Б.М. ӘСКӘРОВ

БӘРК ЧИСИМЛӘР НӘЗӘРИЈЈӘСИ

I ҺИССӘ

ФОНОНЛАР

Али мәктәбләр үчүн
дәрс вәсаити

Азәрбајҹан Республикасы Тәһсил Назиринин 06 март 2001-ҹи ил тарихли 196 сајлы әмри илә тәсдиг едилмишдир

Бакы Университети нәшријјаты

БАКЫ – 2001

Китаба рә'ј верәнләр: **1. Азәрбајҹан ЕА-нын мүхбир үзвү, физика-ријазијјат елмләри доктору, проф. Ф.М.Һәшимзадә**
2. Физика-ријазијјат елмләри доктору Т.Һ.Исмајылов

Елми редакторлар: **Азәрбајҹан ЕА-нын мүхбир үзвү, ф.р.е.д., проф. Ф.М.Һәшимзадә вә ф.р.е.н. Х.А.Һәсәнов**

Бу китаб јазылмасы нәзәрдә тутулан бөјүк һәҹмли дәрс вәсаитинин ики фәсилдән ибарәт биринҹи һиссәсидир. Биринҹи фәсилдә бәрк ҹисимләрин квант нәзәријјәсиндә мәсәләнин үмуми гојулушу, кристал гәфәсин рәгсләри, фонон газынын термодинамик хассәләри шәрһ олунмушдур. Икинҹи фәсил бәрк ҹисмин истилик тутумунун квант нәзәријјәси, бәрк ҹисимләрин һал тәнлији вә фонон истиликкечириҹилијинин нәзәријјәсинә һәср едилмишдир.

Дәрс вәсаити мүәллифин узун илләр Бакы Дөвләт Университетинин физика факүлтәсиндә вә Түркијәнин Һачәттәпә Университетинин физика бөлүмүндә охудугу мүһазирәләр әсасында јазылмышдыр.

Китаб Университетләрин физика факүлтәләринин јухары курс тәләбәләри, макистрантлар, аспирантлар вә елми ишчиләр үчүн нәзәрдә тутулмушдур.

$Ә\frac{3802010000-08}{658(07)-029}-2001$

Мүндәричат

I ФӘСИЛ

КРИСТАЛ ГӘФӘСИН РӘГСЛӘРИ. ФОНОН ГАЗЫ

§ 1. Бәрк чисимләр нәзәријјәсинин үмуми нәзәри физикада јери

Истәнилән макроскопик систем (чисим) јалныз ики нөв зәррәчикдән, нүвә вә електронлардан тәшкил едилмишдир. Кристаллик бәрк чисимләр макроскопик системләрин хүсуси һалыдыр. Белә ки, бу һалда ағыр зәррәчикләр (нүвәләр) фәзада мүәјјән бир гајдада дүзүләрәк кристал гәфәс јарадырлар.

Бәрк чисимләрин бүтүн физики хассәләри (електрик, истилик, оптик, магнит вә с.) гәфәсин дүјүнләриндәки нүвәләрин вә гәфәс дахилиндә пајланмыш електронлар системинин һәрәкәтләри илә мүәјјән олунур.

Бәрк чисимләр нәзәријјәсинин әсас мәгсәди, електронларын вә гәфәси тәшкил едән нүвәләрин һәрәкәтләрини өјрәнән классик вә квант механикасы, ејни заманда статистик физика ганунларына әсасланараг, бәрк чисимләрин тәчрүбәдә өлчүлән макроскопик хассәләрини изаһ етмәк вә ја јени хассәләри әввәлчәдән мүәјјән етмәкдир. Бунун үчүн бәрк чисми әмәлә кәтирән зәррәчикләрин һәрәкәтләринин һансы тәнликләрлә тәсвир олундуғуну билмәк лазымдыр.

Мүасир нәзәри физикада дөрд фундаментал һәрәкәт тәнлији мөвчуддур.

1.Классик гејри-релјативистик механиканын тәнлији (Нјутон һәрәкәт тәнлији)

$$m_0 \cdot \frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F}. \tag{1.1}$$

Бурада m_0 - зәррәчијин күтләси, $\boldsymbol{F}$-она тә'сир едән гүввә, $\boldsymbol{r}$ - зәррәчијин радиус векторудур.

2. Релјативистик классик механиканын тәнлији (Ејнштејн тәнлији)

$$\frac{m_0}{\sqrt{1-\dfrac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}} \cdot \frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F}. \tag{1.2}$$

Бурада c - ишығын вакуумда јајылма сүр'әти, $\boldsymbol{v}$-зәррәчијин һәрәкәт сүр'әтидир.

3. Гејри-релјативистик квант механикасынын тәнлији (Шрединкер тәнлији)

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}\,\psi. \tag{1.3}$$

Бурада $\psi(\boldsymbol{r},t)$ - зәррәчији тәсвир едән далға функсијасы, $\left(\hbar = \dfrac{h}{2\pi},\right)$ h-Планк сабити, $\hat{\mathscr{H}}$ - Һамилтон операторудур.

4.Релјативистик квант механикасынын тәнлији (Дирак тәнлији)

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[c\,(\hat{\alpha}\hat{p}) + m_0 c^2\,\hat{\beta}\right]\psi. \tag{1.4}$$

Бурада $\hat{\alpha}$ вә $\hat{\beta}$ - мә'лум Дирак матрисләри, $\hat{p} = -i\hbar\nabla$- импулс операторудур. Сәрбәст зәррәчик һалында (1.4) тәнлијинин мәхсуси енержиси

$$E = \pm(m_0{}^2 c^4 + c^2 p^2)^{1/2} \qquad (1.5)$$

ифадәси илә верилир.

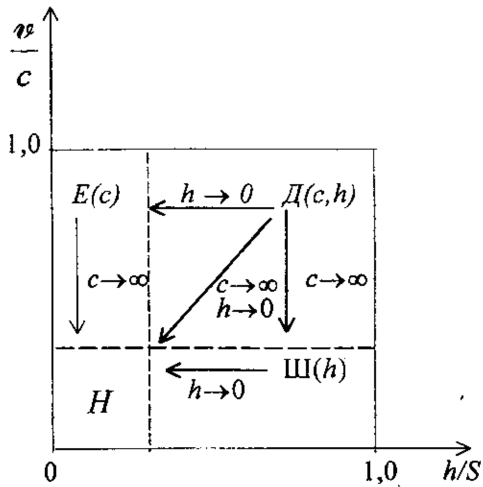
Бу тәнликләрдә ики универсал сабитин, c- ишыг сүр'әти вә h - Планк сабитинин иштирак етдији көрүнүр. Бу сабитләр јухарыдакы тәнликләрә белә дахилдир.

Нјутонун һәрәкәт тәнлијиндә һеч бир сабит јохдур. Ејнштејн тәнлијиндә јалныз ишыг сүр'әти вардыр. Шрединкер тәнлијиндә јалныз h- Планк сабити, Дирак тәнлијиндә исә һәр ики сабит (c вә h) иштирак едир.

Бу дөрд һәрәкәт тәнлијинин һәр биринин тәтбиг саһәләри вардыр. Тәтбиг саһәси һәрәкәтин характеристикасы олан сүр'әт (v) вә һәрәкәтин тә'сиринин ($S = m_0 vd$, һарадакы d- һәрәкәтин баш вердији фәзанын хәтти өлчүсүдүр) үјғун олараг ишыг сүр'әтинә вә Планк сабитинә олан нисбәтләри илә тә'јин олунур. Ишыг сүр'әти ән бөјүк сүр'әт, h исә ән кичик тә'сир олдуғундан мүмкүн олан бүтүн механики һәрәкәтләри ашағыдакы диаграмда көстәрмәк олар (шәкил 1.1).

Бу диаграмда олан квадратын ичәрисиндә мә'лум һәрәкәт тәнликләринин јерләри вә онларын бир-биринә лимит кечидләри көстәрилмишдир. Көрүндүјү кими, ән үмуми һал Дирак тәнлији илә тәсвир олунур. Нјутон тәнлији исә чох кичик областы әһатә едир.

Инди гәфәсдәки нүвә вә електронларын һәрәкәтләринин шәкил 1.1 - дә верилән диаграмын һансы областына дүшдүјүнү араштыраг. Әввәлчә електронларын һәрәкәтинә бахаг; бәрк чисимләрдә електронун сүр'әти $v \sim 10^8 \dfrac{см}{сан} << c$ олдуғундан онун һәрәкәти гејри-релјативистикдир. Електронун һәрәкәт тә'сири $S = m_0 va \approx$ $\approx 10^{-27} \cdot 10^8 \cdot 10^{-8} = 10^{-27}\, ерг \cdot сан \approx h$ олур.Бурада $m_0 \approx 10^{-27}\, г$ - електронун күтләси, $a \approx 10^{-8}\, см$ - електронун һәрәкәт областынын, јә'ни атомун өлчүсүдүр. Беләликлә, електрон системинин һәрәкәти Шрединкер тәнлијинин тәтбиг олунма областына дүшүр (шәкил 1.1), јә'ни електронларын һәрәкәтини өјрәнмәк үчүн гејри-релјативистик квант механикасынын тәнлијини (Шрединкер тәнлијини) сечмәк лазымдыр. Нјутон тәнлији бәрк чисимләрдә електронларын һәрәкәтини тәсвир етмәк үчүн јарамыр.



шәкил 1.1.

Кристал гәфәсин дүјүн нөгтәләриндә олан нүвәләр јалныз рәгси һәрәкәт едә билирләр. Бу рәгси һәрәкәтин сүр'этинин ишыг сүр'әтиндән чох кичик олдуғу мә'лумдур. Нүвәләрин һәрәкәт тә'сирини гијмәтләндирәк.

$$S_{н} \sim MVX \,. \qquad (1.6)$$

Бурада M- нүвәнин күтләси, V- сүр'әти, X- рәгси һәрәкәт заманы нүвәнин таразлыг вәзијјәтиндән јердәјишмәсидир. Нүвәнин јердәјишмәси $X = A\cos\omega t$ олсун, бурада

ω- рәгсин тезлијидир.

$$V = \dot{X} \sim \omega X \qquad (1.7)$$

олдуғундан, $X \sim \dfrac{V}{\omega}$ вә

$$S \sim \frac{MV^2}{\omega} \qquad (1.8)$$

олур. $MV^2 \approx k_0 T$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$S \sim \frac{k_0 T}{\omega} \qquad (1.9)$$

аларыг. Бурада k_0 – Болсман сабити, T - мүтләг температурдур. Нүвәнин һәрәкәтинин классик олмасы үчүн $S >> h$ олмалыдыр, јә'ни

$$\frac{k_0 T}{\omega} >> h \quad \text{вә ја} \quad k_0 T >> h\omega \qquad (1.10)$$

олмалыдыр. Температурун (1.10) шәртинин өдәдији областда, јә'ни јүксәк температурларда нүвәләрин һәрәкәти классик олур. Әксинә, $k_0 T \approx h\omega$ олдугда

$$S \approx h \qquad (1.11)$$

олур, јә'ни ашағы температурларда нүвәләрин һәрәкәти квант характерлидир вә Шрединкер тәнлији васитәсилә тәдгиг олунмалыдыр.

Демәли, мүәјјән бир рәгс тезлији ω үчүн јүксәк температурларда нүвәләрин һәрәкәтини арашдырмаг үчүн Нјутон тәнлијиндән истифадә етмәк олар. Ашағы температурларда исә нүвәләрин һәрәкәти квант тәбиәтли олдуғундан Шрединкер тәнлијиндән истифадә олунмалыдыр.

Нәтичә: Үмуми һалда кристал бәрк чисим нәзәријјәсиндә гејри-релјативистик квант механикасынын һәрәкәт тәнлији әсас көтүрүлмәлидир, јә'ни нәзәријјә квант нәзәријјәси олмалыдыр. Бәрк чисим макроскопик систем олдуғуна көрә квант механикасы вә еһтимал нәзәријјәси әсасында статистик физика, үмуми һалда квант статистикасы гурулмалыдыр.

§ 2. Бәрк чисимләр нәзәријјәсиндә мәсәләнин үмуми гојулушу

N атомдан ибарәт кристала бахаг. Бир атомдакы електронларын сајы Z оларса, кристалда N сајда нүвә вә ZN сајда електрон вардыр. Бундан әввәлки параграфда көстәрдик ки, белә бир системин нәзәријјәсини гурмаг үчүн Шрединкер тәнлијинә истинад етмәк лазымдыр. Нүвәләри вә електронлары нөгтәви јүкләр кими гәбул етсәк, стасионар һалда Шрединкер тәнлији белә јазылыр:

$$\hat{\mathscr{H}}\,\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}) = \mathscr{E}\,\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}). \qquad (2.1)$$

Бурада $\hat{\mathscr{H}}$ - системин Һамилтон оператору, $\mathscr{E}$ мәхсуси енержиси, $\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})$ - системин далға функсијасыдыр, $\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}$ - ујғун олараг електронларын вә нүвәләрин радиус векторларыдыр. Һамилтон оператору

$$\hat{\mathscr{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_{i=1}^{ZN}\nabla_{r_i}^2 - \frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N}\nabla_{R_k}^2 + V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}) \qquad (2.2)$$

шәклиндәдир. Бурада m_0 -електронун күтләси, M-нүвәнин күтләси, ∇^2-ујғун Лаплас оператору вә

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\sum_{i<\ell}\frac{e^2}{r_{i\ell}}+\sum_{n<k}\frac{Z_k Z_n e^2}{R_{kn}}-\sum_{i,k}\frac{Z_k e^2}{r'_{ik}} \qquad (2.3)$$

електрон вә нүвәләрин Кулон гаршылыглы тә'сир енержисидир. Бу ифадәдә $r_{i\ell}$ -нөмрәләри i вә ℓ олан електронлар арасындакы мәсафә, R_{kn}-нүвәләр арасындакы мәсәфә, r'_{ik} нөмрәси i олан електрон илә нөмрәси k олан нүвә арасындакы мәсафәдир.

(2.1) тәнлијинин һәлли олан далға функсијасы $\Psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,...,\boldsymbol{r}_{ZN};\, \boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2,...,\boldsymbol{R}_N)$ әслиндә $3(ZN+N)$ сајда дәјишәнләрдән асылыдыр. Макроскопик кристалда атомларын сајы $N\approx 10^{23}\,см^{-3}$ олдуғуну хатырласаг, (2.1) тәнлијинин дәгиг һәллинин практики олараг мүмкүн олмадығына әмин оларыг.

Мәсәләни тәгриби дә олса һәлл етмәк үчүн бә'зи јахынлашмалар етмәк лазымдыр. Биринчи јахынлашма *адиабатик јахынлашмадыр*. Бу јахынлашмада електронун күтләсинин нүвәләрин күтләсиндән чох кичик олдуғуну нәзәрә алсаг $(m_0<<M)$, (2.2) ифадәси илә верилән Һамилтон операторунда нүвәләрин кинетик енержисинә ујғун кәлән $-\dfrac{\hbar^2}{2M}\sum\limits_{k=1}^{N}\nabla^2_{R_k}$ һәдди ата биләрик. Јә'ни нүвәләр гәфәсдә һәрәкәтсиз гәбул едилир вә електрон системи сүкунәтдә олан нүвәләрин саһәсиндә һәрәкәт едир. Бу һәрәкәт

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_{i=1}^{ZN}\nabla^2_{r_i}+V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})\right]\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\varepsilon(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}) \qquad (2.4)$$

тәнлији илә верилир. Бурада $\boldsymbol{R}$-ләр артыг дәјишән олмајыб, сүкунәтдә олан нүвәләрин верилмиш координатларына ујғун кәлир, јә'ни параметрләрдир. $\varepsilon(\boldsymbol{R})$-кәмијјәти радиус векторлары $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, ..., \boldsymbol{R}_N)$ олан вә гаршылыглы тә'сирдә олан нүвәләрин Кулон саһәсиндә һәрәкәт едән електрон системинин енержиси, $\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R})$-електрон системинин далға функсијасыдыр.

Нүвәләр системинин һәрәкәт тәнлијини јазмаг үчүн кристалын далға функсијасыны, јә'ни (2.1) тәнлијини һәллини

$$\Psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}) = \phi(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}) \qquad (2.5)$$

шәклиндә ахтараг. Бу функсијаны (2.1)-дә јеринә јазыб вә (2.4) тәнлијини нәзәрә алсаг,

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N}\left[\psi\nabla^2_{\boldsymbol{R}_k}\phi + 2(\nabla_{\boldsymbol{R}_k}\psi\nabla_{\boldsymbol{R}_k}\phi) + \phi\nabla^2_{\boldsymbol{R}_k}\psi\right] +$$
$$+\varepsilon(\boldsymbol{R})\psi\phi = \mathscr{E}\psi\phi \qquad (2.6)$$

аларыг.

Електронун далға функсијасынын нормаллашдырма шәртинә көрә

$$\int\psi^2 d\boldsymbol{r} = 1. \qquad (2.7)$$

Бурадан чыхыр ки,

$$\nabla_{\boldsymbol{R}_k}\int\psi^2 d\boldsymbol{r} = 2\int\psi\nabla_{\boldsymbol{R}_k}\psi d\boldsymbol{r} = 0. \qquad (2.8)$$

(2.6) тәнлијини ψ функсијасына вуруб $d\boldsymbol{r}$-ә көрә интегралласаг,

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N}\nabla^2_{\boldsymbol{R}_k}\phi + \left[\varepsilon(\boldsymbol{R}) - \frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N}\int\psi\nabla^2_{\boldsymbol{R}_k}\psi\, d\boldsymbol{r}\right]\phi = \mathscr{E}\phi \qquad (2.9)$$

аларыг. Бурада (2.7) вә (2.8) шәртләри нәзәрә алынмышдыр.

Електронун енержиси $\varepsilon(R) \approx \dfrac{1}{m_0}$, $M >> m_0$ вә ψ функсијасынын $\boldsymbol{R}$-дән зәиф асылы олдуғуну нәзәрә алсаг, (2.9) тәнлијинин сол тәрәфиндә орта мө'тәризә ичиндәки икинчи һәдди атмаг олар. Беләликлә, нүвәләр системинин далға тәнлији

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N} \nabla^2_{\boldsymbol{R}_k} + \varepsilon(\boldsymbol{R})\right]\phi(\boldsymbol{R}) = E\phi(\boldsymbol{R}) \qquad (2.10)$$

шәклинә дүшүр.

Беләликлә, адиабатик јахынлашмада електрон-нүвә һәрәкәтинин дәгиг квантмеханики мәсәләси ики мүстәгил мәсәләјә ајрылыр:

а) һәрәкәтсиз нүвәләрин әтрафында јаратдығы Кулон саһәсиндә електронларын һәрәкәти ((2.4) тәнлији).

б) нүвәләрин $\varepsilon(R)$ потенсиал саһәдә һәрәкәти ((2.10) тәнлији), һарадакы $\varepsilon(R)$ кәмијјәти вәзијјәтләри фиксә олунмуш нүвәләрин саһәсиндә һәрәкәт едән електрон системинин мәхсуси енержиси вә тәрпәнмәз нүвәләрин кулон гаршылыглы тә'сир енержисидир.

Көрүндүјү кими, нүвәләрин һәрәкәтини арашдырмаздан, јә'ни (2.10) тәнлијини һәлл етмәкдән әввәл електронларын (2.4) һәрәкәт тәнлијини һәлл едиб $\varepsilon(R)$ потенсиалыны тапмаг лазымдыр.

§ 3. Квазизәррәчикләр

Јухарыда көрдүк ки, адиабатик јахынлашманын көмәји илә нүвә-електрон системи үчүн проблем ики јерә ајрылыр. Јә'ни (2.1) тәнлијинин әвәзинә (2.4) вә (2.10) тәнликләрини һәлл етмәк лазымдыр. Апарылан бу ишләр проблеми садәләшдирмир. Проблем јенә дә чохзәррәчикли проблем олараг галыр. Әслиндә (2.4) вә (2.10) тәнликләри квант механикасынын јарандығы илк илләрдә јазылмышдыр. Анҹаг онун аналитик һәлли мүмкүн олмамышдыр.

Бу чәтинлији арадан галдырмаг вә бәрк ҹисимләр нәзәријјәсини гурмаг үчүн нәзәријјәјә *квазизәррәҹикләр* анлајышы дахил едилмишдир. Бу анлајышын мејдана кәлмәси квант механикасындакы дуализм принсипинә әсасланыр. Зәррәҹик-далға икилији (дуализм) принсипинә көрә, һәр бир микроскопик варлыг һәм зәррәҹик, һәм дә далға хүсусијјәтинә маликдир. Мәсәлән, електрон өзүнү бә'зән зәррәҹик кими, бә'зән дә далға кими апарыр. Зәррәҹијин характеристикалары енержи (ε) вә импулсдур ($\boldsymbol{p}$); далғанын характеристикалары исә тезлик (ω) вә далға векторудур ($\boldsymbol{k}$)-дыр. Бу кәмијјәтләр Ејнштејн вә Де-Бројл ифадәләри илә әлагәләнирләр:

$$\begin{aligned} \varepsilon &\Longleftrightarrow \hbar\omega, \\ \boldsymbol{p} &\Longleftrightarrow \hbar\boldsymbol{k}. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Көрүндүјү кими, зәррәҹик вә далға характеристикалары бир-биринә Планк сабити h илә бағлыдыр. Јухарыдакы (3.1) ифадәләрини һәм солдан саға, һәм дә сағдан сола охумаг олар.

Солдан сага - Енержиси ε, импулсу $\boldsymbol{p}$ олан зәррәҹијә тезлији ω вә далға вектору $\boldsymbol{k}$ олан бир далға ујғун кәлир.

Сагдан сола - Тезлији ω вә далға вектору $\boldsymbol{k}$ олан далғаја енержиси ε вә импулсу $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ олан зәррәҹик гаршы гојулур.

Квазизәррәҹик анлајышы сағдан сола охунуша әсасланыр. Белә ки, кристаллик бәрк ҹисимдә бир далға һәрәкәти варса, бу һәрәкәт бир квазизәррәҹиклә тәсвир едилә биләр вә бәрк чисмин бу һәрәкәтлә мүәјјән олунан бүтүн хүсусијјәтләрини арашдырмаг үчүн статистик физиканын ганунларыны бу квазизәррәчикләрдән ибарәт идеал газа тәтбиг етмәк кифајәтдир. Бу јолла бәрк чисимләрин квант нәзәријјәси чох вахт идеал газ нәзәријјәси дәрәчәсинә гәдәр садәләшир. Бурада бә'зи квазизәррәчикләрә тә'риф верәк.

Фонон - кристал гәфәсдә јајылан истилик вә ја еластик (сәс) далғалара ујғун квазизәррәчикләрдир. Башга сөзлә, фонон бәрк чисимләрдә истилик вә ја механики рәгсләрин јајылмасындан әмәлә кәлән далға саһәсинин квантыдыр. Фонон кристал гәфәсин елементар һәјачанланмасы кими дә баша дүшүлә биләр. Акустик вә оптик фононлар олур. Фононлар Бозе-Ејнштејн статистикасына табедир вә бозондурлар.

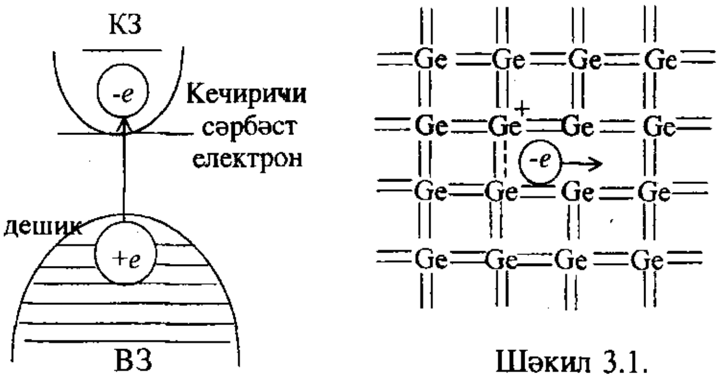
Магнон - магнит дүзүлүшү олан гәфәсләрдә (ферромагнетик вә ја антиферромагнетик) јајылан спин далғаларына гаршы гојулан квазизәррәчикләрдир. Башга сөзлә, магнон мә'лум бир дүзүлүшдә истигамәтләнмиш спин системинин елементар һәјачанланмасыдыр. Магнонлар да бозондур.

Плазмон- плазмада електрик локал јүк сыхлығынын далға шәклиндә јајылмасы нәтичәсиндә јаранан плазма далғаларына ујғун квазизәррәчикләрдир.

Кечиричилик електронлары вә дешикләр- јарымкечиричи кристалларда електрон системинин елементар ојанмаларыдыр. Бу кристалларда ашағы температурларда електронлар валент зонасына гәдәр олан бүтүн енержи зоналарыны долдурмушлар вә валент зонасындан јухарыдакы зоналар бошдур. Фәрз едәк ки, истилик вә ја фотонларын тә'сири илә бир електрон валент зонасындан кечиричи зонаја кечир. Бу һәјачанланма нәтичәсиндә кечиричи зонада бир сәрбәст електрон, валент зонасында исә бир сәрбәст дешик (*hole*=бош квант һалы) јараныр.

Кечиричилик електронлары вә сәрбәст дешикләр мүстәви далға функсијасы илә тәсвир олунурлар. Електрон (-e) вә дешик (+e) бу далғалара ујғун мүәјјән күтләјә малик квазизәррәчикләрдир.

Дөрдвалентли Ge кристалында електрон вә дешикләрин јаранмасы шәкил 3.1- дә схематик олараг көстәрилмишдир. Јарымкечиричиләрдә кечиричилији бу квазизәррәчикләр тә'мин едир. Һәјачанланма нәтичәсиндә валент елетронларындан бири ковалент рабитәдән гопур вә кристалда "сәрбәст" олараг һәрәкәт едир. Електрон сајы бир ваһид азалан рабитәнин өзү мүсбәт јүк әлдә едир вә кристал дахилиндә сәрбәст олур. Електрон вә дешикләр фермиондур.

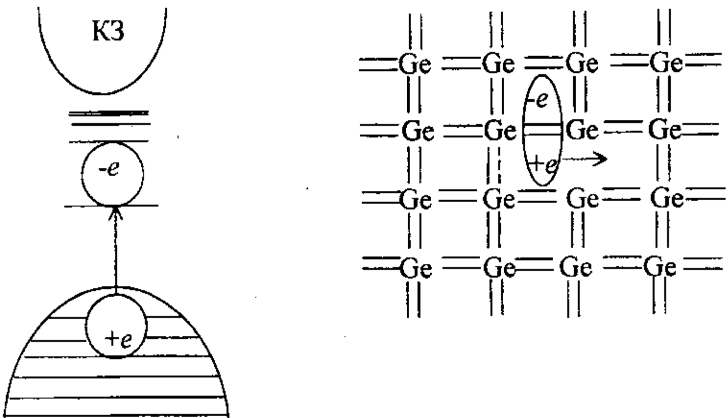


Шәкил 3.1.

Бу садә квазизәррәчикләрдән башга, онлардан тәшкил олунмуш комплекс квазизәррәчикләр вардыр. Бунлардан бә'зиләри ашағыдакы кимидир.

Екситон- јарымкечиричи вә кечиричи кристалларда електрон системинин елементар һәјачанланмасыдыр. Бу тип һәјачанланма, електрон-дешик чүтү јарадылмасындан бир гәдәр фәрглидир: екситон һалында валент зонасындан чыхан електрон дешик илә әлагәни итирмир, електрон вә дешик бир квазиатом јарадыр. Һәр икиси ејни импулс p

илә һәрәкәт едирләр (шәкил 3.2), лакин бу квазиатомун өлчүләри һидрокен атомунун өлчүләриндән чох-чох бөјүк олур. Бу квазиатом позитрониума охшајыр вә онун енержи спектри һидрокен атомунун спектрини хатырладыр. Екситон нејтрал квазизәррәчикдир, башга сөзлә, кечиричиликдә иштирак едә билмәз, анчаг онлар кристалда истилик енержисини дашыјырлар. Екситонлар да бозондур. Температурун артмасы нәтичәсиндә екситонлар (квазиатом) електрон вә дешик чүтләринә парчалана биләр.

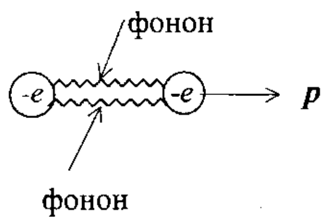


Шәкил 3.2.

Полјарон – ион кристалларда мејдана кәлир. Сәрбәст електрон ион кристалында өз әтрафыны гүтбләшдирәрәк полјаризасија чухуру јарадыр вә өзү дә бу чухура дүшүр.

Полјарону фонон булуду илә әһатә олунмуш (фонон күркү кејмиш) сәрбәст електрон кими дә тәсәввүр етмәк мүмкүндүр. Електрон ион кристалда һәрәкәт етдикчә полјаризасија чухуру (фонон күркү) да онунла бирликдә һәрәкәт етдијиндән полјаронун јүрүклүјү кичик олур. Полјаронлар фермиондурлар.

Купер чүтләри – ифрат кечиричиләрдә јүк дашыјычысы олан квазизәррәчикдир. Нәзәријјәјә көрә ифраткечиричи металларда нормал металлардан фәргли олараг електрик ахыныны сәрбәст електронлар јеринә онлардан әмәлә кәлмиш електрон чүтләри дашыјыр. Електронлары бир-биринә бағлајыб Купер чүтү јарадан електрон-фонон гаршылыглы тә'сиридир. Електронлардан бири фонон шүаландырыр, икинчи електрон исә бу фонону удур; икинчи електрон фонон бурахыр, биринчи електрон удур (шәкил 3.3).



Шәкил 3.3

Беләликлә, бир електрон чүтү јарадылыр вә бу чүтү әмәлә кәтирән һәр ики електрон ејни импулса малик бир зәррәчик кими һәрәкәт едир. Електрон фермион олдуғу һалда Купер чүтү бозондур. Бозон системиндә исә ифратахычылыг, јә'ни ифраткечиричилик мүмкүн олур. Температур артдыгча Купер чүтү ики сәрбәст електрона парчаланыр вә ифраткечиричи метал нормал метала чеврилир.

Бәрк чисимләрдә јухарыда садалананлардан әлавә дә квазизәррәчик ола биләр. Кристалда мүмкүн олан һәр бир һәрәкәтә бир квазизәррәчик гаршы гојулур. Бәрк чисимләр јалныз ики нөв зәррәчикдән (нүвә вә електрон) јарандығына бахмајараг, квазизәррәчикләрин сајы чохдур. Белә ки, һәр бир квазизәррәчик кристалда бир һәрәкәтин дашыјычысыдыр. Квазизәррәчикләр һәгиги зәррәчик дејил, бир зәррәчијин һәрәкәтинә охшар шәкилдә давранышыдыр. Квазизәррәчијин һәгиги зәррәчикдән әсас фәрги ашағыдакылардыр:

(i) квазизәррәчикләр кристалы тәрк едә билмәз вә (ii) импулслары бир гијмәтли ола билмәзләр, јә'ни квазизәррәчикләрин импулсу тәрс гәфәс вектору дәгиглији илә тә'јин олунур (бах. § 7).

Кечиричи електронларын нијә һәгиги зәррәчик олмајыб, квазизәррәчик олдуғу суал олуна биләр. Доғрудан да кристалдакы кечиричи електронлар сәрбәст вә ја изолә олунмуш атомда олан електронлардан чох фәрглидир.

§ 4. Дүз вә тәрс гәфәсләр

Кристал гәфәсин рәгсләри вә фонон газынын термодинамикасына кечмәздән әввәл кристал гәфәсләрин нөвләри вә тәрс гәфәс анлајышы илә таныш олаг.

Кристал вә ја дүз гәфәс. Браве гәфәсләри. Бәрк чисимләри тәшкил едән нүвәләр фәзада мүәјјән бир низамла дүзүләрәк кристал гәфәс тәшкил едирләр. Бу гәфәсләрин әсасыны паралелепипед шәклиндә һәндәси фигур тәшкил едир. Паралелепипедин бир тәпәсиндә кәсишән үч тәрәфин узунлугларыны a,b,c илә ишарә едәк. a,b,c тәрәфләри арасындакы бучаглар $\widehat{ac}=\alpha$, $\widehat{bc}=\beta$ вә $\widehat{ab}=\gamma$ олсун (шәкил 4.1).

a,b,c тәрәфләрин узунлугларынын бир-биринә нисбәтләри вә α, β, γ бучагларынын гијмәтләриндән асылы олараг једди мүхтәлиф кристаллик систем мөвҹуддур.

1. Кубик систем. Бу ән садә системдир: $a=b=c$; $\alpha=\beta=\gamma=90^0$. Нүвәләрин јерләшмәсинә көрә үч нөв кубик гәфәс вардыр.

Примитив кубик гәфәс (P). Бу гәфәсдә нүвәләр јалныз кубун тәпәләриндә јерләшир вә бир куба бир атом дүшүр (шәкил 4.2).

Һәчмәмәркәзләшмиш кубик гәфәс (I). Бу гәфәсдә тәпәләрдән башга кубун мәркәзиндә дә бир нүвә вардыр вә бир куба ики атом дүшүр (шәкил 4.2).

Үзәмәркәзләшмиш кубик гәфәс (F) тәпәләрдән башга кубун алты сәтһинин һәр биринин мәркәзиндә бир нүвә вардыр вә бир куба дөрд атом дүшүр (шәкил 4.2).

2. *Тетрагонал систем.* $a=b\neq c$; $\alpha=\beta=\gamma=90^0$. Бу системин ики модификасијасы вардыр. Бунлар примитив (P) вә һәчмәмәркәзләшмиш (I) тетрагонал гәфәсләрдир (шәкил 4.3).

3. *Орторомбик систем.* $a\neq b\neq c$; $\alpha=\beta=\gamma=90^0$. Бу системин дөрд модификасијасы мөвчуддур. Бунлар примитив (P), базајамәркәзләшмиш (C), һәчмәмәркәзләшмиш (I) вә үзәмәркәзләшмиш (F) орторомбик гәфәсләрдир (шәкил 4.4).

4. *Моноклиник систем.* $a\neq b\neq c$; $\alpha=\gamma=90^0$; $\beta\neq 90^0$. Бу системин ики модификасијасы мөвчуддур. Бунлар примитив (P) вә базајамәркәзләшмиш (C) гәфәсләрдир (шәкил 4.5).

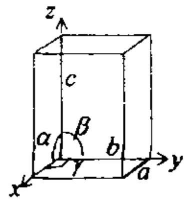
5. *Тригонал систем.* $a=b=c$; $\alpha=\beta=\gamma<120^0$; $\neq 90^0$. Бу системин јеканә бир ромбоһедрал примитив гәфәси вардыр (шәкил 4.6).

6. *Һексагонал систем.* $a=b\neq c$; $\alpha=\beta=90^0$; $\gamma=120^0$. Бу системин примитив өзәји алтыүзлү призма шәклиндә кристал гәфәсдир (шәкил 4.7).

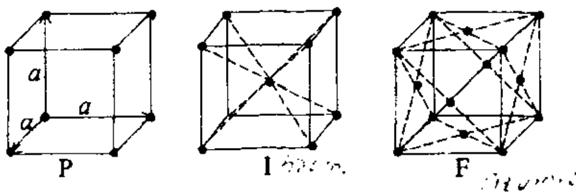
7. *Триклиник систем.* Бу ән үмуми примитив кристал гәфәсдир $a\neq b\neq c$; $\alpha\neq\beta\neq\gamma$ (шәкил 4.8).

Јухарыда садаланан једди кристал системинә дахил олан он дөрд кристал гәфәс *Браве гәфәсләри* адланыр.

