

ՏՅԳ.1
4-ՏԳ

Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

**ՊԻՆԴ ՄԱՐՄՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ
ՆԵՐԱԾՈՒԹՅՈՒՆ
ՄԱՍ I**

**ՀԱՅԱՍՏԱՆ ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ
ՀԱՅԻՆՖՈ ԳՈՐԾԱԿԱԼՈՒԹՅՈՒՆ**

ԵՐԵՎԱՆ 1998

Կ-530 Ա. Ա. Կիրակոսյան
Պիճնդ մարմնի ֆիզիկայի ներածություն, Մաս I
«ՀԱՅԻՆՖՈ» գործակալություն, 1998 թ.

Գրքում տրված են նախնական տեղեկություններ բյուրեղական ցանցի կառուցվածքի և դինամիկայի, բյուրեղներում հանդիպող կապերի տեսակների, ինչպես նաև բյուրեղական ցանցի ջերմային և դիէլեկտրական հատկությունների մասին:

Նախատեսված է ԵՊՀ-ի ֆիզիկայի և ռադիոֆիզիկայի ֆակուլտետների, Արցախի պետական համալսարանի բնագիտական ֆակուլտետի, ՀՊՃՀ-ի կիրեռնետիկայի, կիսահաղորդչային սարքերի ֆիզիկայի, նյութաբանության և հարակից բնագավառներում մասնագիտացող ուսանողների, ինչպես նաև մագիստրոսների և ասպիրանտների համար:

Գիրքը կարող է օգտակար լինել նաև պիճնդ մարմնի ֆիզիկան ինքնուրույն ուսումնասիրել ցանկացող գիտաշխատողների և ճարտարագետների համար:

186492
2000866218

1604010000
Կ-----1998 թ.
701 (01) 98

ԳՄԴ 22.3

**Նախաձեռնությամբ Ամերիկահայ ճարտարագետների
և գիտնականների ընկերակցության**

ՇԱՀԵՆ և ԱԴԻԿ ՊՈՂՈՍՅԱՆՆԵՐԸ
և իրենց գավակներ ՆԱԹԱԼԻՆ և ԱՐՄԵՆԸ,
ի նշան

ՎՈԱՄ և ՓԱՌԱՆՉԵՄ ՊՈՂՈՍՅԱՆՆԵՐԻ և
ՍԱՐԳԻՍ ու ՀԱՍՄԻԿ ՂԱՀՐԱՄԱՆՅԱՆՆԵՐԻ
երախտիքի,
հովանավորել են սույն գրքի հրատարակությունը

Նախաբան.....	6
--------------	---

Գլուխ I. Բյուրեղական կառուցվածքներ

§1. Տեղափոխական համաչափություն.....	9
§2. Վիզներ-Ջեյտցի բջիջ.....	18
§3. Բրավեի ցանց:Բյուրեղական համակարգեր.....	21
§4. Կարևոր բյուրեղական կառուցվածքներ.....	26
§5. Հակադարձ ցանց.....	36
§6. Հակադարձ ցանցի հատկությունները: Միլերյան ցուցիչներ: Հակադարձ ցանցի կառուցումը.....	41
§7. Դիֆրակցիան բյուրեղական կառուցվածքներում.....	50

Գլուխ II. Կապերի տեսակները բյուրեղներում

§1. Բյուրեղական մարմինների դասակարգումը.....	58
§2. Վանդերվաալսյան կապի տեսությունը.....	67
§3. Մոլեկուլային բյուրեղի կապի էներգիայի հաշվարկը.....	73
§4. Իոնական կապի տեսությունը.....	78
§5. Մադելունգի հաստատունի հաշվարկման մեթոդները.....	83
§6. Կովալենտ կապի տեսությունը.....	96
§7. Մետաղական կապի տեսությունը.....	106

Գլուխ III. Բյուրեղական ցանցի դինամիկան

§1. Ներդաշնակ մոտավորություն.....	111
§2. Տատանումները և ալիքները պարզ միաչափ ցանցում.....	113
§3. Ամենամոտ հարևանների մոտավորությունը.....	120
§4. Տատանումները և ալիքները բարդ (բազիսով) միաչափ ցանցում.....	123
§5. Եռաչափ բարդ ցանցի տատանումները.....	134
§6. Սալմանային պայմանների ուսումնասիրությունը.....	146
§7. Տատանումների բաշխումը սպեկտրում: Վիճակների խտության ֆունկցիա.....	151

Գլուխ IV. Բյուրեղական ցանցի ջերմային հատկությունները

§1. Պինդ մարմնի ջերմունակության դասական տեսությունը.....164

§2. Պինդ մարմնի ջերմունակության քվանտային տեսությունը.....170

§3. Պինդ մարմնի ջերմունակության էյնշտեյնի տեսությունը.....177

§4. Պինդ մարմնի ջերմունակության Դեբայի տեսությունը.....181

§5. Դեբայի տեսության քննարկումը.....192

§6. Բյուրեղական ցանցի ջերմային տատանումները:
 Հալման չափանիշը.....202

§7. Դեբայ-Ուոլերի գործոնը.....209

§8. Տատանումների աններդաշնակությամբ սլայմանավորված
 երևույթներ բյուրեղներում.....214

Գլուխ V. Մեկուսիչների էլեկտրական հատկությունները

§1. Էլեկտրական դաշտը մեկուսիչներում: Դիէլեկտրական
 թափանցելիություն.....227

§2. Ապարևեռացմող դաշտ: Ապարևեռացման գործակից.....230

§3. Տեղային դաշտ: Լորենցի դաշտ.....234

§4. Բևեռացվելիության տեսությունը.....237

§5. Օպտիկական տատանումները իոնային բյուրեղներում.....245

§6. Էլեկտրամագնիսական ալիքի փոխազդեցությունը
 ցանցային տատանումների հետ.....253

§7. Դիէլեկտրական ռելաքսացիա.....258

§8. Պիրոէլեկտրականություն.....263

§9. Պիեզոէլեկտրականություն.....265

§10. Սեգնետաէլեկտրականություն.....270

Հավելված 1. Ֆիզիկական հաստատումների աղյուսակ.....281

Հավելված 2. Մաթեմատիկական լրացումներ.....282

Գրականություն.....288

Ընթերցողների ուշադրությանը ներկայացվող սույն գիրքը հեղինակի կողմից Երևանի պետհամալսարանի ֆիզիկայի ֆակուլտետի ուսանողներին կարդացվող «Պինդ մարմնի ֆիզիկայի ներածություն» ընդհանուր դասընթացի դասախոսությունների վերամշակված և ընդլայնված շարադրանքն է:

Պինդ մարմնի ֆիզիկան ֆիզիկայի կարևորագույն և ընդարձակ բաժիններից մեկն է: Այն գիտության և տեխնիկայի ամենատարբեր բնագավառների՝ նյութաբանության, կիսահաղորդիչների և կիսահաղորդչային սարքերի ֆիզիկայի, էլեկտրոնիկայի և պինդմարմնային միկրոէլեկտրոնիկայի, ցածր ջերմաստիճանների ֆիզիկայի գիտական հիմքն է:

Վերջին տասնամյակների ընթացքում էապես ընդլայնվել են պինդ մարմնի տեսության գործնական կիրառման տիրույթները: Ստեղծվել են պինդմարմնային լազերների նոր տեսակներ, էապես կերպարանափոխվել է կիսահաղորդչային միկրոէլեկտրոնիկան, որտեղ լայնորեն կիրառվում են ցածր չափականությամբ էլեկտրոնային համակարգեր պարունակող տարրեր կառուցվածքներ: Ներկայումս հաջողությամբ կիրառվում են հազվագյուտ հողային մետաղների հիման վրա սինթեզված բյուրեղները, մագնիսական կիսահաղորդիչները, ամորֆ մետաղները և կիսահաղորդիչները, բարձրջերմաստիճանային գերհաղորդիչները և այլ նյութեր:

Պինդ մարմնի ֆիզիկայի տեսական և կիրառական նվաճումների հետ մեկտեղ մեծ զարգացում են ապրել պինդ մարմինների հետազոտման փորձարարական մեթոդները՝ մագնիսական, մագնիսական ռեզոնանսային, մյուսբաուերյան սպեկտրոսկոպիան, նյութառնագրությունը, մոդուլյացիոն սպեկտրոսկոպիան և այլն:

Դասագրքում շարադրված են պինդ մարմնի ֆիզիկայի հիմնական բաժինները: Գրքի առաջին մասը նվիրված է բյուրեղական կառուցվածքների, պինդ մարմիններում կապերի տեսակների և բյուրեղական ցանցի ֆիզիկական հատկությունների ուսումնասիրությանը: Մանրամասն դիտարկված են ցանցի դիմամիկան և ցանցի ջերմային հատկությունները, ինչպես նաև պինդ մարմինների դիէլեկտրական հատկությունները:

Գրքի երկրորդ մասը նվիրված է պինդ մարմնի էլեկտրոնային ենթահամակարգի հատկությունների ուսումնասիրությանը: Հանգամանորեն շա-

րադրված է դասական էլեկտրոնային տեսությունը (Պ.Դերուդե, Հ.Լորենց) և ազատ էլեկտրոնային գազի քվանտային տեսությունը (Ա.Զոմերֆելդ): Տրված են նախնական տեղեկություններ պինդ բյուրեղական մարմնում էլեկտրոնի էներգիական սպեկտրի գոտիական կառուցվածքի մասին: Առանձին գլուխներ են նվիրված գերհաղորդականության երևույթի, պինդ մարմնի մագնիսական հատկությունների և արատների ուսումնասիրությանը: Տրված են նաև նախնական, ընդհանուր բնույթի տեղեկություններ ամորֆ պինդ մարմինների և հեղուկ բյուրեղների մասին:

Գրքում գործնականորեն չեն քննարկված պինդ մարմնի ֆիզիկայի զարգացման գործում նշանակալի դեր խաղացած տարբեր փորձեր: Այս հանգամանքն ամենևին չի նշանակում պինդ մարմնի ֆիզիկայում վարձի և փորձարարական հետազոտությունների դերի թերագնահատում կամ անտեսում: Հեղինակի հիմնական նպատակն է եղել մասամբ լրացնել պինդ մարմնի ֆիզիկային վերաբերվող, մայրենի լեզվով ուսումնական զրականության պակասը, տալով պինդ մարմնի ֆիզիկայի տեսական գիտելիքների այն նվազագույնը, որն անհրաժեշտ է ֆիզիկայի և տեխնիկայի տարբեր բնագավառներում մասնագիտացող գիտաշխատողներին և ճարտարագետներին ինքնուրույն աշխատանքային գործունեության մեջ:

Ծանոթությունը սույն դասագրքին կնախապատրաստի ընթերցողին ավելի մանրամասնորեն ուսումնասիրելու պինդ մարմնի ֆիզիկայի առանձին բաժիններ ժամանակակից և ավելի խոր մակարդակով:

Ենթադրվում է, որ ընթերցողը ծանոթ է համալսարանների բնագիտական ֆակուլտետների ուսումնական ծրագրերով նախատեսված մաթեմատիկայի և ընդհանուր տեսական դասընթացի (հիմնականում՝ քվանտային մեխանիկայի և վիճակագրական ֆիզիկայի) գիտելիքների նվազագույնին:

Գրքի օգտակարությունը մեծացնելու նպատակով բանաձևերի արտածումները, որպես կանոն, կատարված են համեմատաբար մանրամասն ձևով: Աստղանիշով (*) պարագրաֆներն առաջին ընթերցման ժամանակ կարելի է բաց թողնել:

Գրքում օգտագործված զրականության ցանկը բաժանված է երկու մասի: Ընդհանուր զրականության ցանկում տրված են շարադրված բաժինների վերաբերյալ տեղեկություններ պարունակող, ինչպես նաև հիմնարար բնույթի հանրահայտ դասագրքերի հղումներ: Երկրորդ մասում տրված է

յութաբանչյուր զլիսում շարադրված նյութին առավել մոտ և մասնագիտական բնույթի դասագրքերի և մենագրությունների ցանկն ըստ զլուխների:

Սույն դասագիրքը նախ և առաջ ուսումնական ձեռնարկ է, ուստի նրանում, որպես կանոն, տրված չեն հղումներ առանձին բնագրերի և սկզբնաղբյուրների վրա:

Գրքում, եզակի բացառություններով, օգտագործված է ֆիզիկական միավորների գաուսյան (CGSE) համակարգը: Նկարները և աղյուսակները համարակալված են տվյալ զլխի, իսկ բանաձևերը՝ պարագրաֆի շրջանակներում: Պարագրաֆների և բանաձևերի վրա հղումներում նշվում է զլուխը (օրինակ՝ II.7, III.5.14):

Սույն դասագիրքը նախատեսված է որպես ուսումնական ձեռնարկ պետհամալսարանի ֆիզիկայի և ռադիոֆիզիկայի ֆակուլտետների, Արցախի պետական համալսարանի բնագիտական ֆակուլտետի, ինչպես նաև ճարտարագիտական համալսարանի համապատասխան մասնագիտացումների ուսանողների համար: Այն կարող է օգտակար լինել նաև պինդ մարմնի ֆիզիկայի, կիսահաղորդիչների և կիսահաղորդչային սարքերի ֆիզիկայի, մագնիսականության, գերհաղորդականության, նյութաբանության, տեսական քիմիայի, քիմիական ֆիզիկայի և հարակից այլ բնագավառներում մասնագիտացող մագիստրոսների և ասպիրանտների համար, ինչպես նաև որպես տեղեկատու ձեռնարկ՝ դասախոսների և գիտաշխատողների համար:

Ես անկեղծ շնորհակալություն եմ հայտնում գրքի խմբագիր, ակադեմիկոս Է.Ղազարյանին՝ մշտական աջակցության, օգուակար խորհուրդների և դիտադությունների համար: Երախտապարտ եմ իմ գործընկերներին՝ Ա.Վարդանյանին, Է.Աբովյանին, Կ.Քեչեյանին և Հ.Հակոբյանին՝ բազմաբնույթ օգնության և բննարկումների համար:

Իմ երախտագիտությունն եմ հայտնում նաև Ա.Ասատրյանին, առանց որի անմիջական և արհեստավարժ օգնության սույն դասագրքի հրատարակումը կարող էր հետաձգվել անորոշ ժամանակով:

Գիտակցելով, որ գրքում անխուսափելի են բացթողումները և անճշտությունները, երախտագիտությամբ կընդունեմ բոլոր ընթերցողների, հատկապես՝ ուսանողների, դիտողությունները և խորհուրդները:

Հեղինակ

ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐ

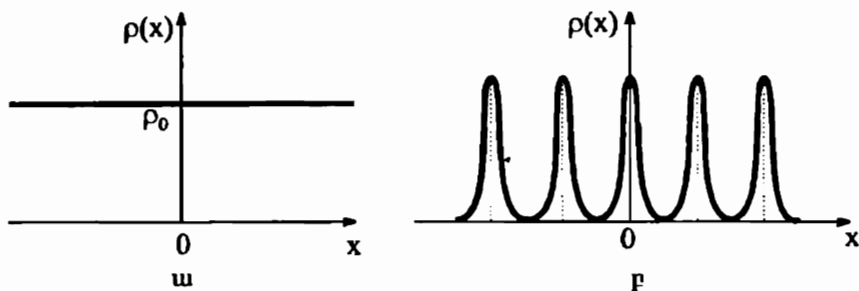
§1. Տեղափոխական համաչափություն

Մարմինների համաչափության հատկությունները պայմանավորված են նրանցում մասնիկների (ատոմների, իոնների, մոլեկուլների) տարածական դասավորությամբ: Շարժվող մասնիկները մարմնում չունեն որոշված տեղեր, ուստի նրանց դիրքերը որոշվում են $\rho(x, y, z)$ խտության ֆունկցիայի միջոցով, որը հավանականության խտության իմաստ ունի (հավանականությունն այն բանի, որ մասնիկը գտնվում է $r(x, y, z)$ կետի մոտ dV ծավալում, հավասար է $\rho(r) dV$): Մասնիկների տարածական բաշխման համաչափության հատկությունները որոշվում են կոորդինատների այն ձևափոխություններով (տեղափոխություններով, պտույտներով, անդրադարձումներով), որոնք անփոփոխ են թողնում $\rho(x, y, z)$ ֆունկցիան: Մարմնի համաչափության ձևափոխությունների բազմությունը կազմում է մարմնի համաչափության խումբը:

Ամենաբարձր համաչափությամբ օժտված են իզոտրոպ մարմինները, որոնց հատկությունները բոլոր ուղղություններով նույնն են, օրինակ՝ գազերը, հեղուկները, ամորֆ պինդ մարմինները: Իզոտրոպ մարմնում յուրաքանչյուր մասնիկի բոլոր դիրքերը տարածության մեջ հավասարահեռավոր են, այսինքն՝ $\rho(x, y, z) = \rho_0 = \text{const}$ (նկ. I.1, ա): Ընդհակառակը, պինդ բյուրեղական մարմիններում, որոնց հատկությունները կախված են ուղղությունից (անիզոտրոպություն), խտության ֆունկցիան ունի խիստ արտահայտված մաքսիմումներ, որոնց տարածական դասավորվածությունն օժտված է հստակ արտահայտված համաչափությամբ (նկ. I.1, բ):

Այսպիսով, բյուրեղական վիճակին բնորոշ է մասնիկների բաշխումը տարածության մեջ կանոնավոր համաչափ կառուցվածքի ձևով, որը կոչվում է տարածական կամ բյուրեղական ցանց: Այն առաջին հերթին բնութագրվում է տարածական պարբերականությամբ կամ տեղափոխական համաչափությամբ: Վերջինս նշանակում է, որ ցանկացած բյուրեղի համար գոյու-

