

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

(для групп Е7-01,02,Т8-31,32,32а,32б,37,70а, 70б)

(Примечание. Для групп Т7-32,32а,32б курс называется
«Теория конденсированного состояния»)

Авторы: **КАГАН Ю.М. , СОБАКИН В.Н. ,
ИВЛИЕВ С.В.**

Лектор: доцент Собакин В.Н.

Кристаллическое состояние твердых тел. Фононы.

1-я лекция. Конденсированное состояние системы макроскопического числа частиц с произвольным взаимодействием. Кристаллическая и аморфная фазы. Квантовые жидкость и газ.

В конденсированном состоянии частицы расположены на расстояниях порядка $a \sim 10^{-8}$ см, т.е. $a \sim r_0$. Частицы плотно упакованы по всем трем осям; $n_1 \sim 10^{24} \frac{1}{\text{см}^3}$.

Тогда говорят, что мы имеем дело с макроскопически большим числом частиц.

Решение трехмерных задач из $E_{\min} \sim 0 + T_{\text{осм}} \sim \frac{\pi^2}{r^2 U_a}$ уравнений с начальными условиями представляется неосуществимым.

Когда 10^{24} частиц приведены в соприкосновение, каждая частица “знает” о положении всех остальных, т.е. потенциальная энергия создается всеми окружающими частицами и ей самой. Формально записать невозможно, поэтому распространить однозначный подход на задачу конденсированного состояния непонятно как.

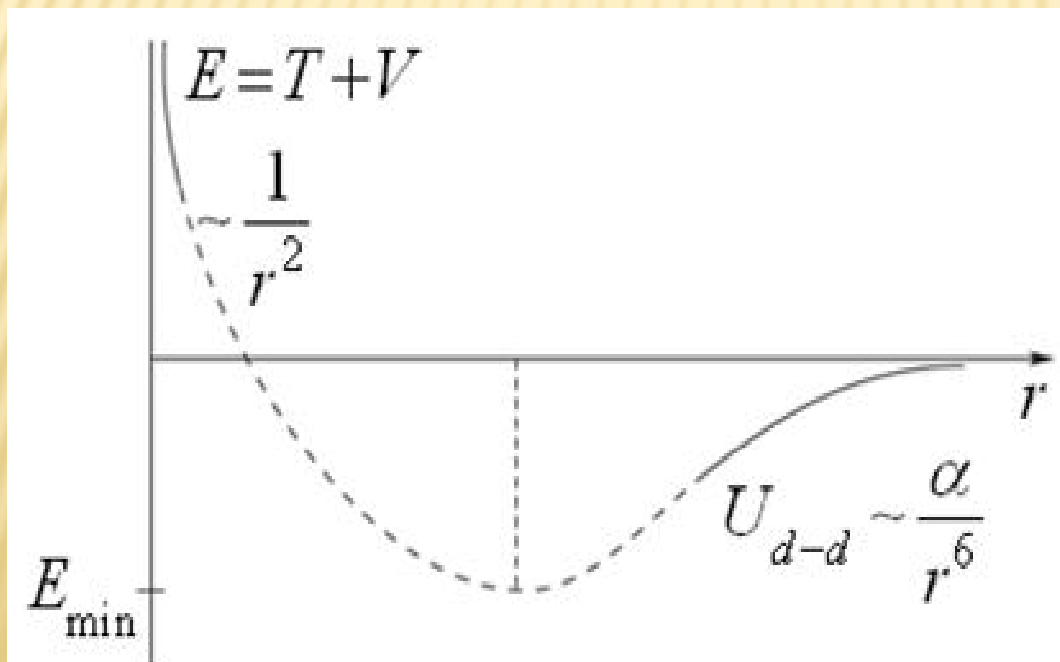
При $T=0$ у твердого тела основное состояние (твердое тело обладает минимальной энергией, она нам неизвестна; мы знаем только о существовании).

Избыточную энергию (энергию возбужденных состояний) мы можем рассчитать. Если она невелика, то у нас есть малый параметр.

Пример возбужденного состояния: попытка возбудить один атом в кристалл и реакция всех остальных атомов.