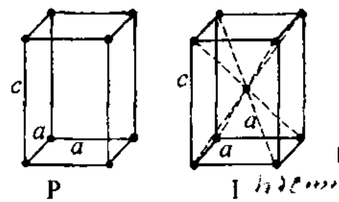
Кристал гәфәсдә бир сәтһ үзәриндә олмајан вә ејни гәфәс дүјүнүндә кәсишән $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ векторларыны elә



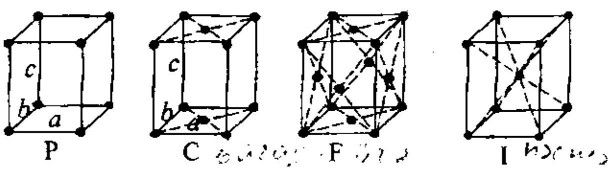
шəкил 4.1



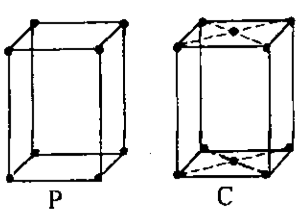
шəкил 4.2



шəкил 4.3

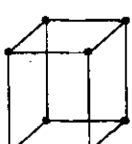


шəкил 4.4

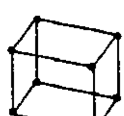


шəкил 4.5

шəкил 4.6

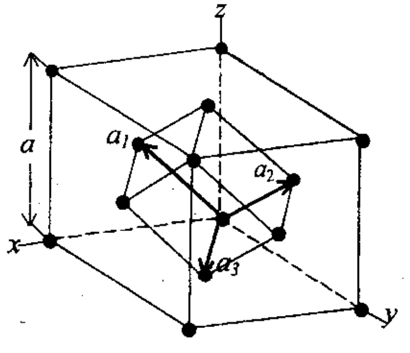


шəкил 4.7



шəкил 4.8

сечәк ки, бу векторлар үзәриндә гурулмуш паралелепипедә ән аз сајда атом дүшсүн. Бу шәкилдә гурулмуш паралелепипед кристал гәфәсин елементар өзәји, $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ векторлары исә *базис векторлары* адланыр. Базис өзәјә јалныз бир атом дүшәрсә, буна садә өзәк вә бу чүр өзәкләрдән тәшкил олунмуш кристаллик гәфәсә исә садә гәфәс дејилир. Диггәт етсәк, көрәрик ки, 14 Браве гәфәсиндән јалныз једдиси садә өзәкдир. Анчаг дикәр једди Браве гәфәси үчүн дә садә өзәкләр гурмаг мүмкүндүр. Мәсәлән, кубик системләрдә Р-типли өзәкләрдән тәшкил олунмуш кристалын базис өзәји садә кубдур (шәкил 4.2). F вә I-типли озәкләрдән тәшкил олунмуш кристал гәфәсләр үчүн дә белә базис өзәк сечилә биләр ки, бу өзәк садә олсун, јә'ни она јалныз бир атом дүшсүн. Мисал олараг, F - типли кубик гәфәсләр үчүн базис өзәк шәкил 4.9-да көстәрилмишдир. Үзәмәркәзләшмиш кубун бир тәпәсини башланғыч олараг гәбул етсәк, базис векторлары олараг бу тәпәдән башланан вә үзләрин мәркәзләриндәки атомлара гәдәр олан $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ векторлары сечилир. Бу вәзијјәтдә базис векторлары арасында галан бучаглар 60^0 олур. Онда F- типли кубик гәфәсин базис векторлары шәкил 4.9-дан көрүндүјү кими



шәкил 4.9

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{y}_0),\ \ \boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{z}_0),\ \ \boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{z}_0 + \boldsymbol{x}_0) \qquad (4.1)$$

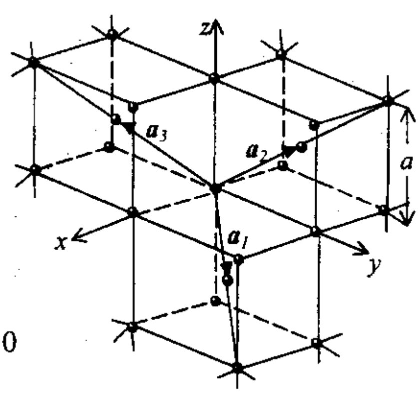
олар, бурада $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{z}_0$ - координат охлары бојунча ваһид векторлардыр. Асанлыгла костәрмәк олар ки, бу гәфәс үчүн базис өзәјинин һәчми

$$\Omega = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3) = \frac{a^3}{4}. \qquad (4.2)$$

Һәчмәмәркәзләшмиш (I-тип) гәфәсин садә базис өзәји шәкил 4.10 -да көстәрилмишдир. Бу һалда $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ базис векторлары олараг кубун бир тәпәсиндән гоншу кубларын мәркәзиндәки атомлара гәдәр олан векторлар көтүрүлүр. Һәмин векторлар арасындакы бучаг $109^0 28'$ -дир. Һәчмәмәркәзләшмиш кубик гәфәсин базис векторлары ашағыдакы кими ифадә едилир

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{y}_0 - \boldsymbol{z}_0), \quad \boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{z}_0 - \boldsymbol{x}_0),$$

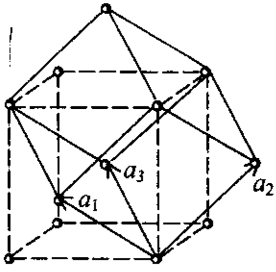
$$\boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{z}_0 + \boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{y}_0) \qquad (4.3)$$



шәкил 4.10

Бу базис векторлары үзәриндә гурулмуш садә базис өзәји шәкил 4.11-дә көстәрилмишдир. Бу өзәјин һәчми

$$\Omega = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3) = \frac{a^3}{2} . \tag{4.4}$$



шәкил 4.11

(4.2) вә (4.4) ифадәләрини аларкән ортогонал ваһид векторларын вурулмасы гајдасындан истифадә едилмишдир.

Көрүндүјү кими, F вә I-типли кубик гәфәсләрдә садә базис өзәкләри куб шәклиндә дејилдир.

Кубик гәфәсләрин бә'зи характеристикалары чәдвәл 4.1-дә верилмишдир.

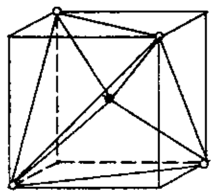
Ајдындыр ки, һәјатда ән чох истифадә олунан маддәләр Браве гәфәсләриндә дејил, даһа мүрәккәб шәкилдә кристаллашырлар. Буна әјани мисал олараг Ge, Si, InSb вә башга $A^{III}B^{V}$ бирләшмәләридир. Бу маддәләр алмаз типли гәфәсдә кристаллашырлар. Алмаз типли гәфәсләрдә һәр бир атом бир дүзкүн тетраедрин мәркәзиндә јерләшир вә тетраедрин тәпәләриндә јерләшмиш дөрд атомла (Ge вә Si үчүн) әһатәләнмишдир. InSb кристалында һәр бир In атому дөрд Sb атому илә вә әксинә һәр бир Sb атому дөрд In атому илә әһатәләнмишдир (шәкил 4.12). Мәркәздәки атому тетраедрин тәпәләриндә јерләшмиш атомларла бирләшдирән хәтләр арасындакы бучаг $109^0 28'$ -дир.

Чәдвәл 4.1.

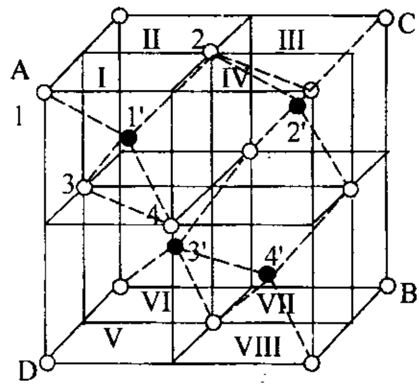
	P-типли кубик гәфәс	I-типли кубик гәфәс	F-типли кубик гәфәс
Кубик өзәјин һәчми	a^3	a^3	a^3
Кубик өзәкдә олан атомларын сајы	1	2	4
Садә базис өзәјин һәчми	a^3	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
Гәфәсдә ваһид һәчмә дүшән атомларын сајы	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
Биринчи (ән јахын) гоншуларын сајы	6	8	12
Биринчи јахын гоншулара гәдәр олан мәсафә	a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{a}{\sqrt{2}}$
Икинчи јахын гоншуларын сајы	12	6	6
Икинчи јахын гоншулара гәдәр олан мәсафә	$\sqrt{2}a$	a	a

Алмаз гәфәсини тәсвир етмәк үчүн бир-бири илә тамам ич-ичә кечмиш ики үзәмәркәзләшмиш куб тәсәввүр едәк (ики гат F-типли куб). Инди бу кублардан бирини дикәринин дахилиндән фәза диагоналы бојунча диагоналын узунлуғунун 1/4-и гәдәр сүрүшдүрәк. Бу һалда мејдана кәлән гәфәс алмаз гәфәси олачаг (шәкил 4.13).

Бу әмәлијјаты тәрсинә јеринә јетирсәк, јә'ни шәкил 4.13 -дә көстәрилән кубу AB диагоналы бојунча онун 1/4 гәдәр сыхышдырсаг $1 \to 1'$, $2 \to 2'$, $3 \to 3'$, $4 \to 4'$ кечидләри олур вә F-типли куб әлдә едилир.



шәкил 4.12



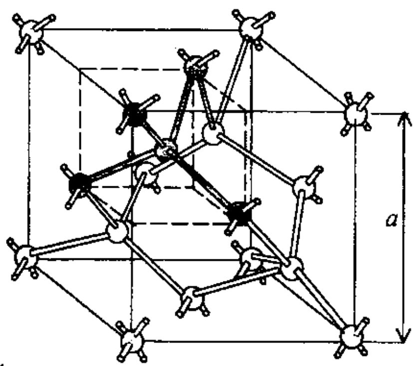
шәкил 4.13

Шәкил 4.13-дә көстәрилән үзәмәркәзләшмиш куб 18 атомдан ибарәтдир вә онун дахилинә 8 атом дүшүр. Бу үзәмәркәзләшмиш кубу 8 куба (I-VIII) бөлмәк мүмкүндүр, белә ки, бунларын дөрдүнүн мәркәзиндә бир атом јерләшмиш олсун (шәкил 4.13-дә гара атомлар). Алмаз гәфәси Браве гәфәси дејилдир вә бу гәфәсдә садә базис өзәкләри сечмәк мүмкүн дејилдир. Алмаз гурулушда бир базис өзәјә ән азы ики атом дүшүр. Шәкил 4.13-да InSb типли бирләшмәләрин гурулушу көстәрилмишдир. Бурада o - In атомларыны, • - Sb атомларыны көстәрир. Ge вә Si кристаллары үчүн алмаз гәфәсдә бүтүн атомлар ејнидир (шәкил 4.14). Бу вәзијјәтдә һәр бир атом дөрд дикәр атомла әһатә олунмушдур вә садә базис өзәкдә ән азы ики атом олур.

Көрүндүјү кими, гәфәсин әсасыны $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ базис векторлары үзәриндә гурулмуш паралелепипед, јә'ни елементар (базис) өзәк тәшкил едир. Бу өзәји $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ векторлары бојунча көчүрәрәк, макроскопик гәфәс әлдә едилир. Бу кристал гәфәсдәки һәр һансы бир атомун вәзијәти транслјасија вектору илә

$$a_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \qquad (4.5)$$

тә'јин едилир. Бурада n_1, n_2, n_3 - там әдәдләрдир: $n_i = 0, \pm 1, \pm 2...$



шәкил 4.14

Базис векторлары a_1, a_2, a_3 үзәриндә гурулмуш бу гәфәсә *кристаллик гәфәс* вә ја *дүз гәфәс* дејилир.

• **Тәрс гәфәс**. Бәрк чисимләр нәзәријјәсиндә тәрс гәфәс анлајышы әсас јерләрдән бирини тутур. Бу анлајышы нәзәријјәјә дахил етмәк үчүн кристаллик гәфәсләрдә трансљасија симметријасындан истифадә олунур. Бу симметријаја көрә гәфәсдә r вә $(r + a_n)$ нөгтәләриндә гәфәс потенсиалы V ејнидир, јә'ни бу нөгтәләр еквивалентдирләр:

$$V(r) = V(r + a_n). \qquad (4.6)$$

Бурада a_n - дүз гәфәсин ихтијари векторудур. (4.6) шәрти гәфәсин идеал олмасынын ријази ифадәсидир. $V(r)$ - потенсиалы үчөлчүлү периодик функсија олдуғундан ону Фурје сырасына ајыра биләрик:

$$V(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{b}} V_{\boldsymbol{b}} e^{i(\boldsymbol{br})} . \tag{4.7}$$

Бурада $V_{\boldsymbol{b}}$ -гәфәс потенсиалынын Фурје әмсалы, $\boldsymbol{b}$ - (*узунлуг*)$^{-1}$ өлчүсүнә малик олан вектордур. Бу вектору тапмаг үчүн (4.6) шәртиндән истифадә едәк:

$$V(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}_n) = \sum_{\boldsymbol{b}} V_{\boldsymbol{b}}\, e^{i\boldsymbol{b}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_n)} = \sum_{\boldsymbol{b}} V_{\boldsymbol{b}} e^{i(\boldsymbol{br})} \cdot e^{i(\boldsymbol{ba}_n)} = V(\boldsymbol{r}) . \tag{4.8}$$

Бурадан көрүнүр ки, (4.6) шәртинин өдәнилмәси үчүн $e^{i(\boldsymbol{ba}_n)}=1$ олмалыдыр, јә'ни

$$(\boldsymbol{ba}_n)=n_1(\boldsymbol{ba}_1)+n_2(\boldsymbol{ba}_2)+n_3(\boldsymbol{ba}_3)=2\pi g . \tag{4.9}$$

Бурада $g = 0, \pm 1, \pm 2...$ - там әдәдләрдир. (4.9) шәртинин өдәнмәси үчүн исә

$$(\boldsymbol{ba}_1) = 2\pi g_1; \quad (\boldsymbol{ba}_2) = 2\pi g_2; \quad (\boldsymbol{ba}_3) = 2\pi g_3 \tag{4.10}$$

олмалыдыр; бурада $g_i = 0, \pm 1, \pm 2...$ там әдәдләрдир.

Мә'лум олдуғу кими, һәр һансы бир ихтијари вектор мә'лум үч векторун чәми кими көстәриләбиләр. Она көрә дә $\boldsymbol{b}$ вектору үч мә'лум $(\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2), (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3), (\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1)$ векторлар бојунча компонентләрә ајыра биләрик:

$$\boldsymbol{b} = A(\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2) + B(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3) + C(\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1) . \tag{4.11}$$

Бурада A, B, C әмсаллары тапылмалы олан скаларјар кәмијјәтләрдир. Бу үч кәмијјәти (4.10) шәртләриндән истифадә едәрәк тапа биләрик. Бунун үчүн (4.11) бәрабәрлијинин һәр ики тәрәфини нөвбә илә $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ вә $\boldsymbol{a}_3$ векторларына скалјар олараг вурсаг,

$$(\boldsymbol{ba}_1) = B\boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3) = 2\pi g_1,$$
$$(\boldsymbol{ba}_2) = C\boldsymbol{a}_2(\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1) = 2\pi g_2, \qquad (4.12)$$
$$(\boldsymbol{ba}_3) = A\boldsymbol{a}_3(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2) = 2\pi g_3$$

алырыг. Нәтичәдә

$$\mathrm{A} = \frac{2\pi}{\Omega_0}\mathrm{g}_3; \quad \mathrm{B} = \frac{2\pi}{\Omega_0}\mathrm{g}_1; \quad \mathrm{C} = \frac{2\pi}{\Omega_0}\mathrm{g}_2 \qquad (4.13)$$

олар, һарадакы $\Omega_0 = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)$ - елементар өзәјин һәчмидир. A, B, C үчүн алынмыш ифадәләри (4.11) дә јеринә јазсаг,

$$\boldsymbol{b}_g \equiv \boldsymbol{b} = g_1\boldsymbol{b}_1 + g_2\boldsymbol{b}_2 + g_3\boldsymbol{b}_3 \qquad (4.14)$$

алынар. Бурада

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\frac{(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}{\Omega_0}, \qquad \boldsymbol{b}_2 = 2\pi\frac{(\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1)}{\Omega_0},$$
$$\boldsymbol{b}_3 = 2\pi\frac{(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2)}{\Omega_0}. \qquad (4.15)$$

$\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ векторлары үзәриндә гурулан паралелепипедин "һәчми" (*узунлуг*)$^{-3}$ өлчүсүндәдир. Бу паралелепипеди $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ векторлары бојунча транслјасија етсәк, бир гәфәс әлдә едәрик. Бу гәфәс *тәрс гәфәс* адланыр. Бурада $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ тәрс гәфәсин базис векторлары; бу векторлар үзәриндә гурулан паралелепипед исә тәрс гәфәсин базис өзәјидир. $\boldsymbol{b}_g$ вектору тәрс гәфәсдә ихтијари бир дүјүнүнүн координатларыны тә'јин едән тәрс гәфәс векторудур.

(4.15) бәрабәрлиjи илә тә'jин олунан тәрс гәфәс базис векторлары

$$\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}_k = 2\pi\delta_{ik} = \begin{cases} 0, & i \neq k \\ 2\pi, & i = k \end{cases} \tag{4.16}$$

хассәләринә маликдир. Дикәр тәрәфдән

$$\boldsymbol{b}_g\boldsymbol{a}_n = 2\pi(n_1g_1 + n_2g_2 + n_3g_3) = 2\pi\times \text{там әдәд} \tag{4.17}$$

олдуғу аjдындыр.

(4.15) бәрабәрлиjиндән көрүндүjү кими, $\boldsymbol{b}_1$ вектору $\boldsymbol{a}_2$ вә $\boldsymbol{a}_3$ векторларына, $\boldsymbol{b}_2$ вектору $\boldsymbol{a}_3$ вә $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{b}_3$ исә $\boldsymbol{a}_1$ вә $\boldsymbol{a}_2$ векторларына перпендикулjардыр. Әкәр дүз гәфәсин елементар өзәjи дүзкүн паралелепипеддирсә, $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ тәрс гәфәс базис векторлары уjғун олараг $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ дүз гәфәс базис векторларына паралелдир вә тәрс гәфәс векторларынын өлчүсү $|b_i| = 2\pi / a_i$ олур.

P- типли/садә кубик гәфәсә гаршы гоjулан тәрс гәфәсин елементар өзәjи садә кубдур. Бу һалда тәрс гәфәсин базис векторлары ашағыдакы кимидир:

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\boldsymbol{x}_0, \quad \boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\boldsymbol{y}_0, \quad \boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\boldsymbol{z}_0. \tag{4.18}$$

Тәрс гәфәсин базис өзәjинин һәчми:

$$\boldsymbol{b}_1(\boldsymbol{b}_2\times\boldsymbol{b}_3) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}. \tag{4.19}$$

Инди F- типли дүз гәфәсин тәрс гәфәсинин I- типли вә I- типли дүз гәфәсин тәрс гәфәсинин исә F- типли олдуғуну көстәрәк. Бунун үчүн тәрс гәфәсләрин базис векторларыны тапаг. F- типли кубик гәфәсә гаршы гојулан тәрс гәфәсин базис векторларыны (4.1), (4.2) вә (4.15) бәрабәрликләриндән истифадә едәрәк ашағыдакы кими аларыг:

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{y}_0 - \boldsymbol{z}_0), \quad \boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{z}_0 - \boldsymbol{x}_0),$$
$$\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{z}_0 + \boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{y}_0). \tag{4.20}$$

I- типли кубик гәфәсә ујғун тәрс гәфәсин базис векторлары (4.3), (4.4) вә (4.15) бәрәбәрликләриндән истифадә едәрәк ашағыдакы кими аларыг:

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{y}_0), \quad \boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{z}_0),$$
$$\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{z}_0 + \boldsymbol{x}_0). \tag{4.21}$$

Инди (4.20) илә (4.3) вә (4.21) илә (4.1)-и мүгајисә едәк. F- типли гәфәсин тәрс гәфәсинин базис векторлары I- типли дүз гәфәсин базис векторлары истигамәтиндәдир. I- типли гәфәсин тәрс гәфәс векторлары исә F- типли дүз гәфәсин базис векторлары истигамәтиндәдир. Беләликлә, јухарыда дедијимизи исбат етдик.

(4.20) вә (4.21) бәрабәрликләри илә тапылан базис векторларындан истифадә едәрәк, F- вә I -типли гурулушлара гаршы гојулан тәрс гәфәсләрин елементар өзәјинин һәчмини асанча һесабламаг олар:

$$\boldsymbol{b}_1(\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}. \tag{4.22}$$

Бурада Ω_0- дүз гәфәсин елементар өзәјинин һәчмидир: P- типли куб үчүн $\Omega_0 = a^3$, F- типли куб үчүн $\Omega_0 = a^3/4$, I- типли куб үчүн исә $\Omega_0 = a^3/2$ -дир.

(4.22) бәрабәрлији илә верилән ифадә садәчә кубик системләр үчүн дејил, бүтүн кристаллик системләр үчүн доғрудур, лакин үмуми һалда дүз гәфәсдә базис өзәјинин һәчми $\Omega_0 = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)$-дир.

Һәгигәтән дә, үмуми һалда тәрс гәфәсин елементар өзәјинин һәчми (4.15) бәрабәрлијиндән

$$\boldsymbol{b}_1(\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0^3}(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)\left[(\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1) \times (\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2)\right] =$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0^3}(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)\left\{\left[\boldsymbol{a}_3(\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2)\right]\boldsymbol{a}_1 - \left[\boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2)\right]\boldsymbol{a}_3\right\} = \qquad (4.22\text{a})$$

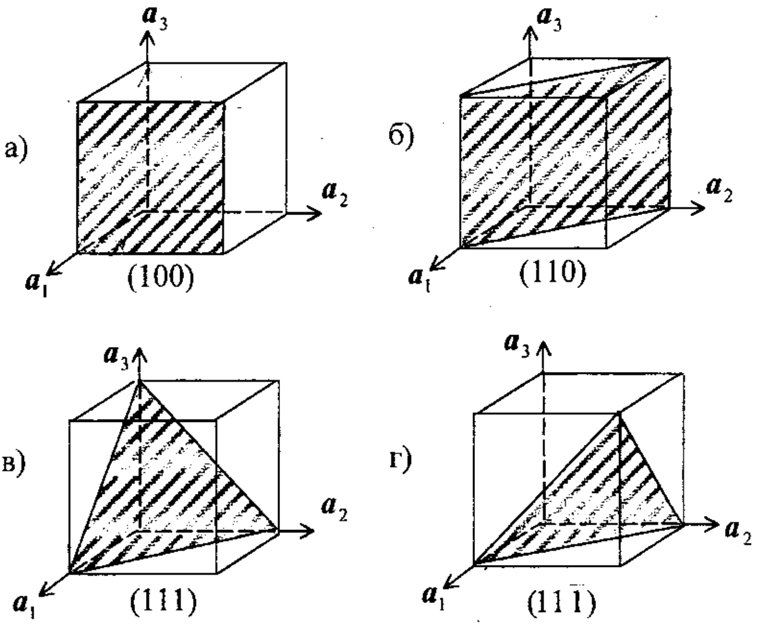
$$= \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0^3}\left[(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)\boldsymbol{a}_1\right]\left[\boldsymbol{a}_3(\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2)\right] = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0^3} \cdot \Omega_0^2 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$$

алыныр. Демәли, үмуми һалда тәрс гәфәсин елементар өзәјин һәчми (4.22) дүстуру илә тә'јин олунур.

Тәрс гәфәс анлајышы вә тәрс гәфәс векторлары, рентген шүаларынын кристал гәфәсләрдән сәпилмәсиндә вә квазизәррәчикләрин квазиимпулсларынын тә'јин олунмасында истифадә едилир.

Миллер индексләри. Кристаллографијада симметрија мүстәвиләринин вәзијјәтини вә охларын истигамәтләрини көстәрмәк үчүн Миллер индексләриндән истифадә едилир.

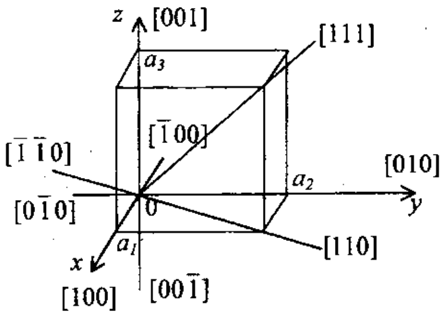
Кристал гәфәсин дүјүнләриндән кечән мүстәви тәсәввүр едәк. Кубик гәфәс үчүн белә мүстәвиләрдән дөрдү



шәкил 4.15

шәкил 4.15-дә көстәрилмишдир. Бу мүстәвиләрин вәзијјәтини тә'јин едән Миллер индексләри (hlk) ашағыдакы кими тапылыр: тутаг ки, бахдығымыз мүстәви координат башланчығындан S_1a_1, S_2a_2 вә S_3a_3 мәсафәсиндә јерләшән атомлардан кечир, бурада S_1, S_2, S_3-там әдәдләрдир. Бу әдәдләрдән дүзәлдилмиш $\frac{1}{S_1}:\frac{1}{S_2}:\frac{1}{S_3}$ нисбәтләрини ән кичик там әдәдләрин нисбәтләри кими, јә'ни $\frac{1}{S_1}:\frac{1}{S_2}:\frac{1}{S_3}=h:k:l$ кими ифадә етсәк (hlk) әдәләри бахдығымыз мүстәвинин вәзијјәтини тә'јин едән *Миллер* *индексләри* адланыр. Шәкил 4.15, а-да штрихләнмиш $\boldsymbol{a}_1$ охуна перпендикулјар мүстәвинин Миллер индекси $\frac{1}{S_1}:\frac{1}{S_2}:\frac{1}{S_3}=\frac{1}{1}:\frac{1}{\infty}:\frac{1}{\infty}=1:0:0$, јә'ни $(hkl)=(100)$ олар. Ујғун олараг 4.15, б, в, г мүстәвиләринин Миллер индексләри (100), (111), $(11\bar{1})$ кими ишарә едилир. Бурада $\bar{1}$ шәкил 4.15, г –дә көстәрилән мүстәви $\boldsymbol{a}_3$ охунун әкс истигамәтиндә a мәсафәсиндә кечдијини көстәрир. Ајдындыр ки, верилмиш (hkl) Миллер индексләри јалныз бир мүстәвини дејил, бир-биринә паралел мүстәвиләр аиләсини тә'јин едир. Физики олараг еквивалент мүстәвиләрин топлусу $\{hkl\}$ символу илә ишарә едилир. Мәсәлән, кубун алты үзү $\{100\}$ илә көстәрилир.

Кристалын дүјүнләриндән кечән охларын истигамәтләри $[u,\upsilon,w]$ символу илә ишарә едилир. Һардакы u,υ вә w әдәдләри ашағыдакы кими тә'јин едилир: тутаг ки, бахылан истигамәт үзрә јөнәлмиш векторун $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$ охлары бојунча топланлары $n_1\boldsymbol{a}_1, n_2\boldsymbol{a}_2, n_3\boldsymbol{a}_3$-дүр. Бурада n_1,n_2,n_3 там әдәдләрдир. Бу әдәдләрдән дүзәлдилмиш $n_1:n_2:n_3$ нисбәт ән кичик u,υ,w там әдәдләрин нисбәти кими, јә'ни $n_1:n_2:n_3=u:\upsilon:w$ оларса, $[u\upsilon w]$ символу һәмин истигамәти көстәрир. Белә симметрик истигамәтләрдән бир нечәси шәкил 4.16-дә көстәрилмишдир. Мәсәлән, кубун OX истигамәтиндә тили $[100]$, кубун отурачағынын диагоналы $[110]$, кубун фәза диагоналы бојунча олан истигамәт $[111]$ символлары илә ишарә олунур. Бу истигамәтләрин әкси исә ујғун олараг $[\bar{1}00],[\bar{1}\bar{1}0]$ вә $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ символлары илә көстәрилир.



шәкил 4.16

Кристалда физики еквивалент истигамәтләр топлусу $\langle u, \upsilon, w\rangle$ символу илә ишарә едилир. Белә ки, $\langle 100\rangle$ кубун тилләри бојунча 6 истигамәти, $\langle 110\rangle$ кубун үзләринин диагоналы бојунча 12, $\langle 111\rangle$ исә кубун 8 фәза диагоналы бојунча истигамәтләри көстәрир.. Кубик кристалларда $[u, \upsilon, w]$ истигамәти (u, υ, w) мүстәвисинә перпендикулјардыр.

Инди исә садә, лакин вачиб ~~ики~~ теореми исбат едәк.

Теорем 1. $g_1 : g_2 : g_3 = h : k : l$ *шәрти өдәнәрсә, тәрс гәфәс вектору* $\boldsymbol{b}_g = g_1\boldsymbol{b}_1 + g_2\boldsymbol{b}_2 + g_3\boldsymbol{b}_3$ *Миллер индексләри* (hkl) *олан мүстәвијә перпендикулјардыр.*

$\frac{\boldsymbol{a}_1}{h}, \frac{\boldsymbol{a}_2}{k}, \frac{\boldsymbol{a}_3}{l}$ векторларынын учлары (hkl) мүстәвиси үзәриндә олдуғуна көрә $\boldsymbol{a}_{12} = \left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{h} - \frac{\boldsymbol{a}_2}{k}\right)$ вә $\boldsymbol{a}_{13} = \left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{h} - \frac{\boldsymbol{a}_3}{l}\right)$ векторлары да (hkl) мүстәвиси үзәриндәдир. Теоремин шәртинә көрә $\boldsymbol{b}_{hkl} = h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3$ вектору $\boldsymbol{b}_g$ векторуна паралелдир. Одур ки, теореми исбат етмәк үчүн $\boldsymbol{b}_{hkl}$ векторунун (hkl) мүстәвисинә перпендикулјар олдуғуну көстәрмәк кифајәтдир. Бунун үчүн $(\boldsymbol{b}_{hkl} \cdot \boldsymbol{a}_{12})$ вә $(\boldsymbol{b}_{hkl} \cdot \boldsymbol{a}_{13})$ векторларынын скалјар һасилләри сыфыр олмалыдыр. Дүз вә тәрс гәфәсләрин базис векторларынын (4.16) хассәсиндән истифадә етсәк,

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{b}_{hkl} \cdot \boldsymbol{a}_{12}) &= (h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3)\left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{h} - \frac{\boldsymbol{a}_2}{k}\right) = 0 \\ (\boldsymbol{b}_{hkl} \cdot \boldsymbol{a}_{13}) &= (h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3)\left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{h} - \frac{\boldsymbol{a}_3}{l}\right) = 0\end{aligned} \tag{4.23}$$

олдуғуну көрәрик. Беләликлә, биринчи теорем исбат олунду.

Теорем 2. (hkl) мүстәвиләр аиләсиндә ики гоншу мүстәви арасындакы мәсафә $2\pi / b_{hkl}$ -дир.

Јухарыда $\boldsymbol{b}_{hkl}$ векторунун (hkl) мүстәвисинә перпендикулјар олдуғуну көстәрдик. Буна көрә $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{b}_{hkl}/b_{hkl}$ ваһид вектор да (hkl) мүстәвисинә перпендикулјардыр. $\frac{\boldsymbol{a}_1}{h}, \frac{\boldsymbol{a}_2}{k}, \frac{\boldsymbol{a}_3}{l}$ векторларынын һәр бири гоншу мүстәвиләри бирләшдирдијиндән, бу векторларын һәр биринин $\boldsymbol{n}$ ваһид вектор истигамәтиндәки проjексијасы мүстәвиләр арасындакы d_{hkl} мәсафәсини верир. Беләликлә, (4.16) ифадәсиндән истифадә едәрәк,

$$d_{hkl} = \frac{\boldsymbol{a}_1}{h}\boldsymbol{n} = \frac{1}{h}\frac{1}{b_{hkl}}\boldsymbol{a}_1(h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3) = \frac{2\pi}{b_{hkl}} \tag{4.24}$$

аларыг. Мисал олараг кубик кристалларда симметриja мүстәвиләри арасындакы мәсафәләри һесаблаjаг. Кубик гәфәсләрдә (100) мүстәвиләри арасындакы мәсафә $d_{100} = 2\pi / b_{100}$; $b_{100} = b_1 = 2\pi / a$ олдуғундан, $d_{100} = a$ олур. (110) мүстәвиләри арасындакы мәсафә $d_{110} = 2\pi / b_{110}$; $b_{110} = (b^2 + b^2)^{1/2} = 2\pi\sqrt{2} / a$ олдуғундан, $d_{110} = a / \sqrt{2}$ олур. (111) мүстәвиләри арасындакы мәсафә $d_{11} = 2\pi / b_{111}$; $b_{111} = (b^2 + b^2 + b^2)^{1/2} = 2\pi\sqrt{3} / a$ олдуғундан $d_{111} = a / \sqrt{3}$ аларыг.

Рентген шүаларынын дифраксиjасы үчүн Лауе вә Брегг-Вулф шәрти. Рентген шүаларынын кристал гәфәсләрдән дифраксиjа шәртинин jазылмасында тәрс гәфәс векторларынын нечә истифадә олунмасына бахаг. Шәкил 4.17 -дә $\boldsymbol{a}$ векторуна перпендикулjар олан ики кристал мүстәвисиндән рентген шүаларынын гаjытмасы көстәрилмишдир. $\boldsymbol{k}$ дүшән, $\boldsymbol{k}'$ гаjыдан шүанын далға векторларыдыр.

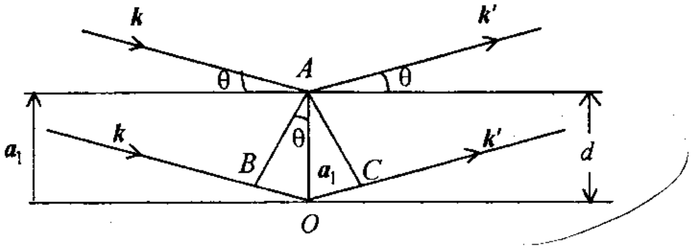
Гаjыдан шүаларын бир-бирини күчләндирмәси үчүн $BO+OC$ jоллар фәрги далға узунлуғу λ-нын там мисилләринә бәрабәр олмалыдыр. Jоллар фәргинин $BO + OC =$ $= -\boldsymbol{a}_1\left(\dfrac{\boldsymbol{k}}{k}\right) + \boldsymbol{a}_1\left(\dfrac{\boldsymbol{k}'}{k'}\right)$ олдуғуну вә $k' = k$ олдуғуну нәзәрә алараг:

$$\boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k})\frac{1}{k} = g_1\lambda \qquad (4.25)$$

мүәjjән едилир. Бурада g_1-там әдәддир. $\boldsymbol{a}_2$ вә $\boldsymbol{a}_3$ истигамәтләри үчүн дә бу шәрти jазсаг,

$$\boldsymbol{a}_2(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k})\frac{1}{k} = g_2\lambda \qquad \boldsymbol{a}_3(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k})\frac{1}{k} = g_3\lambda \qquad (4.26)$$

аларыг.



шәкил 4.17

Сон үч ифадәни (4.10) бәрабәрлији илә мүгајисә етсәк, $\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\frac{1}{k}$ вектору илә $\boldsymbol{b}_g$ тәрс гәфәс векторунун ејни шәрти өдәдијини, јә'ни:

$$\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\frac{1}{k}=\boldsymbol{b}_g \tag{4.27}$$

јазмаг олар. $k=\frac{2\pi}{\lambda}$ олдуғуну нәзәрә алсаг, максимумлуг шәрти

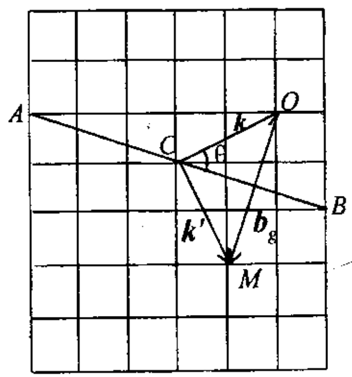
$$(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})=\boldsymbol{b}_g \tag{4.28}$$

шәклинә дүшәр. Бурада $\boldsymbol{b}_g$ кәмијјәти- тәрс гәфәс векторудур. Бу ифадәни $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{b}_g$ кими јазаг, һәр ики тәрәфи квадрата јүксәлдәк вә $k^2=k'^2$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$b_g^2+2(\boldsymbol{k}\boldsymbol{b}_g)=0 \tag{4.29}$$

олар. (4.28) вә ја (4.29) ифадәләри рентген шүаларынын интерференсија мәнзәрәси үчүн Лауе шәртидир.