բյուն ունեն միևնույն հարթության մեջ չգտնվող a_1, a_2, a_3 վեկտորներ, որոնցով բյուրեղը՝ որպես ամբողջություն տեղափոխելիս, համընկնում է ինքն իր հետ: Տարածական ցանցի միևնույն ձևով դասավորված կետերը, որոնք այս տեղափոխության արդյունքում համընկնում են իրար հետ, կոչվում են բյուրեղական ցանցի հանգույցներ: Քանի որ բյուրեղի տեղափոխությունը a_k -ին ($k = 1, 2, 3$) պատիկ վեկտորների չափով նորից հանգեցնում է բյուրեղի համընկնմանն ինքն իր հետ, ապա հարմար է որպես հիմնական վեկտորներ ընտրել տվյալ ուղղություններով տեղափոխությունների ամենափոքր երկարությամբ վեկտորները:



Նկ. 1.1

Եթե կոորդինատների սկզբնակետը համընկնում է որևէ հանգույցի հետ, ապա ցանկացած հանգույցի դիրք կարելի է տալ a_1, a_2, a_3 հիմնական վեկտորների գծային համակցության (կոմբինացիայի) տեսքով՝

$$l = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3, \quad (1.1)$$

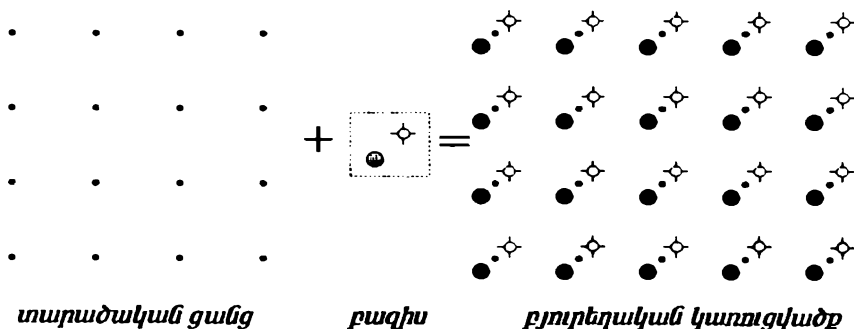
որտեղ $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$: l վեկտորը կոչվում է բյուրեղական ցանցի տեղափոխության վեկտոր կամ տեղափոխական պարբերություն:

Տեղափոխական պարբերականությամբ օժտված է միայն իդեալական, պլյսինքն՝ տարածականորեն անսահմանափակ և արատներից զուրկ բյուրեղը: Մանրամասնափակ բյուրեղի համար տեղափոխման ձևափոխությունը համաչափության ձևափոխություն չէ, քանի որ «տեղափոխված» բյուրեղն այլևս չի համընկնում նախնական բյուրեղի հետ: Եթե տեղափոխության չափը շատ փոքր է բյուրեղի չափերից, ապա տեղափոխության հետևանքով ծավալից հեռացած մասնիկների թիվը շատ փոքր է մարմնի ծավալում եղած

մասնիկների թվից, ուստի իրական բյուրեղների հատկությունները կարելի է ուսումնասիրել, օգտվելով անվերջ բյուրեղական տարածության հասկացությունից, որի համար տեղավախություններն իրոք համաչափության ձևափոխություններ են:

Նման մոտեցումը կարելի է հիմնավորել նաև հետևյալ քանակական գնահատականով: Մակրոսկոպական չափեր ունեցող մոուլի սահմանային շերտում գտնվող մասնիկների ներդրումը մոուլի որևէ աղիտիվ մեծության (օրինակ՝ ներքին էներգիայի) մեջ համեմատական է $N_S/N \sim L^2/L^3 \sim \sim 1/L \sim N^{-1/3}$ -ին, որտեղ L -ը մոուլի զծային չափն է, $N \sim L^3$ -ը՝ մոուլում մասնիկների թիվը, իսկ N_S -ը մոուլի սահմանային շերտում գտնվող մասնիկների թիվն է: Քանի որ մակրոսկոպական մոուլում $N = \nu N_A$, որտեղ $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ մոլ}^{-1}$ Ավոգադրոյի հաստատունն է, ν -ն՝ մոլերի թիվը, ապա $\nu \sim 1$ դեպքում $N_S/N \sim 10^{-8}$, ուստի սահմանի գոյությամբ պայմանավորված ներդրումը կարելի է անտեսել:

Տարածական ցանցը մաթեմատիկական հասկացություն է. բյուրեղական կառուցվածք առաջանում է միայն այն դեպքում, երբ տարածական ցանցի յուրաքանչյուր հանգույցի հետ կապվում է ատոմների որոշակի խումբ՝ բազիս, ընդ որում բոլոր հանգույցների հետ կապված խմբերը նույնական են ինչպես կազմությամբ, այնպես էլ տեղադրությամբ և դիրքորոշմամբ (նկ. I.2):



Նկ. I.2

Մետաղների, իներս գազերի բյուրեղներում բազիսը կազմված է ընդամենը մեկ ատոմից, սակայն հայտնի են բազմաթիվ բյուրեղներ, որոնց բազիսը պարունակում է հազարավոր ատոմներ: N ատոմներից (իոններից) կազմված բազիսը տրվում է

$$\mathbf{r}_j = a_1 \mathbf{x}_j + a_2 \mathbf{y}_j + a_3 \mathbf{z}_j, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (1.2)$$

վեկտորների հավաքածուով, որով որոշվում է ցանցի հանգույցի նկատմամբ ատոմների դիրքը: Սովորաբար ատոմները ցանցի սովյալ կետի նկատմամբ տեղադրում են այնպես, որ $0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1$:

Տեղափոխության հիմնական վեկտորներով կառուցված զուգահեռանիստը կոչվում է տարրական բջիջ: Պարզ է, որ տարրական բջջի ընտրությունը միարժեք չէ, քանի որ միարժեք չէ տարածական ցանցի հիմնական վեկտորների ընտրությունը: Դեռ ավելին, վերջիններս կարելի է ընտրել բազմաթիվ ձևերով:

Դիցուք՝ a_1, a_2, a_3 -ը հիմնական վեկտորներ են: Դրանց փոխարեն ներմուծենք նոր վեկտորներ՝

$$\mathbf{a}'_i = \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{a}_k, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (1.3)$$

որտեղ α_{ik} -երը ամբողջ թվեր են: Մյուս կողմից, եթե $\mathbf{a}'_i$ վեկտորները հիմնական են, ապա $\mathbf{a}_i$ «նախկին» հիմնական վեկտորները պետք է արտահայտվեն $\mathbf{a}'_i$ «նոր» վեկտորների միջոցով (1.3) բանաձևով՝

$$\mathbf{a}_i = \sum_k \beta_{ik} \mathbf{a}'_k, \quad (1.4)$$

որտեղ β_{ik} գործակիցները նույնպես ամբողջ թվեր են: (1.3) և (1.4) բանաձևերից հետևում է, որ

$$\mathbf{a}_i = \sum_{kl} \beta_{ik} \alpha_{kl} \mathbf{a}_k \quad \text{և} \quad \sum_k \beta_{ik} \alpha_{kl} = \delta_{il} = \begin{cases} 1, & i = l, \\ 0, & i \neq l, \end{cases} \quad (1.5)$$

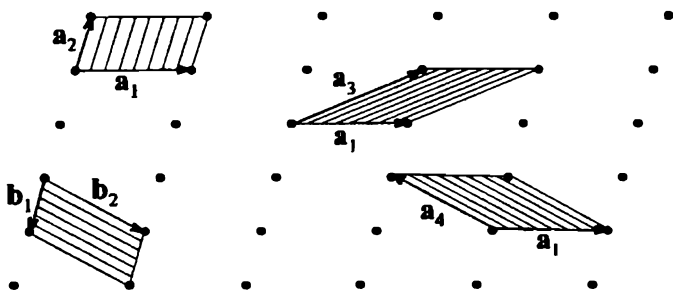
որտեղ δ_{il} -ը Կրոնեկերի խորհրդանիշն է: Համաձայն (1.5) առնչության, $\|\alpha_{ik}\|$ և $\|\beta_{ik}\|$ մատրիցներն իրար հակադարձ են, հետևաբար $\|\beta_{ik}\|$ մատրիցի որոշիչը՝

$$\det \beta_{ik} = (\det \alpha_{ik})^{-1}: \quad (1.6)$$

Քանի որ α_{ik} , և β_{ik} գործակիցներն ամբողջ թվեր են, ապա a_i վեկտորների հիմնական լինելու անհրաժեշտ և բավարար պայմանը, համաձայն (1.6) բանաձևի, հետևյալն է

$$\det \alpha_{ik} = \pm 1 : \quad (1.7)$$

Տարրական բջջի ընտրության տարբեր դեպքեր երկչափ բյուրեղական ցանցում բերված են նկ. 1.3-ում:



Նկ. 1.3

Տարրական բջջին բաժին է ընկնում բյուրեղական ցանցի միայն մեկ հանգույց, իսկ բջջում ատոմների թիվը հավասար է բազիսի ատոմների թվին: Տարրական բջջի ծավալը որոշվում է

$$v_0 = \left(a_1 \cdot [a_2, a_3] \right) = \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix} \quad (1.8)$$

բանաձևով: (1.8) որոշիչի տարրերն են հիմնական վեկտորների բաղադրիչները, գրված որևէ դեկարտյան կոորդինատական համակարգում:

Հիմնական վեկտորների բազմության ցանկացած եռյակի վրա կառուցված տարրական բջիջների ծավալներն իրար հավասար են: Իրոք, համաձայն (1.3), (1.7) և (1.8) բանաձևերի՝

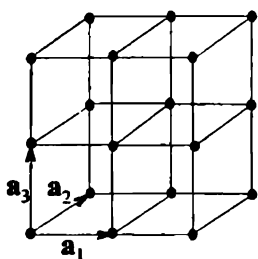
$$v'_0 = \det a'_{im} = \det \alpha_{ii} \cdot \det a_{im} = \det a_{im} = v_0 :$$

Եթե տարրական բջիջը պարունակում է միայն մեկ հանգույց, ապա ցանցը կոչվում է պարզ կամ Բրավեի տիպի, իսկ եթե պարունակում է մեկից ավելի հանգույց, ապա կոչվում է բարդ կամ բազիսով: Այսպիսով, տարածական ցանցը կանվանենք պարզ, եթե հնարավոր է ընտրել տարրական բջիջն այնպես, որ այն պարունակի մեկ հանգույց:

Դիտարկենք մի քանի օրինակ:

1. Պարզ խորանարդային (ՊԿ) ցանց

Այս ցանցի տարրական բջիջը խորանարդ է, որը կազմված է մեծությամբ հավասար և իրար հետ ուղիղ անկյուն կազմող հիմնական վեկտորներից՝

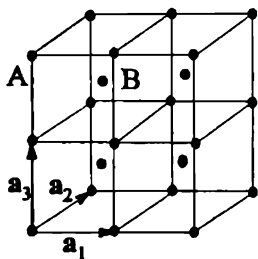


Նկ. 1.4

րից՝ $|a_1| = |a_2| = |a_3| \equiv a$ (նկ. 1.4): Ցանցի ցանկացած հանգույց պատկանում է ութ խորանարդի, այսինքն՝ յուրաքանչյուր խորանարդի բաժին է ընկնում $1/8$ հանգույց: Բազմապատկելով այն խորանարդի զագաթների թվով (8), կստանանք, որ տարրական բջիջն բաժին է ընկնում մեկ հանգույց, հետևաբար՝ խորանարդային ցանցը պարզ ցանց է: Տարրական բջջի (տարրական խորանարդի) ծավալը՝ $v_0 = a^3$:

2. Ծավալակենտրոնացված խորանարդային (ԾԿԿ) ցանց

Այս ցանցը կարելի է ստանալ նկ. 1.4-ում պատկերված խորանարդային կառուցվածքից, եթե յուրաքանչյուր խորանարդի կենտրոնում ավելացվի մեկ հանգույց (նկ. 1.5):



Նկ. 1.5

Առաջին հայացքից այս ցանցը թվում է բարդ, քանի որ յուրաքանչյուր խորանարդ պարունակում է երկու հանգույց: Ցանցի զագաթները (A) որոշվում են

$$l_A = l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3, \quad (1.9)$$

իսկ կենտրոնները (B)՝

$$l_B = \left(l_1 + \frac{1}{2}\right)a_1 + \left(l_2 + \frac{1}{2}\right)a_2 + \left(l_3 + \frac{1}{2}\right)a_3 \quad (1.10)$$

տեղափոխության վեկտորներով, l_1, l_2, l_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են: Յույց տանք, որ կարելի է ընտրել նոր հիմնական վեկտորներ այնպես, որ և՛ զազաթները, և՛ կենտրոնները տրվեն միևնույն տեղափոխության վեկտորով: Նոր հիմնական վեկտորներն ընտրենք հետևյալ կերպ

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{2}(-a_1 + a_2 + a_3), \\ c_2 &= \frac{1}{2}(a_1 - a_2 + a_3), \\ c_3 &= \frac{1}{2}(a_1 + a_2 - a_3): \end{aligned} \quad (1.11)$$

(1.11) բանաձևից a_i -երն արտահայտելով c_i -երի ($i = 1, 2, 3$) միջոցով՝

$$a_1 = c_2 + c_3, \quad a_2 = c_1 + c_3, \quad a_3 = c_1 + c_2 \quad (1.12)$$

և տեղադրելով (1.9) և (1.10) բանաձևերում, կստանանք՝

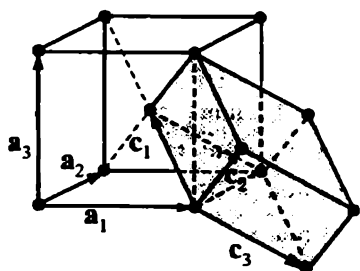
$$l_A = (l_2 + l_3)c_1 + (l_3 + l_1)c_2 + (l_1 + l_2)c_3, \quad (1.13)$$

$$l_B = (l_2 + l_3 + 1)c_1 + (l_3 + l_1 + 1)c_2 + (l_1 + l_2 + 1)c_3: \quad (1.14)$$

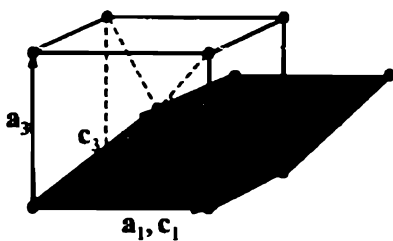
Քանի որ l_1, l_2, l_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են, ապա (1.13) և (1.14) վեկտորները կարելի է ներկայացնել

$$l = n_1 c_1 + n_2 c_2 + n_3 c_3 \quad (1.15)$$

վեկտորով, որտեղ n_1, n_2, n_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են:



ա



բ

Նկ. I.6

Նոր հիմնական վեկտորներ կարելի է ընտրել մաս հետևյալ կերպ

$$c'_1 = a_1, \quad c'_2 = a_2, \quad c'_3 = \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3) : \quad (1.16)$$

Նկ. 1.6-ում պատկերված են տարրական խորանարդը և տարրական բջիջը հիմնական վեկտորների (1.11) և (1.16) բանաձևերով ստացված ընտրության դեպքում:

Որոշենք (1.11) և (1.16) բանաձևերով ստացվող հիմնական վեկտորների վրա կառուցված տարրական բջիջների ծավալները: Համաձայն (1.8) արտահայտության

$$v_0 = (c_1 \cdot [c_2, c_3]) = \begin{vmatrix} c_{1x} & c_{1y} & c_{1z} \\ c_{2x} & c_{2y} & c_{2z} \\ c_{3x} & c_{3y} & c_{3z} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2}, \quad (1.17)$$

նույն ձևով կստանանք, որ

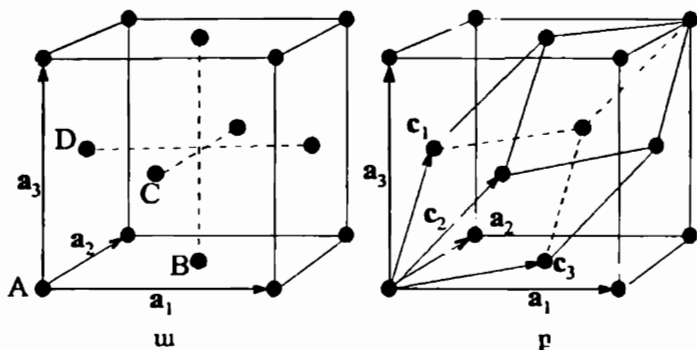
$$v'_0 = (c'_1 \cdot [c'_2, c'_3]) = \frac{a^3}{2} = v_0 : \quad (1.18)$$

Այս օրինակով համոզվեցինք, որ տարրական բջջի ծավալը կախված չէ հիմնական վեկտորների ընտրությունից: Եթե տարրական խորանարդում կար երկու հանգույց, ապա տարրական բջջին բաժին է ընկնում մեկ հանգույց: Այսպիսով, ծավալակենսորոնացված խորանարդային ցանցը պարզ ցանց է:

3. Նխատակենորոնացված խորանարդային (ՆԿԽ) ցանց

Այս ցանցը ստանալու համար հարկավոր է պարզ խորանարդային ցանցի յուրաքանչյուր միստի կենտրոնում տեղադրել մեկ հանգույց: Ցանցի տարրական խորանարդը պարունակում է 4 հանգույց ($6 \times 1/2 = 3$ հանգույց՝ ի հաշիվ միստերի և $8 \times 1/8 = 1$ հանգույց՝ ի հաշիվ գագաթների) և ունի a^3 ծավալ (նկ. 1.7, ա): Նշանակենք l_A, l_B, l_C և l_D -ով համապատասխանաբար խորանարդի գագաթներում և միստերի կենտրոններում գտնվող հանգույցների դիրքերը որոշող վեկտորները՝

$$\begin{aligned}
l_A &= l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3, \\
l_B &= \left(l_1 + \frac{1}{2}\right) a_1 + \left(l_2 + \frac{1}{2}\right) a_2 + l_3 a_3 = l_A + \frac{a_1 + a_2}{2}, \\
l_C &= \left(l_1 + \frac{1}{2}\right) a_1 + l_2 a_2 + \left(l_3 + \frac{1}{2}\right) a_3 = l_A + \frac{a_1 + a_3}{2}, \\
l_D &= l_1 a_1 + \left(l_2 + \frac{1}{2}\right) a_2 + \left(l_3 + \frac{1}{2}\right) a_3 = l_A + \frac{a_2 + a_3}{2}.
\end{aligned} \tag{1.19}$$



