даже если эти микрообъекты находятся в разных агрегатных состояниях. Квантовая теория ван-дер-ваальсовых сил подробно изложена в работах [1, 2], а ее практическое использование для анализа результатов эксперимента, в частности, выращивания в парогазовых средах кристаллов Si и Ge (автоэпитаксия) описано в работах [3, 4]. Силы Ван-дер-Ваальса включают в себя дисперсионное, ориентационное и индукционное взаимодействия между атомами и молекулами. Рассмотрим каждое из них в отдельности.

Дисперсионное взаимодействие обусловлено силами, возникающими при дипольном взаимодействии соседних атомов, и характерно для неполярных молекул. Силы связи между атомами, появляющиеся вследствие согласованного движения электронов в соседних атомах, называются *дисперсионными силами*. Под влиянием воздействия электрического диполя одного атома другой атом поляризуется и в нем возникает дипольный момент, способствующий дисперсионному взаимодействию (рис. 1.1).

Потенциальная энергия дисперсионного взаимодействия двух соседних атомов равна

$$U_d(r) = -\frac{3}{4} \frac{\alpha^2 I}{r^6}, \quad (1.1)$$

где α — поляризуемость атомов, I — энергия возбуждения атомов, r — расстояние между взаимодействующими атомами.

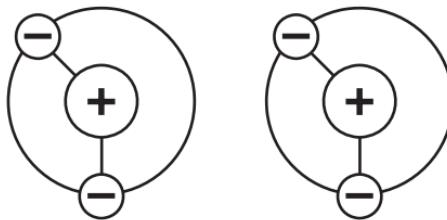


Рис. 1.1. Самосогласованное движение электронов в двух соседних атомах с образованием наведенных электрических диполей, параллельных друг другу

Ориентационное взаимодействие характерно для полярных молекул, обладающих постоянными дипольными моментами M , между которыми возникает электростатическое взаимодействие. Это взаимодействие стремится расположить диполи в определенном порядке (рис. 1.2), который нарушается тепловым движением. В области низких температур ориентация является полной, а энергия взаимодействия двух молекул определяется как

$$U_{\text{оп}} = -\frac{M^2}{2\pi\epsilon_0 r^3}, \quad (1.2)$$

где ϵ_0 — электрическая постоянная.

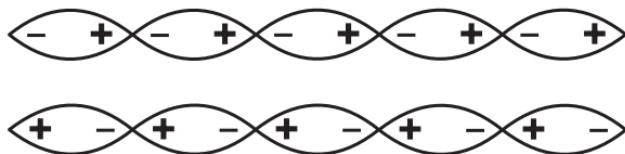


Рис. 1.2. Схема расположения диполей соседних полярных молекул при их ориентационном взаимодействии

Для высоких температур потенциальная энергия ориентационного взаимодействия двух полярных молекул равна

$$U_{\text{оп}} = -\frac{M^4}{24\pi^2\epsilon_0^2 k_B T} \frac{1}{r^6}, \quad (1.3)$$

где k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура.

Как видно из формул (1.2) и (1.30), при изменении термодинамического режима (температуры среды) ориентационное взаимодействие двух молекул резко меняется в зависимости от расстояния r между ними.

Индукционное взаимодействие возникает у полярных молекул, обладающих высокой поляризумостью α , когда может появиться дополнительный (индуцированный) электрический диполь под действием поля постоянных диполей соседних молекул — рис. 1.3. На этом рисунке пунктиром показаны индуцированные диполи. При этом энергия взаимного притяжения между жестким (постоянным) электрическим диполем одной молекулы и наведенным, индуцированным, диполем соседней молекулы не зависит от температуры и определяется соотношением [6]

$$U_{\text{ind}} = -\frac{\alpha M^2}{8\pi\epsilon_0^2} \frac{1}{r^6}. \quad (1.4)$$



Рис. 1.3. Схема взаимного расположения жесткого и наведенного электрических диполей в двух соседних высокополяризованных молекулах при их индукционном взаимодействии

В общем случае при сближении молекул могут возникать все три вида связей, и полная энергия взаимодействия, вызванного силами Ван-дер-Ваальса, равна сумме $U_{\text{в}} = U_{\text{д}} + U_{\text{ор}} + U_{\text{ind}}$. Процентные соотношения для различных веществ между этими тремя видами взаимодействий представлены в табл. 1.1.