дүшән шүаларын далға векторларынын фәрги бу гәфәсә мүвафиг тәрс гәфәсин мүәјјән бир тәрс гәфәс векторуна бәрабәр олмалыдыр (4.28). Рентген шүаларынын (4.28) интерференсија шәртини башга шәкилдә јазмаг олар. Садәлик үчүн икиөлчүлү тәрс гәфәс көтүрәк (шәкил 4.18). Тәрс гәфәсдә башланғыч олараг һәр һансы бир гәфәс нөгтәсини сечәк. Бу башланғыч 0 нөгтәсиндән $(-\boldsymbol{k})$ векторуну чәкәк. Бу векторун башланғычы C нөгтәсиндән чыхан $\boldsymbol{k}'$ векторунун учу тәрс гәфәсин башга бир M дүјүн нөгтәсинин үзәринә дүшәрсә, $\boldsymbol{k}$ вә $\boldsymbol{k}'$ далғалары (4.28) интерференсија шәртини өдәјәр. Бурада $\boldsymbol{OM} = \boldsymbol{b}_g$ тәрс гәфәс векторудур. Инди C нөгтәсиндән $\boldsymbol{b}_g$ векторуна перпендикулјар AB дүз хәттини чәкәк.



шәкил 4.18

Јухарыда исбат едилән биринчи теоремә көрә, әкәр $h:k:l = g_1 : g_2 : g_3$ кимидирсә, Миллер индексләри (hkl) олан мүстәви $\boldsymbol{b}_g$ векторуна перпендикулјардыр. Буна көрә $\boldsymbol{b}_g = n\boldsymbol{b}_{hkl}$ олур, бурада n- там әдәд олуб, g_1, g_2, g_3 -

әдәдләринин ортаг вуруғудур. Икинчи теоремә көрә (hkl) мүстәвиләри арасындакы мәсафә:

$$d = 2\pi / b_{hkl} = 2\pi n / b_g . \tag{4.30}$$

Бурадан

$$b_g = 2\pi n / d \tag{4.31}$$

алыныр. $k = k'$ олдуғундан AB мүстәвиси $\boldsymbol{b}_g$ векторуну икијә бөлүр. Она көрә дә OCM үчбучағындан

$$b_g = 2k\sin\theta = 2\frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta \tag{4.32}$$

јаза биләрик, бурада θ-дүшән шүа илә AB кристал мүстәвиси арасындакы бучагдыр. (4.31) вә (4.32) ифадәләрини бирләшдирсәк,

$$2d\sin\theta = n\lambda \tag{4.33}$$

Брегг-Вулф интерференсија шәрти алыныр. Ајдындыр ки, (4.33) Брегг-Вулф шәрти (4.28) Лауе шәртинә еквивалентдир.

Гејд едәк ки, електронунда кристаллик гәфәсдән дифраксијасы (4.28) вә ја (4.33) шәртләрини өдәмәлидир.

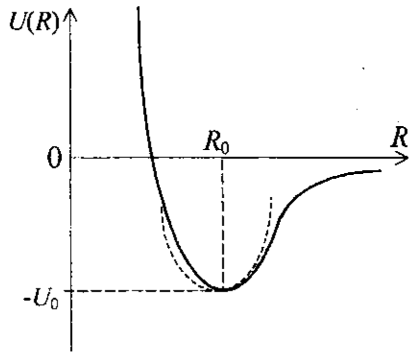
§ 5. Кристал гәфәсләрдә рәгсләр вә далғалар

Мүтләг сыфыр температурунда кристал гәфәсин дүјүнләриндә олан зәррәчикләр сүкунәт вәзијәтиндә олурлар. Онлары бу вәзијјәтдә биркә сахлајан, јә'ни кристалын дајаныглығын тә'мин едән гүввә, кристалы тәшкил едән зәрәчикләр (атомлар, ионлар, молекуллар) арасындакы гаршылыглы тә'сир гүввәсидир.

Мүхтәлиф кристалларда гаршылыглы тә'сир гүввәсинин- рабитәнин тәбиәти мүхтәлифдир. Әсасән кристалларда дөрд рабитә нөвүнүн олдуғу мүәјјәнләшдирилмишдир: *ион, ковалент, ван-дер-ваалс* вә *металлик* рабитәләр.

Ион рабитәси. Бу рабитә нөвү ион кристалларында олур. Белә кристалларын типик нүмајәндәси хөрәк дузудур. Бурада кристал мүсбәт јүклү Na^+ вә мәнфи јүклү Cl^- ионларындан тәшкил олунмушдур. Na атомунун 11 електрону $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ вә Cl атомунун 17 електрону $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ сәвијјәләр үзрә пајландығындан NaCl әмәлә кәләркән Na атомунда $3s$ сәвијәсиндә олан електрон Cl-ун долмамыш $3p$ сәвијјәсинә кечәрәк Na^+ вә Cl^- ионларын әмәлә кәтирир.

Әкәр ионлары нөгтәви јүк кими гәбул етсәк, узаг мәсафәләрдә әсас гаршылыглы тә'сир мүхтәлиф ишарәли гоншу ионлар арасында олан Кулон ҹазибә гаршылыглы тә'сир олар, она көрә ки, ејни адлы ионлар арасында олан мәсафә даһа бөјүкдүр. Бу һалда гаршылыглы тә'сир потенсиалы $U_{кулон} = -e^2 / R$, R- ионлар арасындакы мәсафәдир, e- електронун јүкүдүр. Ҹазибә нәтиҹәсиндә ионлар јахынлашдыгда онларын електрон өртүкләри бир-биринә тохунур вә күҹлү итәләмә гүввәси мејдана чыхыр. Бу итәләмә гүввәсинин тәбиәтини јалныз квант механиасы әсасында, јә'ни Паули принсипини нәзәрә алмагла изаһ етмәк олар. Лакин һәмин итәләмә гаршылыглы тә'сир потенсиалыны емпирик Борн-Мајер дүстуру $U_{итәл} = A_0 \exp\left(-\dfrac{R}{b_0}\right)$ шәклиндә јазмаг олар, бурада A_0 вә b_0-емпирик сабитләрдир. Беләликлә, һәр ики потенсиалы нәзәрә алсаг, үмуми гаршылыглы тә'сир потенсиалы ион кристаллары үчүн схематик олараг шәкил 5.1.-дә көстәрилдиjи кими олар.



шәкил 5.1

Ковалент рабитә. Бу рабитә нөвү нејтрал атомлар арасында олан рабитәдир. Ион рабитәси һалында валент електрону тамамилә бир атомдан дикәр атома кечирсә, ковалент рабитәдә валент електронлары һәр ики атома аид олур, беләликлә дә, онлары (атомлары) бир-биринә бағлаjыр. Ковалент рабитәнин тәбиәтини jалныз квант механикасы әсасында изаһ етмәк олар. Һидрокен H_2 молекуласынын jаранмасы ковалент рабитәнин нәтичәсидир. Кристаллар ичәрисиндә ковалент рабитәнин парлаг нүмунәси алмаз гурулушунда кристаллашан Ge керманиум вә Si силисиумдур. Менделеjев чәдвәлинин дөрдүнчү групунда jерләшән бу елементләрин дөрд харичи електронлары өзүнүн гоншулары арасында ковалент рабитә jарадырлар (шәкил 3.1.), лакин атомлар нејтраллыгларыны сахлаjырлар.

Бә'зи һалларда кристалы тәшкил едән зәррәчикләр арасында *гарышыг рабитә* мөвчуд олур. Мәсәлән, III вә V груп елементләриндән ибарәт кристалларда V груп елементин харичи електрон тәбәгәсиндә олан бешинчи електрону III груп елементдән олан атома кечәрәк мүхтәлиф ишарәли ионлар јарадырлар. $A^{III}B^{V}$ типли кристалларда алмаз гурулушуна маликдирләр, јә'ни һәр бир A^{III} елементи дөрд B^{V} елементи илә вә тәрсинә әһатә олунмушдур. Јаранмыш ионларын харичи електрон тәбәгәсиндә олан дөрд електрон гоншулар арасында ковалент рабитә әмәлә кәтирир. Ајдындыр ки, бу кристалларда ејни заманда ион рабитәси дә мөвчуддур, јә'ни рабитә гарышыг рабитәдир. Белә кристалларын типик нүмајәндәләри InSb, InAs, GaSb вә GaAs кристалларыдыр.

Металлик рабитә. Електрик јүкүнү јахшы кечирән кристалларын дајаныглығы бу рабитә нөвү илә тә'мин олунур. Ион рабитә һалында харичи електрон бир атомдан тамамилә дикәринә кечир. Ковалент рабитә заманы харичи електронлар өз доғма атомларыны там тәрк етмир вә гоншу атомлар арасында үмумиләширләр. Металлик рабитә һалында исә харичи тәбәгәдә олан валент електрону өз атомуну там тәрк едир вә кристал дахилиндә сәрбәст һәрәкәт едир, бунунла да металларын јүксәк електрик вә истилик кечиричилијини тә'мин едир. 14

Металларын типик нүмајәндәси кими натриуму көстәрмәк олар. Изолә олунмуш Na атомунун електрон гурулушу $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ кимидир. Кристаллашаркән $3s$ һалында олан зәиф әлагәли електрон өз атомундан гопараг сәрбәстләшир. Бәрк фазада металлар кристаллик гәфәс әмәлә кәтирән мүсбәт јүклү ионларын вә сәрбәст һәрәкәт едән електрон газындан ибарәтдир. Сәрбәст електронлар металы тәрк едә билмир, она көрәки, бунун үчүн 5÷10 еВ тәртибидә чыхыш иши көрмәк лазымдыр. Беләликлә, металлик рабитәни мүсбәт јүклү ионлар вә сәрбәст електронларла ионлар арасында мөвчуд олан Кулон гарпылыглы тә'сирләри тә'мин едир.

Ван-дер-Ваалс рабитәси. Бу рабитә нөвү нејтрал атомлардан вә ја гејри полјар (мәхсуси дипол моментинә малик олмајан) молекуллардан ибарәт кристалларда зәррәчикләр арасындакы чазибә гаршылыглы тә'сири илә тә'јин олунур. Нејтрал вә гејри полјар зәррәчикләр арасында нә Кулон, нә дә дипол-дипол гаршылыглы тә'сир јохдур. Она көрә ки, онларда јүкләр симметрик пајланыр: мәнфи вә мүсбәт електрик јүкләринин мәркәзләри үст-үстә дүшүр. Лакин електронлар нүвәләр әтрафында даим һәрәкәтдә олдуғундан флуктуасија нәтичәсиндә симметрија истәнилән вахт позула биләр вә $\boldsymbol{P}_1$ електрик дипол моменти јарана биләр. Бу дипол јахынлығында олан молекулада ани олараг индуксија $\boldsymbol{P}_2$ дипол моменти јарадыр. Гоншу молекуллар арасында чазибә јарадан да $\boldsymbol{P}_1$ вә $\boldsymbol{P}_2$ диполлары арасында олан гаршылыгла тә'сирдир.

Мәлумдур ки, араландакы мәсафә $\boldsymbol{R}$ оларса, диполларын гаршылыгла тә'сир енержиси

$$U(R)=\frac{\boldsymbol{P}_1\cdot\boldsymbol{P}_2}{R^3}-\frac{3(\boldsymbol{P}_1\cdot\boldsymbol{R})(\boldsymbol{P}_2\cdot\boldsymbol{R})}{R^5} \tag{5.1}$$

дүстуру илә верилир.

Индуксија нәтичәсиндә јаранан дипол $\boldsymbol{P}_2$ ону јарадан $\boldsymbol{P}_1$ диполуна паралел олдуғундан (5.1)

$$U(R)=-\frac{2\boldsymbol{P}_1\cdot\boldsymbol{P}_2}{R^3} \tag{5.1 a}$$

олар.

Флуктуасија нәтичәсиндә јаранмыш $\boldsymbol{P}_1$ дипол икинчи молекулун олдуғу нөгтәдә јаратдығы електрик саһәсинин интенсивлијинин гијмәти $E=2P_1/R^3$ олдуғундан јаранан индуксија дипол моменти $P_2=\alpha E=2\alpha P_1/R^3$ олар, бурада α - молекулунун електрон полјарлашмасыдыр. Бунлары нәзәрә алсаг, (5.1 а)

$$U_{\text{чазибә}} = -\frac{4\alpha P_1^2}{R^6} = -\frac{C}{R^6} \qquad (5.1\ б)$$

олар, бурада $C = 4\alpha P_1^2$ - верилмиш молекула үчүн сабит кәмиј̃јәтдир.

Көстәрилән (5.1 б) чазибә гаршылыглы тә'сир *Ван-дер-Ваалс* вә ја *дисперсион* гаршылыглы тә'сир адланыр.

Молекуллар чох јахынлашдыгча електрон тәбәгәләрин өртүлмәси нәтичәсиндә күчлү итәләмә гаршылыглы тә'сир јараныр. Бу гаршылыглы тә'сир експоненсиал вә ја үстлү функсија $U_{\text{итәл}} \approx B/R^{12}$ кими јазыла биләр, бурада B- сабит кәмиј̃јәтдир. Һәр ики һалы бирләшдирсәк, үмуми гаршылыглы тә'сир потенсиалы үчүн

$$U(R) = \frac{B}{R^{12}} - \frac{C}{R^6} \qquad (5.1\ в)$$

ифадәсини аларыг. Ајдындыр ки, узаг мәсафәләрдә икинчи һәдд (чазибә), јахын мәсафәләрдә биринчи һәдд (итәләмә) әсас рол ојнајыр. Бу ифадә *Ленард-Чонс потенсиалы* адланыр.

Јухарыда таныш олдуғумуз рабитә нөвләринин һамысынын үмуми бир чәһәти вар: *узаг мәсафәләрдә зәррәчикләр* (атомлар, молекуллар, ионлар) *арасындакы гаршылыглы тә'сир чазибә, јахын мәсафәләрдә исә итәләмә характери дашыјыр.*

Ики атом (молекул) арасындакы гаршылыглы тә'сир потенсиалы атомлар арасындакы мәсафәнин функсијасы кими, шәкил 5.1-дә схематик олараг көстәрилмишдир (атомлардан бири координат башланғычында јерләшдирилмишдир)

Шәкилдән көрүндүјү кими $\lim_{R\to\infty} U(R) = 0$, $U(R_0) = -U_0$

минимумдур. $R > R_0$ олдугда $\boldsymbol{F} = -grad\, U(R) = -\left(\dfrac{\partial U}{\partial R}\right)\boldsymbol{n}$

чәзбетмә гүввәси, $R < R_0$ олдугда исә итәләмә характери

дашыјыр, бурада $\boldsymbol{n} = \dfrac{\boldsymbol{R}}{R}$ ваһид вектордур.

Сүкунәт вәзијјәтдә (атомлар арасындакы мәсафә R_0) гаршылыглы тә'сирин потенсиал енержиси ($-U_0$) сабитдир вә атомлара һеч бир гүввә тә'сир етмир. Истилик һәрәкәти нәтичәсиндә атомлар өз сүкунәт вәзијјәтиндән чыхарса, араларындакы мәсафә $R \neq R_0$ олар. Бу заман атомлар арасындакы потенсиал енержи дәјишир. Кичик јердәјишмә $x = (R - R_0) << R_0$ үчүн $U(R)$ потенсиалыны $(R - R_0)$-ын үстләринә көрә сыраја ајыра биләрик.

$$U(R)=U(R_0)+\left(\frac{\partial U}{\partial R}\right)_{R_0}(R-R_0)+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial R^2}\right)_{R_0}(R-R_0)^2+$$
$$+\frac{1}{6}\left(\frac{\partial^3 U}{\partial R^3}\right)_{R_0}(R-R_0)^3+\ldots \qquad (5.1\ г)$$

Бурада потенсиал енержинин јалныз атомлар арасындакы мәсафәдән асылы олдуғу фәрз олунур (изотроп бәрк чисим јахынлашмасы). Потенсиал енержи $R = R_0$ нөгтәсиндә минимум олдуғундан $(\partial U / \partial R)_{R_0} = 0$ -дыр. (5.1 г) бәрабәрлијиндәки сабитләри $\left(\partial^2 U / \partial R^2\right)_{R_0} = \beta > 0$ вә $\left(\partial^3 U / \partial R^3\right)_{R_0} = -2\gamma < 0$ кими ишарә едиб, сағ тәрәфдә сыфыр олмајан илк үч һәдлә кифајәтләнсәк, потенсиал енержи үчүн

$$U(R) = -U_0 + \frac{1}{2}\beta x^2 - \frac{1}{3}\gamma x^3 \qquad (5.2)$$

алынар. Атомлар арасындакы мәсафә R_0 -дан кичик ($x<0$) олдугда итәләмә гүввәсинин чазибә гүввәсиндән бөјүк олмасы үчүн $\left(\partial^3 U / \partial R^3\right)_{R_0} < 0$, јә'ни $\gamma > 0$ олмалыдыр. Онда атомлар арасындакы гаршылыглы тә'сир гүввәси үчүн белә ифадә алыныр.

$$F = -\frac{\partial U}{\partial R} = -\frac{\partial U}{\partial x} = -\beta x + \gamma x^2 \qquad (5.3)$$

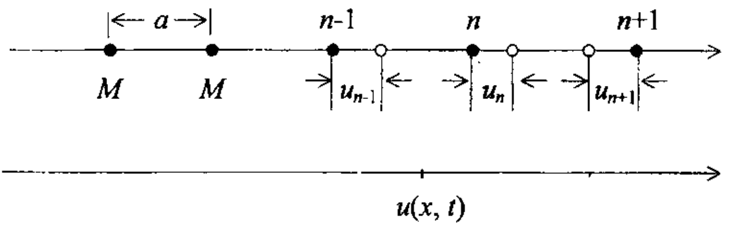
Бу ифадәдә β- еластиклик сабити, γ исә анһармоник гаршылыглы тә'сирин өлчүсүдүр вә бу ики әмсал атомлар арасындакы гаршылыглы тә'сирин тәбиәти илә бағлыдыр. Бу ифадәдән $\beta \sim R_0\gamma$ олдуғу көрүнүр. Доғрудан да, (5.3) ифадәсиндә анһармоник һәддин һармоник һәддә нисбәти $\frac{\gamma x}{\beta} \sim \frac{x}{R_0} << 1$ олмалыдыр.

Кристал гәфәсләрдә нүвәләрин (вә ја атомларын) һәр һансы биринин истилијин тә'сири илә таразлыгдан чыхмасы нәтичәсиндә јаранан рәгси һәрәкәт бир далға кими бүтүн гәфәс боју јајылыр. Бәрк чисимләрин истилик хассәләри бу һәрәкәтлә тә'јин олунур.

Нүвәләрин рәгси һәрәкәтинин үмумијјәтлә квант механикасы васитәси илә изаһ олунмасыны биринчи параграфда көстәрмишдик. Јә'ни (2.10) Шрединкер тәнлијини үјғун һал үчүн јазмаг вә һәлл етмәк лазымдыр. Дикәр тәрәфдән, јүксәк температурларда нүвәләрин рәгси һәрәкәтләринин классик механика чәрчивәсиндә Нјутон һәрәкәт тәнликләриндән истифадә едиләрәк изаһ едилдијини көрмүшдүк.

Биз бурада јүксәк температурлар областына бахаг. Бу һалда атомларын рәгси һәрәкәти классик олараг изаһ олуна биләр. Даһа сонра, ујғунлуг принсипиндән истифадә едәрәк, классик Һамилтон функсијасындан Һамилтон операторуна, јә'ни квант механикасына кечәрәк вә беләликлә, бүтүн температур областыны әһатә едә биләрик.

Бирөлчүлү садә гәфәс. Садәлик үчүн әввәлҹә бирөлчүлү садә гәфәсә бахаг. Бирөлчүлү гәфәс һәр биринин күтләси M олан нејтрал атомлардан ибарәт олсун вә гәфәс сабити a олсун. Һәр елементар гәфәсә бир атом дүшүр. Бир гәфәс нөгтәсини башланғыч олараг сечәк вә дикәр гәфәс нөгтәләрини нөмрәләјәк (шәкил 5.2).



Шәкил 5.2

Атомларын саға доғру јердәјишмәләрини мүсбәт, сола доғру јердәјишмәләрини мәнфи гәбул едәк. Буна көрә, шәкил 5.2-дә $u_n(t) > 0$; $u_{n-1}(t) > 0$; $u_{n+1}(t) < 0$-дыр.

Гәфәсдәки һәр атом гоншулары илә әлагәдә олдуғундан, бир атомун јердәјишмәси әтрафа рәгси далға шәклиндә бүтүн гәфәс боју јајылыр. Бу һәрәкәти изаһ етмәк үчүн һәр һансы n нөмрәли атомун классик һәрәкәт тәнлијини јазаг:

$$M\frac{d^2u_n(t)}{dt^2} = F_n. \qquad (5.3\ a)$$

Бурада F_n - n нөмрәли атома гоншулары тәрәфиндән тә'сир едән гүввәдир. F_n гүввәсинин ачыг ифадәсини јазмаг үчүн олдугча зәрури ики фәрзијјәдән истифадә едәк:

1.Атомлар арасындакы гаршылыглы тә'сир гүввәсинин потенсиалы јердәјишмәјә көрә параболик олсун, $U(x) = -U_0 + \frac{1}{2}\beta x^2$ (шәкил 5.1-дә пунктирли әјри), јә'ни атомлар арасындакы гаршылыглы тә'сир гүввәси квазиеластикдир: $F = -\beta x$

2. Атомлар ән јахын гоншулары илә гаршылыглы тә'сирдә олур, јә'ни n нөмрәли атом јалныз (n-1) вә (n+1) нөмрәли атомларын јердәјишмәләринин тә'сири алтында ола биләр. $(n \pm 2), (n \pm 3)$ вә с. нөмрәли атомларын јерләшмәсиндәки дәјишмәләри n- чи атомун вәзијјәтинә тә'сир етмир.

Бу ики фәрзијјәјә әсасән:

$$F_n = F_{n,\,n-1} + F_{n,\,n+1} = -\beta(u_n - u_{n-1}) - \beta(u_n - u_{n+1})$$

вә ја

$$F_n = -\beta(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) \qquad (5.3\ б)$$

јаза биләрик. Беләликлә, n- чи атомун $u_n(t)$ јердәјишмәси үчүн бу һәрәкәт тәнлији алыныр:

$$M\frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} = -\beta(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) \qquad (5.4)$$

Бу тәнликдән көрүндүјү кими, $u_n(t)$ функсијасыны тә'јин етмәк үчүн гоншу атомларын јердәјишмәләрини

(u_{n-1} вә u_{n+1} функсијаларыны) дә билмәк лазымдыр вә бунлар үчүн һәрәкәт тәнликләрини јазмалыјыг. Бу тәгдирдә u_{n-2} вә u_{n+2} јердәјишмәләри дә мә'лум олмалыдыр. Беләликлә, (5.4) тәнлији чох сајда тәнликләрдән ибарәт олуб, тәнликләр системини јарадыр. Бу тәнликләр системинин һәлли исә практик олараг мүмкүн дејил.

Гаршымыза чыхан бу чәтинлији арадан галдырмаг үчүн мадди нөгтәләрдән тәшкил олунмуш бирөлчүлү гәфәс (зәнчир) јеринә кәсилмәз назик телә бахаг (шәкил 5.2). Бу физики јахынлашма узун далғалар үчүн мүмкүндүр. Телин x нөгтәсинин t анындакы јердәјишмәси $u(x,t)$ үчүн далға тәнлији беләдир:

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = \upsilon_0^2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} . \tag{5.5}$$

Бурада υ_0 - телдә јајылан еластик далғаларын (вә ја сәс далғаларынын) јајылма сүр'әтидир. Мә'лум олдуғу кими, (5.5) тәнлијинин һәлли

$$u(x,t) = Ae^{i(qx-\omega t)} \tag{5.6}$$

шәклиндәдир. Бурада A- јајылан далғанын амплитуду, q- далға әдәди, ω- тезлијидир. (5.6) ифадәсини (5.5) тәнлијиндә јеринә гојсаг, тезлик илә далға әдәди арасында чох садә бир ифадә әлдә едилир:

$$\omega(q) = \upsilon_0 q . \tag{5.7}$$

Бу ифадәдә q-далға вектору олдуғундан, q вә ω сыфырла сонсузлуг арасында дәјишир:

$$0 \le q \le \infty; \qquad 0 \le \omega < \infty .$$

Инди (5.4) тәнлијинә гајыдаг. Бу тәнлијин һәлли дә

(5.6) ифадәси шәклиндә олсун, анчаг бирөлчүлү гәфәс һалында x дәјишәни јалныз мүәјјән гијмәтләр ала биләр, јә'ни $x = na$ олур. Беләликлә, (5.4) тәнлијинин һәллини

$$u_n(t) = Ae^{i(qan-\omega t)} \tag{5.8}$$

шәклиндә јаза биләрик. (5.8) ифадәсини (5.4) -дә јеринә јазсаг, тезлик үчүн бир тәнлик аларыг

$$-M\omega^2 = -\beta(2 - e^{-iaq} - e^{iaq}). \tag{5.9}$$

Бурадан:

$$\omega^2 = 2\frac{\beta}{M}(1-\cos aq) = 4\frac{\beta}{M}\sin^2\frac{aq}{2} \tag{5.9 a}$$

вә ја

$$\omega(q) = \omega_0\left|\sin\frac{aq}{2}\right| \tag{5.10}$$

дисперсија ифадәси алыныр. Бурада

$$\omega_0 = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} = \omega_{\max} \tag{5.11}$$

бирөлчүлү садә гәфәсин максимум рәгс тезлијидир. Кичик бир гијмәтләри, јә'ни $aq << 1$ вә ја узун далғалар $\lambda >> 2\pi a$ үчүн (5.10) ифадәсини сыраја ајырсаг,

$$\omega(q) \approx \omega_0\frac{aq}{2} = \sqrt{\frac{\beta}{M}}\,aq \tag{5.12}$$

аларыг.

Мә'лумдур ки, еластик телдә сәсин сүр'әти $v_0 = \sqrt{E/\rho}$ -дир, бурада E- телин Јунг модулу вә ρ телин хәтти сыхлығыдыр. Бирөлчүлү гәфәс һалында исә

$\rho = \dfrac{M}{a}$ -дыр вә Јунг модулу үчүн

$$E = \frac{\text{гүввә}}{\text{нисби јердәјишмә}} = \frac{|f_{n,n-1}|}{|u_n - u_{n-1}|}\, a = \beta a \qquad (5.13)$$

әлдә едирик. Беләликлә, сәс сүр'әти:

$$v_0 = \sqrt{\frac{\beta}{M}}\, a \qquad (5.14)$$

олур. (5.12) вә (5.14) бәрабәрликләрини бирләшдирсәк, еластик телин $\omega(q) = v_0 q$ ифадәсини әлдә едәрик. Беләликлә, узун далға јахынлашмасында бирөлчүлү гәфәсин еластик тел илә әвәзләнмәсини әсасландырмыш олдуг.

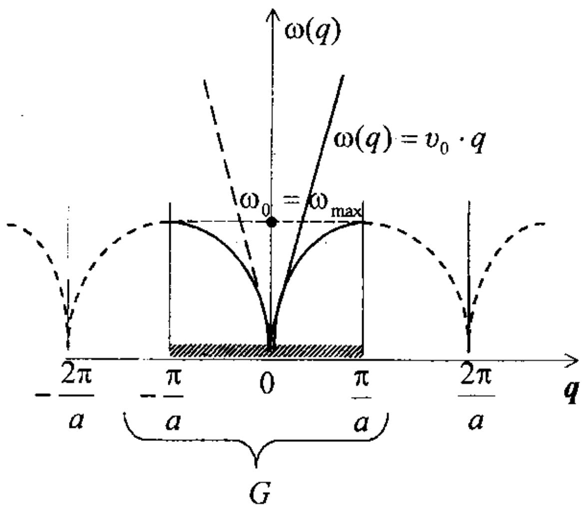
Еластик тел вә бирөлчүлү гәфәс үчүн алынан (5.7), (5.10) дисперсија ифадәләринә ујғун графикләр шәкил 5.3-дә көстәрилмишдир.

Көрүндүјү кими, тел үчүн тезлик $0 \le \omega \le \infty$ аралығында истәнилән гијмәт алдығы һалда бирөлчүлү гәфәс үчүн тезилк мәһдуд $0 \le \omega \le \omega_{\max}$ аралыгда дәјишир, јә'ни тезлик далға әдәдинин периодик функсијасыдыр.

Әкәр (5.8) далға функсијасында q јеринә $q' = q + b_g$ јазсаг, (бурада $b_g = \dfrac{2\pi}{a} g$ тәрс гәфәс вектору вә $g = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ кәмијјәти там әдәдләрдир),

$$u'_n(t) = Ae^{i(q'an - \omega t)} = Ae^{i(qan - \omega t)} \cdot e^{i2\pi g n} = u_n(t) \qquad (5.15)$$

алыныр, чүнки $\exp(i2\pi g n) = \exp(2\pi i \cdot \text{там әдәд}) = 1$-дир.



шәкил 5.3

Бурадан белә нәтичә чыхыр: q вә $q + \left(\frac{2\pi}{a}\right)g$ далға әдәдләри еквивалентдир вә бунлара ујғун кәлән јердәјишмәләр ејнидир. Башга сөзлә десәк, q далға әдәдинин бир-бириндән фәргли гијмәтләрини тә'јин етмәк үчүн $\frac{2\pi}{a}$ интервалына бахмаг кифајәтдир. Бу интервалы

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq +\frac{\pi}{a} \qquad (5.16)$$

олараг сечмәк дүзкүндүр. Далға әдәдинин асылы олмајараг дәјишдији бу интервала *биринчи Бриллүен зонасы* дејилир. (5.10) бәрабәрлији вә шәкил 5.3.-дән көрүндүјү кими, $\omega(q)$ периодик функсијадыр, јә'ни $\omega(q) = \omega\left(q + \frac{2\pi}{a}\right)$

Инди q далға әдәдинин (5.16) интервалында (биринчи

16

Бриллүен зонасында) нечә гијмәт алдығына бахаг. Бунун үчүн сәрһәд шәрти олараг Борн-Карман сәрһәд шәртиндән истифадә едәк. Фәрз едәк ки, бахдығымыз бирөлчүлү макроскопик гәфәс чох бөјүк G сајда атомдан ибарәтдир. Борн-Карман сәрһәд шәртинә көрә:

$$u_{n+G}(t) = u_n(t) \tag{5.17}$$

олмалыдыр. Әкәр (5.8) далға функсијасына (5.17) сәрһәд шәртини нәзәрә алсаг, бу шәртини өдәнмәси үчүн $\exp(\pm i\,q\,a\,G) = 1$, јә'ни $qaG = 2\pi g$ олмалыдыр, g- там әдәдләрдир. Бурадан

$$q = \frac{2\pi}{aG} g \qquad g = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{5.18}$$

әлдә едилир, бурада G- чох бөјүк там әдәдләрдир (гәфәсдәки атомларын сајы). Далға әдәдинин (5.18)-дәки гијмәтини (5.16) бәрабәрлијиндә јеринә гојсаг,

$$-\frac{G}{2} \le g \le +\frac{G}{2} \tag{5.19}$$

алынныр. Буна көрә $g = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm G/2$ гијмәтләрини алыр. g-нин һәр гијмәтинә бир q ујғун олдуғуна вә һәр q гијмәтинә бир $\omega(q)$ тезлији ујғун кәлдијинә көрә ((5.10) бәрабәрлијинә бах.), далға әдәди $-\pi/a \le q \le \pi/a$ интервалында вә тезлик $0 \le \omega \le \omega_{max}$ интервалында G әдәди сајда дискрет гијмәтләр алыр.

G әдәди ејни заманда бирөлчүлү гәфәсин сәрбәстлик дәрәчәләринин сајы олдуғундан бирөлчүлү садә гәфәсдә мүмкүн олан тезликләрин сајы сонлудур вә онун сәрбәстлик дәрәчәләрин сајына бәрабәрдир.

Бирөлчүлү кристалда атомларын сајы (G) артдыгча,

q -нүн ики гоншу гијмәти арасындакы фәрг $\Delta q = 2\pi / aG$ азалыр. Бунунла әлагәдар олараг, бирөлчүлү гәфәс илә кәсилмәз телдә јајылан далғалар арасындакы ики фәрги көстәрәк:

1. Телдә далға әдәди $0 \le q \le \infty$ интервалында кәсилмәз олараг дәјишдијиндән, телдә јајылан далғанын далға узунлуғу $\infty > \lambda \ge 0$ интервалында дәјишир, јә'ни һәр гијмәти ала билир. Дикәр тәрәфдән, кристал гәфәсдә $q_{max} = \pi / a$ олдуғундан $\lambda_{min} = 2\pi / q_{max} = 2a$ олур, јә'ни гәфәсдә узунлуғу $2a$-дан кичик олан далға јајыла билмәз.

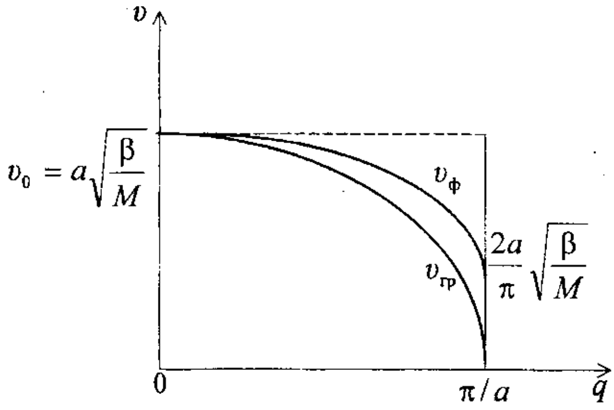
2. (5.7) бәрабәрлијиндән көрүндүјү кими, телдә јаранан далғаларын фаза сүр'әти $\upsilon_ф = \omega / q = \upsilon_0$ вә груп сүр'әти $\upsilon_{гр} = d\omega / dq = \upsilon_0$ ејнидир. Бирөлчүлү гәфәсләрдә јајылан далғаларда исә $\upsilon_ф$ илә $\upsilon_{гр}$ јалныз $q \to 0$ лимит һалында ејни олур.

Бирөлчүлү гәфәсдә јајылан далғаларын фаза вә груп сүр'әтләри үчүн (5.10) вә (5.14) бәрабәрликләриндән

$$\upsilon_ф = \frac{\omega(q)}{q} = a\sqrt{\frac{\beta}{M}} \left| \frac{\sin\frac{aq}{2}}{\frac{aq}{2}} \right| = \upsilon_0 \left| \frac{\sin\frac{aq}{2}}{\frac{aq}{2}} \right| \tag{5.20}$$

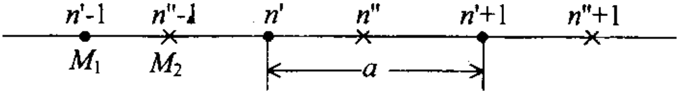
$$\upsilon_{гр} = \frac{d\omega(q)}{dq} = \upsilon_0 \left| \cos\frac{aq}{2} \right| \tag{5.21}$$

ифадәләри алыныр. Фаза вә груп сүр'әтләринин q илә ишарә едилмәси шәкил 5.4-дә көстәрилмишдир. $q \to 0$ лимитиндә, $\upsilon_ф = \upsilon_{гр} = \upsilon_0$ олдуғу ајдындыр.



шәкил 5.4

Бирөлчүлү мүрәккәб гәфәс. Јухарыда тә'јин едилдији кими бир чох маддәләр Браве гәфәсләриндә кристаллашмырлар: мисал олараг NaCl, CsCl, Ge, Si вә с. кими кристал гәфәсләрин базис өзәјиндә ики атом вә ја ион вардыр. Бурада бу кими кристалларын бирөлчүлү һалына бахаг. Фәрз едәк ки, бирөлчүлү гәфәс күтләләри M_1 вә M_2 олан атомлар вә ја ионлардан ибарәтдир (шәкил 5.5).