Նկ. I.7

Այժմ անցնենք նոր հիմնական վեկտորների, որոնք a_1, a_2, a_3 -ի հետ կապված են հետևյալ կերպ՝ (նկ. I.7, բ)

$$c_1 = \frac{1}{2}(a_2 + a_3), \quad c_2 = \frac{1}{2}(a_3 + a_1), \quad c_3 = \frac{1}{2}(a_1 + a_2) : \tag{1.20}$$

Դժվար չէ համոզվել, որ c_1, c_2, c_3 հիմնական վեկտորներով արտահայտված l_A, l_B, l_C և l_D վեկտորները կարելի է ներկայացնել մեկ միասնական տեսքով՝

$$l = n_1 c_1 + n_2 c_2 + n_3 c_3 ,$$

որտեղ n_1, n_2, n_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են: Օգտվելով (1.20) բանաձևերից, հաշվենք նոր հիմնական վեկտորներով կազմված տարրական բջջի ծավալը՝

$$v_0 = (c_1 \cdot [c_2, c_3]) = \begin{vmatrix} 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{8} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{4} a^3, \quad (1.21)$$

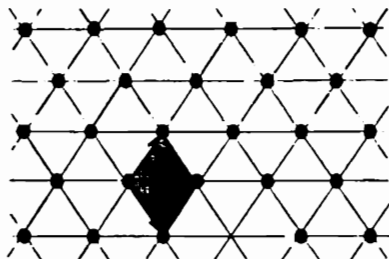
որը չորս անգամ փոքր է տարրական խորանարդի ծավալից: Այսպիսով, տարրական բջիճն բաժին է ընկնում մեկ հանգույց, հետևաբար, նիստակենսությունացված խորանարդային ցանցը պարզ ցանց է:

Պարզ և բարդ ցանցերի միջև առաջին հայացքից ձևական թվացող տարբերությունն իրականում բերում է բյուրեղների ֆիզիկական հատկությունների էական որակական տարբերությունների: Մասնավորապես, բարդ ցանցի տատանումների սպեկտրն ունի օպտիկական ճյուղեր, որոնցից զուրկ է պարզ ցանցի տատանումների սպեկտրը (տես գլուխ III):

§2. Վիզներ-Ջեյտցի բջիճ

Տեղափոխական համաչափության հետ մեկտեղ տարածական ցանցն օժտված է համաչափության նաև այլ տարրերով, որոնց կիրառման դեպքում ցանցը համընկնում է ինքն իր հետ: Դրանց թվին են պատկանում պտույտները համաչափության առանցքների շուրջը և անդրադարձումները համաչափության հարթություններում, որոնց համախումբը կազմում է տարածական ցանցի կետային ձևափոխությունների խումբը:

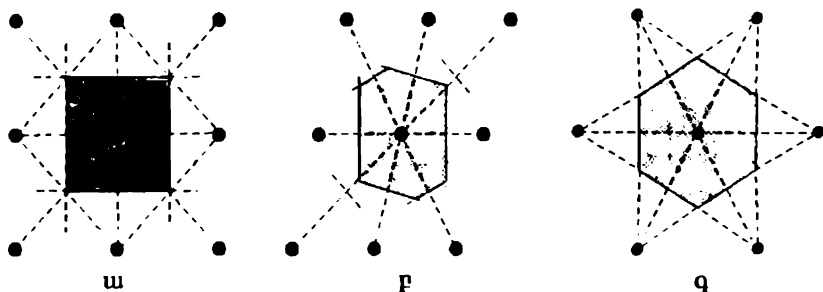
Տարրական բջիճն իր մեջ պարունակում է բյուրեղի տեղափոխական



Նկ. I.8

համաչափության բոլոր տարրերը: Ունենալով տարրական բջիճ, կարելի է տարածության մեջ նրա կրկնությամբ կառուցել ողջ բյուրեղը, սակայն որպես երկրաչափական մարմին այն օժտված չէ ցանցի կետային ձևափոխությունների խմբին պատկանող համաչափության տարրերով: Օրինակ՝ Նկ. I.8-ում պատկերված երկչափ հեքսա-

գոնալ տարածական ցանցն ունի 6-րդ կարգի համաչափության առանցք (այսինքն՝ որևէ հանգույցով անցնող և հարթությանն ուղղահայաց առանցքի շուրջը ցանցը 60° -ով պտտելիս այն համընկնում է իր հետ), իսկ այդ ցանցի տարրական բջիջը (ընդգծված շեղանկյունը) չունի այդպիսի առանցք: Մակայն պարզ ցանցում միշտ կարելի է ընտրել այնպիսի տարրական բջիջ, որն իր մեջ պարունակի ցանցի համաչափության առանցքների և հարթությունների մասին ողջ ինֆորմացիան:

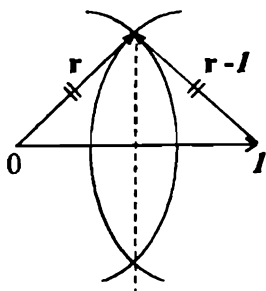


Նկ. I.9

Այդպիսի բջիջ կառուցելու համար որևէ հանգույցից, որն ընտրվում է որպես կենտրոն, տանենք ճառագայթ դեպի ամենամոտ հարևան հանգույցը, իսկ հետո ճառագայթի միջնակետով տանենք այդ ճառագայթին ուղղահայաց հարթություն: Այնուհետև նույն գործողությունը կատարենք մնացած հարևան հանգույցների նկատմամբ: Ստացված հարթությունների համախառնը որպես կենտրոն ընտրված հանգույցի շուրջը կառանձնացնի տարածության որոշակի տիրույթ, որը կոչվում է համաչափ բջիջ կամ Վիգներ-Չեյտցի բջիջ:

Ըստ կառուցման, Վիգներ-Չեյտցի բջիջն այն բոլոր կետերի համախառնն է, որոնք ավելի մոտ են ընտրված կենտրոն-հանգույցին, քան մնացած հանգույցներին: Նկ. I.9-ում պատկերված են Վիգներ-Չեյտցի բջիջները մի քանի երկչափ տարածական ցանցերի համար:

Ի տարբերություն ցանցի տարրական բջջի, Վիգներ-Չեյտցի բջիջը եռաչափ ցանցում ընդհանուր դեպքում գուգահեռանիստ չէ, այլ բազմանիստ, որի կենտրոնում գտնվում է հանգույցը:



Նկ. I.10

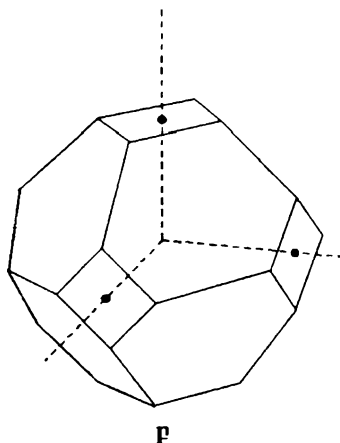
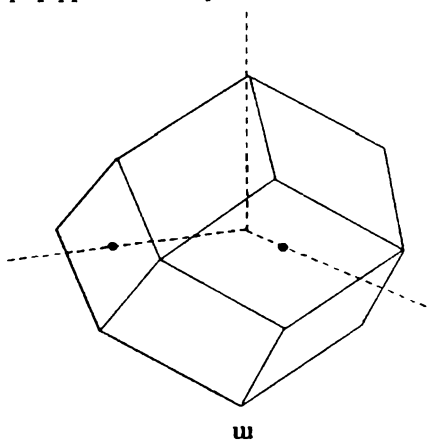
Սակայն ամենակարևորն այն է, որ Վիգներ-Չեյտցի բջիջը որպես երկրաչափական մարմին օժտված է տարածական ցանցի կետային ձևափոխությունների խմբի համաչափության բոլոր տարրերով:

Վիգներ-Չեյտցի բջջի նիստերի հարթությունները որոշվում են

$$|r| = |r - l| \quad (2.1)$$

հավասարումով, որտեղ r -ը նիստի հարթության որևէ կետի շառավիղ-վեկտորն է բջջի կենտրոնի

նկատմամբ, l -ը՝ մոտակա հանգույցի դիրքը որոշող վեկտորը (Նկ. I.10): Համաձայն (2.1) հավասարման, նիստի հարթությունը որոշվում է երկու հարևան կետերում գտնվող կենտրոններով և հավասար (r) շառավիղներով զնդերի հատումով:



Նկ. I.11

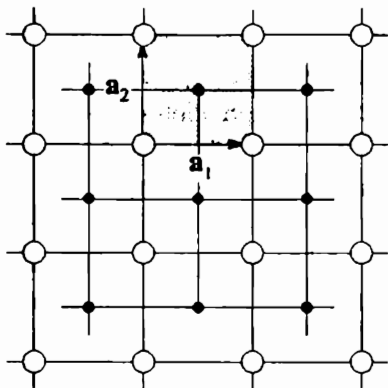
Նկ. I.11, ա-ում պատկերված է նիստակենտրոնացված խորանարդային ցանցի Վիգներ-Չեյտցի բջիջը, որն իրենից ներկայացնում է ունրական տասներկուսանիստ (դոդեկաէդր), իսկ Նկ. I.11, բ-ում՝ ծավալակենտրոնացված խորանարդային ցանցինը, որը տասնչորսանիստ է («հատված ութանիստ»):

§3. Բրավեի ցանց: Բյուրեղական համակարգեր

Բրավեի ցանց անվանում են բյուրեղի բոլոր յուրաքանչյուր համարժեք հանգույցների համախումբը, որը ստիպված է (1.1) արտահայտությամբ: Պարզ ցանցի Բրավեի ցանցը հենց նրա տարածական ցանցն է: Բարդ ցանցը բաղկացած է իրար մեջ ներդրված Բրավեի ցանցերից, ընդ որում՝ բոլոր ցանցերը, որոնցից բաղկացած է բարդ ցանցը, երկրաչափորեն նույնական են (նկ. 1.12): Բրավեի ցանցերի դասակարգումը կատարվում է ըստ կետաչիև խմբի համաչափության տարրերի, ուստի ուսումնասիրենք այժմ Բրավեի ցանցերի համաչափության բոլոր հնարավոր տեսակները:

Նախ պարզենք, թե համաչափության ինչպիսի առանցքներ կարող է ունենալ Բրավեի ցանցը:

Դիցուք՝ A -ն Բրավեի ցանցի որևէ հանգույց է, որով անցնում է նկ. 1.13-ի հարթությանն ուղղահայաց համաչափության առանցք: Եթե B -ն նույնպես ցանցի հանգույց է, որը գտնվում է A -ից տեղափոխման որևէ վեկտորի հավասար հեռավորության վրա, ապա նրանով նույնպես կանցնի համաչափության առանցք: Կատարենք պտույտ φ անկյունով A -ով անցնող առանցքի շուրջը: Այժմ B կետը կգրավի նոր՝ B' դիրք: Նման ձևով պտույտը B -ի շուրջը կբերի A -ին նոր՝ A' դիրքի (նկ. 1.13): Ըստ ենթադրության, A' և B' հանգույցները պատկանում են Բրավեի նույն ցանցին, հետևաբար նրանք կարող են համընկնել զուգահեռ տեղափոխության միջոցով: Նկ. 1.13-ից հետևում է, որ

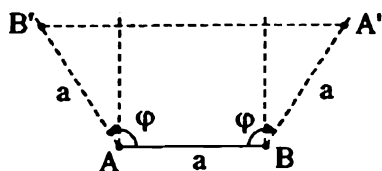


Նկ. 1.12

$$B'A' = a \cdot p = AB + 2a \sin\left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right), \quad (3.1)$$

որտեղ p -ն ամբողջ թիվ է: (3.1) արտահայտությունից հետևում է, որ

$$2 \cos \varphi = 1 - p : \quad (3.2)$$



Նկ. I.13

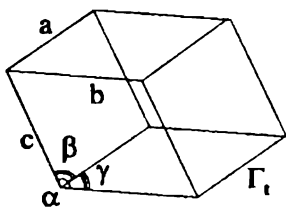
Քանի որ $|\cos \varphi| \leq 1$, ապա p -ն կարող է ընդունել միայն հետևյալ արժեքները՝
 $p = 0$ ($\varphi = 60^\circ$), $p = 1$ ($\varphi = 90^\circ$), $p = 2$ ($\varphi = 120^\circ$), $p = 3$ ($\varphi = 180^\circ$):

Եթե φ անկյունը ներկայացնենք

$$\varphi = \frac{2\pi}{n} \quad (3.3)$$

տեսքով, ապա n -ի համար կատանանք հետևյալ արժեքները՝ $n = 6, 4, 3, 2$: Այսպիսով, Բրավեի ցանցը կարող է ունենալ միայն 2-րդ, 3-րդ, 4-րդ և 6-րդ կարգի համաչափության (սյուսական) առանցքներ:

Այժմ ռառմոնասիւրենք Բրավեի ցանցի համաչափության հնարավոր տեսակները սյուսյունների և անդրադարձումների նկատմամբ: Համաչափության այս տեսակները կրում են բյուրեղական համակարգ կամ սինգոնիա անվանումները: Բյուրեղական համակարգը որոշակի առանցքների և համաչափության հարթությունների համախումբ է, այսինքն՝ կետային խմբերից մեկն է: Բրավեի ցանցի յուրաքանչյուր հանգույց նրա համաչափության (ինվերսիայի) կենտրոնն է: Եթե համաչափության կենտրոնը Բրավեի ցանցի համաչափության միակ սարքն է (տեղափոխություններից բացի), ապա ունենք



Նկ. I.14

1. Տրիկլինային համակարգ (Նկ. I.14)

Այս համակարգի համաչափությունն ամենացածրն է: Բրավեի ցանցի հանգույցները տեղադրված են կամայական երկարության կողմերով ($a \neq b \neq c$) և կամայական անկյուններով ($\alpha \neq \beta \neq \gamma$) զուգահեռանիստի զազաթներում: Տրիկլինային համակարգի Բրավեի ցանցը նշանակվում է Γ_1 -ով:

2. Մոնոկլինային համակարգ (Նկ. I.15)

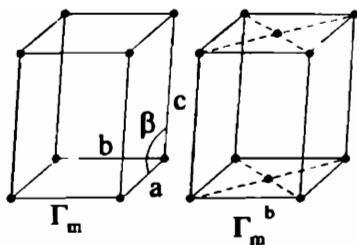
Այս համակարգի համաչափությունն ունի կամայական հինքով ուղիղ զուգահեռանիստը ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$): Բրավեի ցանցն իրա-

կանացվում է երկու եղանակով.

ա) Բրավեի պարզ մոնոկլինային ցանց (Γ_m), որի հանգույցները տեղադրված են ուղղանկյուն միաստերի զագաթներում,

բ) միստակենտրոնացված մոնոկլինային ցանց (Γ_m^b), որի հանգույցները տեղադրված են մաս զուգահեռանիստի (ab)

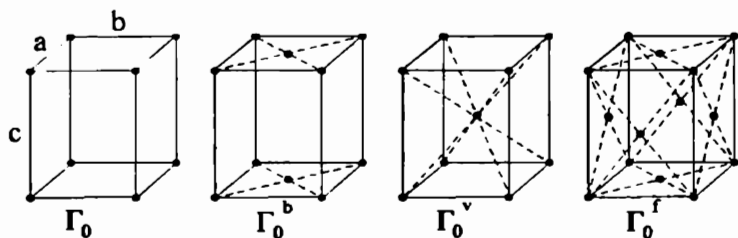
հանդիպակաց ուղղանկյուն միաստերի կենտրոններում:



Նկ. I.15

3. Ռոմբական (օրթոգոնալ) համակարգ (նկ. I.16)

Բնորոշվում է կամայական կողմերով ($a \neq b \neq c$) և ուղղանկյուն ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) զուգահեռանիստի համաչափությամբ:



Նկ. I.16

Այս համակարգին են պատկանում չորս տեսակի Բրավեի ցանցեր.

ա) պարզ ռոմբական (Γ_0), որի հանգույցները տեղադրված են ուղղանկյուն զուգահեռանիստի զագաթներում,

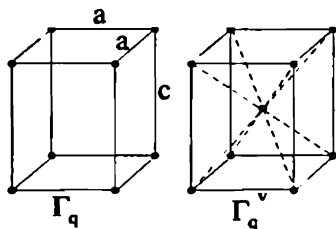
բ) հիմնակենտրոն (Γ_0^b), որի հանգույցները տեղադրված են մաս երկու հանդիպակաց միաստերի (հիմքերի) կենտրոններում,

գ) ծավալակենտրոնացված (Γ_0^v), որի հանգույցները տեղադրված են զուգահեռանիստի զագաթներում և կենտրոններում,

դ) միստակենտրոնացված (Γ_0^f), որի հանգույցները տեղադրված են զուգահեռանիստի զագաթներում և բոլոր միաստերի կենտրոններում:

4. Տետրագոնալ (քառակուսային) համակարգ (նկ. I.17)

Բնորոշվում է քառակուսային հիմքով ուղղանկյուն զուգահեռանիստի համաչափությամբ ($a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$): Բրավեի ցանցն իրականացվում է երկու ձևով.