Качественно, предполагая $T=0$, оценим полную энергию системы частиц.

Сочленение графика в единое целое считается строгим в силу теоремы Ролля.



Рассмотрим эту энергию как функцию межчастичного расстояния. Здесь E - именно энергия основного состояния.

На бесконечности система частиц должна быть неподвижной ($\Rightarrow E_{кин} = T = 0$), электронейтральной (нет электростатического взаимодействия).

Так как у атомов есть центр тяжести “+” ядра и центр тяжести “-” электронного облака, т.е. мы предполагаем существование дипольного момента \Rightarrow есть диполь-дипольное взаимодействие (Ван-дер-Ваальсово притяжение: это теорема для любой системы частиц).

При $r \rightarrow 0$: при однородном сжатии по всем трем осям рано или поздно система достигает состояния, когда соприкасаются электронные оболочки разных атомов. При попытке сжатия с перекрытием электронных оболочек начинает работать принцип Паули (чужие электроны проникают на электронные оболочки, и возникает сильное отталкивание обменного характера).

Т.к. это происходит одновременно со всеми атомами, то все атомы будут ионизованы (обменное отталкивание будет открывать электроны). При ионизации последней К-оболочки получим отдельные ядра и газ электронов. Все атомы оголяются одновременно, и все электроны коллективизируются, т.е. в дальнейшем мы сжимаем плазму.

Тогда каждая частица будет находиться в объеме с характерным расстоянием, равным

межчастичному расстоянию. Принцип неопределенности дает: $p \sim \frac{\pi}{r}$, кинетическая

энергия только возрастает $T \sim \frac{\hbar^2}{r^2(M_{\text{я}}, m_e)}$, $\frac{M_{\text{я}}}{m_e} \sim 10^5$, т.к. в ядре ~ 100 нуклонов, а их

масса есть $2000 m_e$. $T_{\text{я}} \sim \frac{\pi^2}{r^2 m_e}$; $U \sim \frac{\beta}{r}$ (β разного знака в зависимости от типа частиц).

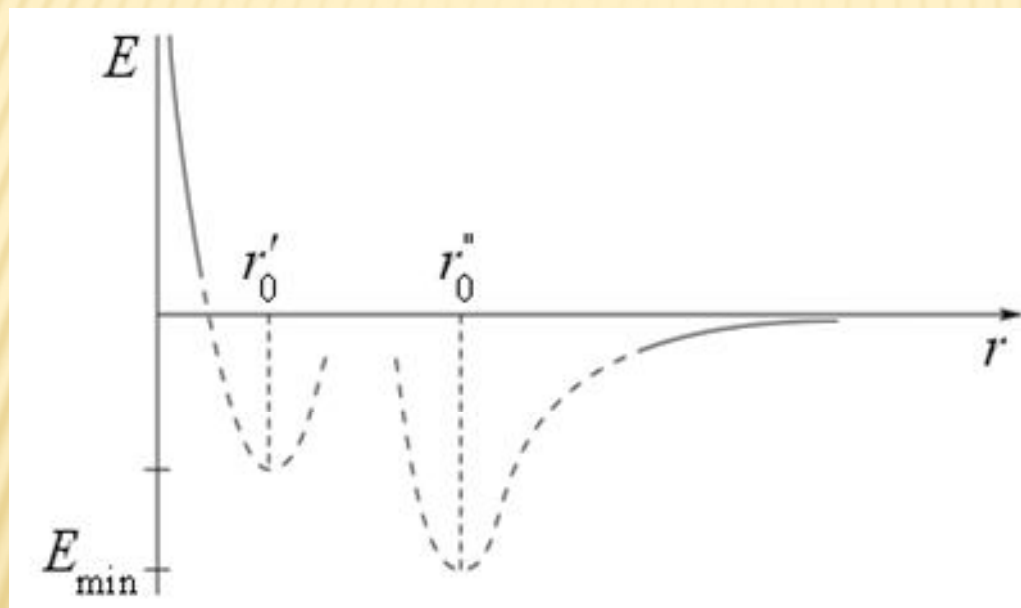
Рано или поздно кинетическая энергия $T(\sim \frac{1}{r^2})$ станет больше потенциальной $U(\sim \frac{1}{r})$, и

мы рассматриваем поведение системы как электронного газа. Следовательно, все вещества в области высоких плотностей есть металлы; плотности, при которых это реализуется для каждого конкретного вещества, разные и, возможно, в земных условиях недостижимы.