шәкил 5.5

Бу һалда базис өзәкләринин "һәчми" $\Omega = a$ олур вә бу "һәчмдә" ики атом вардыр. Бирөлчүлү садә гәфәс һалында олдуғу кими, атомлар арасындакы гүввәләрин квазиеластик олдуғу фәрзијјәсини гәбул едәк вә јалныз ән јахын гоншулар арасындакы гаршылыглы тә'сири нәзәрә алаг. Әкәр n' атому илә n'' атому арасындакы еластиклик сабити β_1, n' илә n''-1 вә n'' илә n'+1 атомлары арасындакы еластиклик сабити β_2 илә ишарә едиләрсә, һәрәкәт тәнликләри ашағыдакы кими олар:

$$
\begin{aligned}
M_1\frac{d^2u'_n}{dt^2} &= -\beta_1(u'_n - u''_n) - \beta_2(u'_n - u''_{n-1}) \\
M_2\frac{d^2u''_n}{dt^2} &= -\beta_1(u''_n - u'_n) - \beta_2(u''_n - u'_{n+1})
\end{aligned}
\qquad (5.22)
$$

Бурада $u'_n(t)$ вә $u''_n(t)$ функсијалары n-чи елементар өзәкдәки n' вә n'' атомларынын јердәјишмәләридир. Бу функсијалары (5.8) бәрабәрлијинә ујғун олараг:

$$
u'_n(t) = A_1 e^{\,i(qan-\omega t)}, \qquad u''_n(t) = A_2 e^{\,i(qan-\omega t)} \qquad (5.23)
$$

шәклиндә јаза биләрик. Бурада A_1 вә A_2- рәгс амплитудларыдыр вә $A_1 \neq A_2$.

(5.23) функсијаларыны (5.22) тәнликләр системиндә јеринә јазыб бу тәнликләрин һәр ики тәрәфини $\exp i[qan - \omega t]$- ә бөлсәк, A_1 вә A_2 амплитудлары үчүн

$$
\begin{aligned}
&[M_1\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]A_1 + (\beta_1 + \beta_2 e^{-iaq})A_2 = 0 \\
&(\beta_1 + \beta_2 e^{-iaq})A_1 + [M_2\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]A_2 = 0
\end{aligned}
\qquad (5.24)
$$

тәнликләри әлдә едилир. Бу бирчинс тәнлик системинин сыфырдан фәргли ($A_1 \neq 0$ вә $A_2 \neq 0$) һәлли олмасы үчүн

$$\begin{vmatrix} M_1\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) & \beta_1 + \beta_2 \exp(-iaq) \\ \beta_1 + \beta_2 \exp(iaq) & M_2\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) \end{vmatrix} = 0 \qquad (5.25)$$

характеристик тәнлик өдәнмәлидир, јә'ни әмсаллардан дүзәлән детерминант сыфыр олмалыдыр. (5.25) бәрабәрлији ω^2- на көрә квадратикдир вә мүмкүн олан бүтүн тезликләри тә'јин едир. $e^{iaq} + e^{-iaq} = 2\cos(aq)$ вә $1 - \cos(aq) = = 2\sin^2(aq/2)$ олдуғуну нәзәрә алсаг, (5.25) тәнлији

$$\omega^4 - \omega_0^2\omega^2 + 4\left(\frac{\beta_1\beta_2}{M_1M_2}\right)\sin^2\frac{aq}{2} = 0 \qquad (5.26)$$

шәклинә дүшүр, бурада

$$\omega_0^2 = \frac{(M_1+M_2)(\beta_1+\beta_2)}{M_1M_2}. \qquad (5.27)$$

(5.26) тәнлијиндән тезлик үчүн ики мүхтәлиф көк алыныр.

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \frac{1}{2}\omega_0^2\left[1-\sqrt{1-\gamma_0^2\sin^2\frac{aq}{2}}\right] \\ \omega_2^2 &= \frac{1}{2}\omega_0^2\left[1+\sqrt{1-\gamma_0^2\sin^2\frac{aq}{2}}\right]. \end{aligned} \qquad (5.28)$$

Бурада γ_0- гәфәсдәки атомларын күтләләриндән вә еластик сабитләрдән асылы бир параметрдир вә өн бөјүк гијмәти ваһиддир:

$$\gamma_0^2 = 16\frac{\beta_1\beta_2}{(\beta_1+\beta_2)^2}\cdot\frac{M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}. \qquad (5.29)$$

$\beta_1=\beta_2$ вә $M_1=M_2$ үчүн $\gamma_0^2=1$ вә ω^2 ән бөјүк гијмәтини алыр: бүтүн әкс һалларда $\gamma_0^2<1$ вә јахуд $\gamma_0^2\sin^2\frac{aq}{2}<1$ олур. Беләликлә, (5.28) бәрабәрликләри илә ифадә олунан ω_1 вә ω_2 тезликләри һәгигидир.

Инди (5.28) тезликләрини арашдыраг. Әкәр (5.23) јердәјишмә ифадәләриндә q јеринә $q'=q+(2\pi/a)g$ јазсаг ($g=0,\pm1,\pm2,...$) u_n' вә u'' функсијалары дәјишмәз, јә'ни q вә $q'=q+(2\pi/a)g$ далға әдәдләри ејнигијмәтлидир. Бундан башга,(5.28) системиндән көрүндүјү кими, $\omega_1(q)$ вә $\omega_2(q)$ периоду $2\pi/a$ олан периодик функсијалардыр:

$$\omega_j(q)=\omega_j(q+b_g), \qquad j=1,2. \qquad (5.30)$$

Бурада $b_g=\frac{2\pi}{a}g$ - тәрс гәфәс векторудур. Беләликлә, q үчүн асылы олмајан гијмәтләр аралығы олараг:

$$-\frac{\pi}{a}\le q\le+\frac{\pi}{a} \qquad (5.30\ а)$$

сечилә биләр вә $\omega_j(q)$ асылылыгларыны (5.30 а) биринчи Бриллүен зонасы дахилиндә тәһлил етмәк кифајәтдир. Даһа сонра мүәјјән сәбәбдән даирәви ω_1 тезлији акустик, ω_2 тезлији исә оптик тезлик адланыр вә $\omega_1(q)\equiv\omega_{ак}(q)$, $\omega_2\equiv\omega_{оп}(q)$ кими көстәрилир.

Тезликләрин биринчи Бриллүен зонасынын мәркәзиндә вә сәрһәдләриндә алдығы гијмәтләри (5.28)-дән тапа биләрик:

$$\omega_{ak}(0)=0; \qquad \omega_{ak}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right)=\frac{\omega_0}{\sqrt{2}}\left(1-\sqrt{1-\gamma_0^2}\right)^{1/2}$$
$$\omega_{on}(0)=\omega_0; \qquad \omega_{on}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right)=\frac{\omega_0}{\sqrt{2}}\left(1+\sqrt{1-\gamma_0^2}\right)^{1/2} \qquad (5.31)$$

Бурадан көрүндүјү кими, тезликләрин лимит гијмәтләри арасында

$$\omega_{ak}(0)<\omega_{ak}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right)<\omega_{on}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right)<\omega_{on}(0) \qquad (5.32)$$

бәрабәрсизликләри вардыр. Хүсуси һалда $\beta_1=\beta_2=\beta$ оларса,

$$\omega_0=\left[2\beta\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)\right]^{1/2}, \qquad \gamma_0=\frac{2}{M_1+M_2}(M_1M_2)^{1/2}$$

олур. Әкәр $M_1 \gg M_2$ оларса, акустик вә оптик тезликләринин Бриллүен зонасы сәрһәдләриндә гијмәтләри

$$\omega_{ak}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right)=\left(\frac{2\beta}{M_1}\right)^{1/2}; \qquad \omega_{on}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right)=\left(\frac{2\beta}{M_2}\right)^{1/2} \qquad (5.31\ a)$$

олар.

Узун далғалар ($\lambda \gg a$), јә'ни кичик далға әдәдләри ($aq \ll 1$) үчүн $\sin(aq/2)\approx aq/2$ олар вә (5.28) бәрабәрлијиндән:

$$\omega_{\text{ак}}(q \to 0) = \frac{1}{4}\omega_0\gamma_0\, aq \sim q;$$
$$\omega_{\text{оп}}(q \to 0) = \omega_0\left(1 - \frac{\gamma_0^2 a^2}{32} q^2\right) \qquad (5.33)$$

алынар. Бундан башга, (5.28) бәрабәрлијиндән көрүндүјү кими, $\omega_{\text{ак}}(q)$ вә $\omega_{\text{оп}}(q)$ асылылыглары $q = 0$ нөгтәсинә көрә симметрикдир, јә'ни

$$\omega_{\text{ак}}(q) = \omega_{\text{ак}}(-q); \qquad \omega_{\text{оп}}(q) = \omega_{\text{оп}}(-q)$$

вә онларын $q = \pm\pi/a$ нөгтәләриндәки төрәмәләри ($\gamma_0 < 1$ үчүн) сыфырдыр:

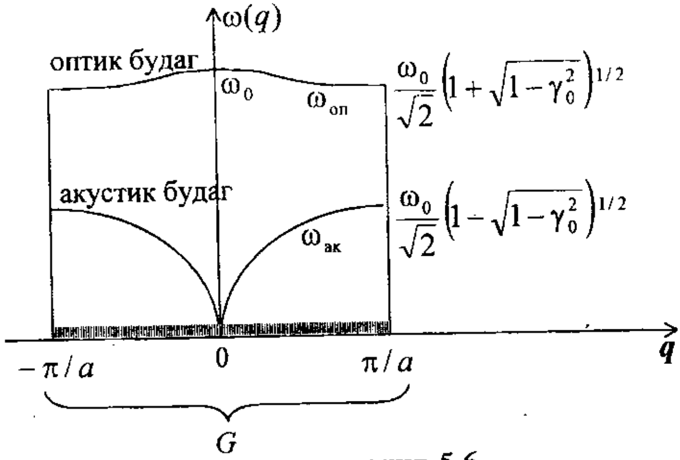
$$\left(\frac{d\omega_{\text{ак}}}{dq}\right)_{q=\pm\pi/a} = 0; \qquad \left(\frac{d\omega_{\text{оп}}}{dq}\right)_{q=\pm\pi/a} = 0 \qquad (5.35)$$

Беләликлә, рәгс тезликләринин (5.30)-(5.35) хассәләрини нәзәрә алараг $\omega_{\text{ак}}(q)$ вә $\omega_{\text{оп}}(q)$ асылылыгларыны схематик олараг чәкә биләрик (шәкил 5.6).

Бу шәкилдәки $\omega_{\text{ак}}(q)$ вә $\omega_{\text{оп}}(q)$ әјриләри ујғун олараг *акустик будаг* вә *оптик будаг* адланыр. 18

Биринчи Бриллүен зонасында $-\pi/a \le q \le \pi/a$ аралығында q далға әдәди нечә гијмәт алыр. Бу суала чаваб вермәк үчүн Борн-Карманын (5.17) дөври ифадәсиндән истифадә едәк. Бу шәрти (5.23) јердәјишмә ифадәләриндә истифадә етсәк, q далға әдәдинин (5.18) илә верилән гијмәтләри алдығы көрүнүр: $-\pi/a \le q \le \pi/a$ аралығында далға әдәдинин алдығы гијмәтләрин сајы кристалларын базис өзәкләринин сајына (G) бәрабәрдир (шәкил 5.6). Далға әдәдинин һәр бир гијмәтинә ики тезлик ујғун қәлдијиндән, мүмкүн олан тезликләрин үмуми сајы гәфәсин сәрбәстлик дәрәчәләринин сајына ($N = 2G$) бәрабәрдир.

Бирөлчүлү мүрәккәб гәфәсдә мүмкүн олан тезликләрин үмуми сајы кристалын сәрбәстлик дәрәчәләринин сајына бәрабәрдир. (5.36)



шәкил 5.6

Инди акустик вә оптик тезликли рәгсләр заманы базис өзәкдәки M_1 вә M_2 атомларынын нечә һәрәкәт етдикләрини арашдыраг. (5.23) вә (5.24) бәрабәрликләриндән атомларын јердәјишдирмәләринин нисбәтләри:

$$\frac{u_n'}{u_n''} = \frac{A_1}{A_2} = \frac{\beta_1 + \beta_2 \exp(-iaq)}{(\beta_1 + \beta_2) - M_1\omega^2} \qquad (5.37)$$

кимидир. Бу нисбәтә узун далғалар $\lambda \gg a$, $(aq \ll 1)$ лимитиндә бахаг. Бу ифадәдә $\exp(-iaq)=1$ олдуғуну вә тезликләрин (5.27) вә (5.31) лимит гијмәтләрини нәзәрә алсаг,

$$\left(\frac{u_n'}{u_n''}\right)^{\text{ak}}_{q\to 0}=+1;\qquad \left(\frac{u_n'}{u_n''}\right)^{\text{оп}}_{q\to 0}=-\frac{M_2}{M_1}\tag{5.38}$$

олар.

Ән кичик далға узунлуғу $\lambda=2a$ (јә'ни $q=\pi/a$) һалында $\exp(-iaq)=\exp(-i\pi)=-1$ олдуғуну вә (5.27), (5.31) ифадәләрини нәзәрә алсаг, (5.37) бәрабәрлији ашағыдакы формаја дүшүр:

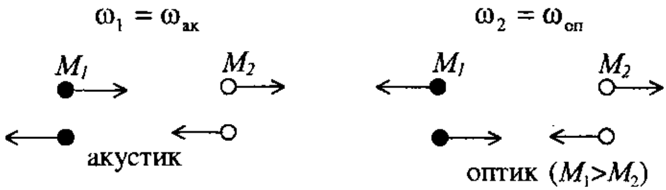
$$\left(\frac{u_n'}{u_n''}\right)_{q=\pm\pi/a}=\frac{(\beta_1-\beta_2)/(\beta_1+\beta_2)}{1-\dfrac{(M_1+M_2)}{2M_2}\left[1\mp\left(1-\dfrac{16\beta_1\beta_2}{(\beta_1+\beta_2)^2}\dfrac{M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}\right)^{1/2}\right]}\tag{5.39}$$

Бу ифадәдә көкүн гаршысындакы мәнфи ишарәси акустик будаға, мүсбәт ишарәси исә оптик будаға ујғундур. Хүсуси һалда $\beta_1>>\beta_2$ вә $M_1=M_2$ оларса, (5.39) бәрабәрлијиндән:

$$\left(\frac{u_n'}{u_n''}\right)^{\text{ak}}_{q=\pm\pi/a}=+1\quad\text{вә}\quad\left(\frac{u_n'}{u_n''}\right)^{\text{оп}}_{q=\pm\pi/a}=-1\tag{5.40}$$

әлдә едилир.

(5.38) вә (5.40) шәртләриндән көрүнүр ки, акустик рәгсләр заманы базис өзәкдәки атомлар ејни фазада, оптик рәгсләрдә исә бу атомлар әкс фазада һәрәкәт едирләр (шәкил 5.7).



шәкил 5.7

Оптик рәгсләрдә $u_n' M_1 + u_n'' M_2 = 0$ бәрабәрлији сахланыр, јә'ни рәгс заманы өзәјан күтлә мәркәзи сабит галыр вә атомлар бир-биринә көрә һәрәкәт едирләр. Акустик рәгсләрдә исә елементар өзәјин күтлә мәркәзи рәгс едир (шәкил 5.7).

Әкәр гәфәси тәшкил едән зәррәчикләр ионлардырса ($NaCl$-да олдуғу кими), ω_2 тезликли оптик рәгсләр заманы ионлар арасындакы мәсафә (R) периодик олараг дәјишир вә, беләликлә, өзәјин електрик дипол моменти ($p = eR$) дә бу тезликлә дәјишир. Бунун нәтиҹәсиндә кристалда електромагнит дalғалары јајылыр. Буна көрә дә, ω_2 тезлији вә она ујғун олан $\omega_2(q) = \omega_{оп}(q)$ дисперсија мүнасибәти *оптик будаг* адланыр.

Ион кристалларда $\omega_{оп}$ тезликли рәгсләрә ујғун тезликли електромагнит дalғалары гаршы гоја биләрик. Буну көстәрмәк үчүн фәрз едәк ки, електрик јүкләри $\pm e$ олан ионлардан тәшкил едилмиш ион кристала дәјишән $E = E_0 e^{i\omega t}$ електрик саһәси тә'сир едир. Онда кристал гәфәсдәки ионлара $\pm eE$ гәдәр гүввә тә'сир едир. Бу гүввәни нәзәрә алсаг вә $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ гәбул етсәк, ионларын (5.22) һәрәкәт тәнликләри узун дalғалар ($q \to 0$) лимитиндә јазылырса, A_1 вә A_2 рәгс амплитудлары үчүн:

$$\begin{aligned} M_1\omega^2 A_1 &= 2\beta(A_1 - A_2) - eE_0 \\ M_2\omega^2 A_2 &= 2\beta(A_2 - A_1) + eE_0 \end{aligned} \qquad (5.40\ а)$$

тәнлик системи әлдә едилир. Узун далға узунлуглу оптик далғалар ($q \to 0$) һалы үчүн амплитудларын нисбәти $A_1 / A_2 = -M_1 / M_2$ олдуғундан,(5.40 а) тәнлик системиндән:

$$A_1 = -\frac{(e / M_1)}{\omega^2 - \omega_0^2} E_0; \qquad A_2 = -\frac{(e / M_2)}{\omega^2 - \omega_0^2} E_0 \qquad (5.40\ б)$$

алыныр. Бурада $\omega_0 = [2\beta(1/M_1 + 1/M_2)]^{1/2}$ - оптик рәгсләрин узун далға боју лимитиндәки мәхсуси тезлијидир (5.27). Ампитудларын (5.40 б) ифадәсиндән ачыгча көрүндүјү кими харичи електрик интенсивлијинин тезлији ион кристалын мәхсуси ω_0 тезлијинә јахын олдуғу заман ($\omega \approx \omega_0$), рәгс амплитудлары бирдән артар, јә'ни електромагнит саһәсиндән резонанс олараг енержи дахил олур вә кристалда оптик рәгсләр јараныр (инфрагырмызы удма). Беләликлә, ω_2 тезликләринә һансы сәбәбдән оптик тезликләр дејилдији ајдын олур. Кристалын ω_0 мәхсуси тезлијини гијмәтләндирәк. Сәс далғаларынын јајылма сүр'әти v_0 илә еластиклик сабити β арасында (5.14) ифадәси вардыр. Бурадан алынан $\beta = Mv_0^2 / a^2$ гијмәтини $\omega_0 = [2\beta(1/M_1 + 1/M_2)]^{1/2}$ ифадәсиндә јеринә јазсаг вә $M_1 \approx M_2$ гәбул етсәк,

19

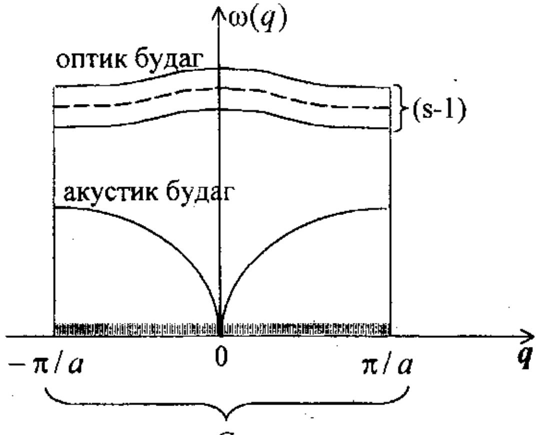
$$\omega_0 \approx 2\frac{v_0}{a} \approx \frac{5 \cdot 10^5}{10^{-8}} сан^{-1} \approx 10^{14} сан^{-1}$$

аларыг. $\omega_0 = 10^{14} сан^{-1}$ тезлији електромагнит спектрин инфрагырмызы зонасына дүшдүјүндән ион кристаллар инфрагырмызы електромагнит далғалары удур вә нәтичәдә кристалда оптик рәгсләр јараныр.

Инди тутаг ки, бирөлчүлү гәфәсин "һәчми" $\Omega = a$ олан базис өзәјиндә s сајда атом вар. Белә бир гәфәс үчүн һәрәкәт тәнликләринин сајы ((5.22)-дән фәргли олараг) s олачаг вә буна ујғун олараг тезликләр үчүн (5.26) характерик тәнлији јеринә ω^2- на көрә s- чи дәрәчәдән бир тәнлик әлдә едәрик. Принсипчә бу тәнликдән s сајда

$$\omega_1(q), \omega_2(q), \omega_3(q), ..., \omega_s(q) \tag{5.41}$$

тезликләри алыныр. Бу тезликләрдән бири базис өзәјинин күтлә мәркәзинин рәгсинә (акустик будаг), јердә галан $(s-1)$ сајда тезлик исә атомларын бир-биринә көрә нисби һәрәкәтләринә гаршы гојулур (оптик рәгсләр) (шәкил 5.8).



шәкил 5.8

Бу һалда $-\pi / a \leq q \leq \pi / a$ аралығында, далға әдәдинин алдығы гијмәтләрин сајы гәфәсдәки базис өзәкләрин (G) сајына бәрабәр олдуғундан вә q-нүн һәр бир гијмәтинә s сајда тезлик гојулдуғундан тезликләрин үмуми сајы гәфәсин сәрбәстлик дәрәчәсинин sG сајына бәрабәр олур. Јә'ни, бу һал үчүн дә (5.36) нәтичәси сахланыр.

Үчөлчүлү гәфәсләр. Базис гәфәсин һәчми $\Omega_0 = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)$ олан үчөлчүлү бир гәфәсин һәр өзәјиндә s сајда атом олсун. Кристал дахилиндә тәрәфләри $G\boldsymbol{a}_1$, $G\boldsymbol{a}_2, G\boldsymbol{a}_3$ векторлары илә тә'јин едилән паралелепипед шәклиндә бир област сечәк. Бурада G - чох бөјүк там әдәддир. Бу макроскопик областын һәчми $V = G^3\Omega_0 = = N\Omega_0$ вә $N = G^3$ көтүрүлмүш областын базис өзәкләрин сајыдыр. Беләликлә, кристалын бахдығымыз областдакы атомларын сајы $sN = sG^3$, гәфәсин сәрбәстлик дәрәчәләринин сајы исә $3sN$ -дир.

Кристал гәфәсдә һәр бир атомун координаты

$$\boldsymbol{r}_n^k = \boldsymbol{a}_n + \boldsymbol{r}^k \tag{5.42}$$

радиус вектору илә тә'јин едилир. Бурада $\boldsymbol{a}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$ - n -чи базис өзәјинин координатыны тә'јин едән гәфәс вектору, $\boldsymbol{r}^k$ базис өзәк дахилиндәки k нөмрәли атомун координатыны көстәрир. Буна көрә $\boldsymbol{r}_n^k$ вектору n- чи өзәкдәки k нөмрәли атомун координатыны тә'јин едән јер векторудур.

Рәгс заманы атомларын сүкунәт координатлары дәјишир. n -чи гәфәсдәки k нөмрәли атомун јердәјишмә векторуну

$$u_{n\alpha}^{k}(t);\quad n=1,2,3,...,N;\quad k=1,2,3,...,s;\quad \alpha=x,y,z. \tag{5.43}$$

илә көстәрәк. Рәгс едән гәфәсин U потенсиал енержиси $3sN$ сајда $u_{n\alpha}^{k}$ јердәјишмәләрин функсијасыдыр:

$$U(u_{n\alpha}^{k})=U(u_{1x}^{1},u_{1y}^{1},u_{1z}^{1},...,u_{Nx}^{S},u_{Ny}^{S},u_{Nz}^{S}). \tag{5.44}$$

Сүкунәтдә $(u_{n\alpha}^{k}=0), U=-U_0$ минимумдур. Буна көрә

$$\left(\frac{\partial U}{\partial u_{n\alpha}^{k}}\right)_0=0 \tag{5.45}$$

олмалыдыр.

Кичик јердәјишмәләр үчүн $U(u_{n\alpha}^{k})$ потенсиал енержи функсијасынын јердәјишмәләрин үстләринә көрә сыраја ајырыб, квадратик һәдлә кифајәтләнсәк (һармоник јахынлашмада),

$$U=-U_0+\frac{1}{2}\sum_{nn'kk'\alpha\beta}U_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}k & k'\\ n & n'\end{pmatrix}u_{n\alpha}^{k}\,u_{n'\beta}^{k'} \tag{5.46}$$

аларыг. Бурада

$$U_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}kk'\\ nn'\end{pmatrix}\equiv\left(\frac{\partial^2 U}{\partial u_{n\alpha}^{k}\partial u_{n'\beta}^{k'}}\right)_0 \tag{5.47}$$

сабит кәмијјәтдир. Потенсиал енержинин (5.46) ифадәсиндән r_n^k атомуна тә'сир едән гүввәнин α пројексијасы үчүн

$$F_{n\alpha}^{k} = -\frac{\partial U}{\partial u_{n\alpha}^{k}} = -\sum_{n'k'\beta} U_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} kk' \\ nn' \end{pmatrix} u_{n'\beta}^{k'} \tag{5.48}$$

алыныр. Беләликлә, һармоник јахынлашма чеврәсиндә (5.48) асылылығындан истифадә едәрәк, күтләси M_k олан вә n -чи өзәкдә јерләшмиш k нөмрәли атомун јердәјишмәсинин α пројексијасы үчүн классик һәрәкәт тәнлијини јаза биләрик:

$$M_k \frac{\partial^2 u_{n\alpha}^{k}}{\partial t^2} = -\sum_{n'k'\beta} U_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} kk' \\ nn' \end{pmatrix} u_{n'\beta}^{k'} \ . \tag{5.49}$$

(5.49) тәнликләр системи $3sN$ сајда $u_{n\alpha}^{k}(t)$ јердәјишмәләри үчүн јазылмыш дифференсиал тәнликләрдән ибарәтдир. Бу системин һәлли, (5.23) ифадәсинә охшар олараг

$$u_{n\alpha}^{k}(t) = A_{\alpha}^{k}(q)\, e^{\,i(qa_n - \omega t)} \tag{5.50}$$

шәклиндә ахтарылыр. Бурада A_{α}^{k} әмсалы $k = 1,2,3,..,s$ атомларынын һәр бири үчүн фәргли олан амплитудларыдыр, $\boldsymbol{q}$ - далға вектору, $\boldsymbol{a}_n$ - гәфәс вектору, ω - тезликдир. (5.50) ифадәсини (5.49) тәнликләр системиндә јазыб бәрабәрликләрин һәр ики тәрәфини $e^{i(qa_n - \omega t)}$ вуруғуна бөлсәк, A_{α}^{k} амплитудлары үчүн ашағыдакы бирчинс тәнликләр системи

$$M_k \omega^2(\boldsymbol{q}) A_{\alpha}^{k}(\boldsymbol{q}) = \sum_{k'\beta} D_{\alpha\beta}^{kk'}(\boldsymbol{q}) A_{\beta}^{k'}(\boldsymbol{q}) \tag{5.51}$$

аларыг. Бурада

$$D_{\alpha\beta}^{kk'}(\boldsymbol{q}) = \sum_{n'} U_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} k & k' \\ n & n' \end{pmatrix} e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{a}_{n'}-\boldsymbol{a}_n)} \qquad (5.52)$$

кристалын динамик матрисидир. (5.51) тәнликләр системи

$$\sum_{k'\beta}\left[D_{\alpha\beta}^{kk'}(\boldsymbol{q}) - M_k\omega^2(\boldsymbol{q})\delta_{kk'}\delta_{\alpha\beta}\right]A_\beta^{k'}(\boldsymbol{q}) = 0 \qquad (5.53)$$

шәклиндә јазыла биләр. Бурада $\delta_{kk'}$ вә $\delta_{\alpha\beta}$ Кронекер символларыдыр вә индексләри ејни олдугда 1, индексләри фәргли олдугда 0 (сыфыр) гијмәтини алыр. Амплитудалар үчүн јазылан (5.53) бирчинс тәнлик системинин сыфырдан фәргли олмасы үчүн әмсаллардан тәшкил олунмуш характеристик тәнлик өдәнмәлидир. Бу характеристик тәнлик детерминант шәкилдә јазыла биләр:

$$\begin{vmatrix} D_{xx}^{11} - M_1\omega^2 & D_{xy}^{11} & D_{xz}^{11} & D_{xx}^{12} \ldots D_{xz}^{1s} \\ D_{yx}^{11} & D_{yy}^{11} - M_1\omega^2 & D_{yz}^{11} & D_{xx}^{12} \ldots D_{yz}^{1s} \\ \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots \\ D_{zx}^{s1} & D_{zy}^{s1} & D_{zz}^{s1} & D_{zx}^{s2} \ldots D_{zz}^{ss} - M_s\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

(5.54)

Бу исә ω^2 -на көрә $3s$ дәрәчәли бир тәнликдир. Принсипчә, (5.54) тәнлијинин $3s$ сајда һәлли олмалыдыр:

$$\omega_1(\boldsymbol{q}), \omega_2(\boldsymbol{q}), \omega_3(\boldsymbol{q}), \ldots, \omega_{3s}(\boldsymbol{q}). \qquad (5.55)$$

$\omega_j(\boldsymbol{q}),\ j = 1,2,\ldots,3s$ функсијаларынын һәр бири $\boldsymbol{q}$ истигамәтиндә бир рәгс будағыны тәсвир едир. Бу будаглар үст-үстә дүшә билир вә ја кәсишә биләрләр. $\omega_j(\boldsymbol{q})$ тезликләрин, јә'ни дисперсија мүнасибәтләринин ачыг шәклини тә'јин етмәк үчүн $D_{\alpha\beta}^{kk'}(\boldsymbol{q})$ динамик матрисинин ачыг шәклини билмәк вә (5.54) тәнлијини һәлл етмәк лазымдыр. Үмуми шәкилдә бу мәсәләни һәлл етмәк чәтиндир. Бурада биз $\omega_j(\boldsymbol{q})$ дисперсија мүнасибәтләринин јалныз үмуми хассәләрини араштдыраг. (5.47)-дән

$$U_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} k & k' \\ n & n' \end{pmatrix} = U_{\beta\alpha}\begin{pmatrix} k' & k \\ n' & n \end{pmatrix} \tag{5.56}$$

олдуғу ајдын көрүнүр. Буну нәзәрә алсаг, (5.52) бәрабәрлијиндән динамик матрисин бир ермит матрис олдуғу ајдын олур:

$$\left(D_{\alpha\beta}^{kk'}(\boldsymbol{q})\right) = \left(D_{\beta\alpha}^{k'k}(\boldsymbol{q})\right)^* \tag{5.57}$$

(5.52) бәрабәрлијиндән ејни заманда чыхыр ки,

$$\left(D_{\alpha\beta}^{kk'}(-\boldsymbol{q})\right) = \left(D_{\alpha\beta}^{kk'}(\boldsymbol{q})\right)^* . \tag{5.58}$$

Јә'ни динамик матрис симметрикдир. Динамик матрисин ермит олдуғуну вә (5.58) хассәсини нәзәрә алсаг, (5.54) тәнлијинин көкләринин

$$\omega_j(-\boldsymbol{q}) = \omega_j(\boldsymbol{q}); \qquad j = 1,2,3,..,3s; \tag{5.59}$$

хассәсинә малик олдуғу көрүнүр. Буна көрә, $\boldsymbol{q}$ фәзасында изотезлик сәтһи $\omega_j(\boldsymbol{q}) = const$ инверсија мәркәзинә маликдир.

Рәгс тезлијинин дисперсија асылылыгларынын икинчи әсас хассәсини ајдынлашдырмаг үчүн (5.50) јердәјишмәсиндәки $\boldsymbol{q}$ далға векторуну

$$\boldsymbol{q} \Longrightarrow \boldsymbol{q}' = \boldsymbol{q} + \boldsymbol{b}_g \tag{5.60}$$

шәклиндә тә'јин едилән $\boldsymbol{q}'$ вектору илә әвәз едәк. Бурада $\boldsymbol{b}_g = g_1\boldsymbol{b}_1 + g_2\boldsymbol{b}_2 + g_3\boldsymbol{b}_3$-ихтијари тәрс гәфәс векторудур. Бу һалда

$$\boldsymbol{q}'\boldsymbol{a}_n = (\boldsymbol{q} + \boldsymbol{b}_g)\boldsymbol{a}_n = \boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_n + 2\pi(n_1g_1 + n_2g_2 + n_3g_3) = \boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_n + 2\pi k$$

(k -һәр һансы бир там әдәддир) вә $\exp(i2\pi k) = 1$ олдуғуну нәзәрә алсаг, (5.50) јердәјишмәнин дәјишмәдији көрүнүр:

$$u^k_{n\alpha}(\boldsymbol{q}) = u^k_{n\alpha}(\boldsymbol{q} + \boldsymbol{b}_g). \tag{5.61}$$

Јә'ни $\boldsymbol{q}$ фәзасында $\boldsymbol{q}$ вә $\boldsymbol{q}+\boldsymbol{b}_g$ нөгтәләри еквивалентдирләр. Буна көрә дә $\boldsymbol{q}$ далға векторундан асылы олан бүтүн физики кәмијјәтләр, хүсуси һалда тезликләр $\boldsymbol{q}$ вә $\boldsymbol{q}+\boldsymbol{b}_g$ нөгтәләриндә ејни олмалыдыр.

$$\omega_j(\boldsymbol{q}) = \omega_j(\boldsymbol{q} + \boldsymbol{b}_g) \tag{5.62}$$

Башга сөзлә, $\omega_j(\boldsymbol{q})$ тезликләри $\boldsymbol{q}$ фәзасында периодик функсијалардыр. $\boldsymbol{q}$ вә $\boldsymbol{q}+\boldsymbol{b}_g = \boldsymbol{q}'$ нөгтәләринин еквивалент олмасы илә әлагәдар $\boldsymbol{q}$ далға векторуну сонлу бир аралыгда тә'јин етмәк кифајәтдир. $\boldsymbol{a}_n = \boldsymbol{a}_i$ вә $\boldsymbol{b}_g = \boldsymbol{b}_i$ сечсәк, $(\boldsymbol{q}'\boldsymbol{a}_i) = (\boldsymbol{q} + \boldsymbol{b}_g)\boldsymbol{a}_i = \boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_i + 2\pi$ аларыг. Јә'ни $\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_i$ скаләр һасили 2π аралығында гијмәтләр алыр. Биз бу аралығы

$$-\pi \le \boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_i \le +\pi \qquad i = 1,2,3 \tag{5.63}$$

шәклиндә сечәк. Верилмиш кристал гәфәс үчүн $\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_i$ һасилинин 2π аралығында дәјишдији тәрс гәфәс областы *биринчи Бруллуен зонасы* адланыр.

Беләликлә, ω_j тезликләрини $-\pi \leq \boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_i \leq +\pi$ аралығында арашдырмаг кифајәтдир, чүнки бу аралыг харичиндә олан һәр бир $\boldsymbol{q}$ векторуну $\boldsymbol{b}_g$ вектору әлавә етмәклә бу аралыг дахилинә кәтирмәк олар.

Кубик кристаллар үчүн Декарт координат системиндә (5.63) зонасы (биринчи Бруллуен зонасы)

$$-\frac{\pi}{a} \leq q_\alpha \leq +\frac{\pi}{a}; \qquad \alpha = x, y, z \tag{5.64}$$

кими тә'јин едилир, бурада a- кубик кристалын гәфәс сабитидир.

Көстәрмәк олар ки, далға векторунун кичик гијмәтләри үчүн (5.55) дисперсија асылылыглары ашағыдакы хассәләрә маликдирләр: $q \to 0$ лимитиндә $3s$ сајда тезликдән јалныз үчү сыфра јахынлашыр:

$$\omega_j(\boldsymbol{q} \to 0) = 0 \qquad (j = 1,2,3) \tag{5.65}$$

вә бу тезликли рәгсләр заманы базис өзәјиндәки атомларын һамысынын јердәјишмәси ејни олур, јә'ни өзәк бүтүн олараг рәгс едир (акустик рәгсләр). Јердә галан $(3s-3)$ сајда тезликләрин һәр бири исә $q \to 0$ лимитиндә сонлу бир гијмәтә јахынлашырлар:

$$\omega_j(\boldsymbol{q} \to 0) = \omega_{oj}; \qquad (j = 4,5,\ldots,3s). \tag{5.66}$$

Бу тезликләр өзәкдәки атомларын бир-биринә нисбәтән рәгсләринә ујғундур вә бу чүр рәгс заманы өзәјин күтлә мәркәзи һәрәкәтсиз галыр (оптик рәгсләр). Бирөлчүлү гәфәсләр үчүн бу шәрт (5.38) бәрабәрлијиндә көстәрилмишдир.