Նկ. I.17

ա) պարզ տետրագոնալ ցանց (Γ_q),

երբ հանգույցները տեղադրված են զուգահեռանիստի գագաթներում,

բ) ծավալակենտրոնացված ցանց (Γ_q^v), երբ հանգույցները տեղադրված են

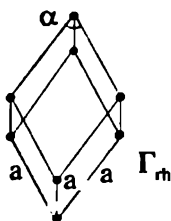
մաս զուգահեռանիստի կենտրոնում:

5. Ռոմբոէդրական (եռանիստ) համակարգ (նկ. I.18)

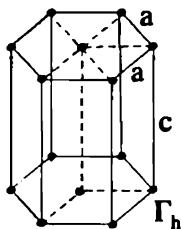
Բնորոշվում է ռոմբոէդրի (ստրաժական անկյունագծի ուղղությամբ ձգված կամ սեղմված խորանարդի) համաչափությամբ ($a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$): Բրավեի ցանցը (Γ_r) իրականացվում է միակ ձևով՝ հանգույցները տեղադրվում են ռոմբոէդրի գագաթներում:

6. Հեքսագոնալ համակարգ (նկ. I.19)

Բնորոշվում է կանոնավոր վեցանկյուն պրիզմայի համաչափությամբ: Բրավեի ցանցը (Γ_h) իրականացվում է միակ ձևով՝ նրա հանգույցները տեղադրվում են վեցանկյուն պրիզմայի գագաթներում և վեցանկյուն հիմքերի կենտրոններում:



Նկ. I.18



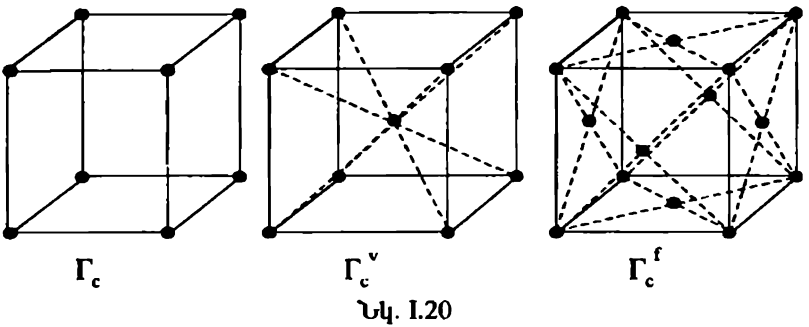
Նկ. I.19

7. Խորանարդային համակարգ (նկ. I.20)

Այս համակարգը բնորոշվում է խորանարդի համաչափությամբ և ունի

երեք տեսակի Բրավեի ցանց՝ պարզ (Γ_c), ծավալակենտրոնացված (Γ_c^v) և նիստակենտրոնացված (Γ_c^f):

Այսպիսով, զոյություն ունեն յոթ տարբեր կետային խմբեր, որոնք կա-
րող է ունենալ Բրավեի ցանցը: Նկատի ունենալով յուրաքանչյուր բյուրեղա-
կան համակարգում Բրավեի հնարավոր ցանցերի քիվը, կստանանք՝
 $1+2+4+2+1+1+3=14$: Այս 14 Բրավեի ցանցերը կազմում են համաչափու-
թյան լրիվ տարածական խումբ, որն իր մեջ պարունակում է տարածական
ցանցի ինչպես կետային, այնպես էլ տեղափոխական համաչափության բո-
լոր տարրերը:



Ուսումնասիրված 7 բյուրեղական համակարգերը և 14 Բրավեի ցանցե-
րը համապատասխանում են այն դեպքին, երբ ցանցի բազիսն օժտված է
առավելագույն՝ զնդային համաչափությամբ (Բրավեի ցանցի հանգույցնե-
րում տեղադրված են զնդեր): Կամայական բյուրեղական կառուցվածքի
համաչափության խումբը կախված է ինչպես բազիսի, այնպես էլ Բրավեի
ցանցի համաչափությունից: Համաձայն Ե.Ֆյոդորովի, զոյություն ունեն բա-
զիսով ցանցերի 230 տարբեր համաչափության խմբեր՝ 230 տարածական
խմբեր: Այս 230 տարածական խմբերը բաշխված են 32 բյուրեղագրական
կետային խմբերի (դասերի) միջև: 32 բյուրեղական դասերը կարելի է ստա-
նալ 7 բյուրեղական համակարգերից, քննարկելով Բրավեի ցանցի համաչա-
փության նվազեցման բոլոր հնարավոր եղանակները: Աղյուսակ I.1-ում
սրված են Բրավեի ցանցերի և բյուրեղական կառուցվածքների կետային և
տարածական խմբերը:

	Բրավեի ցանց (զնդային համաչափ. բազիս)	Բյուրեղական կառուցվածք (կամայական համաչափ. բազիս)
Կետային խմբերի թիվը	7 (7 բյուրեղ. համակարգ)	32 (32 բյուրեղագր. կետ. խումբ)
Տարածական խմբերի թիվը	14 (14 Բրավեի ցանց)	230 (230 տարածական խումբ)

Բյուրեղական դասը, որը բյուրեղի համաչափության առանցքների և հարթությունների համախումբն է և կապված չէ տեղափոխությունների հետ, որոշում է բյուրեղում ֆիզիկական համարժեք ուղղությունները և դրանով իսկ անիզոտրոպ հոծ միջավայրի մակրոսկոպական համաչափությունը: Այս համաչափությամբ որոշվում են այնպիսի ֆիզիկական երևույթներ, ինչպիսիք են, օրինակ, լույսի տարածումը բյուրեղում, նրա ջերմային ընդարձակումը և մեխանիկական հատկությունները:

§4. Կարևոր բյուրեղական կառուցվածքներ

Ուսումնասիրենք մի քանի տարածված բյուրեղական կառուցվածքներ, որոնք մեծ հետաքրքրություն են ներկայացնում ինչպես փորձնական, այնպես էլ տեսական հետազոտությունների տեսանկյունից:

1. Պարզագույն բյուրեղական կառուցվածքների՝ *պարզ, ծավալակենտրոնացված և նիստակենտրոնացված խորանարդային* ցանցերի հետ ծանոթացել ենք §1-ում: Հարկ է ավելացնել, որ նորմալ պայմաններում միատարր նյութերից պարզ խորանարդային կառուցվածք ունի միայն ալֆա-պոլիմորֆը (α -Քո): Ծավալակենտրոնացված և նիստակենտրոնացված խորանարդային կառուցվածք ունեցող միատարր նյութերը տրված են համապատասխանաբար Աղյուսակ I.2-ում և Աղյուսակ I.3-ում:

Ինչպես երևում է բերված տվյալներից, մաքուր մետաղների բյուրեղների մեծ մասը պատկանում է խորանարդային համակարգին:

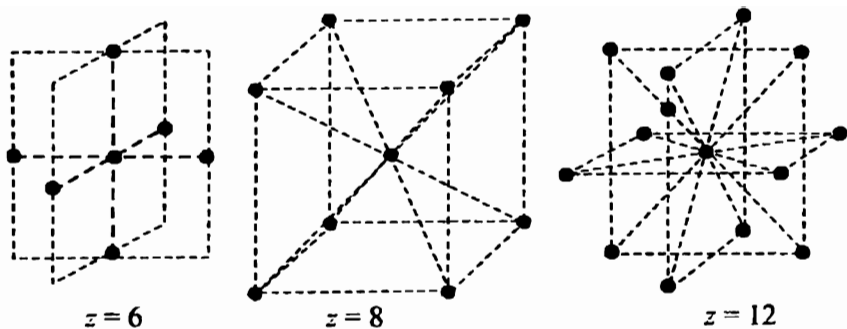
Աղյուսակ I.2

Swpp	a , Å	Swpp	a , Å	Swpp	a , Å
Ba	5,02	Li	3,49 (78K)	Ta	3,31
Cr	2,88	Mo	3,15	V	3,02
Cs	6,05 (78K)	Na	4,23	W	3,16
K	5,23 (5K)	Nb	3,30	Fe	2,87

Աղյուսակ I.3

Swpp	a , Å	Swpp	a , Å	Swpp	a , Å
Ar	5,26 (4,2K)	Ir	3,84	Pt	3,92
Ag	4,09	Kr	5,72 (58K)	δ-Pu	4,64
Al	4,05	La	5,30	Rh	3,80
Au	4,08	Ne	4,43 (4,2K)	Sc	4,54
Ca	5,58	Ni	3,52	Sr	6,08
Ce	5,16	Pb	4,95	Th	5,08
β-Co	3,55	Pd	3,89	Xe	6,20
Cu	3,61	Pr	5,16	Yb	5,49

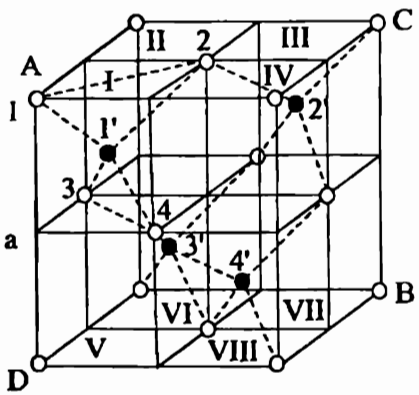
Բյուրեղական ցանցի կարևոր բնութագիրն է կոորդինացիոն թիվը՝ տվյալ հանգույցին ամենամոտ հարևանների (հանգույցների) թիվը, որը սովորաբար նշանակում են z -ով: Ցանկացած պարզ ցանցում z -ը միևնույնն է ցանցի բոլոր հանգույցների համար: Պարզ խորանարդային ցանցում $z = 6$ և կոորդինացիոն խմբի ատոմների հեռավորությունը տվյալ հանգույցից՝ $d = a$, որտեղ a -ն ցանցի հաստատունն է (խորանարդի կողը): Ծավալակենտրոնացված ցանցում $z = 8$, $d = a\sqrt{3}/2$, իսկ նիստակենտրոնացված ցանցում՝ $z = 12$, $d = a\sqrt{2}/2$ (նկ. I.21):



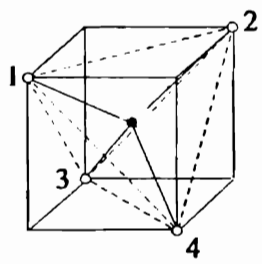
Նկ. I.21

2. Ալմաստի կառուցվածք

Ալմաստի ցանցը կարելի է ներկայացնել որպես իրար նկատմամբ խորանարդի տարածական անկյունագծի մեկ քառորդի չափով շեղված երկու նիստակենտրոնացված խորանարդային ցանցերի վերադրման արդյունք (Նկ. I.22):



Նկ. I.22



Նկ. I.23

Իրոք, եթե լուսավոր զնդիկներով նիստակենտրոնացված ցանցը AB անկյունագծով տեղաշարժենք $AB/4$ -ով, ապա 1 ատոմը կգրադեցնի $1'$ ատոմի տեղը, 2 ատոմը՝ $2'$ -ի, 3-ը՝ $3'$ -ի և 4-ը՝ $4'$ -ի տեղը: Քանի որ նիստակենտրոնացված խորանարդային ցանցը Բրավեի տիպի ցանց է, ապա ալմաստի ցանցում կարելի է ընտրել տարրական բջիջ, որը կապարտունակի եր-

կու առում (բազիսը կազմող ատոմների կոորդինատներն են՝ 000, $a/4$, $a/4$, $a/4$): Յուրաքանչյուր ատոմ ունի 4 ամենամոտ հարևան ($z = 4$) կապերի տեսարանական դասավորվածությամբ (նկ. I.23):

Նկ. I.22-ում պատկերված խորանարդային բջիջը կազմված է 18 ատոմից: Ատոմների դասավորությունը պատկերացնելու համար ցիկլիկենտրոնացված խորանարդը բաժանենք ութ միատեսակ խորանարդների (նկ. I.22, I-VIII): Ատոմներ դնենք I, III (վերին շերտ) և VI, VIII (ներքին շերտ) խորանարդների կենտրոններում: Արդյունքում կստանանք նկ. I.23-ում պատկերված չորս՝ տեսարանոր պարունակող խորանարդները: I և III խորանարդների տակ տեղադրելով V և VII «դատարկ» խորանարդները, կստանանք նկ. I.22-ում պատկերված ալմաստի կառուցվածքը: Հաշվենք խորանարդում հանգույցների քիվը՝ $8 \cdot (1/8) + 6 \cdot (1/2) + 4 = 8$: Նկ. I.22-ում պատկերված խորանարդը օժտված չէ խորանարդի համաչափության բոլոր տարրերով: Օրինակ՝ ուղղանկյուն առանցքի շուրջը 90° -ով պտտելիս հանգույցներն իրար հետ չեն համընկնում: Այսուհանդերձ, իր մակրոսկոպական հատկություններով ալմաստի բյուրեղն օժտված է խորանարդային համաչափությամբ: Ալմաստի կառուցվածքով բյուրեղացող տարրերը տրված են Աղյուսակ I.4-ում:

Աղյուսակ I.4

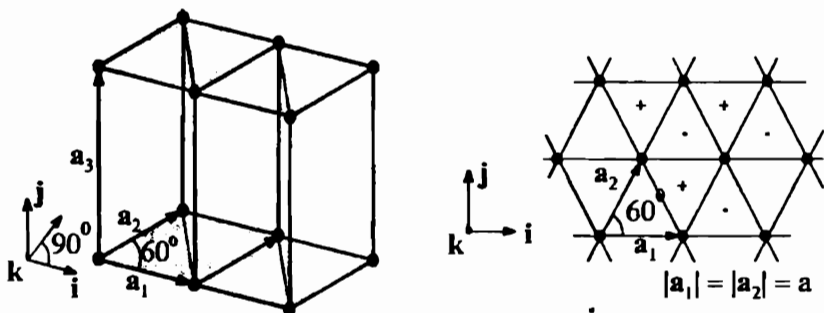
Տարր	Խորանարդի կողը՝ a , Å
C (ալմաստ)	3,57
Si	5,43
Ge	5,66
α-Sn (գորշ անագ)	6,49

3. Հեքսագոնալ խիտ դարսվածքով կառուցվածք

Հեքսագոնալ խիտ դարսվածքով (ՀԽԴ) կառուցվածքի հիմքում ընկած է Բրավեի պարզ հեքսագոնալ ցանցը, որը ստացվում է հարթ (երկչափ) եռանկյուն ցանցերն իրար վրա դարսելիս: Դարսման ուղղությունն անվանում են c -առանցք: Հիմնական վեկտորների եռյակը հետևյալն է՝ (նկ. I.24)

$$a_1 = a \cdot i, \quad a_2 = \frac{a}{2} i + \frac{\sqrt{3}a}{2} j, \quad a_3 = c \cdot k, \quad (4.1)$$

որտեղ i, j, k -ն միավոր վեկտորներ են ուղղանկյուն կոորդինատական համակարգում: a_1 և a_2 վեկտորները ծնուն են եռանկյուն ցանց x - y հարթության մեջ, իսկ a_3 -ը «դարսում» է ցանցը ցանցի վրա c հեռավորությամբ:

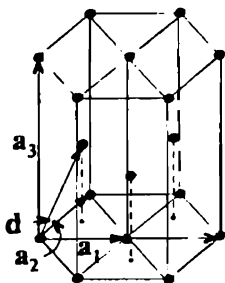


Նկ. 1.24

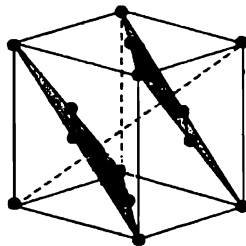
Հեքսագոնալ խիտ դարսվածքը կազմված է երկու պարզ հեքսագոնալ ցանցերից, որոնք իրար նկատմամբ տեղաշարժված են $d \equiv (a_1 + a_2)/3 + a_3/2$ վեկտորով (նկ. 1.25): Նման կառուցվածք կարելի է ստանալ a տրամագծով կոշտ զնդերի խիտ դարսվածքի օգնությամբ հետևյալ ձևով: Գնդերի առաջին շերտը դարսվում է եռանկյուն խիտ դարսվածքով: Երկրորդ շերտի զնդերը դարսվում են առաջին շերտի զնդերից կազմված եռանկյունների կենտրոններում (նկ. 1.24, փոքր կետերը): Արդյունքում երկրորդ շերտը ստացվում է առաջին շերտի նկատմամբ շեղված $|a_1 + a_2|/3 = a/\sqrt{3}$ չափով: Երրորդ շերտը կազմում են, տեղադրելով զնդերը երկրորդ շերտի փոսիկների մեջ այնպես, որ նրանք գտնվեն հենց առաջին շերտի զնդերի կենտրոնների վրա: Չորրորդ շերտը դարսվում է երկրորդ շերտի նման և այլն: Արդյունքում ստացվում է հեքսագոնալ խիտ դարսվածքով ցանց $|a_3| = c$ -ի խիստ որոշակի արժեքով՝

$$c = \sqrt{\frac{8}{3}} a \cong 1,633a : \quad (4.2)$$

Եթե բյուրեղական կառուցվածքը կազմող միավորները տարբերվում են կոշտ զնդերից, ապա c/a հարաբերությունը կարող է տարբերվել իր $(8/3)^{1/2}$ «իդեալական» արժեքից:



Նկ. I.25



Նկ. I.26

Ինչպես և ավաստի ցանցը, հեքսագոնալ խիտ դարսվածքով ցանցը Բրավեի ցանց չէ, բանի որ c -առանցքով շերտից շերտ անցնելիս փոխվում է հանգույցի շրջապատի կողմնորոշումը:

Հնարավոր են կոշտ զնդերի խիտ դասավորման բազմաթիվ այլ եղանակներ: Օրինակ, եթե զնդերի III շերտը դասավորենք այնպես, որ զնդերը գտնվեն և՛ I, և՛ II շերտերում «չօգտագործված» փոսիկների վրա ընկած փոսիկներում, որոնց նկ. I.24-ում համապատասխանում են + նշանները, ապա IV շերտը կտեղադրվի III շերտի փոսիկներում ճիշտ I շերտի զնդերի վրա, V շերտը՝ II շերտի վրա և այլն: Ստացված ցանցն իրենից ներկայացնում է Բրավեի նիստակենտրոնացված ցանց խորանարդի տարածական անկյունագծով, ուղղահայաց դարսման շերտերին (նկ. I.26): Շերտերի հաջորդականությունը հեքսագոնալ խիտ դարսվածքում կարելի է պատկերել հետևյալ կերպ՝ ABABABAB..., իսկ նիստակենտրոնացված խորանարդային ցանցի դեպքում՝ ABCABCABC...: Հայտնի են խիտ դարսվածքով մակ այլ տեսակի կառուցվածքներ: Օրինակ՝ որոշ հազվագյուտ հողային մետաղներ ունեն ABACABACABAC... տիպի կառուցվածք:

Swpp	a , Å	c	c/a	Swpp	a , Å	c	c/a
Be	2,29	3,58	1,56	Os	2,74	4,32	1,58
Cd	2,98	5,62	1,89	Pr	3,67	5,92	1,61
Ce	3,65	5,96	1,63	Re	2,76	4,46	1,62
α-Co	2,51	4,07	1,62	Ru	2,70	4,28	1,59
Dy	3,59	5,65	1,57	Sc	3,31	5,27	1,59
Er	3,56	5,59	1,57	Tb	3,60	5,69	1,58
Gd	3,64	5,78	1,59	Ti	2,95	4,69	1,59
He (2K)	3,57	5,83	1,63	Tl	3,46	5,53	1,60
Hf	3,20	5,06	1,58	Tu	3,54	5,55	1,57
Ho	3,58	5,62	1,57	Y	3,65	5,73	1,57
La	3,75	6,07	1,62	Zn	2,66	4,95	1,86
Lu	3,50	5,55	1,59	Zr	3,23	5,15	1,59
Nd	3,66	5,90	1,61	Mg	3,21	5,21	1,62

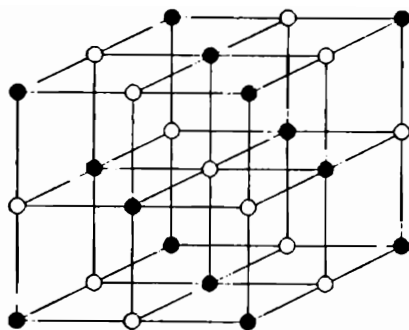
Հեքսագոնալ խիտ դարավածքի համար կոորդինացիոն թիվը՝ $z = 12$:

Աղյուսակ I.5-ում տրված են հեքսագոնալ խիտ դարավածքով միատարր նյութերը:

4. Նատրիումի քլորիդի կառուցվածք

Բազիսով ցանց հարկավոր է օգտագործել մակ ալյնպիսի բյուրեղական կառուցվածքներ նկարագրելիս, որոնցում ատոմները (իոնները) գտնվում են միայն Բրավեի ցանցի հանգույցներում, սակայն ցանցի լրիվ տեղափոխական համաչափությունը բացակայում է, քանի որ կան երկու տեսակի ատոմներ (իոններ): Օրինակ՝ նատրիումի քլորիդը բաղկացած է հավասար թվով նատրիումի և քլորի իոններից, որոնք դասավորված են պարզ խորանարդային ցանցի հանգույցներում ալյնպես, որ տվյալ իոնի ամենամոտ հարևանները

որ մյուս տեսակի 6 խոններն են (Նկ. I.27): Առանձին-առանձին մատրիումի և քլորի խոնները կազմում են միատակենտրոնացված խորանարդային ցանցեր, որոնք իրար նկատմամբ շեղված են խորանարդի տարածական անկյունագծի կեսի չափով: Այսպիսի կառուցվածքը կարելի է նկարագրել որպես Բրավեի միատակենտրոնացված ցանց՝ բազիտով, որը կազմված է (000) կեսում գտնվող մատրիումի խոնից և $(i + j + k)/2$ կեսում գտնվող քլորի խոնից:



Նկ. I.27

Աղյուսակ I.6

Բյուրեղ	a , Å	Բյուրեղ	a , Å	Բյուրեղ	a , Å
LiF	4,02	RbF	5,64	CaS	5,69
LiCl	5,13	RbCl	6,58	CaSe	5,91
LiBr	5,50	RbBr	6,85	CaTe	6,34
LiI	6,00	RbI	7,34	SrO	5,16
NaF	4,62	CsF	6,01	SrS	6,02
NaCl	5,64	AgF	4,92	SrSe	6,23
NaBr	5,97	AgCl	5,55	SrTe	6,47
NaI	6,47	AgBr	5,77	BaO	5,52
KCl	6,29	MgO	4,21	BaS	6,39
KBr	6,60	MgS	5,20	BaSe	6,60
KF	5,35	MgSe	5,45	BaTe	6,99
KI	7,07	CaO	4,81		

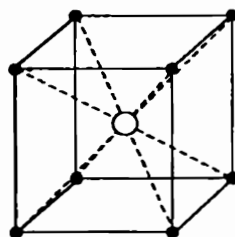
Աղյուսակ I.6-ում տրված են հաադիումի քլորիդի կառուցվածք ունեցող որոշ միացություններ:

5. Ֆեզիումի քլորիդի կառուցվածք

Բաղկացած է ցեզիումի և քլորի իոններից, որոնք տեղավորված են խորանարդի գագաթներում և կենտրոնում, որպես, որ ամեն մի իոն ունի ութ ամենամոտ հարևան՝ հակառակ նշանի լիցքով (նկ. I.28): Այս կառուցվածքը կարելի է նկարագրել որպես Բրավեի պարզ խորանարդային ցանց՝ բազիսով, որը բաղկացած է (000) կետում գտնվող ցեզիումի և $(i + j + k)a/2$ կետում գտնվող քլորի իոններից:

Աղյուսակ I.7

Բյուրեղ	a , Å	Բյուրեղ	a , Å
CsCl	4,12	CuPd	2,99
CsBr	4,29	BeCu	2,70
CsI	4,57	LiHg	3,29
TlCl	3,83	AlNi	2,88
TlBr	3,97	NH₄Cl	3,87
TlI	4,20	AgMg	3,28



Նկ. I.28

Այս կառուցվածքը կարելի է ներկայացնել նաև որպես երկու պարզ խորանարդային (մի տեսակի իոններից կազմված) ցանցերի վերադրում, որոնք իրար նկատմամբ շեղված են խորանարդի տարածական անկյունագծի կեսի չափով: Աղյուսակ I.7-ում տրված են ցեզիումի քլորիդի կառուցվածքով մի քանի միացություններ:

Ֆեզիումի քլորիդի, ինչպես նաև մատրիումի քլորիդի կառուցվածքներում բջջի գումարային լիցքը և դիպոլային մոմենտը զրո են: Իոնների ջերմային շարժման հետևանքով դիպոլային մոմենտը դառնում է զրոյից տարբեր, ինչը բերում է իոնային բյուրեղներում հաղորդականության էլեկտրոնների ցրման:

6. Զինկի խաբուսակի կառուցվածք

Այս կառուցվածքը երկրաչափորեն համընկնում է ալմաստի կառուցվածքի հետ: Մի նիստակնստրոնացված ցանցի հանգույցներում Zn -ի ատոմներն են, իսկ մյուսի հանգույցներում՝ S -ի (նկ. I.22): Յուրաքանչյուր ատոմ ունի այլ տեսակի 4 ամենամոտ հարևան ատոմներ, որոնք տեղադրված են տետրաէդրի գագաթներում (նկ. I.23): Աղյուսակ I.8-ում արված են ցինկի խաբուսակի կառուցվածքով մի քանի միացություններ:

Աղյուսակ I.8

Բյուրեղ	a , Å	Բյուրեղ	a , Å
ZnS	5.41	AlSb	6.13
ZnSe	5.67	GaP	5.45
ZnTe	6.09	GaAs	5.65
CdS	5.82	GaSb	6.12
CdTe	6.48	InP	5.87
HgS	5.85	InAs	6.04
HgSe	6.08	InSb	6.47
AlAs	5.62	SiC	4.35

Աղյուսակ I.9

Բյուրեղ	a , Å	c , Å
ZnO	3.25	5.12
ZnS	3.81	6.23
ZnSe	3.98	6.53
ZnTe	4.27	6.99
SiC	3.25	5.21
ալմաստ	2.52	4.12
CdS	4.13	6.75
CdSe	4.30	7.02

Հայտնի է ցինկի խաբուսակի դիտարկված խորանարդային կառուցվածքի, ինչպես նաև ալմաստի կառուցվածքի հեքսագոնալ տարատեսակը: Երկու տարատեսակներն էլ բաղկացած են կրկնակի շերտերից՝ մի շերտը զբաղեցնում են Zn -ի, մյուսը՝ S -ի ատոմները: Խորանարդային կառուցվածքում կրկնակի շերտերը դարսվում են ABCABCABC..., իսկ հեքսագոնալ կառուցվածքում՝ ABABABAB... հաջորդականությամբ: Աղյուսակ I.9-ում բերված են ցինկի խաբուսակի հեքսագոնալ կառուցվածք ունեցող մի քանի միացություններ: Ինչպես երևում է Աղյուսակ I.8-ից և Աղյուսակ I.9-ից, միևնույն միացությունը կարող է ունենալ և՛ խորանարդային, և՛ հեքսագոնալ կառուցվածք: Օրինակ՝ ZnS -ի խորանարդային կառուցվածքը 1300K-ից բարձր ջերմաստիճաններում անցնում է հեքսագոնալ կառուցվածքի: Այս

երևույթը հայտնի է որպես բազմատեսակություն (պոլիտիպիզմ): Այս երևույթի դասական օրինակ է SiC բյուրեղը, որը, բացի խորանարդային և հեքսագոնալ կառուցվածքներից, կարող է գոյություն ունենալ նաև 45 այլ տարատեսակների ձևով, որոնք ունեն տարբեր հեքսագոնալ դարսվածքներ:

§5. Հակադարձ ցանց

Բյուրեղական կառուցվածքը բնութագրող բոլոր ֆիզիկական մեծությունները ներկայացվում են այնպիսի ֆունկցիաներով, որոնք ունեն նույն պարբերականությունը, ինչ որ տարածական ցանցը: Այդպիսի մեծություններից են էլեկտրոնային լիցքի բաշխումը, էլեկտրաստատիկ պոտենցիալը, ցանցի որևէ կետում ատոմի զտնվելու հավանականությունը և այլն:

Եթե $f(\mathbf{r})$ -ը այդպիսի մի ֆունկցիա է, ապա պարբերականության պայմանը կգրվի հետևյալ տեսքով՝

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = f(\mathbf{r}), \quad (5.1)$$

որտեղ $\mathbf{l}$ -ը տեղափոխության ցանկացած վեկտոր է և տրվում է (1.1) արտահայտությամբ, իսկ $\mathbf{r}$ -ը կամայական կետի շառավիղ-վեկտոր է:

Նպատակահարմար է նախ քննարկել միաչափ բյուրեղի պարզ դեպքը, երբ բյուրեղի ֆիզիկական բնութագրերը վառիչվում են միայն մեկ ուղղությամբ: Այս դեպքում (5.1) պայմանը կգրվի

$$f(x + l) = f(x) \quad (5.2)$$

տեսքով, որտեղ $l = l_1 \cdot a$, $l_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, իսկ a -ն $f(x)$ ֆունկցիայի պարբերությունն է (միաչափ ցանցի հաստատունը):

Ինչպես հայտնի է, ցանկացած պարբերական ֆունկցիա կարելի է վերածել Ֆուրյեի շարքի՝

$$f(x) = \sum_g A_g e^{igx}, \quad (5.3)$$

որտեղ g մեծության ընդունած արժեքները որոշվում են (5.2) պայմանից՝

$$f(x + l) = \sum_g A_g e^{ig(x+l)} = \sum_g A_g e^{igx} \cdot e^{igl} \equiv f(x),$$

այսինքն՝

$$e^{ig'l} = 1 \quad \text{կամ} \quad e^{ig'al} = 1 : \quad (5.4)$$

Քանի որ l_1 -ը կամայական ամբողջ թիվ է, ապա (5.4) պայմանը տեղի կունենա միայն այն դեպքում, երբ

$$g = \frac{2\pi}{a} m \equiv g_1 m, \quad (5.5)$$

որտեղ m -ը կամայական ամբողջ թիվ է: $g = g_1 m$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots$) մեծությունները կազմում են միաչափ ցանցի հակադարձ երկարությունների բազմությունը: Ֆուրյե-վերլուծության A_g գործակիցները որոշելու համար (5.3) շարքի աջ և ձախ մասերը բազմապատկենք $\exp(-ig'x)$ -ով և ինտեգրենք ըստ x -ի $0 - L_x$ տիրույթում՝

$$\int_0^{L_x} f(x) e^{-ig'x} dx = \sum_g A_g \int_0^{L_x} e^{ix(g-g')} dx, \quad (5.6)$$

$L_x = aN_x$ -ը միաչափ ցանցի երկարությունն է, N_x -ը՝ տարրական բջիջների թիվը: Չևափոխենք (5.6) հավասարման ձախ մասը, նկատի ունենալով (5.2) և (5.5) արտահայտությունները.

$$\begin{aligned} \int_0^{L_x} f(x) e^{-ig'x} dx &= \sum_{m=0}^{N_x-1} \int_{ma}^{(m+1)a} f(x) e^{-ig'x} dx = \\ &= \sum_{m=0}^{N_x-1} \int_0^a f(x' + ma) e^{-ig'(x'+ma)} dx' = \\ &= \sum_{m=0}^{N_x-1} e^{-ig'ma} \int_0^a f(x') e^{-ig'x'} dx' = N_x \cdot \int_0^a f(x) e^{-ig'x} dx. \end{aligned} \quad (5.7)$$

(5.6) հավասարման աջ կողմում գրված ինտեգրալը՝

$$I_{gg'} \equiv \int_0^{L_x} e^{ix(g-g')} dx = L_x, \quad \text{եթե } g = g' \quad (5.8)$$

և

$$I_{gg'} = \frac{e^{iL_x(g-g')} - 1}{i(g-g')} = \frac{e^{iN_x a(g-g')} - 1}{i(g-g')} = 0, \quad \text{եթե } g \neq g', \quad (5.9)$$

քանի որ, համաձայն (5.4) պայմանի, կոտորակի համարիչը հավասար է զրոյի: (5.8) և (5.9) արտահայտությունները կարելի է միավորել՝

$$I_{gg'} = L_x \cdot \delta_{gg'} , \quad (5.10)$$

որտեղ $\delta_{gg'}$ -ը Կրոնեկերի խորհրդանիշն է: (5.6), (5.7) և (5.10) արտահայտություններից կստանանք՝

$$A_g = \frac{1}{L_x} \int_0^{L_x} f(x) e^{-igx} dx = \frac{N_x}{L_x} \int_0^a f(x) e^{-igx} dx = \frac{1}{a} \int_0^a f(x) e^{-igx} dx : \quad (5.11)$$

Այժմ անցնենք ընդհանուր դեպքի ուսումնասիրությանը: $f(r)$ պարբերական ֆունկցիան ներկայացնենք Ֆուրյեի եռակի շարքի տեսքով՝

$$f(r) = \sum_g A_g e^{igr} : \quad (5.12)$$

(5.1) և (5.12) առնչություններից բխում է, որ տեղափոխության կամայական l վեկտորի համար

$$e^{igl} = 1 , \quad (5.13)$$

որը համարժեք է հեռակալ պայմանին՝

$$g \cdot l = 2\pi \times \text{ամբողջ թիվ} : \quad (5.14)$$

Հարմարության համար նշանակելով $g = 2\pi b$ և (5.14) պայմանում տեղադրելով (1.1) արտահայտությունը, կստանանք՝

$$g \cdot l = 2\pi (ba_1 \cdot n_1 + ba_2 \cdot n_2 + ba_3 \cdot n_3) = 2\pi \times \text{ամբողջ թիվ} : \quad (5.15)$$

Քանի որ n_1, n_2, n_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են, ապա (5.15) պայմանը տեղի կունենա միայն այն դեպքում, երբ

$$ba_1 = l_1 , \quad ba_2 = l_2 , \quad ba_3 = l_3 , \quad (5.16)$$

որտեղ l_1, l_2, l_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են: Ստացված 3 հավասարումներից որոշվում է b անհայտ վեկտորը: Ներկայացնենք այն մեկ հարթության մեջ չգտնվող $[a_1, a_2]$, $[a_2, a_3]$ և $[a_3, a_1]$ երեք վեկտորների գծային համակցության տեսքով

$$b = \alpha [a_2, a_3] + \beta [a_3, a_1] + \gamma [a_1, a_2] : \quad (5.17)$$

Բազմապատկենք (5.17) արտահայտությունը սկալյար ձևով a_i -ով: Նկատի ունենալով (5.16) հավասարումներից առաջինը, ինչպես նաև այն, որ a_i

վեկտորն ուղղահայաց է $[a_3, a_1]$ և $[a_1, a_2]$ վեկտորներին, կստանանք՝

$$ba_1 = \alpha(a_1[a_2, a_3]) = l_1 \quad \text{և} \quad \alpha = \frac{l_1}{v_0}, \quad (5.18)$$

որտեղ v_0 -ն տարրական բջջի ծավալն է: (5.17) արտահայտությունը բազմապատկելով a_2 -ով, և ապա a_3 -ով, նույն ձևով կգտնենք β և γ գործակիցները՝

$$\beta = \frac{l_2}{v_0}, \quad \gamma = \frac{l_3}{v_0} : \quad (5.19)$$

Այսպիսով, (5.17) արտահայտությունը կընդունի հետևյալ տեսքը՝

$$b = b_1 l_1 + b_2 l_2 + b_3 l_3, \quad (5.20)$$

որտեղ

$$b_1 = \frac{1}{v_0}[a_2, a_3], \quad b_2 = \frac{1}{v_0}[a_3, a_1], \quad b_3 = \frac{1}{v_0}[a_1, a_2] : \quad (5.21)$$