Конденсированная фаза с упорядоченным расположением частиц (в основном состоянии) при $T=0$ представляет собой кристаллическую фазу.

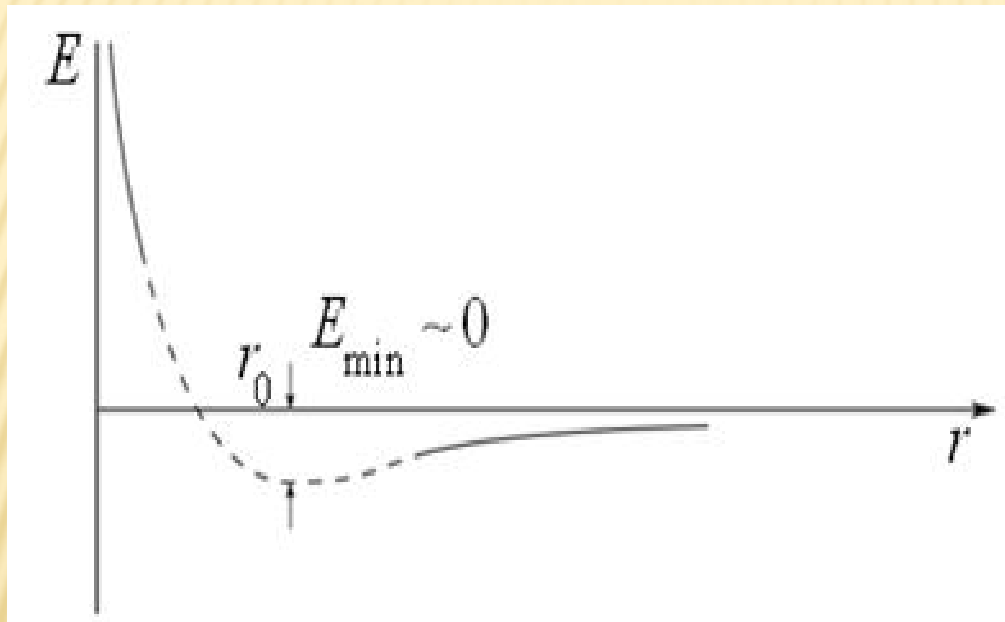
Связи атомов на границе кристалла оборваны, следовательно, кристалл обладает гигантской поверхностной энергией.

Поэтому энергетически более выгодно существование поликристаллов (при этом “торчащие” энергии монокристаллов компенсируются).



Если $E(r)$ имеет несколько минимумов, то частицы “рассядутся” по локальным минимумам (если не дать системе релаксироваться в главный минимум), тогда мы получим аморфное тело (псевдожидкость), т.к. у частиц остается вероятность подбарьерного “просачивания” и “сваливания” в глобальный минимум.(Цитата “Стекло (сущ.) стекло (глагол.)!”).

Реализация того или иного аморфного состояния требует определенных условий (чтобы “рассадить” частицы по локальным минимумам).



При “мелком” минимуме кристалл может и не возникнуть, т.к. необходимо учитывать

энергию атомов: $E_{\min} \sim 0 + T_{am} \sim \frac{\pi^2}{r^2 U_a}$, тогда можем выйти в положительную область, и

кристалльная фаза может не реализоваться.