Јухарыда $\boldsymbol{q}$ далға векторунун асылы олмајан гијмәтләринин биринчи Бриллүен зонасы дахилиндә олдуғуну көстәрмишдик. Инди биринчи Бриллүен зонасында, $\boldsymbol{q}$-нун нечә вә һансы гијмәтләри алдығыны тапаг. Бунун үчүн, (5.50) јердәјишмәнин ифадәсиндә Борн-Карман бәрабәрлијиндән истифадә едәк. Үчөлчүлү гәфәсдә бу шәрт

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{a}_n)=\boldsymbol{u}(\boldsymbol{a}_n+G\,\boldsymbol{a}_i); \qquad (i=1,2,3) \qquad (5.67)$$

шәклиндәдир. Бурада G - чох бөјүк там әдәддир. Јердәјишмә ифадәсинин (5.67) шәртини өдәмәси үчүн $\exp[i\boldsymbol{q}G\boldsymbol{a}_i]=1$ олмалыдыр, јә'ни $G\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_i=2\pi g_i$ вә ја:

$$\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_i=\frac{2\pi}{G}g_i \qquad (i=1,2,3) \qquad (5.68)$$

олмалыдыр, бурада g_i - там әдәдләрдир. (5.68) ифадәсини (5.63)-дә јеринә јазсаг, g_i кәмијјәтинин дәјишмә аралығы:

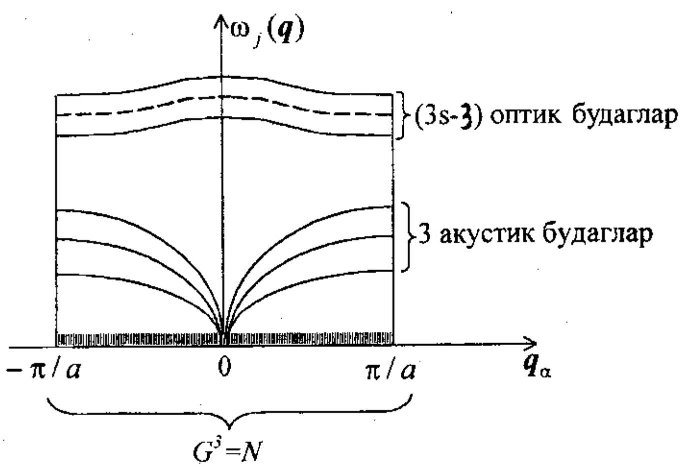
$$-\frac{G}{2}\le g_i\le+\frac{G}{2} \qquad (5.69)$$

белә тә'јин едилир. Беләликлә, $\boldsymbol{q}$ векторунун $\boldsymbol{a}_i$ вектору үзәриндәки проjексиjасы (5.68) G сајда бир-биринә чох јахын кәсилмәз гијмәтләр алыр. Буна көрә $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$ охларыны да нәзәрә алсаг, (5.63) аралығында, $\boldsymbol{q}$ вектору $G^3=N$ сајда гијмәт алыр. Бурада N- кристалдакы базис өзәкләрин сајыдыр.

$\boldsymbol{q}$ далға векторунун бир гијмәтинә $3s$ сајда тезлик ујғун олдуғундан, тезлик спектринин тәшкил едән тезликләрин сајы сонлудур вә $3sN$-дир. Бу сај ејни заманда кристалын сәрбәстлик дәрәчәләринин сајына ($3sN$) бәрабәрдир. Беләликлә, әлдә едилән ән үмуми вә вачиб нәтичә будур:

Кристалда мүмкүн олан тезликләрин сајы, кристалын сәрбәстлик дәрәчәләрин сајына бәрабәрдир.

Шәкил 5.9.-да көстәрилән тезлик спектри кристалын истилик рәгсләри илә тә'јин олунан бүтүн хассәләринин әсасыны тәшкил едир. Үчөлчүлү гәфәсин тезлик спектрини сонлу сајда ($3sN$) тезликдән ибарәтдир вә бунлар да $3s$ сајда будаг тәшкил едирләр (шәкил 5.9). Бу будагларын јалныз үчү акустик, јердә галан ($3s-3$) дәнәси исә оптик будагдыр. Акустик будагларын сајы базис өзәкдә олан атомларын сајындан (s-дән) асылы дејилдир, чүнки өзәк нә гәдәр мүрәккәб олурса олсун, онун бир күтлә мәркәзи вардыр. Базис өзәкдә јалныз бир атом варса ($s=1$), јә'ни Браве гәфәсләри һалында кристалда оптик рәгсләр мүмкүн дејил.



шәкил 5.9

§ 6. Нормал координатлар. Кристал гәфәсин Һамилтон функсиjасы

Инди рәгси һәрәкәтдә олан гәфәсин там енержисини, jә'ни Һамилтон функсиjасыны тапаг. Кристалын там енержиси E кинетик K вә потенсиал U енержиләринин чәминә бәрабәрдир:

$$E = K + U \tag{6.1}$$

Бу мәсәләни әввәлчә бирөлчүлү садә гәфәс (шәкил 5.2) үчүн һәлл едәк, сонра исә үчөлчүлү гәфәс һалына үмумиләшдирәк. Шәкил 5.2-дә көстәрилән бирөлчүлү садә гәфәс үчүн K вә U-нун шәкли ашағыдакы кими олар:

$$K = \frac{M}{2}\sum_{n=1}^{G} \dot{u}_n^2 \ , \tag{6.2}$$

$$U = \frac{\beta}{2}\sum_{n=1}^{G} (u_n - u_{n-1})^2 \ . \tag{6.3}$$

Бурада G- гәфәсин фундаментал областында олан елементар базис өзәкләрин (бизим һалда, һәм дә атомларын) саjы, $\dot{u}_n$- jердәjишмәнин замана көрә төрәмәсидир. Потенсиал енержи U- нун ифадәсинин дүзкүн олмасы орадан көрүнүр ки, онун u_n-ә көрә төрәмәсинин әкс ишарәси

$$F_n = -\frac{\partial U}{\partial u_n} = -\beta\,(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) \tag{6.4}$$

n- атомуна тә'сир едән (5.3а) гүввәсини верир.

Гејд едәк ки, потенсиал енержини $U = \frac{\beta}{2}\sum_{n=1}^{G}(u_n - u_{n+1})^2$

кими дә јазмаг олар, чүнки бу һалда да (6.4) алыныр. $u_n(t)$ јердәјишмәләри периодик функсија олдуғуна көрә онлары һармоникаларына ајырмаг олар. Онда реал јердәјишмә үчүн јаза биләрик:

$$u_n=\sum_q \left[A_q e^{i(qan-\omega_q t)}+A_q^* e^{i(qan-\omega_q t)}\right]=$$
$$=\frac{1}{\sqrt{G}}\sum_q \left\{a_q e^{iqan}+a_q^* e^{-iqan}\right\}. \tag{6.5}$$

Бурада

$$a_q=\sqrt{G}\,A_q e^{-i\omega_q t} \tag{6.6}$$

ишарә едилмишдир.

$\dot{a}_q=-i\,\omega_q\,a_q$ вә $\dot{a}_q^*=i\,\omega_q\,a_q^*$ олдуғуну нәзәрә алараг (6.5)- и (6.2)- дә јеринә јазсаг, кинетик енержинин ифадәси ашағыдакы шәклә дүшәр:

$$K=\frac{M}{2}\sum_{n=1}^{G}\dot{u}_n\dot{u}_n=\frac{M}{2}\sum_{n=1}^{G}\frac{1}{\sqrt{G}}\sum_q \left\{\dot{a}_q e^{iqan}+\dot{a}_q^* e^{-iqan}\right\}\times$$
$$\times\frac{1}{\sqrt{G}}\sum_{q'}\left\{\dot{a}_{q'} e^{iq'an}+\dot{a}_{q'}^* e^{-iq'an}\right\}=-\frac{M}{2G}\sum_{qq'}\sum_{n=1}^{G}\omega_q\omega_{q'}\times$$
$$\times\left\{a_q a_{q'} e^{i(q+q')an}-a_q a_{q'}^* e^{i(q-q')an}-a_q^* a_{q'} e^{-i(q-q')an}+a_q^* a_{q'}^* e^{-i(q+q')an}\right\} \tag{6.7}$$

Бурдан көрүнүр ки, K-ны тапмаг үчүн $L=\sum\limits_{n=1}^{G} e^{iqan}$ типли чәми һесабламаг лазымдыр. Далға әдәдинин (5.18) гијмәтләрини $q = \dfrac{2\pi}{aG}$, $g = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm G/2$ јада салсаг:

$$\sum_{n=1}^{G} e^{iqan} = \sum_{n=1}^{G} e^{i\frac{2\pi}{G}gn} = \sum_{n=1}^{G} l^n, \qquad (6.8)$$

һарада ки,

$$l = e^{i\frac{2\pi}{G}g}. \qquad (6.9)$$

Бурада ики һала бахаг:

1) $q \neq 0$, јә'ни $g \neq 0$. Бу һалда $l \neq 1$-дир вә

$$L = \sum_{n=1}^{G} l^n = l + l^2 + \ldots + l^G = \frac{l(1-l^G)}{1-l} = 0,$$

чүнки $l^G = e^{i2\pi g} = 1$. Јә'ни:

$$L(q \neq 0) = \sum_{n=1}^{G} e^{iqan} = 0, \quad q \neq 0 \text{ олдугда} \qquad (6.10)$$

2) $q = 0$, јә'ни бүтүн $g = 0$. Бу һалда (6.9)-дан $l=1$ вә:

$$L = \sum_{n=1}^{G} l^n = \sum_{n=1}^{G} 1 = G, \quad q = 0 \text{ олдугда} \qquad (6.11)$$

Беләликлә:

$$\sum_{n=1}^{G} e^{iqan} = \begin{cases} 0, & \text{әкәр } q \neq 0 \\ G, & \text{әкәр } q = 0. \end{cases} \qquad (6.12)$$

Ејнилә:

$$\sum_{n=1}^{G} e^{i(q\pm q')an} = \begin{cases} 0, & \text{әкәр} \quad q \pm q' \neq 0 \\ G, & \text{әкәр} \quad q \pm q' = 0 \end{cases} \qquad (6.12\ \text{а})$$

јаза биләрик.

Бу чәмләмә гајдасыны (6.7) ифадәсинә тәтбиг етсәк вә $\omega_q = \omega_{-q}$ олдуғуну нәзәрә алсаг, кинетик енержи үчүн:

$$K = \frac{M}{2}\sum_q \omega_q^2 (2a_q a_q^* - a_q a_{-q} - a_q^* a_{-q}^*)\,. \qquad (6.13)$$

Инди дә потенсиал енержинин шәклини дәјишдирәк. (6.3) вә (6.5)-дән аларыг:

$$U = \frac{\beta}{2}\sum_{n=1}^{G}(u_n - u_{n-1})(u_n - u_{n-1}) = \frac{\beta}{2G}\sum_{qq'}\sum_{n=1}^{G}\Big[a_q e^{iqan} +$$

$$+ a_q^* e^{-iqan} - a_q e^{-iqa} e^{iqan} - a_q^* e^{iqa} e^{-iqan}\Big] \times \qquad (6.14)$$

$$\times \Big[a_{q'} e^{iq'an} + a_{q'}^* e^{-iq'an} - a_{q'} e^{-iq'a} e^{iq'an} - a_{q'}^* e^{iq'a} e^{-iq'an}\Big].$$

Бурадакы мө'тәризәләри вурдугдан сонра (6.12 а)-нын көмәји илә n вә q'-ә көрә чәмләмәни апарсаг вә $e^{iqa} + e^{-iqa} = 2\cos aq$; $1 - \cos aq = 2\sin^2 aq/2$ вә (5.9)-дан $\sin^2 aq/2 = M\omega_q^2/4\beta$ олдуғуну нәзәрә алсаг, потенсиал енержи үчүн:

$$U = \frac{M}{2}\sum_q \omega_q^2\left(2a_q a_q^* + a_q a_{-q} + a_q^* a_{-q}^*\right) \qquad (6.15)$$

аларыг. K вә U-нун (6.13) вә (6.15) ифадәләрини топласаг рәгс едән бирөлчүлү гәфәсин там енержиси үчүн

$$E = K + U = 2M\sum_q \omega_q^2 a_q a_q^* \tag{6.16}$$

аларыг.

Көрүндүјү кими, там енержи a_q координатлары васитәсилә чох садә шәкилдә ифадә едилир. a_q координатлары *нормал координатлар* адланыр. Лакин, комплекс координатлардан реал X_q вә P_q нормал координатларына кечмәк даһа ујғундур. Реал координатлар:

$$\begin{aligned} X_q &= a_q + a_q^* = 2\,\mathrm{Re}(a_q) \\ P_q &= M\dot{X}_q = \frac{M\omega_q}{i}(a_q - a_q^*) = \frac{M\omega_q}{i}\, 2\,\mathrm{Im}(a_q) \end{aligned} \tag{6.17}$$

шәклиндә сечилә биләр. Онда:

$$\begin{aligned} a_q &= \frac{1}{2}\left(X_q + i\frac{P_q}{M\omega_q} \right), \\ a_q^* &= \frac{1}{2}\left(X_q - i\frac{P_q}{M\omega_q} \right) \end{aligned} \tag{6.18}$$

олар.

Бу мүнасибәти (6.16) - да јеринә јазсаг, там енержи вә ја Һамилтон функсијасы үчүн сон ифадә аларыг:

$$E = \sum_q \left\{ \frac{1}{2M} P_q^2 + \frac{1}{2} M\omega_q^2 X_q^2 \right\} = \mathcal{H}\left(X_q, P_q\right) \tag{6.19}$$

Бурада чәм ишарәси алтында олан мөʼтәризә тезлији ω_q олан һармоник оссилјаторун енержисидир. X_q вә P_q

нормал координатлар, бунларла ифадә олунан һармоник рәгсләр исә *нормал рәгсләр - модлар* адланырлар.

Бирөлчүлү гәфәсин далға әдәди (5.18) G сајда гијмәт алдығындан, (6.19) ифадәсинә гәфәсдә мүмкүн олан тезликләрин сајы гәдәр оссилјаторын енержиси дахилдир.

Беләликлә, бирөлчүлү гәфәсин Һамилтон функсијасыны X_q вә P_q нормал координатлары илә ифадә етмәклә ашағыдакы чох мүһүм нәтиҹәјә кәлирик:

Рәгси һәрәкәтдә олан бирөлчүлү садә гәфәсин там енержиси гәфәсдә мүмкүн олан G сајда тезликләрин сајы гәдәр һармоник оссилјаторларын енержиләринин ҹәминә бәрабәрдир.

Оссилјаторун һәр бири ω_q тезликләриндән бири илә рәгс едир вә бир-бири илә гаршылыглы тә'сирдә олмурлар.

Там енержинин (6.19) ифадәсини үчөлчүлү гәфәс һалы үчүн дә үмумиләшдирмәк олар. Бу һалда $\omega_j(\boldsymbol{q})$ тезликләринин сајы $3sN$ -ә бәрабәрдир (бах шәкил 5.9).

Үчөлчүлү гәфәсләр үчүн там енержи:

$$E = \sum_{q} \sum_{j=1}^{3s} \left\{ \frac{1}{2M} P_j^2(\boldsymbol{q}) + \frac{M}{2} \omega_j^2(\boldsymbol{q}) Q_j^2(\boldsymbol{q}) \right\} = \mathscr{H}(Q, P) \,. \quad (6.20)$$

Бурада $Q_j(\boldsymbol{q})$ вә $P_j(\boldsymbol{q})$ - үчөлчүлү гәфәсин нормал координатлары, $\mathscr{H}(Q,P)$ исә Һамилтон функсијасыдыр. Садәлик үчүн өзәкдә олан атомларын күтләси $M_1 = M_2 = \ldots = M_s = M$ гәбул едилмишдир.

Енержинин (6.20) ифадәсиндән көрүнүр ки, үчөлчүлү гәфәсин там енержиси $3sN$ сајда һармоник оссилјаторун енержисинин ҹәминә бәрабәрдир. Бу нәтиҹә кристаллик бәрк ҹисимләрин истилик хассәләринин нәзәријјәсини гурмаг үчүн чох ваҹибдир.

§ 7. Гәфәсин рәгсләринин квантланмасы. Фонон газы

21

Квант механикасында олан ујғунлуг принсипинә көрә системин Һамилтон функсијасыны билсәк, онун Һамилтон операторуну тапа биләрик. Бунун үчүн Һамилтон функсијасында импулсу мә'лум гајдада ујғун операторла әвәз етмәк лазымдыр. Кристал гәфәс үчүн олан Һамилтон функсијасында

$$P_j(\boldsymbol{q}) \Longrightarrow \frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial Q_j(\boldsymbol{q})} \qquad (7.1)$$

оператору илә әвәз етсәк, гәфәсин Һамилтон операторуну

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{q,j}\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\cdot\frac{\partial^2}{\partial Q_j^2(\boldsymbol{q})} + \frac{M}{2}\omega_j^2(\boldsymbol{q})\,Q_j^2(\boldsymbol{q})\right\} \qquad (7.2)$$

аларыг, бурада $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$, h- Планк сабитидир. (7.2)-ни

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{q\,j}\hat{\mathcal{H}}_{q\,j} \qquad (7.3)$$

шәклиндә јазаг, һарада ки,

$$\hat{\mathcal{H}}_{q\,j} = -\frac{\hbar^2}{2M}\cdot\frac{\partial^2}{\partial Q_j^2(\boldsymbol{q})} + \frac{M}{2}\omega_j^2(\boldsymbol{q})\,Q_j^2(\boldsymbol{q}) \qquad (7.4)$$

$(\boldsymbol{q}, j)$ типли һармоник оссилјаторун Һамилтон операторудур.

Кристал гәфәсин стасионар Шрединкер тәнлији:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi\,. \qquad (7.5)$$

Һамилтониан $\hat{\mathscr{H}}$ һармоник оссилјаторларын Һамилтон операторларынын чәминә (7.3) бәрабәр олдуғуна көрә (7.5) тәнлијин мәхсуси функсијалары

$$\psi = \prod_{q\,j} \psi_{N_{q\,j}}(Q) \tag{7.6}$$

вә мәхсуси гијмәтләри

$$E = \sum_{q\,j} \varepsilon_{N_{q\,j}} \tag{7.7}$$

кими јазыла биләр.

Бурада $\psi_{N_{q\,j}}(Q)$ вә $\varepsilon_{q\,j}$

$$\hat{\mathscr{H}}_{q\,j}\psi_{N_{q\,j}}(Q) = \varepsilon_{N_{q\,j}}\psi_{N_{q\,j}}(Q) \tag{7.8}$$

$(\boldsymbol{q}, j)$ типли оссилјатор үчүн Шрединкер тәнлијинин һәллидир, бурада $\hat{\mathscr{H}}_{q\,j}$ (7.4) илә верилир.

(7.8) тәнлијинин һәлли мә'лумдур: мәхсуси функсија

$$\psi_N(Q) = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^N N!}}\, e^{-\omega Q^2/2\hbar}\, H_N\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}\,Q\right) \tag{7.9}$$

һармоник оссилјаторун далға функсијасы, H_N- Ермит полиномудур; мәхсуси гијмәт

$$\varepsilon_{N_{q\,j}} = \left(N_{q\,j} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})\,. \tag{7.10}$$

Бурада $N_{q\,j} = 0,1,2,...$ оссилјатор квант әдәдидир.

Беләликлә, (7.7) вә (7.10)-дан рәгс едән кристал гәфәсин там енержиси:

$$E=\sum_{qj}\left(N_{qj}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_j(\boldsymbol{q}) \tag{7.11}$$

вә ја:

$$E=E_0+\sum_{qj} N_{qj}\,\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})\,. \tag{7.12}$$

Бурада $E_0=\frac{1}{2}\sum_{qj}\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})$ - сыфырынчы рәгсләрин енержисидир.

Инди енержинин (7.12) ифадәсини анализ едәк. Әкәр бүтүн оссилјаторлар әсас һалдадырларса, јә'ни истәнилән $(\boldsymbol{q},j)$ үчүн $N_{qj}=0$-дырса, онда

$$E=E_0 \tag{7.13}$$

олур. Бу гәфәсин әсас һалыдыр вә бу о заман олар ки, температур сыфыр олсун $(T=0)$. Кристалын бу һалына ејни һәчмдә ичи бош бир габ (вакуум) гаршы гојаг (шәкил 7.1).

кристал $T=0$, V	$\Longleftrightarrow$	вакуум $E=E_0$ V		кристал $T\neq 0$, V	$\Longleftrightarrow$	фонон газы, V

шәкил 7.1

Температур сыфырдан фәргли оланда, оссилјаторларын бә'зиси һәјәчанланмыш һала кечир, јә'ни $N_{qj}=1$ олур.

Бу заман кристалын енержиси $\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})$ гәдәр артыр. Һәр дәфә оссилјаторлар јени һәјәчанланмыш һала кечдикдә кристалын енержиси $\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})$-ләрин мисилләри гәдәр артыр. Енержинин $\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})$ гәдәр артмасыны кристала гаршы гојулмуш габда енержиси $\varepsilon_j(\boldsymbol{q})=\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})$ вә импулсу $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{q}$ олан бир *квазизәррәчијин* јаранмасы кими тәсәввүр етмәк олар.

Һәмин квазизәррәчик *фонон* адланыр:

$$\left.\begin{array}{l}\varepsilon_j(\boldsymbol{q})=\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})\\ \boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{q}\end{array}\right\}\ \text{фонон.} \tag{7.14}$$

Фононлар реал зәррәчикләр дејил, квазизәррәчикләр адланыр, она көрә ки, онларын импулслары, (5.62)-дән көрүндүјү кими, биргијмәтли олмајыб ихтијари тәрс гәфәс вектору $\boldsymbol{b}_g$ дәгиглији илә тә'јин олунур: импулсун $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{q}$ вә $\boldsymbol{p}=\hbar(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{b}_g)$ гијмәтләринә ејни енержили $\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})=\hbar\omega_j(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{b}_g)$ фонон ујғун кәлир. Фононлар јалныз кристал дахилиндә мүмкүндүрләр, јә'ни кристалдан харичдә фонон ола билмәз.

Јухарыдан көрүндүјү кими, *фононлар кристал гәфәсдә јајылан истилик далғаларынын енержи квантыдыр.*

Кристал гәфәсдә мүмкүн олан вә шәкил 5.8-дә схематик көстәрилән тезлик спектрини јарадан һәр бир тезлијә бир тип фонон ујғундур. Фононун типи $(\boldsymbol{q},j)$ илә, јә'ни далға векторунун гијмәти вә рәгсин будағынын нөмрәси илә тә'јин олунур. Демәли, N сајда өзәкдән ибарәт олан вә һәр өзәкдә s сајда атом олан гәфәсин чәми $3sN$ тип фонон мүмкүндүр. Тезлик спектринә (шәкил 5.8) ујғун олараг акустик вә оптик фононлар вар.

Кристалын температуру дәјишдикчә она гаршы гојулмуш габда фонон газынын јаранма динамикасыны бу чүр тәсвир етмәк олар: Кристалын $T = 0$ һалында енержиси $E = E_0$ вә она гаршы гојулан габ бошдур (вакуум). $T \neq 0$ олдугда әввәлчә кичик енержили фононлар јараныр. Бу тезлик спектринин (шәкил 5.8) ашағы һиссәсинә ујғундур. Демәли, әввәлчә акустик фононлар јараныр. Температур јүксәлдикчә јени-јени фонон типләри јараныр, ејни заманда әввәлчәдән јаранмыш фононларын сајы артыр. Акустик фононлардан сонра оптик типли фононлар јараныр вә температурун кифајәт гәдәр јүксәк гијмәтләриндә бүтүн $3sN$ тип фононларын һамысы ојанмыш олур. Бундан сонра температурун артмасы артыг јени тип фонон јаратмыр, јалныз фононларын сајыны артырыр.

Классик дилдә, фононларын типи гәфәсдә јајылан рәгсләрин тезлијинә, онларын сајы исә бу рәгсләрин интенсивлијинә (амплитудун квадратына) ујғундур.

Кристалын там енержиси (7.12)-дән

$$E = E_0 + E_f \tag{7.15}$$

шәклиндә јазыла биләр, бурада

$$E_f = \sum_{qj} N_{qj} \hbar\omega(\boldsymbol{q}) \tag{7.16}$$

фонон газынын енержисидир. Бу ифадәдән көрүнүр ки, оссилјатор квант әдәдинин ајдын физики мәнасы вар: N_{qj} - тезлији $\omega_j(\boldsymbol{q})$ олан, јә'ни $(\boldsymbol{q},j)$ типли фононларын сајыдыр.

Инди V һәчмини тутан фонон газынын T температурунда там енержиси вә $(\boldsymbol{q},j)$ типли фононларын орта сајыны тапаг. Бунун үчүн статистик физиканын орта гијмәтләри һесабламаг методуну идеал фонон газына тәтбиг едәк.

Фонон газынын енержисинин $\overline{E}_f$ орта гијмәтини тапмаг үчүн, (7.16)-дан көрүндүјү кими $\overline{N_{qj}\hbar\omega(q)}$ орта гијмәти һесабламаг лазымдыр.

$$\overline{N_{qj}\hbar\omega_j(q)} = \sum_{N_{qj}} N_{qj}\hbar\omega_j(q)W_{N_{qj}}. \tag{7.17}$$

Бурада

$$W_{N_{qj}} = Ae^{-\beta N_{qj}\hbar\omega_j(q)} \tag{7.18}$$

Болсман пајланмасы, $\beta = \dfrac{1}{k_0T}$, k_0-Болсман сабити, A- нормаллашма шәртиндән тапылан сабитдир:

$$\sum_{N_{qj}} W_{N_{qj}} = A\sum_{N_{qj}} e^{-\beta N_{qj}\hbar\omega_j(q)} = 1.$$

Бурадан A-ны тапыб (7.18)-дә јеринә јазсаг, Болсман пајланмасы үчүн

$$W_{N_{qj}} = \frac{1}{Z}e^{-\beta N_{qj}\hbar\omega_j(q)} \tag{7.19}$$

аларыг, бурада

$$Z = \sum_{N_{qj}=0}^{\infty} e^{-\beta N_{qj}\hbar\omega_j(q)} \tag{7.20}$$

статистик чәмдир. (7.17) вә (7.19)-дән $(\boldsymbol{q},j)$ типли фононларын орта енержиси үчүн аларыг:

$$\overline{N_{qj}\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})} = -\frac{d\ln Z}{d\beta}. \tag{7.21}$$

Демәк (7.20)-дә олан статистик чәми Z-и һесабламаг лазымдыр. Көрүндүјү кими:

$$Z = 1 + e^{-\beta\hbar\omega_j(q)} + e^{-2\beta\hbar\omega_j(q)} + \ldots = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_j(q)}}. \tag{7.22}$$

Беләликлә,

$$N_{qj}\,\hbar\,\omega(\boldsymbol{q}) = \frac{\hbar\,\omega_j(\boldsymbol{q})}{e^{\hbar\omega_j(q)/k_oT} - 1} \tag{7.23}$$

аларыг. Бурадан $(\boldsymbol{q}, j)$ типли фононларын T температурундакы орта сајы үчүн

$$N_{qj} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_j(q)/k_oT} - 1} \tag{7.24}$$

аларыг. Бу функсија *Планк функсијасы* адланыр. Планк функсијасы (7.24) Бозе пајланма функсијасынын хүсуси һалыдыр. Бозе пајланма функсијасында кимјәви потенсиалы $\xi = 0$ гәбул етсәк, Бозе функсијасы Планк функсијасы илә (7.24) үст-үстә дүшәр. Демәли, *фонон газы кимјәви потенсиалы сыфыр олан Бозе газыдыр.*

Нәтичәдә фонон газынын орта енержиси үчүн (7.16) вә (7.23)-дән

$$\overline{E}_f = \sum_{q,j} \frac{\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})}{e^{\hbar\omega_j(q)/k_oT} - 1} \tag{7.25}$$

аларыг.

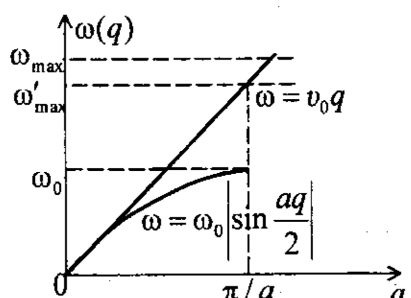
Газда олан фононларын T температурундакы там сајыны

$$N(T)=\sum_{qj}\overline{N}_{qj}=\sum_{qj}\frac{1}{e^{\hbar\omega_j(q)/k_0T}-1} \tag{7.26}$$

һесабламаг үчүн тезлијин дисперсијасыны јә'ни $\omega_j(\boldsymbol{q})$ функсијасынын ачыг шәклини билмәјимиз лазымдыр. Үмуми һалда $\omega_j(\boldsymbol{q})$ функсијасынын аналитик шәкли мә'лум олмадығындан хүсуси бир һала бахаг. Акустик фононларын там сајынын температурдан асылылығыны тапаг. Бунун үчүн чох садә бир модел сечәк (шәкил 7.2). Јә'ни континиум јахынлашмасында тезлији

$$\omega(q)=v_0q \tag{7.27}$$

шәклиндә сечәк вә фәрз едәк ки, сәсин сүр'әти v_0 бүтүн будаглар үчүн ејнидир (үч гат чырлашмыш акустик будаг). Бу модел *Дебај модели* адланыр (бах §8, шәкил 8.4).



шәкил 7.2

Квазидискрет вектору $\boldsymbol{q}$ үзрә чәмләмәдән мә'лум

$$\sum_q(...)=\frac{V}{(2\pi)^3}\int(...)d\boldsymbol{q} \tag{7.28}$$

гајда илә интеграла кечсәк, (7.26)

$$N_{ak}(T)=\frac{3V}{(2\pi)^3}\int\frac{d\boldsymbol{q}}{e^{\hbar\omega(\boldsymbol{q})/k_0T}-1} \qquad (7.29)$$

шәклинә дүшәр. Бурда V-фонон газы олан габын, јә'ни кристалын һәчми, $d\boldsymbol{q}=dq_x dq_y dq_z$, $\boldsymbol{q}$-фәзасында һәчм елементидир, 3 рәгәми- акустик будагларын сајыдыр.

Тезлик $\omega(q)$ јалныз далға векторунун гијмәтиндән (далға әдәдиндән) (7.27) асылы олдуғуна көрә (7.29) интегралында сферик координатлара кечә биләрик $d\boldsymbol{q}=q^2dk\sin\theta d\theta d\varphi$.

Бучаглара көрә интеграл 4π вердијиндән (7.29)

$$N_{ak}(T)=\frac{3V}{2\pi^2}\int\frac{q^2dq}{e^{\hbar\omega(\boldsymbol{q})/k_0T}-1} \qquad (7.30)$$

шәклинә дүшәр. Бурада далға әдәдинә көрә интегралдан тезлијә көрә интеграла кечмәк мүнасибдир: Бунун үчүн (7.27)-дән истифадә етсәк,

$$N_{ak}(T)=\frac{3V}{2\pi^2 v_0^3}\int_0^{\omega_{max}}\frac{\omega^2d\omega}{e^{\hbar\omega/k_0T}-1} \qquad (7.31)$$

аларыг. Бурада кристалы континиумдан ајыран фәрг ондадыр ки, ω-ја көрә интеграл $(0,\infty)$ интервалында дејил $(0,\omega_{max})$ интервалында апарылыр. Интегралын үст сәрһәдди ω_{max} ашағыдакы шәртдән тапылыр: акустик фононларын там сајы $3N$-ә бәрабәрдир, јә'ни:

$$\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{j=1}^{3}1=3N \qquad (7.32)$$

Бурада N- гәфәсдә олан елементар өзәкләрин сајыдыр. Бу шәрт (7.28)-ин көмәји илә

$$3\frac{V}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{q} = 3N \tag{7.33}$$

вә ја (7.27)-дән истифадә етсәк,

$$\frac{3V}{2\pi^2 \upsilon_0^3}\int\limits_0^{\omega_{max}} \omega^2 d\omega = 3N \tag{7.34}$$

шәклинә дүшүр. Нәтичәдә ω_{max} үчүн:

$$\omega_{max} = \upsilon_0\left(\frac{6\pi^2}{\Omega_0}\right)^{1/3} = \upsilon_0\frac{(6\pi^2)^{1/3}}{a} \tag{7.35}$$

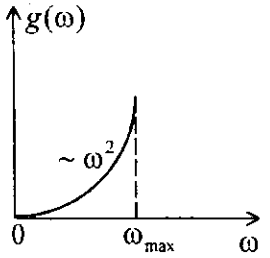
аларыг. $\Omega_0 = \dfrac{V}{N}$- елементар өзәјин һәчмидир. Кубик кристаллар үчүн $\Omega = a^3$. Гејд едәк ки, бу јолла тапылан (7.35) ω_{max} һәм (5.10) дисперсија мүнасибәтинә дахил олан $\omega_{max} = \omega_0 = \dfrac{2\upsilon_0}{a}$, һәм дә $\omega'_{max} = \upsilon_0 q_{max} = \dfrac{\pi}{a}\upsilon_0$ гијмәтләриндән фәрглидир. (7.35)-дән һесабланан ω_{max} һәр ики һалдакы тезликдән (ω_0 вә ω'_{max}) бөјүкдүр (шәкил 7.2). Акустик фононларын сајы үчүн (7.34) тәнлијини:

$$\int\limits_0^{\omega_{max}} g(\omega)d\omega = 3N \tag{7.36}$$

шәклиндә јазсаг, бурада:

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 \upsilon_0^3}\omega^2 \sim \omega^2 \tag{7.37}$$

функсијасынын ваһид тезлик интервалына дүшән акустик фононларын сајы кими физики мәнаја малик олдуғу ајдындыр. Көрүндүјү кими, бу функсија континиум јахынлашмасында тезлијин квадратына мүтәнасибдир $g(\omega) \sim \omega^2$ (шәкил 7.3):



шәкил 7.3

Фононларын үмуми сајы үчүн олан (7.31) дүстурунда $x = \dfrac{\hbar\omega}{k_0 T}$ дәјишәни гәбул етсәк,

$$N_{ak}(T) = \frac{3V}{2\pi^2 v_0^3}\left(\frac{k_0 T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} \tag{7.38}$$

олар. Бурада

$$\theta = \frac{\hbar\omega_{max}}{k_0} = \frac{\hbar v_0}{k_0}\left(\frac{6\pi^2}{V/N}\right)^{1/3} \tag{7.39}$$

Дебај температуру адланыр (бах §8). Көрүндүјү кими, θ елә бир характеристик температурдур ки, бу температурда мүмкүн олан бүтүн акустик тезликли рәгсләр $(k_0\theta = \hbar\omega_{max})$ ојанмышлар, јә'ни фонон газында ән бөјүк $\hbar\omega_{max}$ енержили акустик фонон белә јаранмыш олур.

(7.39) нәзәрә алынса акустик фононларын (7.38) сајы

$$N_{\text{ak}}(T)=\frac{9}{2}N\left(\frac{T}{\theta}\right)D_2\left(\frac{\theta}{T}\right) \qquad (7.38\text{ a})$$

шәклинә дүшәр. Бурада

$$D_n\left(\frac{\theta}{T}\right)=n\left(\frac{T}{\theta}\right)^n\int_0^{\frac{\theta}{T}}\frac{x^n\,dx}{e^x-1} \qquad (7.40)$$

Дебај функсијасыдыр. Температур $(0\div\infty)$ интервалында дәјишдикдә бу функсија $(0\div 1)$ арасында гијмәт алыр.

Температурун ики лимит һалына бахаг.

Јүксәк температурлар $T\gg\theta$. Бу һалда $e^x=1+x+\ldots$ кими јазсаг, $D_2=1$ олар вә фононларын сајы үчүн

$$N_{\text{ak}}(T)=\frac{9}{2}N\frac{T}{\theta}\sim T; \qquad T\gg\theta; \qquad (7.38\text{ б})$$

аларыг, јә'ни фононларын сајы јүксәк температурларда T илә дүз мүтәнасибдир (шәкил 7.4).