Քանի որ a_1, a_2 և a_3 վեկտորները չեն գտնվում մեկ հարթության մեջ, ապա նույնը կարելի է ասել նաև b_1, b_2 և b_3 վեկտորների մասին: Համաձայն (5.20) արտահայտության

$$g = 2\pi b = 2\pi b_1 \cdot l_1 + 2\pi b_2 \cdot l_2 + 2\pi b_3 \cdot l_3 : \quad (5.22)$$

g վեկտորները կազմում են ցանց, որի տարրական բջիջը կառուցված է $g_1 = 2\pi b_1, g_2 = 2\pi b_2, g_3 = 2\pi b_3$ հիմնական վեկտորներով: Այս ցանցն ընդունված է անվանել հակադարձ նախնական ուղիղ (a_1, a_2, a_3 հիմնական վեկտորներով) ցանցի նկատմամբ: Ակնհայտ է, որ հակադարձ ցանցը միարժեքորեն որոշվում է a_1, a_2 և a_3 վեկտորներով, այսինքն՝ տալով ուղիղ ցանցը, միաժամանակ տրվում է և հակադարձ ցանցը: «Հակադարձ» անվանումը պայմանավորված է այն հանգամանքով, որ g վեկտորը չափվում է սմ⁻¹ միավորով:

Հակադարձ ցանցը Բրավեի ցանց է, քանի որ այն տրվում է (5.22) բանաձևով, հետևաբար, կարելի է կառուցել նրա համար հակադարձ ցանց, որը համընկնում է ուղիղ ցանցի հետ: Դժվար չէ նկատել, որ g_j ($j = 1, 2, 3$) վեկտորները բավարարում են

$$a_i \cdot g_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (5.23)$$

առնչությանը, այսինքն՝ g_1 վեկտորն ուղղահայաց է a_2 և a_3 , g_2 -ը՝ a_1 և a_3 , իսկ g_3 -ը՝ a_1 և a_2 վեկտորներին:

Հաշվենք հսկադարձ ցանցի տարրական բջջի ծավալը՝

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= (g_1 [g_2, g_3]) = (2\pi)^3 (b_1 [b_2, b_3]) = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{v_0^3} \{ [a_2, a_3] \cdot ([a_3, a_1] \times [a_1, a_2]) \} = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{v_0^3} \cdot [a_2, a_3] \{ a_1 ([a_3, a_1] \cdot a_2) - a_2 ([a_3, a_1] \cdot a_1) \} = \frac{(2\pi)^3}{v_0}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Ուղիղ և հսկադարձ ցանցերի տարրական բջիջների ծավալների միջև (5.24) կապը ստանալիս օգտվեցինք վեկտորական հաշվից հայտնի $A \times [B \times C] = B(AC) - C(AB)$ բանաձևից:

(5.12) ֆուրյե-վերլուծության անհայտ A_g գործակիցները որոշվում են նույն եղանակով, ինչ որ միաչափ դեպքում: Արդյունքում ստացվում է (5.11) արտահայտության եռաչափ ընդհանրացումը՝

$$A_g = \frac{1}{V} \int_V f(r) e^{-i g \cdot r} dr = \frac{1}{v_0} \int_{v_0} f(r) e^{-i g \cdot r} dr, \quad (5.25)$$

որն արտածելիս օգտվել ենք

$$I_{gg'} \equiv \int_V e^{i r \cdot (g - g')} dr = V \delta_{gg'} \quad (5.26)$$

առնչությունից, որն, իր հերթին, (5.8) բանաձևի եռաչափ ընդհանրացումն է:

Ապացուցենք (5.26) առնչությունը:

Քանի որ

$$G = g - g' = 2\pi(n_1 b_1 + n_2 b_2 + n_3 b_3) \quad (5.27)$$

վեկտորը պատկանում է հսկադարձ ցանցին, ապա $e^{i r \cdot G}$ ֆունկցիան պարբերական է ըստ r -ի, հետևաբար՝ (5.26) բանաձևում ըստ բյուրեղի V ծավալի ինտեգրալը կարելի է ներկայացնել որպես ինտեգրալ ըստ մեկ տարրական բջջի v_0 ծավալի՝ բազմապատկած բջիջների N քվով՝

$$I_{gg'} = N \int_{v_0} e^{i r G} d\mathbf{r} = N \int_{v_0} e^{i 2\pi (n_1 b_1 + n_2 b_2 + n_3 b_3) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} : \quad (5.28)$$

Անցնենք ինտեգրման նոր փոփոխականների՝

$$\xi = \mathbf{r} b_1, \quad \eta = \mathbf{r} b_2, \quad \zeta = \mathbf{r} b_3 : \quad (5.29)$$

Նկատի ունենալով (5.23) առնչությունը, հեշտ է համոզվել, որ

$$\mathbf{r} = \xi \mathbf{a}_1 + \eta \mathbf{a}_2 + \zeta \mathbf{a}_3 : \quad (5.30)$$

Երբ $\mathbf{r}$ -ը փոփոխվում է v_0 ծավալում, $0 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1$, հետևաբար՝

$$I_{gg'} = N \int_0^1 d\xi \int_0^1 d\eta \int_0^1 d\zeta e^{i 2\pi (n_1 \xi + n_2 \eta + n_3 \zeta)} J\left(\frac{x, y, z}{\xi, \eta, \zeta}\right),$$

որտեղ $(x, y, z) \rightarrow (\xi, \eta, \zeta)$ ձևափոխության յակոբիանը՝

$$J\left(\frac{x, y, z}{\xi, \eta, \zeta}\right) \equiv \frac{D(x, y, z)}{D(\xi, \eta, \zeta)} = \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix} = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) = v_0 :$$

Արդյունքում

$$I_{gg'} = N v_0 \int_0^1 d\xi e^{i 2\pi n_1 \xi} \int_0^1 d\eta e^{i 2\pi n_2 \eta} \int_0^1 d\zeta e^{i 2\pi n_3 \zeta} = V \cdot \delta_{n_1, 0} \cdot \delta_{n_2, 0} \cdot \delta_{n_3, 0},$$

որը զրոյից տարբեր է միայն $n_1 = n_2 = n_3 = 0$ դեպքում, ինչը, համաձայն (5.27) արտահայտության, համարժեք է $\mathbf{g} = \mathbf{g}'$ հավասարությանը:

§6. Հակադարձ ցանցի հատկությունները: Միլերյան ցուցիչներ:

Հակադարձ ցանցի կառուցումը

Այժմ ծանոթանանք հակադարձ ցանցի հատկություններին:

1. Հակադարձ ցանցի ցանկացած վեկտոր ուղղահայաց է ուղիղ ցանցի որոշակի հարթությունների բազմությանը:

Հակադարձ ցանցի կամայական $\mathbf{g} = h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3$ վեկտորի և ուղիղ ցանցի որևէ $\mathbf{l} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ վեկտորի արտադրյալը, համաձայն (5.23) առնչության, հավասար է

$$gl = 2\pi(hn_1 + kn_2 + ln_3) = 2\pi M, \quad (6.1)$$

որտեղ M -ն ամբողջ թիվ է: Մյուս կողմից

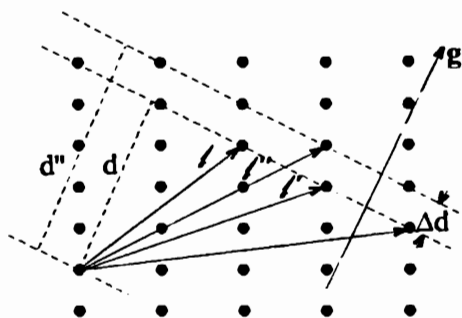
$$gl = |g| \cdot |l| \cdot \cos(gl) = |g| \cdot d, \quad (6.2)$$

որտեղ $d = |l| \cos(gl)$ մեծությունը l -ի պրոյեկցիան է g վեկտորի ուղղության վրա: (6.1) և (6.2) արտահայտություններից

$$d = \frac{2\pi M}{|g|}: \quad (6.3)$$

Այսպիսի պրոյեկցիա ունեն ուղիղ ցանցի անվերջ թվով l' վեկտորներ, որոնք որոշում են կոորդինատների սկզբնակետից d հեռավորության վրա

գտնվող և g -ին ուղղահայաց հարթության մեջ գտնվող հանգույցները (նկ. I.29):



Նկ. I.29

Ստացանք Բրավեի ցանցի ատոմական հարթություններից մեկը, որն ըստ սահմանման, պարունակում է Բրավեի ցանցին պատկանող և մեկ ուղիղի վրա չգտնվող առնվազն 3 հանգույց: Տեղափոխական համաչափության հետևանքով

այդպիսի ցանկացած ատոմական հարթություն պարունակում է անթիվ բազմությամբ հանգույցներ, որոնք կազմում են Բրավեի երկչափ ցանց:

Ատոմական հարթությունների ընտանիք կոչվում է իրար գոլգահեռ և իրարից հավասարահեռ ատոմական հարթությունների բազմությունը, որը պարունակում է Բրավեի եռաչափ ցանցի բոլոր հանգույցները: Ակնհայտ է, որ Բրավեի ցանցը կարելի է բաժանել ատոմական հարթությունների ընտանիքների տարբեր ծևերով (նկ. I.30):

2. Եթե g վեկտորի բաղադրիչները չունեն ընդհանուր բաժանարար, ապա g -ին ուղղահայաց հարթությունների միջև հեռավորությունը հակադարձ համեմատական է նրա երկարությանը՝ $|g|$ -ին:

Համաձայն (6.1) և (6.2) առնչությունների, երևի h, k, l թվերը չունեն ընդհանուր բաժանարար, ապա միշտ կարելի է ընտրել ուղիղ ցանցի մի այնպիսի l'' վեկտոր, որ

$$gl'' = 2\pi(M+1) : \quad (6.4)$$

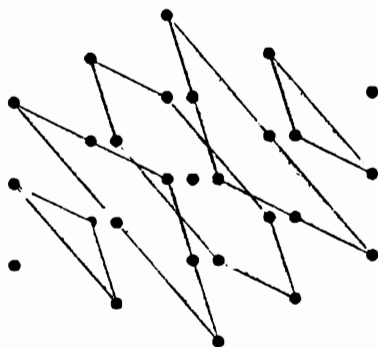
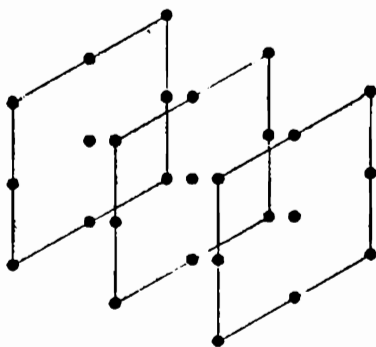
Սա նշանակում է, որ l'' վեկտոր ունեցող հանգույցը պատկանում է կոորդինատների սկզբնակետից

$$d'' = \frac{2\pi(M+1)}{|g|} \quad (6.5)$$

հեռավորության վրա գտնվող հարթությանը, որը հարևան հարթությունից գտնվում է

$$\Delta d = d'' - d = \frac{2\pi}{|g|} \quad (6.6)$$

հեռավորության վրա (նկ. I.29):



Նկ. I.30

1. և 2. հասկություններից հետևում է, որ ցանցի ատոմական հարթությունները կարելի է բնութագրել, տալով նրանց ուղղահայաց, հակադարձ ցանցին պատկանող g վեկտորները: Ատոմական հարթությունների նշումը հակադարձ ցանցի վեկտորների միջոցով համարժեք է բյուրեղագրության մեջ հայտնի միլերյան ցուցիչների տալուն:

Իրոք, եթե g վեկտորն ուղղահայաց է որևէ ատոմական հարթության,

ապա այդ հարթության բոլոր հանգույցների համար տեղի ունի (6.1) պայմանը: Եթե վերցնենք այդ հարթության $n_2 = n_3 = 0$ կետը, որը պատկանում է x_1 առանցքին, ապա (6.1) առնչությունից կստանանք, որ $n_1 = M/h$, այսինքն՝ այդ հարթությունը x_1 առանցքից հատում է

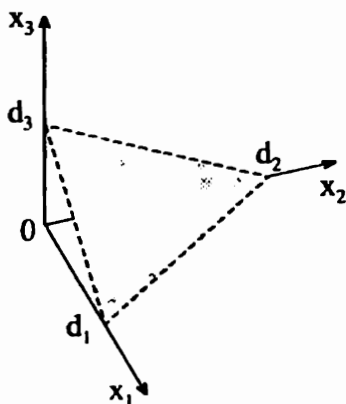
$$d_1 = n_1 a_1 = \frac{M}{h} a_1 \quad (6.7)$$

երկարությամբ մի հատված: Նույն ձևով կարելի է համոզվել, որ այն x_2 և x_3 առանցքներից հատում է համապատասխանաբար

$$d_2 = n_2 a_2 = \frac{M}{k} a_2 \quad \text{և} \quad d_3 = n_3 a_3 = \frac{M}{l} a_3 \quad (6.8)$$

երկարությամբ հատվածներ (նկ. I.31): (6.7) և (6.8) արտահայտություններից հետևում է, որ

$$\frac{d_1}{a_1} : \frac{d_2}{a_2} : \frac{d_3}{a_3} = \frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l}, \quad (6.9)$$



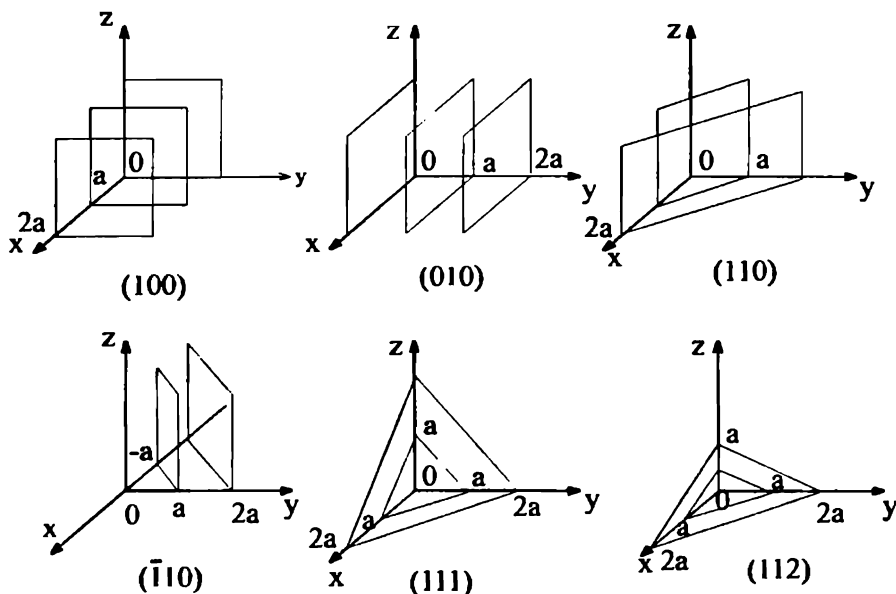
Նկ. I.31

այսինքն՝ սովյալ ատոմական հարթության՝ կոորդինատական առանցքներից հատած հատվածները (արտահայտված համապատասխանաբար a_1, a_2, a_3 միավորներով) հակադարձ համեմատական են h, k, l թվերին, որոնք ընդհանուր բաժանարարով կրճատելուց հետո ներկայացնում են միլերյան ցուցիչները: Այսպիսով, որևէ ատոմական հարթության միլերյան ցուցիչները հակադարձ ցանցի ամենափոքր վեկտորի կոորդինատներն

են, որն ուղղահայաց է սովյալ հարթությանը, այսինքն՝ h, k, l ցուցիչներով հարթությունն ուղղահայաց է հակադարձ ցանցի $g = 2\pi(hb_1 + kb_2 + lb_3)$ վեկտորին:

Ատոմական հարթությունները նշում են, փակագծերում տալով միլերյան ցուցիչները՝ առանց ստորակետերի՝ (hkl) , ցուցչի բացասական նշանը դրվում է վերևից, այսինքն՝ $-n$ -ի փոխարեն գրվում է $\bar{n}$:

Նման նշումներ օգտագործվում են մակ ուղիղ ցանցում ուղղությունների համար, սակայն միլերյան ցուցիչների հետ (որոնք որոշում են ուղղություն հակադարձ ցանցում) չշփոթելու համար օգտվում են քառակուսի փակագծերից: Օրինակ՝ խորանարդի տարածական անկյունագծի ուղղությունն է $[111]$: Ընդհանուր դեպքում $l = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ վեկտորն ընտրված կոորդինատական համակարգում ունի $[n_1 n_2 n_3]$ ուղղությունը:

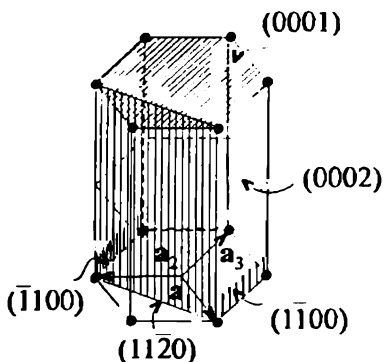


Նկ. I.32

Լատմական հարթությունների բոլոր ընտանիքները, որոնք իրար համադրեք են բյուրևի համաչափության հետևանքով, նշվում են ձևավոր փակագծերով՝ $\{ \}$: Օրինակ՝ խորանարդային բյուրեղում (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, $(00\bar{1})$ հարթությունները նշվում են որպես $\{100\}$: Նման ձևով ֆիզիկորեն համադրեք ուղղությունների համար օգտագործում են անկյունային փակագծեր՝ $\langle \rangle$: Օրինակ՝ $[100]$, $[010]$, $[001]$, $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$, $[00\bar{1}]$