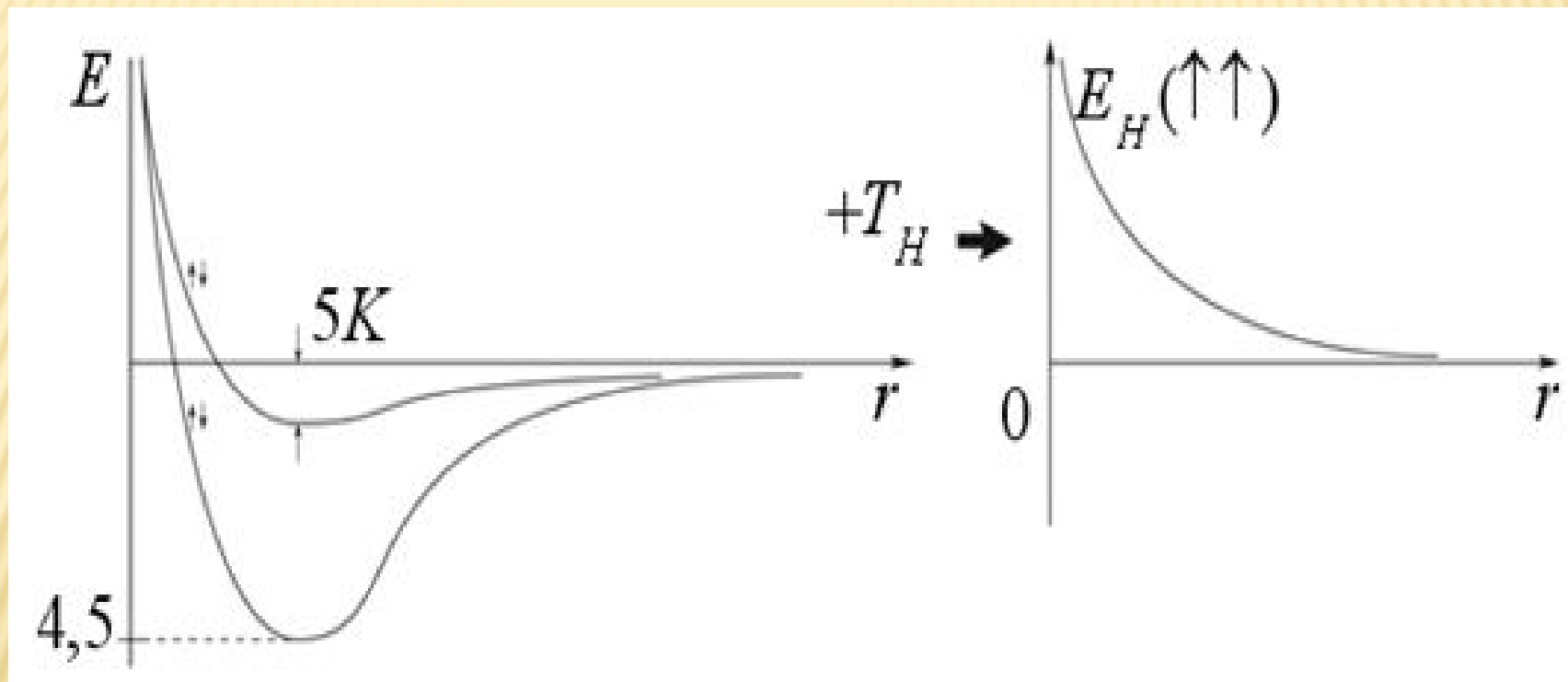
Чтобы положительная энергия была маленькой, а $E = T + U = \sum_n \frac{p_n^2}{2M_n} + U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_n, \dots)$ $T_{ат}$

-большой, необходимо, чтобы масса атома была маленькой.

Гелий (He) в окрестности абсолютного нуля в силу этих условий не образует кристалл, а образует квантовую жидкость. Правда, если немного надавить (25 атм), получится квантовый кристалл.

С водородом (H) этого не происходит, т.к. при перекрытии электронных облаков спины электронов переориентируются так, что образуются молекулы H_2 , и образуется газ, а потом кристалл из молекул водорода.

Чтобы не дать возможность образования молекулы, необходимо задержать переориентировку спинов (с помощью наложения магнитного поля).



$E_H(\uparrow\uparrow)$ - положительная \Rightarrow нет свободных состояний (газ)- это спин- поляризованный атомарный водород(квантовый газ).

И он остается в газовой фазе (должен оставаться) при $T=0$ с любыми плотностями.

Сейчас проверено до 10^{17} . Температуры достигнуты до тысячных долей К.