Ашағы температурлар $T\ll\theta$. Бу һалда (7.40) интегралынын үст сәрһәдини $\theta/T\to\infty$ - ла әвәз етмәк олар. Бу заман алынан интеграл

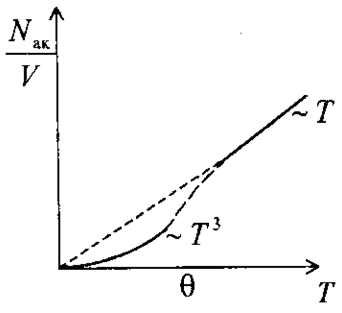
$$\int_0^{\infty}\frac{x^2dx}{e^x-1}=\Gamma(3)\,\xi(3)=2\cdot 1{,}2=2{,}4 \qquad (7.41)$$

олар [(7.40) тип интегралларын һесабланмасы һагда §8-ә бах, (8.42) дүстуру]. Бурада $\Gamma(n)$- Гамма, $\xi(n)$ исә Зета функсијалардыр.

Беләликлә, ашағы температурларда $(T\ll\theta)$ акустик фононларын сајы:

$$N_{ak}(T) = 21{,}6\,N\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \sim T^3 \qquad T \ll \theta \tag{7.42}$$

Јә'ни $N_{ак}$ температурун кубуна мүтәнасибдир (шәкил 7.4).

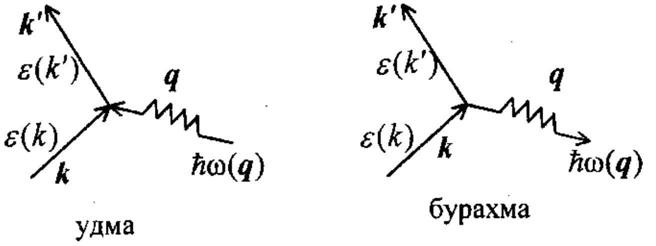


шәкил 7.4

Гејд едәк ки, фонон анлајышы кристал гәфәсин истилик тутумунун, истиликкечирмәнин нәзәријјәсини гурмагда вә металларда кечиричи електронларын кристал гәфәс илә гаршылыглы тә'сирини арашдырмагда чох әлверишлидир. Бу һалларда рәгс едән кристал әвәзинә, идеал фонон газына бахмаг, јә'ни електрон газынын фонон газы илә гаршылыглы тә'сирини арашдырмаг кифајәтдир.

Фонон газынын әсасыны кристал гәфәсин рәгс тезликләринин далға векторундан асылылығы, јә'ни $\omega_j(\boldsymbol{q})$ дисперсија мүнасибәти тәшкил едир. Бу асылылыг схематик олараг үмуми шәкилдә шәкил 5.9-да көстәрилмишдир. Лакин реал кристаллар үчүн $\omega_j(\boldsymbol{q})$ дисперсија мүнасибәтини тапмагдан өтрү конкрет кристалын симметријасыны, онун кимјәви рабитәсинин тәбиәтини нәзәрә алмаг, груп нәзәријјәсини тәтбиг етмәк лазымдыр.

Експериментал јолла $\omega_j(\boldsymbol{q})$ функсијасыны тапмаг үчүн нејтрал зәррәчикләрин кристал гәфәсдән сәпилмәсиндән истифадә едилир. Белә зәррәчикләр фотонлар вә нејтронлар ола биләр. Фонон спектрини, јә'ни $\omega_j(\boldsymbol{q})$ функсијасынын тапмаг үчүн ән јахшы метод нејтронларын гәфәсдән сәпилмәсинә әсасланыр. Нејтронун гәфәс илә гаршылыглы тә'сирини онун фонон удмасы вә ја бурахмасы кими тәсәввүр етмәк олар (шәкил 7.5).



шәкил 7.5

Тутаг ки, далға вектору $\boldsymbol{k}$ олан нејтрон гәфәс үзәринә дүшүр вә сәпиләрәк $\boldsymbol{k}'$ вектору илә кристалы тәрк едир. Бу заман нејтрон далға вектору $\boldsymbol{q}$ олан фонон уда вә ја бураха биләр (шәкил 7.5).

Бу просесләр үчүн импулсун вә енержинин сахланмасы ганунлары

$$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}' \pm \boldsymbol{q} \qquad \varepsilon(\boldsymbol{k}') = \varepsilon(\boldsymbol{k}) \pm \hbar\omega(\boldsymbol{q}) \qquad (7.43)$$

шәклиндәдир.

Тәчрүбәдә нејтронун сәпилмә заманы итирдији вә ја газандығы $\Delta\varepsilon = \pm[\varepsilon(\boldsymbol{k}') - \varepsilon(\boldsymbol{k})]$ енержинин $(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}) = \pm\boldsymbol{q}$ далға векторлары фәргиндән асылылығыны тапсаг, $\hbar\omega(\boldsymbol{q})$ кәмијјәтини, үјғун олараг $\omega(\boldsymbol{q})$ дисперсија мүнасибәтини тә'јин едә биләрик.

II ФӘСИЛ

КЕЧИРИЧИ ОЛМАЈАН БӘРК ЧИСИМЛӘРИН ИСТИЛИК ХАССӘЛӘРИ ВӘ ҺАЛ ТӘНЛИЈИ

§ 8. Бәрк чисимләрин истилик тутуму нәзәријјәси. Ејнштејн вә Дебај моделләри

Чисимләрин истилик тутумунун експериментал вә нәзәри олараг өјрәнилмәси физикада чох мүһүм јер тутур. Бунун сәбәби одур ки, истилик тутуму маддәнин дахили гурулушуна вә ону тәшкил едән зәррәчикләрин һәрәкәтинин тәбиәтинә бүтүн термодинамик әмсаллaрын (истидән кенишләнмә, сыхылма вә с.) һамысындан даһа һәссасдыр. Тәсадүфи дејил ки, нисбилик нәзәријјәсинин јарадычысы Ејнштејн 1907-чи илдә бәрк чисимләрин истилик тутуму нәзәријјәси илә мәшғул олмуш, онун квант нәзәријјәсини вермиш вә көстәрмишдир ки, ашағы температурларда кристал гәфәсин дүјүнләриндә олан атомларын рәгси һәрәкәти квант характер дашыјыр. Бу нәзәријјә бир нечә ил сонра Дебај тәрәфиндән континиум маддәләр үчүн тәкмилләшдирилмишдир.

Биз бурада бәрк чисимләрин квант нәзәријјәсини фонон газы анлајышы әсасында шәрһ едәчәјик. Лакин, әввәлчә тәчрүбәдән алынан нәтичәни јада салаг. Бәрк чисимләрин истилик тутуму XIX јүзиллијин орталарындан интенсив өлчүлмәјә башланмышдыр. О заман тәчрүбәләр отаг вә ондан јухары температурларда апарылырды.

Тәчрүбәләрдән мә'лум олан бүтүн мә'луматлары тәһлил едәрәк Дүлонг вә Пти ашағыдакы үмуми нәтичәјә кәлмишдиләр:

Јүксәк температурларда ($T >> \theta$, *θ - Дебај температурудур) бәрк чисимләрин истилик тутуму* (c_V) *температурдан вә кристалын нөвүндән асылы олмајыб, сабит кәмијјәтдир; бир мол маддә үчүн бу сабитин гијмәти* $c_V \cong 6\,кал/K$ *-дур (Дүлонг-Пти гануну).*

Гејд едәк ки, c_V-нин гијмәти бәрк чисмин кечиричи (метал) вә ја диелектрик (изолјатор) олмасындан да асылы дејил.

Классик нәзәријјә. Јүксәк температурлар областында c_V үчүн алынмыш јухарыдакы нәтичә классик нәзәријјә әсасында чох көзәл изаһ едилир. Доғрудан да, тутаг ки, кристал N сајда гәфәс дүјүнләриндән ибарәтдир. Дүјүн нөгтәләриндә олан атомларын вә ја ионларын һәр биринә рәгс едән үч өлчүлү һармоник оссилјатор кими бахаг. Онда кристалын там енержиси 22

$$E = 3N\bar{\varepsilon} \tag{8.1}$$

олар, бурада $\bar{\varepsilon}$ бир хәтти оссилјаторун орта енержисидир. Классик физикаја көрә $\bar{\varepsilon} = k_0 T$ (k_0-Болсман сабити, T- мүтләг температур) олдуғуну нәзәрә алсаг, там енержи үчүн

$$E = 3Nk_0T \tag{8.2}$$

аларыг. Нәтичәдә истилик тутуму

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = 3Nk_0 \tag{8.3}$$

олар. C_V-ни бир мол маддә үчүн гијмәтләндирәк. Бу һалда $N = N_0 = 6{,}023 \cdot 10^{23}\, мол^{-1}$ (Авогадро әдәди), Болсман сабити $k_0 = 1{,}38 \cdot 10^{-16}\, ерг/К$. Онда (8.3)-дән $C_V^{кл}$ үчүн:

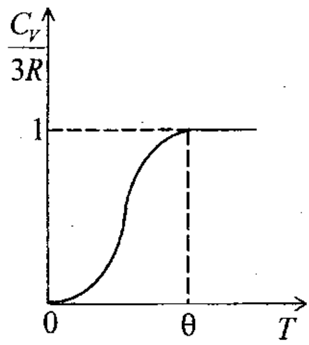
$$C_V^{кл} = 2{,}5 \cdot 10^8\, \frac{ерг}{К \cdot мол} = 5{,}96\, \frac{кал}{К \cdot мол} \tag{8.4}$$

аларыг ки, бу да експериментал факта там ујғундур $(1\, кал \approx 4{,}18 \cdot 10^7\, ерг)$.

Әкәр $k_0 N_0 = R = 1{,}99\, кал/К \cdot мол$ универсал газ сабитини јада салсаг, истилик тутумуну $C_V = 3R = = 5{,}96\, кал/К \cdot мол$ кими дә јаза биләрик. Лакин тәчрүбә илә нәзәријјә арасындакы бу ујғунлуг узун сүрмәди. Ашағы температурларын алынма техникасы инкишаф етдикчә бәрк чисимләрин истилик тутумуну даһа ашағы температурларда өлчмәјә башладылар вә јени-јени фактлар мејдана чыхды. Мә'лум олду ки, температур ашағы дүшдүкчә C_V азалыр вә һәтта $T \to 0$-да C_V дә сыфыра јахынлашыр (термодинамиканын үчүнчү ганунуна ујғун олараг) (шәкил 8.1). Классик нәзәријјә илә тәчрүбә арасындакы бу ујғунсузлуг бәрк чисмин истилик тутуму үчүн јени нәзәријјә гурмаг тәләб едирди. Белә бир јени нәзәријјәни - квант нәзәријјәсинин әсасыны Ејнштејн јаратды.

Квант нәзәријјәси. Ејнштејнин квант нәзәријјәсинин әсас идејасы ондан ибарәтдир ки, бурада кристалын енержиси (8.1)-дә дүјүн нөгтәләринин енержиси $\bar{\varepsilon} = k_0 T$ әвәзиндә Планкын һармоник оссилјатор үчүн алдығы

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_0 T} - 1} \tag{8.1 a}$$



шәкил 8.1

ифадәсини jазмаг тәклиф олунур. Jалныз jүксәк температурларда ($k_0T >> \hbar\omega$) (8.1а)-дан $\bar{\varepsilon} = k_0T$ алыныр. Биз бурада фонон газы анлаjышындан истифадә едәчәjик. Бәрк чисмин истилик тутумуну тапмаг үчүн онун енержисинин температурдан асылылығыны, jә'ни $E(T)$ функсиjасынын ачыг шәклини билмәк лазымдыр. Јухарыда (§7) көстәрдик ки, рәгс едән кристалик гәфәсин енержисини һесабламаг әвәзинә фонон газынын енержисини һесабламаг кифаjәтдир (шәкил 7.1). Фонон газынын T температурунда енержиси (7.25) формулу илә верилир. Бураjа акустик вә оптик фононларын енержиләри дахилдир. Биз (7.25) ифадәсини ($\overline{E}_f \equiv E$ ишарә етмәклә) ашағыдакы шәкилдә jаза биләрик:

$$E = E_{\text{ак}} + E_{\text{оп}}. \tag{8.5}$$

Бурада

$$E_{\text{ak}} = \sum_{j=1}^{3}\sum_{q} \frac{\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})}{e^{\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})/k_0T} - 1} \tag{8.6}$$

акустик фононларын,

$$E_{\text{оп}}=\sum_{j=4}^{3S}\sum_{q}\frac{\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})}{e^{\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})/k_0T}-1} \qquad (8.7)$$

оптик фононларын енержисидир.

Бәрк чисимләрин истилик тутумунун квант нәзәријјәсини гурмаг (8.6) вә (8.7) чәмләринин ачыг шәклини тапмаг демәкдир. Көрүндүјү кими, бунун үчүн $\omega_j(q)$ дисперсија мүнасибәтини билмәк лазымдыр. Мә'лумдур ки, реал кристаллар үчүн $\omega_j(q)$ функсијасынын шәкли чох мүрәккәбдир. Она көрә дә, биз (8.6) вә (8.7) чәмләрини јалныз садә моделләр үчүн һесаблаја биләрик. Белә ики модел вар.

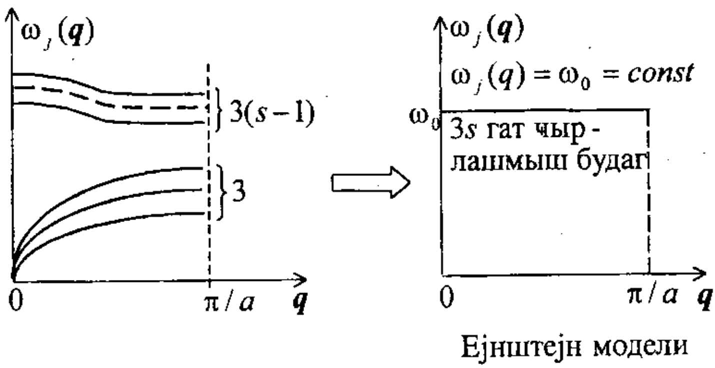
Ејнштејн модели. Бу моделә көрә, кристал гәфәсдә мүмкүн олан бүтүн тезликләрин һамысы ејнидир: $\omega_j(q)=\omega_0$, јә'ни кристалын тезлик спектри чох садә спектрлә әвәз олунур (шәкил 8.2). Башга сөзлә, фонон газында олан $3sN$ сајда фононларын һамысы бир нөвдүр вә $\omega_0=const$ тезлијинә, јә'ни $\hbar\omega_0$ енержисинә маликдирләр. Бу һалда (8.6) чәми $3N$ сајда, (8.7) топлусу исә $3(s-1)N$ сајда ејни һәдләрдән ибарәт олур. Буна көрә дә, фонон газынын там енержиси (8.5), јә'ни кристалын там енержиси:

$$E=3sN\frac{\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0/k_0T}-1} \qquad (8.8)$$

олур. Истилик тутуму $C_V=\dfrac{\partial E}{\partial T}$ исә

$$C_V=3sNk_0\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0T}\right)^2\frac{e^{\hbar\omega_0/k_0T}}{(e^{\hbar\omega_0/k_0T}-1)^2} \qquad (8.9)$$

шәклинә дүшүр.



шәкил 8.2

Истилик тутумунун (8.9) ифадәсиндә характеристик

$$\theta_0 = \frac{\hbar\omega_0}{k_0} \tag{8.10}$$

Ејнштејн температуру дахил етсәк,

$$C_V(T) = 3sNk_0 A\left(\frac{\theta_0}{T}\right) \tag{8.11}$$

олар. Бурада

$$A\left(\frac{\theta_0}{T}\right) = \left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 \left[\exp\left(\frac{\theta_0}{T}\right) - 1\right]^{-2} \exp\left(\frac{\theta_0}{T}\right) = \left(\frac{\theta_0 / 2T}{\sin h(\theta_0 / 2T)}\right)^2 \tag{8.12}$$

Ејнштејн функсијасы адланыр. Бу функсијанын ашағы вә јухары температурларындакы асимптотикаларыны араштыраг.

а) Јүксәк температурлар $T >> \theta_0$. Инди вә бундан сонракы һалларда јүксәк температурлар областына бахмаг үчүн бизә ашағыдакы функсијаларын асимптотикасыны билмәк лазымдыр.

Кичик $x << 1$ -лар үчүн x^2 дәгиглији илә һәмин асимптотикалары јазаг:

$$\frac{1}{e^x - 1} \approx \frac{1}{x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \dots} = \frac{1}{x}\left(1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12}\right); \; x << 1 \qquad (8.13)$$

$$\frac{1}{(e^x - 1)^2} \approx \frac{1}{x^2}\left(1 - x + \frac{5x^2}{12}\right); \qquad x << 1 \qquad (8.14)$$

$$\frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \approx \frac{1}{x^2}\left(1 - x + \frac{5x^2}{12}\right)\left(1 + x + \frac{x^2}{2}\right) = \frac{1}{x^2}\left(1 - \frac{x^2}{.12}\right); \quad x << 1 \qquad (8.15)$$

Бизим һалда $x = \theta_0 / T << 1$ олдуғундан (8.12) вә (8.15)- дән Ејнштејн функсијасынын асимптотикасы

$$A\left(\frac{\theta_0}{T}\right) = 1 - \frac{1}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2; \qquad T >> \theta_0 \qquad (8.16)$$

олар.

Истилик тутуму C_V үчүн (8.11) вә (8.16)-дан

$$C_V = 3sNk_0\left[1 - \frac{1}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right]; \qquad T >> \theta_0 \qquad (8.17)$$

аларыг. Бу ифадәдән $T \to \infty$ олдугда C_V үчүн

$$C_V = 3sNk_0 = 3N_0k_0 = 3R = C_V^{\text{кл}} \qquad (8.18)$$

классик нәзәријјәнин нәтичәсини аларыг, бурада $sN = N_0$ Авогадро әдәди гәбул едилмишдир. N- гәфәсдә олан елементар өзәкләрин, s- бир өзәкдәки атомларын сајыдыр.

Ејнштејн моделинә көрә, гәфәс рәгсләринин квантланмасы һесабына истилик тутумуна квант әлавәси үчүн (8.17)-дән

$$\Delta C_V = C_V - C_V^{\text{кл}} = -3k_0N_0 \cdot \frac{1}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 = -\frac{C_V^{\text{кл}}}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 \qquad (8.19)$$

аларыг. Көрүндүјү кими, рәгсин квантланмасы истилик тутумуну азалдыр.

б) Ашағы температурлар $T \ll \theta_0$. Бу һалда (8.12)-дән көрүндүјү кими, Ејнштејн функсијасынын асимптотикасы

$$A\left(\frac{\theta_0}{T}\right) = \left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\theta_0}{T}\right); \qquad T \ll \theta_0 \qquad (8.20)$$

шәклинә дүшүр. Онда (8.11) вә (8.20)-дән

$$C_V(T) = 3sNk_0\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\theta_0}{T}\right); \qquad T \ll \theta_0. \qquad (8.21)$$

Беләликлә, истилик тутумунун $T \to 0$ һалында експоненсиал олараг сыфыра јахынлашдығы $C_V(T \to 0) \Rightarrow 0$ ајдын олур.

(8.16) вә (8.20)-дән көрүнүр ки, температур $0 \le T \le \infty$

арасында дәјишәркән Ејнштејн функсијасы $0 \le A\left(\frac{\theta_0}{T}\right) \le 1$

арасында гијмәт алыр:

$$A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)=\begin{cases}0; & T \to 0 \quad \text{олдугда}\\ 1; & T \to \infty \quad \text{олдугда}.\end{cases} \tag{8.22}$$

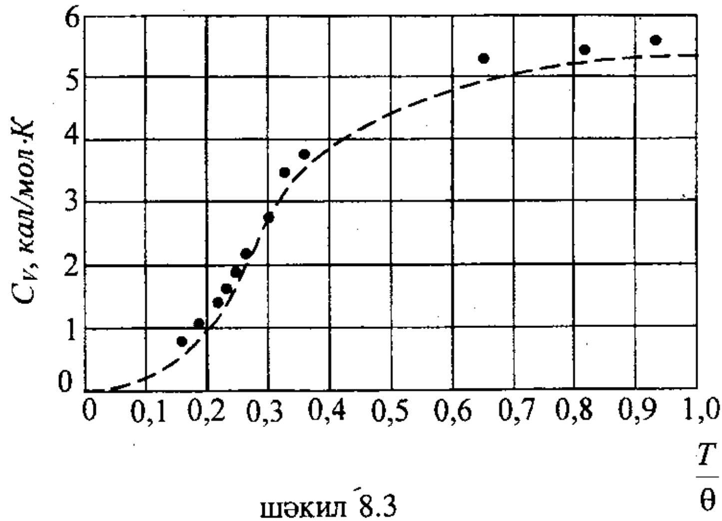
Беләликлә, тәҹрүбәдән алынан фактла нәзәријјә арасындакы ујғунсузлуг принсипҹә (кејфијјәтҹә) арадан галхмыш олур вә белә бир нәтиҹәјә кәлирик:

Јухары температурларда дүјүн нөгтәләринин рәгси һәрәкәти классик (§1-дә көстәрилдији кими), ашағы температурларда исә квант тәбиәтлидир.

Ејнштејн истилик тутуму нәзәријјәси үчүн вердији (8.11) температур асылылығынын алмаз үчүн олан тәҹрүби нәтиҹәләри илә мүгајисәси шәкил 8.3-дә верилмишдир (A.Einstein, Ann.Physik 22, 180, 1907). C_V-нин (8.11) әсасында һесаблајаркән Ејнштејн температуру $\theta_0 = 1320^0 K$ көтүрүлмүшдүр (шәкил 8.3 Ч.Киттелин китабындан көтүрүлмүшдүр).

Шәкил 8.3-дән көрүнүр ки, Ејнштејн нәзәријјәсинә көрә, C_V тәҹрүбәдән даһа тез сыфра јахынлашыр. Тәҹрүбә көстәрир ки, $C_V(T)$ сыфра (8.21)-дә олан експоненсиал јолла јох, үстлү функсија $C_V(T \to 0) \sim T^3$ кими кедир. Ејнштејн нәзәријјәси илә тәҹрүбә арасындакы бу ујғунсузлуғу арадан галдырмаг үчүн Дебај тезлик спектринин моделини тәкмилләшдирмиш вә тәҹрүбәјә даһа ујғун нәтиҹә алынмышдыр.

Ејнштејн-Дебај модели. Бу моделә көрә, тезлик спектриндә јалныз оптик будаға аид олан тезликләр далға



шәкил 8.3

векторундан асылы олмајыб сабитдирләр, јә'ни Ејнштејн моделинә ујғундурлар. Акустик будағын тезликләри исә далға әдәдинә мүтәнасибдир. Ән садә вариантда Ејнштејн-Дебај моделини

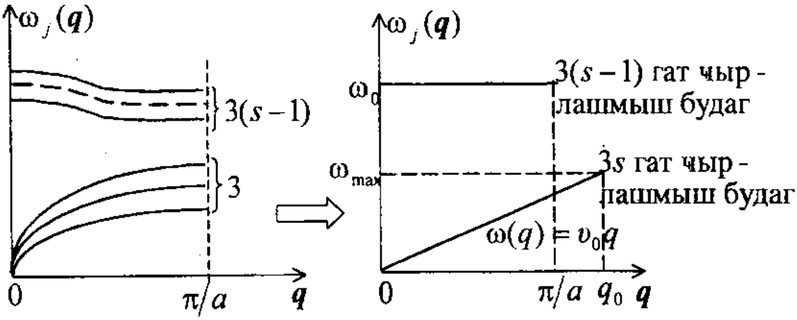
$$\omega_j(\boldsymbol{q}) = \begin{cases} v_0 q; \ j = 1,2,3 \\ \omega_0; \ j = 4,5,\ldots,3s \end{cases} \tag{8.23}$$

кими јаза биләрик (шәкил 8.4). Бурада v_0 - кристалда сәсин сүр'әти, $\omega_0 = const$ - оптик рәгсләрин тезлијидир.

Бу моделә көрә оптик фононларын (8.7) енержисини

$$E_{\text{оп}} = 3(s-1)N\frac{\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0/k_0T}-1} \tag{8.24}$$

вә ја



Реал модел   Ејнштејн-Дебај модели

шәкил 8.4

$$E_{\text{оп}} = 3(s-1)Nk_0T\left(\frac{\theta_0}{T}\right)\left[\exp\left(\frac{\theta_0}{T}\right)-1\right]^{-1} \tag{8.25}$$

кими јаза биләрик.

Акустик фононларын енержиси үчүн (8.6) вә (7.28)-дән Дебај модели $\omega(q) = \upsilon_0 q$ јахынлашмасында

$$E_{\text{ak}} = \frac{3V\hbar}{2\pi^2\upsilon_0^3}\int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_0T}-1} \tag{8.26}$$

аларыг, бурада $\omega_{\max}$ - акустик фононларын максимум тезлији - Дебај тезлијидир:

$$\omega_{\max} = \upsilon_0 q_0 \tag{8.27}$$

һарада ки,

$$q_0 = \left(\frac{6\pi^2}{\Omega_0}\right)^{1/3} = \frac{\left(6\pi^2\right)^{1/3}}{a} \tag{8.28}$$

Дебај далға әдәдидир (шәкил 8.4). $\Omega_0 = \left(\dfrac{V}{N}\right)$ - өзәјин һәчми, куб үчүн $\Omega_0 = a^3$. Көрүндүјү кими, $q_0 > q_{\max} = \pi / a$.

Акустик фононларын (8.26) енержисини

$$E_{ak} = \int_0^{\omega_{\max}} \hbar\omega N(\omega) g(\omega) d\omega \tag{8.29}$$

шәклиндә јаза биләрик. Бурада $\hbar\omega$ - бир фононун енержиси, $N(\omega)$ - тезлији ω олан фононларын T температурундакы орта сајы (7.24), $g(\omega)$ ваһид тезлик интервалында олан тезликләрин сајы (7.37), јә'ни тезликләрин сыхлыг функсијасыдыр (шәкил 7.3). Демәли, Дебај моделинин әсасыны (7.37) тезлик сыхлыг функсијасы тәшкил едир.

Бу функсијаны

$$g(\omega) = \begin{cases} \dfrac{3V}{2\pi^2 v_0^3}\omega^2; & 0 \le \omega \le \omega_{\max} \\ 0; & \omega > \omega_{\max} \end{cases} \tag{8.29 a}$$

кими дә јаза биләрик.

Адсыз $x = \dfrac{\hbar\omega}{k_0 T}$ дәјишәнләри дахил етсәк, акустик фононларын енержисини

$$E_{ak} = 3Nk_0 T D_3\left(\frac{\theta}{T}\right) \tag{8.30}$$

шәклиндә јаза биләрик. Бурада (7.40)-а ујғун олараг

$$D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)=3\left(\frac{T}{\theta}\right)^3\int_0^{\theta/T}\frac{x^3dx}{e^x-1} \qquad (8.31)$$

Дебај функсијасыдыр. Бу функсијаја характеристик параметр кими дахил олан

$$\theta=\frac{\hbar\omega_{\max}}{k_0}=(6\pi^2)^{1/3}\cdot\frac{\hbar v_0}{k_0a} \qquad (8.32)$$

Дебај температуру адланыр.

Беләликлә, Дебај моделинә көрә, фонон газынын (кристалын) там енержиси (8.25) вә (8.30)-дан

$$E=3Nk_0T\left[D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)+(s-1)\left(\frac{\theta_0}{T}\right)\left(e^{\theta_0/T}-1\right)^{-1}\right] \qquad (8.33)$$

олур. Истилик тутуму $C_V=\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V$ үчүн (8.33)-дән

$$C_V(T)=3Nk_0\left[D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)+TD_3'\left(\frac{\theta}{T}\right)+(s-1)A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)\right] \qquad (8.34)$$

аларыг. Бурада $A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)$ - Ејнштејн функсијасы (8.12), $D_3'\left(\frac{\theta}{T}\right)$-Дебај функсијасынын T-јә көрә төрәмәсидир. Бу төрәмәнин

$$D_3'\left(\frac{\theta}{T}\right)=\frac{3}{T}D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)-\frac{3\theta}{T^2}\left(e^{\theta/T}-1\right)^{-1} \qquad (8.35)$$

олдуғуну нәзәрә алсаг, C_V-нин (8.34) ифадәси сон һалда

$$C_V(T) = 3Nk_0\left[4D_3\left(\frac{\theta}{T}\right) - 3\left(\frac{\theta}{T}\right)\left(e^{\theta/T} - 1\right)^{-1} + (s-1)A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)\right] \tag{8.36}$$

шәклә дүшәр. Бу кечиричилији олмајан кристал бәрк чисимләрин истилик тутуму үчүн ән үмуми ифадәдир. Бурада әввәлки ики һәдд акустик фононларын, үчүнчү һәдд исә оптик фононларын истилик тутумуна вердији пајдыр. Әкәр кристал гәфәс садәдирсә, јә'ни елементар өзәкдә јалныз бир атом вардырса $(s=1)$, онда оптик фононлар белә кристалда мүмкүн дејил вә (8.36)-да үчүнчү һәдд јох олур.

Истилик тутуму үчүн олан ән үмуми (8.36) ифадәсини мүхтәлиф лимит һалларында арашдырмаздан әввәл (8.31) Дебај функсијасынын јухары вә ашағы температурлардакы асимптотикаларыны јазаг.

Јухары температурларда $T \gg \theta$ олдуғундан (8.31)-дә $x \ll 1$-дир вә (8.13) сырасындан истифадә етмәк олар. Онда Дебај функсијасынын јүксәк температур асимптотикасы

$$D_3\left(\frac{\theta_0}{T}\right) = 1 - \frac{3}{8}\left(\frac{\theta}{T}\right) + \frac{1}{20}\left(\frac{\theta}{T}\right)^2; \quad T \gg \theta \tag{8.37}$$

шәклинә дүшәр.

Ашағы температурларда $T \ll \theta$, Дебај функсијасы (8.31)-дә интегралын јухары сәрһәддини $\theta/T \to \infty$ гәбул етмәк олар. Онда

$$D_3\left(\frac{\theta}{T}\right) = 3\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 I_3 \tag{8.38}$$

олар, бурада

$$I_n = \int_0^{\infty} \frac{x^n dx}{e^x - 1} \tag{8.39}$$

типли интегралдыр.

Бәрк чисимләрин нәзәриjjәсиндә (8.39) I_n типли интеграллар чох раст кәлдиjиндән онлары һесаблаjаг. Бунун үчүн интеграл алтында олан функсиjанын шәклини бир аз дәjишдирәк. $x > 0$ олдуғундан

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = e^{-x}\left(1 + e^{-x} + e^{-2x} + \ldots\right) = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-kx} \tag{8.40}$$

кими jазмаг олар. Буну (8.39)-да нәзәрә алсаг,

$$I_n = \int_0^{\infty} x^n \sum_{k=1}^{\infty} e^{-kx} dx = \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\infty} x^n e^{-kx} dx = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{n+1}} \int_0^{\infty} y^n e^{-y} dy \tag{8.41}$$

олар, бурада $kx = y$ ишарә едилмишдир. Беләликлә,

$$I_n = \Gamma(n+1)\,\xi\,(n+1) \tag{8.42}$$

шәклинә дүшәр. Бурада

$$\Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} y^n e^{-y} dy \tag{8.43}$$

мә'лум Гамма функсиjа.

$$\xi(n+1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{n+1}} \tag{8.44}$$

Зета функсиjасыдыр.

Гамма функсиjасынын гиjмәтини тапмаг үчүн онун ашағыдакы хассәләрини билмәк кифаjәтдир:

$$\Gamma(n+1) = n! \qquad \text{әкәр } n\text{- там әдәддирсә}$$

$$\Gamma(n+1) = n\Gamma(n) \qquad \text{ихтиjари } n \text{ үчүн} \tag{8.45}$$

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi} \quad .$$

$\Gamma(n+1)$ функсиjасынын $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$ хассәсини исбат етмәк үчүн (8.43)-дә бир дәфә һиссә-һиссә интеграллама апармаг лазымдыр.

Зета функсиjасынын гиjмәтини тапмаг үчүн исә (8.44) чәмини һесабламаг лазымдыр. Бу функсиjанын бир нечә гиjмәтини бурада jазаг:

$$\xi\left(\frac{3}{2}\right) = 2{,}612; \quad \xi(2) = \frac{\pi^2}{6} = 1{,}645; \quad \xi\left(\frac{5}{2}\right) = 1{,}341;$$

$$\xi(3) = 1{,}202; \quad \xi(4) = \frac{\pi^4}{90} = 1{,}082. \tag{8.45 a}$$

Беләликлә, (8.42)-jә әсасән бизә лазым олан интеграл

$$I_3 = \Gamma(4)\cdot\xi(4) = 6\cdot\frac{\pi^4}{90} = \frac{\pi^4}{15} \tag{8.46}$$

олар. Нәтичәдә ашағы температурларда Дебаj функсиjасы (8.38) үчүн

$$D_3\left(\frac{\theta}{T}\right) = \frac{\pi^4}{15}\left(\frac{T}{\theta}\right)^3; \quad T << \theta \tag{8.47}$$

аларыг.

Температур $0 \le T \le \infty$ интервалында дәjишдикдә

Дебај функсијасы да Ејнштејн функсијасы кими $0 \le D\left(\frac{\theta}{T}\right) \le 1$ арасында гијмәт алыр. Доғрудан да (8.37) вә (8.47)-дән чыхыр ки,

$$D_3\left(\frac{\theta}{T}\right) = \begin{cases} 0; & T \to 0 \\ 1; & T \to \infty. \end{cases} \tag{8.48}$$

Инди истилик тутуму үчүн ән үмуми олан (8.36) ифадәсинин јухары вә ашағы температурлар областында асимптотикасыны тапаг.

а) *Јүксәк температурлар* $T \gg \theta_0$. Ејнштејн температуру Дебај температурундан бөјүк $\theta_0 > \theta$ олдуғундан $T \gg \theta$ олур. Бу һалда (8.13), (8.16) вә (8.37)-дән истифадә етсәк истилик тутуму (8.36)

$$C_V(T) = 3Nk_0\left[s - \frac{1}{20}\left(\frac{\theta}{T}\right)^2 - \frac{(s-1)}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right]; \quad T \gg \theta \tag{8.49}$$

шәклинә дүшәр. Лимит һалында $(T \to \infty)$ бурадан

$$C_V = 3Nsk_0 = 3N_0k_0 = 3R \tag{8.50}$$

классик нәзәријјәнин нәтичәси алыныр. Акустик вә оптик рәгсләрин квантланмасы һесабына истилик тутумуна олан квант әлавәси (8.49)-дан

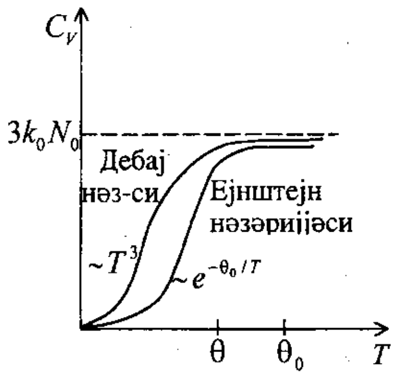
$$\Delta C_V(T) = -\frac{3Nk_0}{4}\left[\frac{1}{5}\left(\frac{\theta}{T}\right)^2 + \frac{(s-1)}{3}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right]; \quad T \gg \theta \tag{8.51}$$

алыныр.

б) *Ашағы температурлар* $T \ll \theta$. Бу заман (8.36)-да $e^{-\theta/T}$ мүтәнасиб олан һәдләри атсаг вә (8.47)-ни нәзәрә алсаг, истилик тутуму үчүн

$$C_V(T) = \frac{12\pi^4}{5} Nk_0 \left(\frac{T}{\theta}\right)^3; \quad T \ll \theta \qquad (8.52)$$

аларыг. Беләликлә, Ејнштејн моделиндән фәргли олараг, Дебај моделинә көрә ашағы температурларда бәрк чисимләрин истилик тутуму $C_V \sim T^3$-дур. Температурдан бу чүр асылылыг тәчрүбәјә даһа јахындыр, јә'ни C_V сыфра експоненсиал функсијадан јаваш $\sim T^3$ кими сыфра јахынлашыр. Бу Дебајин T^3 гануну адланыр. Үмумијјәтлә, бүтүн температурларда истилик тутуму үчүн Дебај нәзәријјәси Ејнштејн нәзәријјәсиндән [illegible] гијмәт верир (шәкил 8.5).