ուղղությունների ընտանիքը նշվում է որպես $\langle 100 \rangle$: Նկ. 1.32-ում արված են մի քանի աստմական հարթություններ խորանարդային կառուցվածքով բյուրեղի համար:

Հեքսագոնալ բյուրեղներում աստմական հարթությունները բնութագրելու համար երեքի վոխարեն օգտագործում են չորս թիվ՝ $(hkil)$, որտեղ



Նկ. 1.33

$i = -(h + k)$, որոնցից առաջին երեքը համապատասխանում են վեցանիստի ելմքի հարթության մեջ ընկած և իրար հետ 120° անկյուն կազմող a_1, a_2 և a_3 -ով ուղղված առանցքներից կտրած հասվածներին ($|a_1| = |a_2| = |a_3| = a$), իսկ չորրորդը՝ l -ը, համապատասխանում է c -առանցքի վրա կտրած հասվածին, արտահայտված c -ուղղությամբ ցանցի հաստատունով (նկ. 1.33): $(hkil)$ նշանակումը հայտնի է որպես

«Միլեր-Բրավեի ցուցիչներ»:

Կառուցենք մի քանի բյուրեղական ցանցերի հակադարձ ցանցերը:

1. Պարզ խորանարդային ցանց

Հիմնական վեկտորները արվում են

$$a_1 = ai, \quad a_2 = aj, \quad a_3 = ak \quad (6.10)$$

արտահայտություններով, որտեղ i, j, k -ն միավոր վեկտորներ են: Համաձայն (5.21) բանաձևերի,

$$g_1 = 2\pi \frac{[a_2, a_3]}{(a_1[a_2, a_3])} = \frac{2\pi a^2[j, k]}{a^3} = \frac{2\pi}{a} i, \quad (6.11)$$

$$g_2 = \frac{2\pi}{a} j, \quad g_3 = \frac{2\pi}{a} k,$$

այսինքն՝ հակադարձ ցանցը նույնպես պարզ խորանարդային է, որի հաստատունն է $2\pi/a$:

Վիզներ-Ջեյտցի բջիջը, որը հակադարձ ցանցի դեպքում կոչվում է Բրիլյուենի առաջին զոնա, սահմանափակված է հարթություններով, որոնք ուղղահայաց են հետևյալ վեց վեկտորներին՝

$$\pm \frac{1}{2} \mathbf{g}_1 = \pm \frac{\pi}{a} \mathbf{i}, \quad \pm \frac{1}{2} \mathbf{g}_2 = \pm \frac{\pi}{a} \mathbf{j}, \quad \pm \frac{1}{2} \mathbf{g}_3 = \pm \frac{\pi}{a} \mathbf{k} : \quad (6.12)$$

Ստացված վեց հարթությունները $2\pi/a$ կողով խորանարդի նիստերն են, իսկ նրա ծավալը հավասար է $(2\pi/a)^3$:

2. Ծավալակենտրոնացված խորանարդային ցանց

Հիմնական վեկտորները տրվում են (1.11) բանաձևերով՝

$$\mathbf{c}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k} - \mathbf{i}), \quad \mathbf{c}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{i} - \mathbf{j}), \quad \mathbf{c}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}), \quad (6.13)$$

ուստի հակադարձ ցանցի հաստատունների համար կստանանք՝

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{k} + \mathbf{i}), \quad \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i} + \mathbf{j}), \quad (6.14)$$

ինչը տեսքով համընկնում է (1.20) արտահայտության հետ և որոշում է նիստակենտրոնացված ցանցի տարրական բջիջը: Այսպիսով, ծավալակենտրոնացված խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը նիստակենտրոնացված խորանարդային ցանցն է:

Հակադարձ ցանցի ցանկացած վեկտոր կգրվի հետևյալ ձևով՝

$$\mathbf{g} = h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{a}[(h+l)\mathbf{i} + (h+k)\mathbf{j} + (k+l)\mathbf{k}] : \quad (6.15)$$

Ջրոյից տարբեր և ամենակարճ վեկտորներն են՝

$$\frac{2\pi}{a}(\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{j}), \quad \frac{2\pi}{a}(\pm \mathbf{j} \pm \mathbf{k}), \quad \frac{2\pi}{a}(\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{k}) \quad (6.16)$$

ընդամենը 12 հատ: Ուղիղ ցանցի տարրական բջջի ծավալը հավասար է $a^3/2$, իսկ հակադարձ ցանցի տարրական բջջինը, համաձայն (5.24) բանաձևի, հավասար է $2(2\pi/a)^3$:

Բրիլյուենի առաջին զոնան սահմանափակված է տասներկու հարթություններով, որոնք ուղղահայաց են (6.16) վեկտորներին, և իրենից ներկայացնում է կանոնավոր տասներկուսանիստ (օմբրական դոդեկաէդր, տես նկ. 1.11, ա): Նիստերի կենտրոնները որոշվում են

$$\frac{\pi}{a}(\pm i \pm j), \quad \frac{\pi}{a}(\pm j \pm k), \quad \frac{\pi}{a}(\pm i \pm k) \quad (6.17)$$

վեկատորներով:

3. Նիստակենտրոնացված խորանարդային ցանց

Ուղիղ ցանցի հիմնական վեկտորները ստիվում են (1.20) արտահայտություններով՝

$$c_1 = \frac{a}{2}(j+k), \quad c_2 = \frac{a}{2}(k+i), \quad c_3 = \frac{a}{2}(i+j), \quad (6.18)$$

ուստի հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների համար (5.21) բանաձևերից կստանանք՝

$$g_1 = \frac{2\pi}{a}(-i+j+k), \quad g_2 = \frac{2\pi}{a}(i-j+k), \quad g_3 = \frac{2\pi}{a}(i+j-k), \quad (6.19)$$

ինչը տեսքով համընկնում է ծավալակենտրոնացված ցանցի հիմնական վեկտորների հետ: Այսպիսով, նիստակենտրոնացված խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը ծավալակենտրոնացված ցանցն է: Տարրական բջջի ծավալը, համաձայն (5.24) բանաձևի, հավասար է $4(2\pi/a)^3$:

Հակադարձ ցանցի վեկտորները ստիվում են

$$g = hg_1 + kg_2 + lg_3 = \frac{2\pi}{a}[(h-k+l)i + (h+k-l)j + (-h+k+l)k] \quad (6.20)$$

բանաձևով, որտեղ h, k, l -ը կամայական ամբողջ թվեր են: Ջրոյից տարրեր ամենավտոր վեկտորներն են հետևյալ ութ վեկտորները՝

$$\frac{2\pi}{a}(\pm i \pm j \pm k): \quad (6.21)$$

Բրիլյուենի առաջին զոնան առաջանում է (6.21) վեկտորներին ուղղահայաց ութ հարթություններով կազմված ութանիստի զագաթները

$$\frac{2\pi}{a}(\pm 2i), \quad \frac{2\pi}{a}(\pm 2j), \quad \frac{2\pi}{a}(\pm 2k) \quad (6.22)$$

վեկտորներին ուղղահայաց և նրանց կիսող վեց հարթություններով հատելիս: Արդյունքում ստացվում է «հատված ութանիստ», որն իրենից ներկայացնում է տասնչորսանիստ (տես նկ. I.11, բ):

4. Հեքսագոնալ ցանց

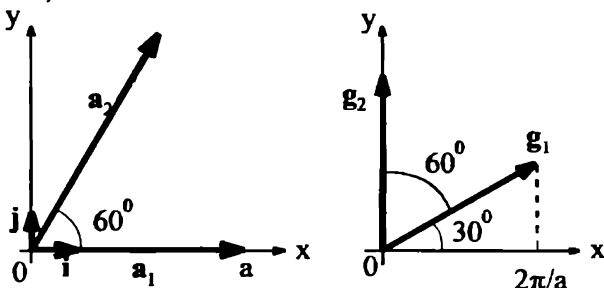
Ուղիղ ցանցի հիմնական վեկտորները տրվում են (4.1) արտահայտությոններով՝

$$a_1 = ai, \quad a_2 = \frac{a}{2}i + \frac{\sqrt{3}a}{2}j, \quad a_3 = ck, \quad (6.23)$$

ուստի հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների համար (5.21) բանաձևից կստանանք՝

$$g_1 = \frac{2\pi}{a} \left(i + \frac{1}{\sqrt{3}} j \right), \quad g_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} j, \quad g_3 = \frac{2\pi}{c} k : \quad (6.24)$$

Դժվար չէ համոզվել, որ $|g_1| = |g_2| = 4\pi/a\sqrt{3}$, այսինքն՝ պարզ հեքսագոնալ ցանցի հակադարձ ցանցը նույնպես պարզ հեքսագոնալ կառուցվածք է, որի g_1 և g_2 հիմնական վեկտորները 30° -ով պտտված են k ուղղության շուրջը (նկ. I.34):



Նկ. I.34

Հակադարձ ցանցի տարրական բջջի ծավալը՝

$$\Omega_0 = (g_1 [g_2, g_3]) = \frac{2(2\pi)^3}{\sqrt{3} \cdot ca^2}, \quad (6.25)$$

իսկ ուղիղ ցանցի բջջինը՝

$$v_0 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0} = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c : \quad (6.26)$$

§7. Դիֆրակցիան բյուրեղական կառուցվածքներում

Բյուրեղների կառուցվածքային ուսումնասիրություններում օգտագործվում է ալիքների դիֆրակցիայի երևույթը, որը դրսևորվում է առավել ցայտուն, երբ ընկնող ալիքի երկարությունը միջատոմսական հեռավորությունների կարգի է: Սկզբունքորեն կառուցվածքային հետազոտություններում կարելի է օգտագործել ցանկացած տեսակի ճառագայթում՝ ֆոտոններ, նեյտրոններ, էլեկտրոններ և այլ մասնիկների հոսքեր:

Համաձայն դը Բրոյլի վարկածի, p իմպուլսով մասնիկին վերագրվում է

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (7.1)$$

երկարությամբ ալիք, $h = 6,62 \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ Պլանկի հաստատունն է: Եթե ճառագայթումն իրենից ներկայացնում է m զանգվածով ոչ ռելյատիվիստական մասնիկների հոսք, ապա դը Բրոյլի ալիքի երկարությունը՝

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon}} \quad (7.2)$$

որտեղ ε -ն մասնիկի կինետիկ էներգիան է: Էլեկտրոնների համար (7.2) արտահայտությունից ստացվում է հետևյալ գնահատականը՝

$$\lambda \approx \frac{12}{\varepsilon^{1/2}} \quad (7.3)$$

որտեղ λ -ն չափված է անգստրեմներով, իսկ էներգիան՝ էլեկտրոն-վոլտերով ($1 \text{ էՎ} = 1,6 \cdot 10^{-12}$ էրգ): Ցանցի հաստատունի կարգի ալիքի երկարություններ ստացվում են $\varepsilon \sim 100 \text{ էՎ}$ կարգի էներգիաների համար: Զանցի որ էլեկտրոններն ունեն լիցք, նրանք ուժեղ փոխազդում են նյութի հետ և բյուրեղի մեջ խոր թափանցել չեն կարող: Այս պատճառով էլեկտրոնների դիֆրակցիայի մեթոդով հիմնականում ուսումնասիրում են բարակ բաղաձնները, ինչպես նաև զանգվածեղ նմուշների մակերևութային շերտերը:

Նեյտրոնների դը Բրոյլի ալիքի երկարության համար (7.2) արտահայտությունից ստացվում է հետևյալ գնահատականը՝

$$\lambda \approx \frac{0,28}{\varepsilon^{1/2}} \quad (7.4)$$

համաձայն որի $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$, երբ $\varepsilon \approx 0,08 \text{ էՎ}$ (ջերմային նեյտրոններ):

Ի տարբերություն էլեկտրոնների և ֆոտոնների, նեյտրոնները ցրվում են ատոմների միջուկների վրա և տեղեկություններ են տալիս բյուրեղի ատոմական կառուցվածքի մասին:

Նեյտրոններն ունեն մագնիսական մոմենտ, ուստի նեյտրոնային փնջերի միջոցով հաջողությամբ ուսումնասիրվում է մագնիսական բյուրեղների կառուցվածքը:

Էլեկտրամագնիսական ճառագայթման ալիքի երկարության կախումն էներգիայից նույնպես տրվում է (7.1) բանաձևով, որտեղ $p = \hbar \omega / c$ ($\hbar = h / 2\pi = 1,05 \cdot 10^{-27}$ էրգ-վ)

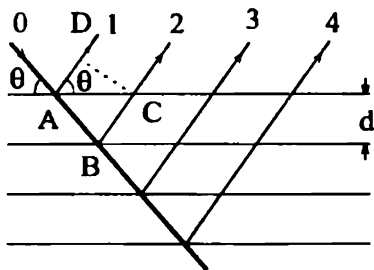
$$\lambda = \frac{12,4}{\varepsilon},$$

որտեղ λ -ն չափվում է անգստրեմներով, իսկ էներգիան՝ կէՎ-երով: $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$ երկարությունների համար ε -ն մի քանի տասնյակ կէՎ կարգի մեծություն է, ինչը համապատասխանում է ճառագայթման ռենտգենյան տիրույթին:

Ռենտգենյան ճառագայթման լայն կլորառությունը նյութի կառուցվածքային հետազոտություններում պայմանավորված է նյութի հետ նրա թույլ փոխազդեցությամբ, ինչի շնորհիվ ռենտգենյան ճառագայթները կարող են թափանցել նմուշի ողջ ծավալի մեջ և տալ տեղեկություններ նրա բաղադրության և կառուցվածքի մասին: Ի տարբերություն նեյտրոնների, ռենտգենյան ճառագայթները ցրվում են էլեկտրոնների վրա (միջուկների մեծ զանգվածի հետևանքով ցրումը նրանց վրա կարելի է արեամարմել), ի հայտ բերելով նմուշում էլեկտրոնների տարածական բաշխման օրինաչափությունները:

Ուսումնասիրենք ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիայի երևույթը բյուրեղական կառուցվածքներում:

Համաձայն Ու.Բրեգի, բյուրեղի վրա ընկնող ռենտգենյան ալիքները հայելային ձևով անդրադառնում են իրար զուգահեռ ատոմական հարթություններից, ընդ որում յուրաքանչյուր հարթությունից անդրադառնում է ընկած ճառագայթման չնչին մասը: Որևէ ուղղությամբ դիֆրակցված փունջը հնարավոր է դիտել, եթե այդ ուղղությամբ զննցող և տվյալ ատոմական հարթությունների ընտանիքի յուրաքանչյուր հարթությունից անդրադար-



Նկ. I.35

ձած երկրորդային ալիքներն իրար ուժեղացնում են, այսինքն՝ հարևան հարթություններից անդրադարձած ալիքների ընթացքների տարբերությունը հավասար է ամբողջ թվով ալիքի երկարության (նկ. I.35): Եթե d -ն հարթությունների միջև հեռավորությունն է, ապա 1 և 2 անդրադարձած ալիքների միջև ընթացքների տարբերությունը՝

$$AB + BC - AD = 2d \sin \theta ,$$

որտեղ θ անկյունը հաշվվում է ատոմական հարթությունից:

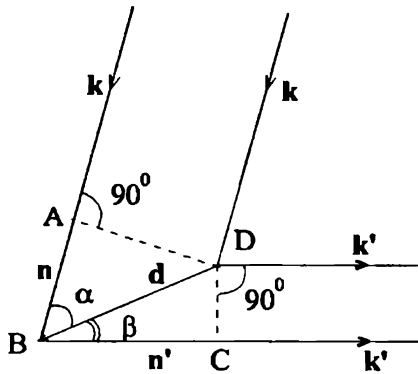
Անդրադարձման ինտերֆերենցիոն մաքսիմումի անհրաժեշտ պայմանը կգրվի

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.6)$$

տեսքով, որն իրենից ներկայացնում է Բրեգի օրենքը (պայմանը): Այն հետևանք է բյուրեղական ցանցի պարբերականության: Համաձայն (7.6) պայմանի, բրեզյան անդրադարձում հնարավոր է միայն այն ալիքների համար, որոնց երկարությունը՝ $\lambda \leq 2d$:

Դիֆրակցիայի երևույթի նկարագրությունը կարելի է տալ նաև այլ՝ Մ.Լաուեի ձևակերպմամբ, որի շրջանակներում հատկապես ցայտունորեն է դրսևորվում հակադարձ ցանցի զադախարի կարևորությունը և օգտակարությունը:

Ըստ Լաուեի, ցանցի բոլոր l խանգույցներում տեղադրված են նույնական օբյեկտներ (ատոմներ, իոններ կամ նրանց խմբեր), որոնք իրենց վրա ընկնող ճառագայթունը



Նկ. I.36

ցրում են բոլոր ուղղություններով: Տրված ալիքի երկարության համար ինտերֆերենցիոն մաքսիմումներ ստացվում են այն ուղղություններով, որոնցով զնացող ալիքներն իրար ուժեղացնում են:

Դիտարկենք երկու ցրող կենտրոն, որոնք իրար նկատմամբ շեղված են d վեկտորով (նկ. I.36): B և D կենտրոնների ցրած ալիքների ընթացքների տարբերությունը՝

$$AB + BC = d \cos \alpha + d \cos \beta = d(n - n'), \quad (7.7)$$

որտեղ n -ը և n' -ը միավոր վեկտորներ են համասպատասխանաբար ընկնող և ցրված ալիքների տարածման ուղղություններով, հավասարեցնենք ամբողջ թվով ալիքի երկարության՝ $m\lambda$: Նկատի ունենալով ցրման առած-գական բնույթը՝ $|k| = |k'|$, ինչպես նաև ալիքի երկարության և ալիքային վեկտորի միջև կապը՝

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} n, \quad k' = \frac{2\pi}{\lambda} n', \quad (7.8)$$

(7.7) և (7.8) առնչություններից կստանանք՝

$$d(k - k') = 2\pi m, \quad m = \pm 1, \pm 2, \pm \dots : \quad (7.9)$$

Եթե ցրող կենտրոնների թիվն անվերջ մեծ է, ապա (7.9) պայմանը պետք է միաժամանակ տեղի ունենա բոլոր d վեկտորների համար, որոնք պատկանում են Բրավեի ցանցի l վեկտորների բազմությանը, այսինքն՝

$$l(k - k') = 2\pi m, \quad m = \pm 1, \pm 2, \pm \dots : \quad (7.10)$$

Դժվար չէ տեսնել, որ (7.10) պայմանը նույնաբար համընկնում է հակադարձ ցանցը որոշող (5.14) հավասարման հետ, հետևաբար $k - k'$ տարբերությունը պետք է հավասար լինի հակադարձ ցանցի վեկտորի՝ $k - k' = g$: Այս պայմանը (Լաուե)՝

$$k - k' = g, \quad (7.11)$$

կարելի է տալ նաև այլ տեսքով, եթե նկատի ունենանք, որ $|k| = |k'|$.