Таблица 1.1

**Процентное соотношение между дисперсионным $U_{\text{д}}$,
ориентационным $U_{\text{ор}}$ и индукционным U_{ind}
взаимодействиями для различных веществ**

Вещество	$U_{\text{д}}$	$U_{\text{ор}}$	U_{ind}
H_2O	19	77	4
NH_3	50	45	5
HCl	81	15	4

Таблица 1.2

Энергия связи U для молекулярных кристаллов, образованных силами Ван-дер-Ваальса, кДж/моль

Вещество	U
Ne	1,9
Ar	8,4
N ₂	6,8
O ₂	8,2
CO	8,4
CH ₄	10,8

Из этой таблицы видно, что индукционное взаимодействие в процентном отношении для всех представленных веществ мало. У полярных молекул H₂O, NH₃ энергия ван-дер-ваальсовых связей состоит в основном из ориентационного взаимодействия, а у молекул HCl определяется их дисперсионными связями. В табл. 1.2 приведены значения энергии связи в расчете на 1 моль для некоторых молекулярных кристаллов, образованных силами Ван-дер-Ваальса [6]. Оказывается, что энергии связей атомов или молекул в кристаллическом состоянии, обусловленные ван-дер-ваальсовыми силами, невелики по сравнению с энергиями связей атомов, обусловленных иными взаимодействиями.

1.2. Ионная, ковалентная и металлическая связь в твердых телах

Рассмотренная ранее модель ван-дер-ваальсовых сил связи между атомами или молекулами связана с взаимной ориентацией заряженных электрических диполей. Она не обусловлена электростатическим законом взаимодействия (законом Кулона) элементарных зарядов или воздействием внешних магнитных полей, а потому не относится к типу электромагнитных сил связей, которые являются наиболее сильными из всех известных взаимодействий на атомно-молекулярном уровне. К этому типу относится **ионная связь**, имеющая место у щелочных металлов или галоидов.

После потери элементарного заряда (электрона) атом щелочного металла превращается в положительный ион, а атом галоида

после присоединения электрона становится отрицательным ионом. Ионы взаимодействуют между собой по закону Кулона, образуя ионную, или полярную, связь.

Энергию притяжения двух ионов с равными по величине, но противоположными по знаку зарядами q на расстоянии r друг от друга можно представить в виде

$$U_{\text{пп}} = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

На рис. 1.4 кривая 1 показывает зависимость энергии притяжения $U_{\text{пп}}(r)$ при уменьшении r , когда $\lim_{r \rightarrow 0} U_{\text{пп}}(r) = -\infty$. Под действием силы притяжения ионы стремятся максимально сблизиться друг с другом. Этому на малых расстояниях ($r \rightarrow 0$) препятствуют силы отталкивания, обусловленные межъядерным взаимодействием сближающихся ионов. Энергия отталкивания, показанная на рис. 1.4 кривой 2, оценивается по степенному закону

$$U_{\text{от}} = \frac{B}{r^n},$$

где B и n — некоторые постоянные и $n > 1$.

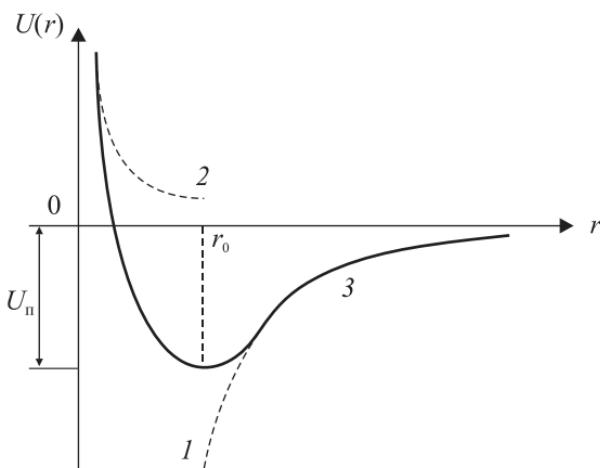


Рис. 1.4. Потенциальная энергия взаимодействия двух ионов $U(r)$ в зависимости от расстояния r между ними

$$\begin{bmatrix} & & \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ & & \end{bmatrix}$$

Байков Юрий Алексеевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики РХТУ им. Д. И. Менделеева. Автор более 100 научных трудов по квантовой механике и физике твердого тела, в том числе монографии по математическому моделированию процессов кристаллизации.

Кузнецов Вадим Михайлович – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики РХТУ им. Д. И. Менделеева, профессор НИУ МФТИ. Автор более 100 публикаций в области кинетической теории многоатомных газов, неравновесных газовых течений, фрактальных подходов к исследованию конденсированных сред и монографии по концептуальным вопросам современной физики.