шәкил 8.5

Мүрәккәб гәфәсли ($s > 1$) кристаллар үчүн нисбәтән ашағы ($T < \theta_0$) температурларда оптик фононларын истилик тутумуна вердији пајы нәзәрә алмамаг олар. Бу һалда вә садә гәфәсли ($s=1$) бәрк чисимләрин истилик тутуму јалныз акустик фононларла тә'јин олунур. Бу заман (8.36) -да әввәлинчи ики һәдди сахламагла истилик тутуму үчүн

$$C_V(T) = 3k_0 N L_V\left(\frac{\theta}{T}\right) \tag{8.53}$$

аларыг. Бурада $L_V = \frac{\partial}{\partial T}(TD_3)$, вә ја ачыг шәкилдә

$$L_V\left(\frac{\theta}{T}\right) = 4D_3\left(\frac{\theta}{T}\right) - \frac{3\theta}{T}\left(e^{\theta/T}-1\right)^{-1} \tag{8.54}$$

функсијасы јалныз $x = \frac{\theta}{T}$ дәјишәниндән асылыдыр вә истилик тутумунун температур асылылығыны тә'јин едир. Бу функсијаны

$$L_V\left(\frac{\theta}{T}\right) = 3\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{\theta/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x-1)^2} \tag{8.54 a}$$

шәклиндә јазмаг олар. Доғрудан да (8.54)-дән (8.54 а)-ны алмаг үчүн (8.31) Дебај функсијасына дахил олан интегралы бир дәфә һиссә-һиссә интеграламаг лазымдыр.

Температур $T\to\infty$ һалында $e^x - 1 \approx x$ јазмаг олар вә (8.54а)-дан $L_V = 1$ олур, јә'ни $C_V = 3Nk_0$ классик нәтичә алыныр.

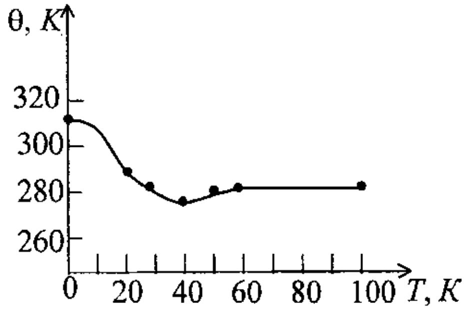
Температур $T \to 0$ һалында исә интегралын үст сәрһәддини $\theta/T \to \infty$ илә әвәз етмәк олар. Алынан чәдвәл интегралынын

$$\int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} dx = \frac{4\pi^4}{15} \tag{8.55}$$

олдуғуну биләрәк (8.53)-дән Дебаjын (8.52) $C_V \sim T^3$ гануну аларыг.

Истилик тутумунун (8.53) ифадәсиндән көрүнүр ки, садә кристаллар ($s=1$) үчүн ихтиjари температурларда вә мүрәккәб ($s>1$) кристаллар үчүн исә нисбәтән ашағы ($T<\theta_0$) температурларда (оптик фононларын оjанмадығы температур областында) $C_V(T)$ функсиjасына jалныз бир параметр, jә'ни Дебаj температуру θ дахилдир. Бәрк чисмин тәбиәтини jалныз θ тәмсил едир, jә'ни ону характеризә едир. Тә'рифинә (8.32) көрә бу характеристик параметр елә бир температурдур ки, $T \geq \theta$ олдугда кристалда мүмкүн олан бүтүн тезликли акустик фононлар $\omega \leq \omega_{max}$ оjанмыш олур. Еjни заманда, θ макроскопик олараг классик вә квант нәзәриjjәләринин сәрһәддини тә'jин едир. Белә ки, $T>\theta$ температурларда дүjүн нөгтәләринин рәгси һәрәкәти классик, $T \leq \theta$ температурларда исә рәгси һәрәкәти квант тәбиәтлидир.

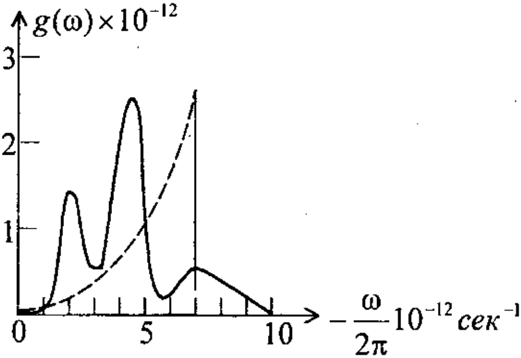
Әслиндә тә'рифинә көрә (8.32) Дебаj температуру сабит параметрдир $\theta = \dfrac{\hbar\omega_{max}}{k_0} = const$. Лакин, $\theta = const$ көтүрүрәк Дебаj нәзәриjjәсиндән алынан (8.53) $C_V(T)$ асылылығынын тәчрүбәдән алынан нәтичәләрлә мүгаjисәси көстәрир ки, нәзәриjjәнин вердиjи (8.53) асылылыгла тәчрүбәдән алынан асылылыг там уjғунлашмыр. Хүсуси һалда $C_V(T) \sim T^3$ гануну jалныз (4÷5)К температурларындан ашағыда тәчрүбә илә дүз кәлир. $T > 10\,K$-дән jухары температурларда Дебаj нәзәриjjәси илә тәчрүбә арасында фәрг алыныр. Бу фәрги арадан галдырмаг үчүн фәрз едилир ки, Дебаj параметри температурдан асылыдыр: $\theta = \theta(T)$. Демәли, (8.53) функсиjасында $\theta(T)$ үчүн елә бир асылылыг көтүрмәк лазымдыр ки, Дебај нәзәријјәси илә тәчрүбә арасында асылылыг ејни олсун. Тәчрүбә илә нәзәријјәнин мүгајисәсиндән алынан бу асылылыг шәкил 8.6-да нөгтәләрлә көстәрилмишдир. Шәкил 8.6 А.И.Анселмин "Введение в теорию полупроводников", М., Наука, 1978 китабындан көтүрүлмүшдүр.



шәкил 8.6

Дебај нәзәријјәси илә тәчрүбәдән алынан нәтичәләрин там ујғун кәлмәмәсинин әсил сәбәби ондадыр ки, Дебај нәзәријјәси чох садә $\omega(q) = v_0 q$ дисперсија мүнасибәтинә вә бундан чыхан $g(\omega) \sim \omega^2$ тезликләрин сыхлыг функсијасына әсасланмышдыр. Әслиндә $\omega(q)$ вә $g(\omega)$ функсијалары реал кристаллар үчүн даһа мүрәккәбдирләр.

Мәсәлән, NaCl кристалында акустик рәгсләр үчүн Келлерман Е.У. (Phil. Trans. Roy. Soc. 238, 1940. 3; Proc. Roy.Soc.A 178, 1941,17) $g(\omega)$ функсијасыны һесабламышдыр. Шәкил 8.7-дә онун алдығы нәтичә (бүтөв әјри) вә $g(\omega) \sim \omega^2$ (кәсик әјри) көстәрилмишдир (шәкил А.И. Анселмин китабындан көтүрүлмүшдүр). Келлерманын алдығы $g(\omega)$ функсијасы әсасында һесабланмыш $\theta(T)$ асылылығы шәкил 8.6-да бүтөв әјри илә верилмишдир. Көрүндүјү кими, тәчрүбә илә ујғунлуг јахшыдыр.



шәкил 8.7

Тәчрүбәдән, верилмиш кристал үчүн Дебај температуруну тапараг ω_{max}, орадан да кристалда сәсин сүр'əти вә (5.14)-дән еластиклик әмсалы β-ны тә'јин етмәк олар. Дебај температуру әксәр бәрк чисимләр үчүн әримә температуру тәртибиндәдир. Бә'зи бәрк маддәләр үчүн θ-нын гијмәтләри чәдвәл 8.1 –дә верилмишдир (θ -нын гијмәтләри Н.Ј. Ашкрофт, Н.Д. Мермин "Физика твердого тела", 1979 китабындан көтүрүлмүшдүр).

Истилик тутуму үчүн бурада шәрһ етдијимиз нәзәријјәдән көрүнүр ки, доғрудан да, C_V маддәнин гурулушуна, онун енержи спектринин шәклинә чох һәссас бир термоднамик кәмијјәтдр. Истилик тутуму о системләрдә температурдан асылы олмајыб сабит олур ки, орада һеч бир активләшмә јохдур. Кристалларда $T \leq \theta$ температурларда һәјачанланма (фононларын јаранмасы) просеси олдуғундан енержи удулмасы вар вә она көрә дә C_V температурдан асылы олур. Һәјачанланма просеси $T \geq \theta$ температурларда баша чатыр вә бундан сонра кристалын енержиси T -јә мүтәнасиб олараг артыр, јә'ни истилик тутуму сабит галыр.

Чәдвәл 8.1

	Li	Na	K	Be	Mg	Ca	B	Al	Ga
θ,K	400	150	100	100	318	230	1250	394	240
	In	Tl	Fe	Ni	$C_{\text{алмаз}}$	Si	Ge	Pb	As
θ,K	129	96	420	375	1860	625	360	88	285
	Sb	Bi	Cu	Ag	Au	Hg	Mn	Cr	
θ,K	200	120	315	215	170	100	400	460	

Биз бурада јалныз кечиричилији олмајан (диелектрик) кристалларын истилик тутумуна бахдыг, јә'ни елә бәрк чисимләрә бахдыг ки, онларда јалныз фонон газы вардыр. Кечиричи бәрк чисимләрдә (металларда) фонон газындан башга сәрбәст електрон газы мөвчуддур. Електрон газынын енержиси дә температурдан асылыдыр вә онун һесабына да истилик тутуму олур. Белә бәрк чисимләрин- металларын истилик тутуму нәзәријјәсини биз III фәсилдә шәрһ едәчәјик.

§ 9. Фонон газы вә бәрк чисимләрин һал тәнлији. Грунејзен сабити

Индијә гәдәр биз дүјүн нөгтәләринин рәгсләрини өјрәнәркән, кристалын там енержисини вә истилик тутуму һесаблајаркән атомлар арасындакы гаршылыглы тә'сир потенсиалы үчүн һармоник јахынлашма илә кифајәтләнмишдик. Лакин бәрк чисимләрин бир чох хассәләри вардыр ки, онлар гаршылыглы тә'сирин анһармоник һәдди илә тә'јин олунур. Белә хассәләрдән: бәрк чисмин һал тәнлији (бәрк чисмин ону әһатә едән башга чисимләрә тәзјиги), кристалларын истидән кенишләнмәси, фонон истилик кечиричилијинин сонлу олмасы, јә'ни истилик мүгавимәти кимиләрини көстәрмәк олар. Бу фәсилдә биз бәрк чисимләрин анһармоникликлә тә'јин олунан (γ -параметри илә) хассәләринә бахачајыг. Әввәлчә бәрк чисмин һал тәнлијини тапаг.

Термодинамикадан мә'лумдур ки, макроскопик системин һал тәнлији үмуми һалда

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \tag{9.1}$$

шәклиндә јазылыр, бурада P- системин әтрафдакы чисимләрә етдији тәзјиг, $F = F(V,T)$ -системин сәрбәст енержиси, V -онун һәчми, T -мүтләг температурдур. Сәрбәст енержи F илә там енержи E арасында олан үмуми мүнасибәтин

$$F = E - TS \tag{9.2}$$

олдуғуну билирик. Бурада $S=-\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V$ - системин ентропијасыдыр. Бурадан

$$F = E + T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \tag{9.3}$$

вә ја там енержи үчүн

$$E = -T^2 \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{F}{T}\right)_V \tag{9.4}$$

аларыг. Әкәр T -јә көрә интеграллазаг, сәрбәст енержини там енержи илә

$$F=-T\int \frac{E(T,V)}{T^2}\,dT \tag{9.5}$$

шәклиндә ифадә едәрик. Демәли, мәсәлә там енержинин тапылмасына кәлир.

Әввәлҹә Дебаj јахынлашмасында садә кристаллара ($s=1$) бахаг. Бу һалда кристалын там енержиси сыфырынҹы рәгсләрин енержиси вә акустик фононларын енержисинин ҹәминә (7.12)

$$E=E_0+E_{\text{ак}} \tag{9.6}$$

бәрабәрдир. Онда (8.26) вә (9.6)-дан садә кристалын там енержиси үчүн

$$E(V,T)=E_0(V)+\frac{3V\hbar}{2\pi^2 v_0^3}\int\limits_0^{\omega_{max}}\frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_0T}-1} \tag{9.7}$$

аларыг. Бу ифадәни (9.5)-дә јеринә јазсаг вә

$$\int\frac{1}{(e^{\hbar\omega/k_0T}-1)}\frac{dT}{T^2}=-\frac{k_0}{\hbar\omega}\ln(1-e^{-\hbar\omega/k_0T}) \tag{9.8}$$

олдуғуну нәзәрә алсаг,сәрбәст енержи үчүн

$$F(V,T)=E_0(V)+k_0T\frac{3V}{2\pi^2 v_0^3}\int\limits_0^{\omega_{max}}\omega^2\ln\left(1-e^{-\hbar\omega/k_0T}\right)d\omega \tag{9.9}$$

ифадәсини аларыг. Дебаj температурунун [(8.27) вә (8.32)-јә бах]

$$\theta=\frac{\hbar\omega_{max}}{k_0}=\frac{\hbar v_0 q_0}{k_0}=\frac{\hbar v_0}{k_0}\left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} \tag{9.10}$$

тә'јининдән истифадә етсәк,(9.9) -дан кристалын сәрбәст енержиси

$$F(V,T)=E_0(V)+9Nk_0T\left(\frac{T}{\theta}\right)^3\int\limits_0^{\theta/T}x^2\ln\left(1-e^{-x}\right)dx \qquad (9.11)$$

шәклинә дүшәр, бурада $x=\dfrac{\hbar\omega}{k_0T}$ дәјишәни дахил едилмишдир.

Дебај модели үчүн сыфырынчы квант рәгсләринин $E_0(V)$ енержисини

$$E_0(V)=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}\sum_{q}\hbar\,\omega_j(\boldsymbol{q})=\frac{3}{2}\sum_{q}\hbar\,\omega(\boldsymbol{q})=\frac{9}{8}Nk_0\theta \qquad (9.12)$$

шәклиндә јазмаг олар. Беләликлә, Дебај модели чәрчивәсиндә садә гәфәсли кристалын сәрбәст енержиси

$$F(V,T)=\frac{9}{8}Nk_0\theta+9Nk_0T\left(\frac{T}{\theta}\right)^3\int\limits_0^{\theta/T}x^2\ln\left(1-e^{-x}\right)dx \qquad (9.13)$$

олар. Бу функсијада һәчм V илә бағлы олан јеканә кәмијјәт Дебај температурудур. Өз нөвбәсиндә, (9.10)-дан көрүндүјү кими, θ-нин V-дән асылылығы Дебај максимум тезлијинин $\omega_{\max}$ һәчмдән асылы олмасы илә тә'јин олунур. Һәчмин дәјишмәси илә $\omega_{\max}$ тезлијинин дәјишмәсини характеризә едән γ_G сабити дахил едәк:

$$\frac{\Delta\omega_{\max}}{\omega_{\max}}=-\gamma_G\frac{\Delta V}{V}\,. \qquad (9.14)$$

Бу сабит *Грунејзен сабити* адланыр.

Грунејзен сабити (9.14)-дән

$$\gamma_G = -\frac{\Delta\omega_{max}/\omega_{max}}{\Delta V/V} = -\frac{d\ln\omega_{max}}{d\ln V} = -\frac{d\ln\theta}{d\ln V} = -\frac{V d\theta}{\theta\, dV} \qquad (9.15)$$

кими јаза биләрик.

Инди (9.13) сәрбәст енержидән V-јә көрә төрәмә алсаг, (9.1)-ә ујғун олараг тәзјиг аларыг

$$P = P_0 - 3Nk_0 T D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)\frac{1}{\theta}\cdot\frac{d\theta}{dV}\ . \qquad (9.16)$$

Бурада $D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)$- Дебај функсијасы (8.31),

$$P_0 = -\frac{9}{8}Nk_0\frac{d\theta}{dV} = \frac{9}{8}\cdot\frac{Nk_0\theta}{V}\gamma_G \qquad (9.17)$$

сыфырынчы рәгсләрлә бағлы вә температурдан асылы олмајан сыфырынчы тәзјигдир. Гејд едәк ки, P_0, јә'ни сыфырынчы тәзјиг,тәмиз квант еффектидир.

Беләликлә, (9.16) вә (8.30)-дан садә гәфәсли бәрк чисмин һал тәнлијини аларыг

$$P(V,T) = P_0 + \frac{\gamma_G}{V}E_{ak}(V,T) \qquad (9.18)$$

бурада $E_{ak}(V,T)$- акустик фонон газынын (кристалын) Дебај јахынлашмасындакы орта енержисидир (8.30).

Инди исә Грунејзен сабити γ_G - нин гаршылыглы тә'сир потенсиалы (5.2)-јә дахил олан анһармониклик әмсалы γ илә бағлы олдуғуну көстәрәк. Садәлик үчүн бирөлчүлү кристала бахаг. (5.14) вә (8.27)-дән Дебај тезлијини еластиклик әмсалы β илә ифадә етсәк.

$$\omega_{max}^2 = \frac{\beta}{M}(6\pi^2)^{2/3} \qquad (9.19)$$

аларыг. Еластиклик әмсалы β исә атомларын гаршылыглы тә'сир потенсиалынын икинчи төрәмәси $U''(R_0)$-ын таразлыг $(R = R_0)$ нөгтәсиндәки гијмәтинә бәрабәрдир (5.2):

$$\beta = U''(R_0). \tag{9.20}$$

Онда

$$\omega_{\max}^2 = (6\pi^2)^{2/3} \frac{1}{M} U''(R_0). \tag{9.21}$$

Әкәр атомлар арасындакы таразлыг мәсафәси ΔR_0 гәдәр артарса (гәфәс кенишләнәрсә), $\omega_{\max}$ да $\Delta\omega_{\max}$-а гәдәр дәјишмиш олар. Бу һалда (9.21)-дән

$$\left(\omega_{\max} + \Delta\omega_{\max}\right)^2 = \frac{1}{M}\left(6\pi^2\right)^{2/3} U''(R_0 + \Delta R_0) \tag{9.22}$$

јаза биләрик. Бу мүнасибәтдә сол тәрәфи квадрата јүксәлдиб $(\Delta\omega_{\max})^2$ олан ифадәни атмагла вә сағ тәрәфи исә ΔR_0-ын үстләринә көрә сыраја ајырсаг,

$$\frac{\Delta\omega_{\max}}{\omega_{\max}} = -\gamma \frac{\Delta R_0}{\beta} \tag{9.23}$$

аларыг. Бурада (9.19) вә $U'''(R_0) = -2\gamma$ олдуғу нәзәрә алынмышдыр, γ-анһармониклик әмсалыдыр (5.2). Беләликлә, бирәлчүлү кристаллар үчүн Грунејзен сабити

$$\gamma_G = -\frac{\Delta\omega_{\max} / \omega_{\max}}{\Delta R_0 / R_0} = \gamma \frac{R_0}{\beta} \tag{9.24}$$

олар. Көрүндүјү кими, Грунејзен сабити анһармониклик әмсалы γ илә тә'јин олунур. Гејд едәк ки, гаршылыглы тә'сир потенсиалынын (5.3) ифадәсиндә анһармоник һәддин һармоник һәддә нисбәти јердәјишмәнин R_0-а олан нисбәти кими олмалыдыр:

$$\frac{\gamma x}{\beta} \approx \frac{x}{R_0} \tag{9.25}$$

Бурадан $\beta = R_0\gamma$ алыныр вә (9.24) -дән көрүнүр ки, Грунејзен сабити $\gamma_G \approx 1$ тәртибли бир сабитдир вә температурдан, демәк олар ки, асылы дејил.

Беләликлә, (9.18) вә (9.24)-дән белә бир нәтичә чыхыр ки, һармоник јахынлашмада ($\gamma = 0$ олдугда $\gamma_G = 0$ олур) бәрк чисмин тәзјиги сыфырдыр, јә'ни бу јахынлашмада кристал әтрафдакы системләрә һеч бир тәзјиг көстәрмир.

Бурадан даһа бир нәтичә чыхыр:

Һармоник јахынлашмада јухарыда көрдүјүмүз кими фонон газы алыныр, лакин бу јахынлашмада бәрк чисмин тәзјиги сыфырдыр јә'ни, фонон газынын тәзјиги јохдур. Бу нәтичә бир даһа фононун реал дејил, квазизәррәчик олдугуну көстәрир.

Гејд едәк ки, фонон газынын тәзјигинин сыфыр олмасынын сәбәби фононун импулсунун биргијмәтли олмамасыдыр.

Акустик фононларын (8.30) енержисини (9.18)-дә јеринә јазсаг вә сыфырынчы тәзјигин (9.17) ифадәсиндән истифадә етсәк үчөлчүлү бәсит кристаллар үчүн үмуми һал тәнлији

$$P(V,T) = \frac{9}{8}\frac{Nk_0\theta}{V}\gamma_G\left[1+\frac{8}{3}\frac{T}{\theta}D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)\right] \tag{9.26}$$

аларыг. Бурада $D_3\left(\dfrac{\theta}{T}\right)$-Дебај функсијасыдыр (8.31).

Үмуми олан (9.26) һал тәнлијини јүксәк вә ашағы температурларда јазаг.

Јүксәк температурлар $T >> \theta$. Бу һалда Дебај функсијасынын (8.37) асимптотикасындан истифадә етсәк (9.26), һал тәнлији

$$P(V,T)=\frac{3Nk_0T}{V}\gamma_G; \quad T>>\theta; \tag{9.27}$$

шәклинә дүшәр.

Ашағы температурлар $T << \theta$. Дебај функсијасынын (8.47) асимптотикасыны (9.26)-да нәзәрә алсаг, һал тәнлији

$$P(V,T)=\frac{9}{8}\cdot\frac{Nk_0\theta}{V}\gamma_G\left[1+\frac{8\pi^4}{15}\left(\frac{T}{\theta}\right)^4\right]; \quad T<<\theta \tag{9.28}$$

олар.

Биз садә өзәјә малик кристалларын $(s=1)$ һал тәнлијини (9.26) тапдыг. Бу чүр кристалларда јалныз акустик рәгсләр олдуғундан кристалын сәрбәст енержиси (9.9)-ла верилир. Инди даһа үмуми һала бахаг $(s>1)$. Белә кристалларда олан оптик рәгсләрин һал тәнлијинә вердији әлавәни һесаблајаг.

Ејнштејн модели чәрчивәсиндә оптик рәгсләрин һесабына кристалын там енержиси сыфырынчы рәгсләрин енержиси илә оптик фононларын енержисинин (8.24) чәминә бәрабәрдир:

$$E=\frac{3}{2}N(s-1)\hbar\omega_0+3N(s-1)\frac{\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0/k_0T}-1} \tag{9.29}$$

вә ја јығчам шәкилдә

$$E = \frac{3}{2} N\hbar\omega_0 (s-1)\, Coth\left(\frac{\hbar\omega_0}{2k_0T}\right) \qquad (9.29\ \text{a})$$

Енержинин (9.29) ифадәсини (9.5)-дә јеринә гојсаг, оптик рәгсләр һесабына олан сәрбәст енержини

$$F_{оп} = \frac{3}{2} N(s-1) k_0 \theta_0 + 3N(s-1)\, k_0 T \ln\left(1 - e^{-\theta_0/T}\right) \qquad (9.30)$$

аларыг, бурада $\theta_0 = \frac{\hbar\omega}{k_0}$ - Ејнштејн температурудур.

Сәрбәст енержинин (9.30) ифадәсиндән вә (9.1)-дән тәзјиг үчүн

$$P_{оп} = P_0 + \frac{\gamma_G^0}{V} E_{оп}(T) \qquad (9.31)$$

аларыг, бурада

$$P_0 = \frac{3}{2} N(s-1)\, \frac{k_0\theta_0}{V} \gamma_G^0 \qquad (9.32)$$

сыфырынчы тәзјиг,

$$E_{оп}(T) = \frac{3N(s-1)k_0\theta_0}{e^{\theta_0/T} - 1} \qquad (9.33)$$

оптик фононларын енержиси,

$$\gamma_G^0 = -\frac{d\ln\theta_0}{d\ln V} = -\frac{d\ln\omega_0}{d\ln V} \qquad (9.34)$$

Ејнштејн тезлији үчүн Грунејзен сабитидир.

Тәзјигин (9.26) вә (9.31) ифадәләрини топласаг, Ејнштејн-Дебај модели чәрчивәсиндә кристалын ән үмуми һал тәнлијини

$$P(V,T)=\frac{9}{8}\frac{Nk_0\theta}{V}\gamma_G\left[1+\frac{8}{3}\frac{T}{\theta}D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)\right]+ \\ +\frac{3N(s-1)k_0\theta_0}{2V}\gamma_G^0\,Coth\left(\frac{\theta_0}{2T}\right) \tag{9.35}$$

әлдә едәрик.

Јүксәк температурларда, $T \gg \theta_0$ һалында $D_3=1$;

$Coth\left(\frac{\theta_0}{2T}\right)\approx\frac{2T}{\theta_0}$ олур вә (9.35)

$$P(V,T)=\frac{3Nk_0T}{V}\gamma_G+\frac{3N(s-1)k_0T}{V}\gamma_G^0= \\ =\frac{3Nk_0T}{V}\left(\gamma_G+(s-1)\gamma_G^0\right) \tag{9.36}$$

шәклинә дүшүр.

Ашағы температурларда $T \ll \theta$, $D_3=\frac{\pi^4}{5}\left(\frac{T}{\theta}\right)^3$ (бах 8.47) вә $Coth\left(\frac{\theta_0}{2T}\right)\approx 1$ олдуғундан (9.35)-дән

$$P(V,T)=\frac{3N(s-1)k_0\theta_0}{2V}\gamma_G^0+\frac{9Nk_0\theta}{8V}\gamma_G\left[1+\frac{8\pi^4}{15}\left(\frac{T}{\theta}\right)^4\right] \tag{9.37}$$

аларыг. Тапылан һал тәнлијинин көмәји илә диелектрик кристалларын термодинамик әмсалларыны һесабламаг мүмкүндүр. Бу мәсәләләрә нөвбәти 10 -чу параграф һәср едилмишдир.

§ 10. Бәрк чисимләрин истидән кенишләнмәси вә изобарик истилик тутуму

Бундан әввәлки параграфда тапылан сәрбәст енержини вә һал тәнликләрини истифадә едәрәк бәрк чисимләрин истидән кенишләнмә әмсалыны, изобарик истилик тутумуну вә башга термодинамик әмсаллары һесабламаг олар. Бу әмсалларын бир нечәсинин тә'рифләрини јада салаг

Истидән изобарик кенишләнмә әмсалы

$$\alpha_P = \frac{1}{3V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P. \tag{10.1}$$

Изотермик вә адиабатик сыхылма

$$\chi_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T, \quad \chi_S = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_S \tag{10.2}$$

вә бу әмсалын тәрси олан һәчм модулу

$$B_T = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T, \quad B_S = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S. \tag{10.3}$$

Изохорик вә изобарик истилик тутуму

$$C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V, \quad C_P = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P. \tag{10.4}$$

Мө'тәрзәләрин индекләри төрәмә алынаркән ујғун кәмијјәтләрин сабит сахланмасыны көстәрир.

Бу әмсаллар арасында үмуми термодинамик мүнасибәтләр тапмаг үчүн Јакобиан вә онун хассәләриндән истифадә едәк.

Јакобианы ашағыдакы кими тә'јин олунур.

$$\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}=\begin{vmatrix}\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y}\\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y}\end{vmatrix}=\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)_x-\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_x\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_y. \qquad (10.5)$$

Јакобианын ашағыдакы хассәләри вар:

$$\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}=-\frac{\partial(v,u)}{\partial(x,y)};\quad \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}=-\frac{\partial(u,v)}{\partial(y,x)}; \qquad (10.6)$$

$$\frac{\partial(u,y)}{\partial(x,y)}=\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_y \qquad (10.7)$$

$$\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}=\frac{\partial(u,v)}{\partial(t,s)}\frac{\partial(t,s)}{\partial(x,y)}. \qquad (10.8)$$

Јакобианын (10.7) вә (10.8) хассәләриндән истифадә етсәк,

$$C_P=T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P=T\,\frac{\partial(S,P)}{\partial(T,P)}=T\,\frac{\partial(S,P)}{\partial(S,V)}\frac{\partial(S,V)}{\partial(T,V)}\frac{\partial(T,V)}{\partial(T,P)}=$$

$$=T\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T$$

јаза биләрик. Бурадан

$$C_P=C_V\frac{\chi_T}{\chi_S}\quad \text{вә ја}\quad C_V=C_P\frac{\chi_S}{\chi_T}=C_P\frac{B_T}{B_S} \qquad (10.9)$$

аларыг. Тәҹрүбәдә изобарик истилик тутумуну (C_p), изотермик (B_T) вә адиабатик (B_S) һәҹм модулларыны рәк, C_V -ни (10.9)-дан тапа биләрик.

Изобарик вә изохорик истилик тутумлары арасында даhа бир мүнасибәт, јә'ни $(C_P - C_V)$ фәргини тапа биләрик.

Јакобианын (10.7), (10.8), (10.5) вә (10.6) хассәләриндән истифадә етсәк,

$$C_P = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P = T\,\frac{\partial(S,P)}{\partial(T,P)} = T\,\frac{\partial(S,P)}{\partial(V,T)}\,\frac{\partial(V,T)}{\partial(T,P)} =$$
$$= -T\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \left[\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V - \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V\right] \qquad (10.10)$$

кими јаза биләрик. Мә'лум термодинамик мүнасибәти $\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$ нәзәрә алсаг, (10.10)

$$C_P - C_V = -T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V^2 \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T^{-1} \qquad (10.11)$$

шәклинә дүшәр. Бурадан көрүнүр ки, $P = P(V,T)$ hал тәнлијинин ачыг шәклини билсәк, $(C_P - C_V)$ фәргини hесаблаја биләрик.

Јенә дә Јакобианын (10.6), (10.7), (10.8) хассәләринин көмәји илә

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_V = -1 \qquad (10.12)$$

олдуғуну асанлыгла көстәрмәк олар. Бурадан, (10.1) вә

(10.3)-дән

$$\alpha_P = \frac{1}{3B_T}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \tag{10.13}$$

аларыг. Һал тәнлији үчүн (9.18) ифадәсиндән истифадә етсәк,(10.13)

$$\alpha_P = \frac{\gamma_G}{3VB_T} C_V \tag{10.14}$$

шәклинә дүшәр. Бурадан вә (10.9)-дан

$$\alpha_P = \frac{\gamma_G}{3VB_S} C_P \tag{10.15}$$

аларыг. Изобарик истилик тутуму C_P-ни өлчмәклә B_S вә α_P-ни биләрәк (10.15)-дән Грунејзен сабити

$$\gamma_G = \frac{3V\alpha_P B_S}{C_P} \tag{10.16}$$

тапмаг олар. (10.14)-дән көрүндүјү кими, истидән кенишләнмә һармоник јахынлашмада сыфырдыр: $\gamma_G = 0$ оланда $\alpha_P = 0$. Бу о демәкдир ки, һармоник јахынлашмада фонон газынын тәзјиги јохдур, она көрә дә бәрк чисим әтрафына тә'сир едә билмир вә бунунлада һәчм дәјишмир.

Әкәр һәчм модулунун вә Грунејзен сабитинин температурдан зәиф асылы олдуғуну нәзәрә алсаг, (10.14)-дән көрүнүр ки, α_P-нин температурла әлагәси C_V -нин асылылығы кимидир.

Истилик тутуму үчүн (8.53) ифадәсини (10.14)-дә јеринә јазсаг, $\alpha_P(T)$-нин T илә әлагәсинин ачыг шәклини

$$\alpha_P(T)=\frac{Nk_0\gamma_G}{VB_T}L_V\left(\frac{\theta}{T}\right) \qquad (10.17)$$

аларыг. $L_V\left(\frac{\theta}{T}\right)$ функсиjасынын (8.54) ифадәсиндән истифадә етсәк, ихтиjари температурларда

$$\alpha_P(T)=\frac{Nk_0\gamma_G}{VB_T}\left[4D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)-\frac{3\theta}{T}\left(e^{\frac{\theta}{T}}-1\right)^{-1}\right] \qquad (10.18)$$

олар. $L_V\left(\frac{\theta}{T}\right)$ функсиjасынын асимптотикаларыны

$$L_V\left(\frac{\theta}{T}\right)=1-\frac{1}{20}\left(\frac{\theta}{T}\right)^2; \quad T>>\theta \qquad (10.19)$$

вә

$$L_V\left(\frac{\theta}{T}\right)=\frac{4\pi^4}{5}\left(\frac{T}{\theta}\right)^3; \quad T<<\theta \qquad (10.20)$$

нәзәрә алсаг, көрәрик ки, ашағы температурларда

$$\alpha_P(T)=\frac{4\pi^4}{5}\cdot\frac{Nk_0\gamma_G}{VB_T}\left(\frac{T}{\theta}\right)^3\sim T^3; \quad T<<\theta \qquad (10.21)$$

истидән кенишләнмә әмсалы T^3-на мүтәнасибдир вә jүксәк температурларда исә

$$\alpha_P(T)=\frac{Nk_0\gamma_G}{VB_T}\left[1-\frac{1}{20}\left(\frac{\theta}{T}\right)^2\right]; \quad T>>\theta \qquad (10.22)$$

демәк олар ки, сабитдир. $\alpha_P(T\to\infty)=const$

Јүксәк температурлардакы һал тәнлији (9.27)-дән көрүнүр ки, изотермик һәчм модулу тәзјигә бәрабәрдир:

$$B_T = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T = P; \quad T >> \theta \qquad (10.22\ \text{a})$$

Бу нәтичә јалныз јүксәк температурлардадыр. Үмуми һалда (9.26)-дан көрүнүр ки, B_T мүрәккәбдир.

Јухарыда көрдүјүмүз кими,нәзәри олараг изохорик истилик тутуму C_V һесабланыр, лакин тәчрүбәдә изобарик истилик тутуму C_P өлчүлүр. Нәзәријјә илә тәчрүбәдән алынан нәтичәләри мүгајисә етмәк үчүн C_P илә C_V арасында асылылығы билмәк лазымдыр ки, C_P-ни өлчмәклә C_V-ни тапаг. Бунун үчүн һал тәнлији (9.18) -дән $(\partial P/\partial T)_V$-ни тапыб (10.11)-дә јеринә јазсаг, ејни заманда (10.3) вә (10.14)-дән истифадә етсәк,C_P илә C_V арасында

$$C_P = C_V(1+3\alpha_P\gamma_G T) \qquad (10.23)$$

асылылығыны аларыг. C_P-ни өлчмәклә, α_P вә γ_G-ни биләрәк (10.23)-дән

$$C_V = \frac{C_P}{1+3\alpha_P\gamma_G T} \qquad (10.24)$$

изохорик истилик тутумуну һесаблаја биләрик. Көрүндүјү кими, јалныз анһармоник јахынлашмада C_P истилик тутуму C_V-дән фәргләнир; һармоник $(\gamma_G = 0)$ кристаллар үчүн $\alpha_P = 0$ олдуғу кими $C_P - C_V$ фәрги дә сыфыр олур.

Изобарик вә изохорик истилик тутумлары арасында олан (10.9) вә (10.23) мүнасибәтләри феноменоложи мүнасибәтләрдир, јә'ни C_P / C_V нисбәтини башга термодинамик әмсалларла әлагәләндирир. Лакин биз бәрк чисмин (9.26) һал тәнлијини билдијимиздән $(C_P - C_V)$ фәргинин ачыг шәклини, јә'ни бу фәргин микроскопик ифадәсини тапа биләрик.

Бунун үчүн (10.11) мүнасибәтиндән вә (9.26) һал тәнлијиндән истифадә етмәк лазымдыр. Дебај температурунун һәчмдән асылы олдуғуну, јә'ни $\theta(V)$ олдуғуну вә (8.31) Дебај функсијасынын θ-ја көрә төрәмәсинин

$$\left(\frac{\partial D_3}{\partial \theta}\right)_T = -\frac{3}{\theta} D_3\left(\frac{\theta}{T}\right) + \frac{3}{T}\left(e^{\frac{\theta}{T}} - 1\right)^{-1} \qquad (10.25)$$

олдуғуну нәзәрә алсаг, (9.26) һал тәнлијиндән $(\partial P / \partial V)_T$-ни тапарыг вә нәтичәдә (10.11)

$$C_P - C_V = 3Nk_0\gamma_G M_1\left(\frac{\theta}{T}, \gamma_G\right) \qquad (10.26)$$

шәклинә дүшәр, бурада

$$M_1\left(\frac{\theta}{T}, \gamma_G\right) = \frac{\left[\frac{\partial}{\partial T}(T D_3)\right]^2}{\frac{3}{8}\frac{\theta}{T}(1+\gamma_G) + \left[D_3 + \gamma_G \theta\left(\frac{\partial D_3}{\partial \theta}\right)\right]}. \qquad (10.27)$$

Бураја дахил олан $\frac{\partial}{\partial T}(T D_3) = L_V\left(\frac{\theta}{T}\right)$ функсијасы үчүн (8.54) ифадәсини вә (10.25) төрәмәсиндән истифадә етсәк, ачыг шәкилдә

$$M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)=\frac{\left[4D_3-\frac{3\theta}{T}\left(e^{\frac{\theta}{T}}-1\right)^{-1}\right]^2}{\left(\frac{3}{8}\frac{\theta}{T}+D_3\right)+\frac{3}{8}\frac{\theta}{T}\left[1-\frac{8T}{\theta}D_3+8\left(e^{\frac{\theta}{T}}-1\right)^{-1}\right]\gamma_G} \qquad (10.28)$$

аларыг. Гејд едәк ки, $M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)$ функсијасы Дебај модели чәрчивәсиндә (C_P-C_V) фәргинин ән үмуми һалда температур асылылығыны тә'јин едир. (10.28) функсијасыны һесаблајараг, (10.26)-дан (C_P-C_V) фәргини истәнилән температурда тапа биләрик.

$M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)$ функсијасынын асимптотикасына бахаг.

Ашағы температурларда $(T\ll\theta)$ Дебај функсијасынын (8.47) асимптотикасындан истифадә етсәк,

$$M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)=\frac{8}{3(1+\gamma_G)}\left(\frac{4\pi^4}{5}\right)^2\left(\frac{T}{\theta}\right)^7 \qquad (10.29)$$

аларыг, јә'ни $T\to 0$ һалында $M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)$ функсијасы чох бөјүк сүр'әтлә сыфра јахынлашыр. Буна көрә дә ашағы температурларда $C_P\approx C_V$ олур.

Јүксәк температурларда $(T\gg\theta)$ Дебај функсијасы үчүн (8.37)-дән истифадә етсәк,

$$M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)=1-\frac{1}{20}(3+2\gamma_G)\left(\frac{\theta}{T}\right)^2;\quad T\gg\theta \qquad (10.30)$$

олдуғуну көрәрик. Беләликлә, (10.26) мүнасибәтинә дахил олан $M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)$ функсијасы сыфырла бир арасында гијмәт алыр:

$$M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)=\begin{cases}0; & T\to 0\\ 1; & T\to\infty\ .\end{cases} \tag{10.31}$$

Истилик тутумларынын фәрги үчүн олан (10.26) ифадәси ашағы температурларда $(C_P - C_V)$ фәргинин чох сүр'әтлә сыфра јахынлашмасыны изаһ едир. Лакин јүксәк температурларда ($T >> \theta$) бу фәрг үчүн нәзәријјәдән алынан гијмәт тәчрүбәдән алынан нәтичәдән чох ола биләр. Бу онунла әлагәдардыр ки, Дебај модели кичик тезликләр үчүн реал спектрә даһа јахындыр, бөјүк тезликләрдә Дебај модели реал спектрдән кифајәт гәдәр фәргләнир ки, бу да јүксәк температурлара ујғундур.

C_V-нин (8.53) ифадәсини (10.26)-да јеринә јазсаг, изобарик истилик тутуму үчүн

$$C_P(T)=3Nk_0L_P\left(\frac{\theta}{T}\right) \tag{10.26 а}$$

аларыг, бурада

$$L_P\left(\frac{\theta}{T}\right)=L_V\left(\frac{\theta}{T}\right)+\gamma_G M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right). \tag{10.26 б}$$

$L_V\left(\frac{\theta}{T}\right)$ вә $M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)$ функсијаларыны (10.19), (10.20), (10.29) вә (10.30) асимптотикаларыны нәзәрә алсаг, $C_P(T)$ үчүн јүксәк вә ашағы температурларда асимптотик ифадәләр аларыг:

$$C_P(T) = 3Nk_0\left[1 + \gamma_G - \frac{1}{20}\left(1 + \gamma_G\left(3 + \gamma_G\right)\right)\left(\frac{\theta}{T}\right)^2\right]; \quad T \gg \theta \tag{10.26 в}$$

вә

$$C_P(T) = \frac{12\pi^4}{5}Nk_0\left(\frac{T}{\theta}\right)^3\left[1 + \frac{32\pi^4}{15}\frac{\gamma_G}{1+\gamma_G}\left(\frac{T}{\theta}\right)^4\right]; \quad T \ll \theta \ . \tag{10.26 г}$$

Изобарик истилик тутумунун температур асылылығыны истәнилән температурларда (10.26 а)-дан тапараг тәчрүбә илә мүгајисә етмәк олар.

Көрүнүр ки, $T \to \infty$ һалында L_P функсијасынын лимит гијмәти Грунејзен сабитиндән асылыдыр:

$$L_P\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right) = \begin{cases} 0; & T \to 0 \\ 1+\gamma_G; & T \to \infty \ . \end{cases} \tag{10.26 ғ}$$

Истилик тутуму үчүн (8.53) вә (10.26) ифадәләриндән

$$\frac{C_P}{C_V} = 1 + \gamma_G M_2\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right) \tag{10.26 д}$$

аларыг, бурада

$$M_2\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right) = \frac{M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)}{L_V\left(\frac{\theta}{T}\right)} \tag{10.26 е}$$

ишарә едилмишдир.

M_2 функсијасынын асимптотикалары

$$M_2\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)=1-\frac{1}{10}(1+\gamma_G)\left(\frac{\theta}{T}\right)^2;\quad T>>\theta \qquad (10.26\ ж)$$

$$M_2\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)=\frac{32\pi^4}{15}\frac{1}{1+\gamma_G}\left(\frac{T}{\theta}\right)^4;\quad T<<\theta. \qquad (10.26\ з)$$

Гејд едәк ки, Дебај модели чәрчивәсиндә бәрк чисимләрин термодинамик хассәләрини беш функсија тә'јин едир. Бунлар ашағыдакылардыр:

$D_2\left(\frac{\theta}{T}\right)$ - акустик фононларын там сајы (7.38 а),

$D_3\left(\frac{\theta}{T}\right)$ - бәрк чисмин енержиси (8.30) вә һал тәнлији (9.18),

$L_V\left(\frac{\theta}{T}\right)$ - изохорик истилик тутуму (8.53) вә изобарик истидән кенишләнмә (10.17),

$M_1\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)$ - изобарик вә изохорик истилик тутумларынын (C_P-C_V) фәрги (10.26).

$M_2\left(\frac{\theta}{T},\gamma_G\right)$ - изобарик вә изохорик истилик тутумларынын (C_P/C_V) нисбәти (10.26 д).

Бу функсијаларын һамысынын бир үмуми хассәси вар: Температур $(0\div\infty)$ интервалында дәјишән заман бунларын һәр бири јалныз $0\div1$ арасында гијмәт алырлар.

Бу параграфын сонунда садә бирөлчүлү гәфәс үчүн истидән хәтти кенишләнмә әмсалыны һесаблајаг вә көстәрәк ки, һәгигәтән дә бу әмсал (α_P) анһармониклилә тә'јин едилир.

Бирөлчүлү гәфәсин зәнчирин узунлуғу $L_0 = Na$ олсун, бурада a- гәфәс сабити, N- бирөлчүлү өзәкләрин сајыдыр. Истидән кенишләнәркән зәнчирин орта узунлуғу

$$\overline{L} = \overline{N(a+x)} = L_0 + N\overline{x} \tag{10.32}$$

олар, бурада $\overline{x}$- гәфәс сабитинин дәјишмәсинин орта гијмәтидир. Истидән хәтти кенишләнмә әмсалы

$$\alpha = \frac{1}{L_0}\left(\frac{\partial \overline{L}}{\partial T}\right) = \frac{N}{L_0}\left(\frac{\partial \overline{x}}{\partial T}\right) \tag{10.33}$$

илә тә'јин олунур.

Гәфәсдә өзәк сабитинин дәјишмәсинин орта гијмәти $\overline{x}$ -и тапмаг үчүн Болсман пајланмасындын истифадә едәк

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xW(x)dx, \tag{10.34}$$

бурада

$$W(x) = Ae^{-\frac{U(x)}{k_0 T}} \tag{10.35}$$

кенишләнмәнин x олма еһтималыдыр, $U(x)$- потенсиал енержидир, A сабити нормаллашдырма шәртиндән

$$A^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{U(x)}{k_0 T}} dx \tag{10.36}$$

кими тапылыр.

Әкәр потенсиал енержи үчүн һармоник јахынлашма илә кифајәтләниб $U(x)=\frac{1}{2}\beta x^2$ јазсаг, (10.34)-дән көрәрик ки, бу јахынлашмада $\bar{x}=0$ олур. Бу физики чәһәтдән дә ајдындыр, она көрә ки, һармоник јахынлашмада $U(x)$ потенсиалы $x=0$ нөгтәсинә нәзәрән симметрикдир. $\bar{x}$ үчүн сыфырдан фәргли гијмәт алмаг үчүн $U(x)$-ин анһармоник һәддини сахламалыјыг (бах 5.2):

$$U(x)=\frac{1}{2}\beta x^2-\frac{1}{3}\gamma x^3. \tag{10.37}$$

Анһармоник һәддин кичик олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$e^{-\frac{U(x)}{k_0T}}\approx e^{-\frac{\beta x^2}{2k_0T}}\left(1+\frac{\gamma x^3}{3k_0T}\right) \tag{10.38}$$

јаза биләрик. Потенсиал енержинин бу ифадәсини (10.35)-дә јеринә јазсаг, (10.34)-дән

$$\bar{x}=A\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta x^2}{2k_0T}}\left(x+\frac{\gamma x^4}{3k_0T}\right)dx \tag{10.39}$$

аларыг. Бурадакы биринчи интеграл сыфырдыр. Икинчи интегралын

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-kx^2}dx=2\int_0^{\infty} x^4 e^{-kx^2}dx=\frac{3}{4}\frac{\sqrt{\pi}}{k^{5/2}} \tag{10.40}$$

типли интеграл олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$\bar{x}=\frac{\gamma\sqrt{2\pi}}{\beta^{5/2}}(k_0T)^{3/2}\cdot A \tag{10.41}$$

әлдә едәрик. A сабитини (10.36) вә (10.38)-дән

$$A^{-1}=\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta x^2}{2k_0T}}\left(1+\frac{\gamma x^3}{3k_0T}\right)=\left(\frac{2\pi k_0T}{\beta}\right)^{1/2} \qquad (10.42)$$

тапа биләрик. Бурада

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2}dx=2\int_{0}^{\infty} e^{-kx^2}dx=\left(\frac{\pi}{k}\right)^{1/2} \qquad (10.43)$$

интегралындан истифадә едилмишдир. Беләликлә, (10.41) вә (10.42)-дән

$$\bar{x}=\frac{\gamma k_0T}{\beta^2} \qquad (10.44)$$

аларыг.

Нәтичәдә (10.33) вә (10.44)-дән истидән хәтти кенишләнмә үчүн

$$\alpha=\frac{Nk_0}{L_0\beta^2}\gamma \qquad (10.45)$$

ифадәсини аларыг. Көрүндүјү кими истидән хәтти кенишләнмә анһармониклик әмсалы γ илә тә'јин олунур: $\gamma=0$ олдугда кенишләнмә сыфырдыр ($\alpha=0$)

Әкәр бир өлчүлү кристаллар үчүн $C_V=Nk_0$ олдуғуну нәзәрә алсаг, (10.45) бәрабәрлијини

$$\alpha=\frac{\gamma}{L_0\beta^2}C_V \qquad (10.46)$$

кими јаза биләрик ки, бу да (10.14) бәрабәрлијинә охшајыр.

$L_0=Na$ вә $\beta\approx a\gamma$ [бах (9.25)] олдуғуну биләрәк (10.45) хәтти кенишләнмә әмсалыны гијмәтләндирмәк олар: $\alpha = \dfrac{k_0}{\beta a^2}$.

Еластиклик әмсалы β илә сәсин кристалдакы сүр'әти v_0 арасында олан әлагә исә $v_0 = a(\alpha/\beta)^{1/2}$ олдуғундан $\alpha = \dfrac{k_0}{M v_0^2}$ олур, бурада $M \approx 10^{-22}\,гр$ - гәфәсдә олан атомун күтләсидир. $k = 1{,}38 \cdot 10^{-16}\,ерг/K$, $v_0 \approx 5 \cdot 10^5\,см/с$ гәбул етсәк, $\alpha \approx 5 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ кими тәртибчә дүзкүн гијмәт аларыг.

Анһармоник јахынлашмада истидән кенишләнмәнин сыфырдан фәргли олмасы онунла бағлыдыр ки, бу јахынлашмада потенсиал енержи (10.37) $x = 0$ нөгтәсинә нәзәрән асимметрикдир: $U(-x) > U(x)$. Һармоник јахынлашмада исә $U(x)$ симметрикдир.

§ 11. Фонон истилик кечиричилији

Кристалларда истилик енержисини мүхтәлиф квазизәррәчикләр дашыја биләр. Бу бәрк чисмин нөвүндән асылыдыр. Изолјаторларда фононлар; металларда сәрбәст електронлар вә фононлар; јарымкечиричиләрдә фононлар, електрон-дешик чүтләри вә екситонлар; магнит дүзүлүшү олан кристалларда магнонлар вә фононлар истилик енержисинин дашыјычыларыдыр. Биз бу параграфда јалныз изолјатор олан (електрик кечиричилији олмајан) бәрк чисимләрә бахачајыг, јә'ни фонон газынын истилик кечиричилијини нәзәрдән кечирәчәјик. Метал вә јарымкечиричиләрин истилик кечиричилији IV фәсилдә шәрһ едиләчәк.

Фононларын дашыдығы енержи селинин сыхлығы

$$W=\frac{1}{V}\sum_{q}\sum_{j}\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})\,\boldsymbol{v}_j(\boldsymbol{q})N_{qj}\,. \qquad (11.1)$$

Бурада $\boldsymbol{v}_j(\boldsymbol{q})=\nabla_q\omega_j(\boldsymbol{q})$ - кристалда јајылан еластики далғаларын груп сүр'әти, $\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})$ - фононун енержиси, N_{qj}/V - фононларын консентрасијасы, V -кристалын һәчмидир, N_{qj} - фононларын пајланма функсијасыдыр.

Садәлик үчүн Браве гәфәсли бәрк чисимләрә бахаг вә Дебај моделини әсас көтүрәк: $\omega_j(\boldsymbol{q})=v_0 q$. Бурада v -сәсин сүр'әтидир. Бу заман (11.1) ифадәси

$$W=\frac{3}{V}\sum_{\vec{q}}\hbar\omega(\boldsymbol{q})\,\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q})N(\boldsymbol{q}) \qquad (11.2)$$

шәклинә дүшәр.

Термодинамик таразлыг һалында кристалын бүтүн нөгтәләриндә температур T ејни олдугда фононларын пајланма функсијасы

$$N(\boldsymbol{q})=N_0(\omega(q)), \qquad (11.2\text{ a})$$

бурада $N_0(\omega(\boldsymbol{q}))=\left[\exp\left(\dfrac{\hbar\omega(\boldsymbol{q})}{k_0T}\right)-1\right]^{-1}$ Планк функсијасыдыр.

Планк функсијасыны јалныз $\omega(\boldsymbol{q})$ тезлијидән асылы олдуғуну, тезлијин $\omega(\boldsymbol{q})=\omega(-\boldsymbol{q})$ вә онун төрәмәси илә тә'јин олунан груп сүр'әтинин $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q})=-\boldsymbol{v}(-\boldsymbol{q})$ хассәләринә малик олдуғуну нәзәрә алсаг, (11.2)-дә олан $\boldsymbol{q}$ -јә көрә чәмин сыфыр бунунлада $\boldsymbol{W}=0$ олдуғуну көрәрик. Бу о дeмәкдир ки, термодинамик таразлыг һалында фононларын консентрасијасы координатдан асылы дејил, она көрә дә фонон газында һеч бир енержи ахыны јохдур.

Кристалда температур градиенти оларса фононларын консентрасијасы координатдан асылы $N(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r})$ олар вә температур јүксәк олан тәрәфдә фононларын консентрасијасы чох, температур ашағы олан тәрәфдә исә фононларын консентрасијасы аз олдуғундан фононлар исти тәрәфдән сојуг тәрәфә диффузија едәрәк истилик енержиси дашыјырлар.

Кристалда $\boldsymbol{r}$ нөгтәси әтрафындакы фононларын $N(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r})$ сајы диффузија нәтичәсиндә дәјишир. Бундан әлавә импулсу $\hbar\boldsymbol{q}$ олан фононларын сајы исә фононларын бир-бири илә тоггушмасы вә ја кристалын дефектләри вә сәрһәдләриндән сәпилмәси нәтичәсиндә дәјишир. Беләликлә, фононларын сајынын замандан асылы олараг дәјишмәси

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)=\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_{\text{дифф}}+\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_{\text{сәп}} \qquad (11.3)$$

олар. Бураја дахил олан $(\partial N/\partial t)_{\text{дифф}}$ һәддинин ачыг шәклини тапмаг үчүн фонон газынын локал таразлыг шәртиндән истифадә едәк. Бу шәртә көрә фононларын $\boldsymbol{r}$ нөгтәси әтрафында $(t+\Delta t)$ анындакы консентрасијасы, онларын t анында $(\boldsymbol{r}-\Delta\boldsymbol{r})$ нөгтәси әтрафындакы консентрасијасына бәрабәр олмалыдыр:

$$N(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r},t+\Delta t)=N(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}-\Delta\boldsymbol{r},t), \qquad (11.4)$$

бурада $\Delta\boldsymbol{r}=\boldsymbol{\upsilon}\Delta t$ - јердәјишмә, $\boldsymbol{\upsilon}$ - фононларын сүр'әтидир.

Јердәјишмәни кичик һесаб едәрәк (11.4) бәрабәрлијинин сағ тәрәфини $\boldsymbol{r}$-ин үстүнә көрә сыраја ајырсаг,

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_{\text{дифф}} = -\boldsymbol{v}\frac{\partial N}{\partial \boldsymbol{r}} \qquad (11.5)$$

аларыг. Фонон системинин релаксасија мүддәтини τ илә ишарә етсәк,

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_{\text{сәп}} = -\frac{N-N_0}{\tau} \qquad (11.6)$$

кими јаза биләрик, бурада $N_0(\boldsymbol{q})$ - термодинамик таразлыг һалында фононларын сајы, јә'ни Планк функсијасыдыр, $N(\boldsymbol{q})$ - исә таразлыг олмајан һалда фононларын сајыдыр.

Стасионар һалда $(\partial N / \partial t) = 0$ олдуғуну нәзәрә алсаг, (11.3), (11.5) вә (11.6) –дан фонон газы үчүн Болсман кинетик тәнлији

$$\boldsymbol{v}\frac{\partial N}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{N-N_0}{\tau} = 0 \qquad (11.7)$$

аларыг.

$\dfrac{\partial N}{\partial \boldsymbol{r}} = \dfrac{\partial N}{\partial T}\dfrac{\partial T}{\partial \boldsymbol{r}} = \dfrac{\partial N}{\partial T}\nabla T$ олдуғуну нәзәрә алсаг, (11.7)

$$\boldsymbol{v}\frac{\partial N}{\partial T}\nabla T + \frac{N-N_0}{\tau} = 0 \qquad (11.8)$$

шәклинә дүшәр. Температур градиентинә көрә хәтти јахынлашмада (11.8) тәнлијинин биринчи һәддиндә $N(\boldsymbol{q}) = N_0(\boldsymbol{q})$ көтүрә биләр. Беләликлә, (11.8) тәнлијиндән таразлыгда олмајан фонон газынын $N(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{r})$ сајы үчүн

$$N(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{r}) = N_0(\boldsymbol{q}) - \tau\,\boldsymbol{v}\frac{\partial N_0(\boldsymbol{q})}{\partial T}\nabla T \qquad (11.9)$$

аларыг. Бу һәлли (11.2)-дә јеринә јазсаг, енержи селинин сыхлығы үчүн

$$\boldsymbol{W} = -\frac{3}{V}\sum_{\boldsymbol{q}} \tau \hbar\, \omega(\boldsymbol{q})\, \frac{\partial N_0(\boldsymbol{q})}{\partial T}\,(\boldsymbol{v}\,\boldsymbol{v})\nabla T \qquad (11.10)$$

аларыг. Бу векторун ифадәсини компонентләрдә јазсаг,

$$W_i = -K_{ij}\nabla_j T\,. \qquad (11.10\text{ a})$$

Бурада

$$\chi_{ij} = \frac{3}{V}\sum_{\boldsymbol{q}} \tau \hbar\, \omega(\boldsymbol{q}) \frac{\partial N_0(\boldsymbol{q})}{\partial T}\left(\boldsymbol{v}_i\, \boldsymbol{v}_j\right) \qquad (11.11)$$

истилик кечиричилиji тензорунун компонентләридир.

Кубик кристаллар вә аморф маддәләр һалында Дебај модели үчүн $\boldsymbol{v} = \dfrac{\partial\omega}{\partial\boldsymbol{q}} = \dfrac{\omega}{\boldsymbol{q}} = v_0\dfrac{\boldsymbol{q}}{q}$, бурада v_0 - сәсин сүр'әтидир.

(7.28) бәрабәрлијинә әсасән (11.11)-дә чәмдән интеграла кечәрәк вә интегралламаны сферик координат системиндә апарыб бучаглара көрә интегралы көтүрсәк, $\chi_{xx} = \chi_{yy} = \chi_{zz} = \chi$ үчүн

$$\chi = \frac{1}{2\pi^2}\int \tau \hbar\, \omega\, v_0^2\, \frac{\partial N_0(q)}{\partial T}\, q^2 dq \qquad (11.12)$$

аларыг, јә'ни бахдығымыз һалда истилик кечиричилиji скалјар кәмијјәтдир. Релаксасија мүддәтинин орта гијмәтини $\tau = \bar{\tau}$ интегралдан кәнара чыхарсаг вә $q = \omega / \boldsymbol{v}_0$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$\chi = \frac{\bar{\tau}\hbar}{2\pi^2 v_0}\int_0^{\omega_{max}} \omega^3\left(\frac{\partial N_0}{\partial T}\right) d\omega \qquad (11.13)$$

әлдә едәрик, бурада $\omega_{\max} = v_0 \left(\dfrac{6\pi^2}{\Omega_0} \right)^{1/3}$ - Дебај тезлијидир.

Планк функсијасынын температура көрә төрәмәси $\dfrac{\partial N_0}{\partial T} = \dfrac{\hbar\omega}{k_0 T^2} e^{\hbar\omega / k_0 T} \left(e^{\hbar\omega / k_0 T} - 1 \right)^{-2}$ олдуғундан (11.13)

$$\chi = \frac{1}{3} v_0 \Lambda \frac{9 k_0 N}{V} \left(\frac{T}{\theta} \right)^2 \int_0^{\theta / T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} \tag{11.14}$$

шәклинә дүшәр, бурада $\Lambda = v_0 \bar{\tau}$ - фононларын сәрбәст јолунун узунлуғудур. Истилик тутуму үчүн (8.53) ифадәсини јада салсаг, фонон истилик кечиричилији (11.14) бәрабәрлијини

$$\chi = \frac{v_0}{3} \Lambda(T) C_V(T) \tag{11.15}$$

кими јаза биләрик, бурада $C_V = 3 k_0 n_0 L_V(\theta / T)$ - кристалын хүсуси истилик тутуму, $n_0 = N / V$ - ваһид һәчмдә олан өзәкләрин сајыдыр, $L_V(\theta / T)$ функсијасы (8.54) вә ја (8.54а)-да верилмишдир.

Беләликлә, фонон истилик кечиричилијинин температурдан асылылығы истилик тутумунун $C_V(T)$ вә фононларын сәрбәст јолунун узунлуғунун $\Lambda(T)$ температурдан асылылығы илә тә'јин олунур. $C_V(T)$ функсијасы §8-дә әтрафлы тәһлил олунмушдур.

Инди фононларын сәрбәст јолунун узунлуғунун температурдан асылылығы $\Lambda(T)$ функсијасыны бир гәдәр әтрафлы нәзәрдән кечирәк.

Сәрбәст јолун узунлуғунун $\Lambda(T)$ фононларын кристалын дефектләриндән (дислокасијалар, изотоплар), һәм дә нүмунәнин сәрһәдләриндән сәпилмәси вә онларын бир-бири илә тоггушмасы, јә'ни фонон-фонон гаршылыглы тә'сири илә тә'јин олунур.

Фононларын гаршылыглы тә'сир нәзәријјәси олдугча чәтин проблемдир. Һармоник јахынлашмада фононлар арасында һеч бир гаршылыглы тә'сир јохдур, јә'ни фонон газы идеал газдыр.

Бу јахынлашмада идеал кристалларда фононларын сәрбәст јолунун узунлуғунун $\Lambda \Rightarrow \infty$, јә'ни истилик кечиричилији $\chi \Rightarrow \infty$ олур вә истилик мүгавимәти (thermal resistivity) $1/\chi \Rightarrow 0$ олур.

Нәзәри олараг сонлу истилик кечиричилији алмаг үчүн кристалын Һамилтон функсијасында анһармоник һәдди јазмаг вә бу һәддә бир һәјачанланма кими бахмаг лазымдыр. Бу анһармоник һәјачанланма потенсиалынын тә'сири нәтичәсиндә фонон далға вектору $\boldsymbol{q}$ олан бир квант һалындан башга бир $\boldsymbol{q}'$ һалына кечир, јә'ни фононлар бир-бири илә тоггушараг импулсларыны дәјишәр вә бунунла да сәрбәст јолунун узунлуғу азалар, јә'ни сонлу олар.

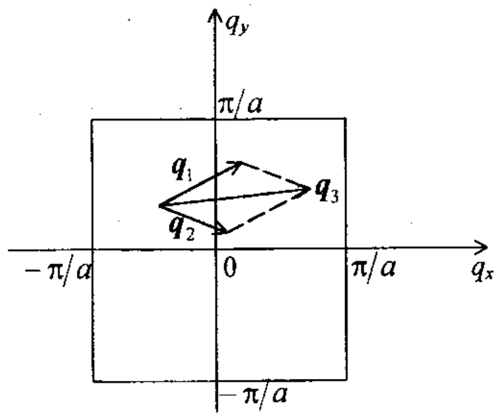
Фонон-фонон гаршылыглы тә'сириндә ики чүр просес мүмкүндүр: *N- нормал просес* вә *U- гајтарычы просес* (*umklapp process, процесс переброса*).

N - просес елә просесдир ки, $\boldsymbol{q}_1$ вә $\boldsymbol{q}_2$ далға вектору олан ики фонон тоггушаркән алынан фононун далға вектору $\boldsymbol{q}_3$ биринчи Брүллијен зонасынын дахилиндә галыр. Бу заман импулсун сахланмасы гануну бир гијмәтли өдәнилир (шәкил 11.1):

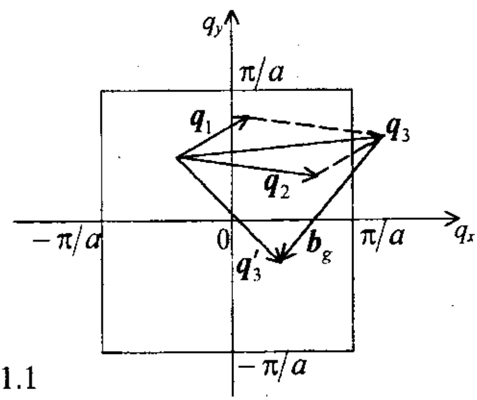
$$\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{q}_3; \quad N\text{-просес} \qquad (11.16)$$

U - просес елә просесдир ки, тоггушма заманы алынан фононун далға вектору биринчи Брүллијен зонасындан кәнара чыхыр вә ону биринчи Брүллијен зонасы дахилинә гајтармаг үчүн онун үзәринә ихтијари $\boldsymbol{b}_g$ тәрс гәфәс вектору әлавә етмәк лазымдыр (шәкил 11.1):

N-просес



U- просес



шәкил 11.1

$$\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{q}_3 + \boldsymbol{b}_g; \quad U\text{ – просес}. \tag{11.17}$$

$\omega(\boldsymbol{q}_3)=\omega(\boldsymbol{q}_3+\boldsymbol{b}_g)$ олдуғундан һәр ики просес заманы енержинин сахланмасы гануну өдәнилир:

$$\hbar\omega_1(\boldsymbol{q}_1)+\hbar\omega_2(\boldsymbol{q}_2)=\hbar\omega_3(\boldsymbol{q}_3). \qquad (11.18)$$

Лакин импулсун сахланмасы јалныз N - просесдә өдәнилир. U - просесдә исә импулсун сахланмасы гануну өдәнилмир, бу заман $\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2$ чәми $\boldsymbol{q}_3$ векторуна дејил, $\boldsymbol{q}_3'=\boldsymbol{q}_3+\boldsymbol{b}_g$ векторуна бәрабәр олур. Буна көрә (шәкил 11.1-дән көрүндүјү кими) N - просес фононун сәрбәст јолунун узунлуғуну дәјишдирмир вә она көрә дә истилик кечиричилијинә тә'сир етмир. U - просес исә фононларын сәрбәст јолунун узунлуғуну дәјишдирир вә истилик мүгавимәти јарадыр.

Инди бу дејиләнләр әсасында кристалын истилик кечиричилијинин температурдан асылылығыны тәһлил едәк.

Чох ашағы температурларда ($T\to 0$) кристалда јалныз кичик далға вектору олан ($aq \ll 1$) олан фононлар ојандығындан онлар арасындакы топгушма N - просесдир вә бу просес фононларын сәрбәст јолуну дәјишдирмир. Белә ашағы температурларда фононларын сәрбәст јолу кристалын дефектләриндән вә ја нүмунәнин сәрһәдләриндән сәпилмә илә тә'јин олунур, она көрә дә T-дән асылы олмур: $\Lambda(T\to 0)=const$. Температурун бу областында кристалын истилик тутуму $C_V(T)\sim T^3$ олдуғундан (11.15) мүнасибәтинә әсасән

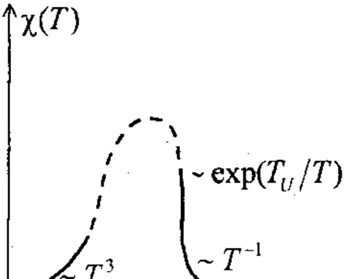
$$\chi(T)\big|_{T\to 0}=const\cdot T^3 \qquad (11.19)$$

алыныр. Бу фононларын ашағы температурларда кристалын дефектләриндән вә нүмунәнин сәрһәдләриндән сәпилмәси нәтичәсиндә фононун истилик кечиричилијидир.

Температур артдыгча даһа бөјүк импулса (далға векторуна) малик олан фононлар ојаныр вә N - просеслә јанашы U - просес баш верир. U - просесдә иштирак едә билән фононларын далға әдәдини q_U, ујғун тезлији исә ω_U илә ишарә едәк. Бу чүр фононларын сајы $N_U = \left(e^{\hbar\omega_U/k_0T} - 1\right)^{-1}$ чох олдугча фононларын сәрбәст јолу бир о гәдәр гыса олар, јә'ни $\Lambda \sim N_U^{-1} = \left(e^{\hbar\omega_U/k_0T} - 1\right)$. Беләликлә, температур артдыгча U - просесдә иштирак едән фононларын сајы артыр вә бунунла да сәрбәст јолун узунлуғу експоненсиал олараг азалыр. Температурун мүәјјән гијмәтиндә $(T_U \approx \hbar\omega_U / k_0)$ сәрбәст јолун $\Lambda(T) \sim e^{\hbar\omega_U/k_0T}$ експоненсиал азалмасы истилик тутуму $C_V(T)$-нин артмасыны үстәләјир вә $T > T_U$ температурларындан сонра $\chi(T)$ азалмаға башлајыр, јә'ни $T \approx T_U$ областында истилик кечиричилији максимумдан кечмәлидир вә

$$\chi(T) \sim \exp\left(\frac{T_U}{T}\right); \quad T \geq T_U \tag{11.20}$$

кими експоненсиал олараг азалмалыдыр (шәкил 11.2).



шәкил 11.2

Гејд едәк ки, U - просесин әсас олмаға башладығы температур T_U дебај температуру θ -дан ашағы олдуғундан ($T_U < \theta$) фонон истилик кечиричилијинин максимуму да дебај температурундан ашағыда мүшаһидә олунмагдадыр.

Температур даһа да јүксәлдикчә ($T >> T_U$) U - просесдә иштирак едән фононларын сајы $N_U \approx \dfrac{k_0 T}{\hbar\omega_U} = \dfrac{T}{T_U}$ кими артыр вә ујғун олараг фононларын сәрбәст јолунун узунлуғу $\Lambda(T) \sim N_U^{-1} \sim T^{-1}$ кими азалыр. Температурун бу областында истилик тутумунун T-дән зәиф асылы олдуғуну нәзәрә алсаг истилик кечиричилијинин T илә тәрс мүтәнасиб олараг азалдығыны дејә биләрик:

$$\chi(T) \sim C_V \cdot T^{-1} \sim T^{-1}; \quad T >> T_U \qquad (11.21)$$

Ајдындыр ки, ујғун олараг кристалын фонон истилик мүгавимәти $T \approx T_U$ температурунда минимумдан кечмәлидир. Гејд едәк ки, истилик кечиричилијинин шәкил 11.2 -дә көстәрилән температур асылылығы тәчрүбәләрдә мүшаһидә едилмишдир.

Әдәбиjјат

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика.- М.: Наука, 1964.
2. *Мухтаров А.И.* Статистик физика.- Бакы, 1960.
3. *Ансельм А.И.* Введение в теорию полупроводников. -М.: Наука, 1978.
4. *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела.- М.: Наука, 1978.
5. *J.Richard Christman.* Fundamentals of Solid State Physics. John Wiley. New York, Singapore, 1988.
6. *Займан. Дж.* Принципы теории твердого тела.- М.: Мир, 1974.
7. *Алиев М.И.* Теплопроводность полупроводников.- Баку, 1963.
8. *Анималу А.* Квантовая теория кристаллическх твердых тел.- М.: Мир, 1981.
9. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела.- М.: Мир, 1979, т.1,2.
10. *Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г.* Физика полупроводников.- М.: Наука, 1977.
11. *Займан Дж.* Электроны и фононы. – М.: ИЛ, 1962.
12. *Аскеров Б.М.* Электронные явления переноса в полупроводниках. – М.: Наука, 1985.

Нәшријјат редактору: ***Рәһим Рәһимли***

Билкисајар дизајны: ***Самирә Темирнијазова, Елчин Һабилоғлу***

Корректорлар: ***Хураман Јусифгызы, Бәһруз Аббаслы***

Әскәров Бәһрам Меһрәли оғлу

БӘРК ЧИСИМЛӘР НӘЗӘРИЈЈӘСИ

Али мәктәбләр үчүн дәрс вәсаити

Јығылмаға верилиб: 16. 03. 2001. Чапа имзаланыб: 04.05.2001
Форматы: 60x90 $^1/_{16}$. Ә'ла нөв кағыз. Офсет чап үсулу.
Шәрти чап вәрәги: 9,6. Тиражы 500 нүсхә. Сифариш № 21
Гијмәти мүгавилә илә.

"Күр" нәшријјат-полиграфија бирлијиндә
чап едилмишдир.