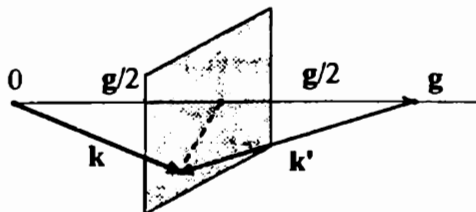
$$k - g = k' \quad \text{կամ} \quad |k - g| = |k| : \quad (7.12)$$

(7.12) հավասարումը բարձրացնելով քառակուսի, կստանանք՝

$$k n_g = \frac{1}{2} g, \quad (7.13)$$

որտեղ n_g -ն միավոր վեկտոր է g -ի ուղղությամբ: (7.13) առնչությունից բխում է, որ k վեկտորի պրոյեկցիան g վեկտորի ուղղության վրա հավասար է $g/2$: Երկրաչափորեն (7.13) պայմանը նշանակում է, որ k վեկտորի

ծայրը գտնվում է g վեկտորին ուղղահայաց և այն կիսող հարթության մեջ (նկ. I.37): k -տարածության մեջ գտնվող այս հարթությունները կոչվում են բրեզյան:



Նկ. I.37

Դիֆրակցիայի Բրեզի (7.6) և Լաուեի (7.11) պայմանների համարժեքությունը կարելի է ցույց տալ, օգտվելով հակադարձ ցանցի համար §6-ում ստացված 2. հատկությունից, համաձայն որի հակադարձ ցանցի ամենափոքր, ոչ զրոյական վեկտորի մեծությունը $2\pi/d$ է, որտեղ d -ն ատոմական հարթությունների միջև հեռավորությունն է: Այս վեկտորին զուգահեռ բոլոր վեկտորներն ունեն $n(2\pi/d)$ երկարություն: Մյուս կողմից, ըստ (7.12) հավասարման՝

$$g = 2k \sin \theta = \frac{2\pi}{d} n : \quad (7.14)$$

Նկատի ունենալով նաև, որ $k = 2\pi/\lambda$, (7.14) արտահայտությունից կստանանք դիֆրակցիայի Բրեզի (7.6) պայմանը:

Եթե տարրական բջիջն ունի միևնույն աստմներից բաղկացած բազիս, ապա անհրաժեշտ է հաշվի առնել նաև բազիսի աստմների (խոնների) վրա ցրված ալիքների ինտերֆերենցը: Եթե բրեզյան մաքսիմումին համապատասխանում է ալիքային վեկտորի $k' - k = K$ փոփոխություն, ապա d , և d_j կետերում ցրված ալիքների փուլերը կտարբերվեն $\exp[iK(d, -d_j)]$ արտադրիչով, հետևաբար, ամբողջ բջջի կողմից ցրված ալիքների վերադրման հետևանքով առաջացած ալիքի ամպլիտուդը կսլաքաճանալի

$$S_K = \sum_{j=1}^n \exp(iKd_j) \quad (7.15)$$

արտադրիչը, որտեղ n -ը բազիսում ատոմների քիվն է: S_K մեծությունը կոչվում է երկրաչափական կառուցվածքային գործոն և ցույց է տալիս, թե բազիսի ատոմների վրա ցրված ալիքների ինտերֆերենցը որքան է փոքրացնում K վեկտորով որոշվող բրեզյան մաքսիմումի ինտենսիվությունը, որը համեմատական է $|S_K|^2$ մեծությանը: Առանձնահատուկ կարևորություն են ներկայացնում այն դեպքերը, երբ $S_K = 0$:

Քննարկենք մի օրինակ: Ծավալակենտրոնացված խորանարդային ցանցը կարելի է դիտարկել նաև որպես ai, aj, ak հիմնական վեկտորներով պարզ խորանարդային ցանց, որի հետ կապված է $d_1 = 0$ և $d_2 = a(i + j + k)/2$ վեկտորներով բազիս: Պարզ խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը նույնպես պարզ խորանարդային է՝ $2\pi/a$ կողով, սակայն այժմ յուրաքանչյուր բրեզյան անդրադարձման համապատասխանում է S_K կառուցվածքային գործոն: Համաձայն (7.15) սահմանման՝

$$S_K = \sum_{j=1}^2 \exp(i K d_j) = 1 + \exp(i K d_2) = 1 + \exp\left[i \cdot \frac{a}{2} K(i + j + k)\right]: \quad (7.16)$$

Հակադարձ ցանցի K վեկտորը, համաձայն (6.11) արտահայտության, ունի հետևյալ տեսքը՝

$$K = \frac{2\pi}{a} (n_1 i + n_2 j + n_3 k), \quad (7.17)$$

որտեղ n_1, n_2, n_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են: (7.16) և (7.17) արտահայտություններից կստանանք՝

$$S_K = 1 + \exp[i\pi (n_1 + n_2 + n_3)] = \begin{cases} 2, & n_1 + n_2 + n_3 = 2m, \\ 0, & n_1 + n_2 + n_3 = 2m + 1, \end{cases} \quad (7.18)$$

($m = 0, 1, 2, \dots$): Հետևաբար, այն հանգույցները, որոնց կոորդինատների գումարը՝ արտահայտված $2\pi/a$ հիմնական միավորներով, կենտ է, բրեզյան անդրադարձումներ չեն տալիս: Արդյունքում պարզ խորանարդային հակադարձ ցանցը վերածվում է նիստակենտրոնացված ցանցի, որը և կստացվեր հենց սկզբից, եթե ծավալակենտրոնացված ցանցը դիտվեր ոչ թե որպես բազիսով, այլ Բրավեի ցանց:

Եթե բազիսի ատոմները նույնական չեն, ապա երկրաչափական կառուցվածքային գործոնի փոխարեն մտցվում է մի նոր մեծություն՝ կառուցվածքային գործոնը

$$\tilde{S}_K = \sum_{j=1}^n f_j(K) \exp(i K d_j) \quad (7.19)$$

արտահայտությամբ, որտեղ ցրման ատոմային գործոնը՝ $f_j(K)$ -ն, հաշվի է առնում էլեկտրոնների տարածական բաշխումը j -րդ ատոմում: Եթե նշանակենք $A(r)$ -ով մտովի ատոմի կենտրոնում տեղադրված էլեկտրոնի կողմից ցրված ռենտգենյան ալիքի ամպլիտուդը որոշակի ուղղությամբ, առումից մեծ հեռավորության վրա, ապա r կետում գտնվող $n(r)dr$ էլեկտրոնների կողմից ցրված ալիքի ամպլիտուդը նույն ուղղությամբ համեմատական կլինի $n(r)dr \cdot \exp(iKr)$ մեծությամբ (տես (7.7), (7.8) և (7.11) արտահայտությունները), որտեղ $n(r)$ -ը էլեկտրոնների խտությունն է ատոմում: j -րդ ատոմի բոլոր էլեկտրոնների կողմից ցրված ալիքի ամպլիտուդը՝

$$A_j(r) = A(r) \cdot \int n_j(r) e^{iKr} dr \quad (7.20)$$

Ըստ սահմանման՝

$$f_j(K) = \frac{A_j(K)}{A(K)} = \int n_j(r) e^{iKr} dr, \quad (7.21)$$

որն էլեկտրոնների խտության ֆուրյե-բադադիչն է: Եթե ենթադրենք, որ ցանցում գտնվող ատոմը չի տարբերվում ազատ ատոմից, և նրանում լիցքի բաշխումն օժտված է զնդային համաչափությամբ, ապա (7.21) բանաձևից, ըստ անկյունների ինտեգրումից հետո, կստանանք՝

$$f_j(K) = 4\pi \int_0^\infty r^2 n_j(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr, \quad (7.22)$$

որտեղ, ըստ (7.13) բանաձևի

$$K = 2k \sin \theta \equiv \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda} \quad (7.23)$$

Նկ. I.38-ում պատկերված է $f_j(K)$ ատոմային գործոնի վարքը, կախված $\sin \theta / \lambda$ փոփոխականից նատրիումի ատոմի համար (նատրիումի կարգա-

քիվը $Z = 11$): Երբ $\sin \theta / \lambda \rightarrow 0$ (կամ $\theta \rightarrow 0$, այսինքն՝ ցրումներ չկան, կամ $\lambda \rightarrow \infty$ ՝ բոլոր էլեկտրոնները տատանվում են միևնույն փուլում)

$$\frac{\sin Kr}{Kr} = \frac{\sin(4\pi r \sin \theta / \lambda)}{4\pi r \sin \theta / \lambda} \rightarrow 1$$

և

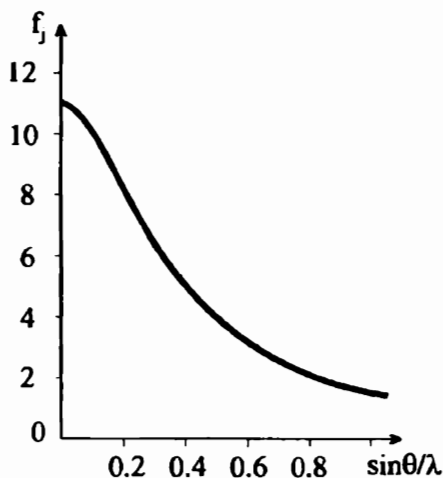
$$f_j(K) = 4\pi \int_0^\infty r^2 n_j(r) dr = Z_j : \quad (7.24)$$

Նույն արդյունքը կստացվի, եթե ենթադրենք, որ ատոմի բոլոր էլեկտրոնները գտնվում են նրա կենտրոնում, այսինքն՝ (7.21) արտահայտության մեջ տեղադրենք

$$n_j(r) = Z_j \delta(r) . \quad (7.25)$$

որտեղ $\delta(r)$ -ը Դիրակի «դելտա» ֆունկցիան է:

Այսպիսով, գալիս ենք այն եզրակացության, որ ատոմի վերջավոր չափերով պայմանավորված ինտերֆերենցիոն երևույթները փոքրացնում են ատոմի՝ որպես ամբողջություն ցրման ունակությունը, ինչն առավել ցայտուն ի հայտ է գալիս ատոմի չափերի կարգի և ավելի փոքր ալիքի երկարությունների համար: Քանի որ



Նկ. I.38

դիֆրակցված ճառագայթման ինտենսիվությունը համեմատական է $|\tilde{S}_K|^2$ մեծությանը, ապա այն զգալի կլինի միայն այն դեպքում, երբ կառուցվածքային գործոնը տարբեր է զրոյից, իսկ ցրման ատոմային գործոնի արժեքը մոտ է տվյալ բյուրեղի համար հնարավոր առավելագույն արժեքին:

ԿԱՊԵՐԻ ՏԵՍԱԿՆԵՐԸ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

§1. Բյուրեղական մարմինների դասակարգումը

Բյուրեղների դասակարգման վերը քննարկված սխեմայի հիմքում ընկած են բյուրեղական կառուցվածքների համաչափության հատկությունները: Այդպիսի դասակարգումն արտահայտում է պինդ մարմինների միայն երկրաչափական համաչափությունը, սակայն հաշվի չի առնում այն կարևորագույն կառուցվածքային առանձնահատկությունները, որոնք պայմանավորում են նրանց ֆիզիկական հատկությունները: Այդ է պատճառը, որ բոլոր բյուրեղական համակարգերում էլ կան տարբեր մեխանիկական, էլեկտրական, օպտիկական և այլ հատկություններ ունեցող բյուրեղներ:

Պինդ մարմինների տարբեր տեսակների միջև գոյություն ունեցող տարբերությունները հետևանք են նրանցում իոնների և արժեքական (վալենտական) էլեկտրոնների տարածական բաշխման: Վերջինն էապես տարբերվում է մեկուսացված ատոմում գոյություն ունեցող բաշխումից:

Կապը պինդ մարմինը կազմող մասնիկների միջև հիմնականում պայմանավորված է էլեկտրոնների և դրականապես լիցքավորված միջուկների միջև գործող կուլոնյան փոխազդեցության ուժերով: Կայուն կապի առաջացումը ենթադրում է, որ ցանցի հանգույցներում գտնվող մասնիկների և արժեքական էլեկտրոնների փոխադասավորությանը համապատասխանող էներգիան ավելի փոքր է, քան ցանկացած այլ փոխադասավորության էներգիան, այդ թվում և այն, որի դեպքում բոլոր ատոմներն իրարից անվերջ հեռավորությունների վրա են գտնվում:

Կապի քանակական բնութագիրը կապի էներգիան է, որը սահմանվում է որպես մեկուսացված ատոմների համակարգի պոտենցիալ էներգիայի (U_{∞}), կապված համակարգի պոտենցիալ էներգիայի (U) և մասնիկների սեղանացումով պայմանավորված այսպես կոչված «զրոյական» կինետիկական էներգիաների (T_0) տարբերություն՝

$$\Delta U = U_{\infty} - U - T_0 : \quad (1.1)$$

Եթե նմուշը բաղկացած է M_i զանգվածով N_i իոններից և m զանգվածով ազատ N_e էլեկտրոններից, ապա, օգտվելով անորոշությունների առնչությունից, նրանց զրոյական կինետիկական էներգիաների հարաբերության համար կստանանք՝

$$\gamma = \frac{T_{0e}}{T_{0i}} = \frac{N_e p_e^2 / m}{N_i p_i^2 / M_i} = \frac{N_e M_i}{N_i m} \left(\frac{\Delta a}{L} \right)^2, \quad (1.2)$$

որտեղ Δa -ն (L -ը) իոնի (էլեկտրոնի) տեղայնացման տիրույթի զծային չափն է: Եթե ընդունենք, որ $\Delta a \leq a \sim 10^{-8}$ սմ (a -ն ցանցի հաստատունն է), իսկ $L \sim 1$ սմ (ազատ էլեկտրոնները կարող են գտնվել 1 սմ³ ծավալով նմուշի ցանկացած կետում), $N_i \sim N_e$ և $M_i \sim 10^4 \div 10^5 m$, ապա $\gamma \sim 10^{-12} \div 10^{-11}$: Այսպիսով, իոնների ուժեղ տեղայնացման հետևանքով հիմնական ներդրումը զրոյական տատանումների էներգիայում պայմանավորված է իոններով՝ $T_0 \simeq T_{0i}$:

Չրոյական տատանումները զգալի դեր կարող են խաղալ համեմատաբար քեթև միջուկներից կազմված բյուրեղներում: Մասնավորապես, զրոյական տատանումների, ինչպես նաև թույլ փոխազդեցության հետևանքով հեղուկ հեղիումը չի բյուրեղանում մթնոլորտային ճնշման տակ անգամ 0K-ում^{*)} (հեղուկ He^3 -ը բյուրեղանում է $p \geq 33$ մթն., իսկ հեղուկ He^4 -ը՝ $p \geq 26$ մթն. ճնշման տակ): Մնացած դեպքերում (1.1) արտահայտության մեջ T_0 անդամն արեամարեելու հետևանքով առաջացող սխալը չի գերազանցում 1%-ը, ուստի կարելի է ընդունել, որ

$$\Delta U \simeq U_\infty - U_0 : \quad (1.3)$$

(1.1) արտահայտության մեջ T_0 անդամի արեամարեելունը համարժեք է այն ենթադրությանը, որ իոնները (ատոմները) դասական մասնիկներ են:

Ընդունված է կապի էներգիան չափել կկալ/մոլ միավորներով կամ մեկ մոլեկուլին բաժին ընկնող էներգիայով՝ արտահայտված էՎ-երով. 1 էՎ/մ $\approx 23,05$ կկալ/մոլ:

Պինդ բյուրեղական մարմիններն ըստ նրանցում էլեկտրոնների տարածական բաշխման, բաժանվում են հետևյալ տեսակների՝

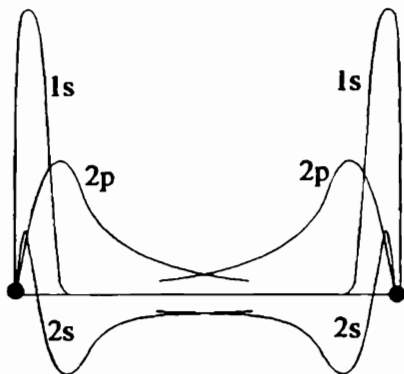
^{*)} Նշված պայմաններում $\Delta U < 0$

- ա) մոլեկուլային բյուրեղներ
- բ) խոնային բյուրեղներ
- գ) կովալենտ բյուրեղներ
- դ) մետաղներ
- ե) ջրածնային կապով բյուրեղներ:

Համառոտակի թվարկենք նշված տեսակների յուրահատկությունները:

ա) Մոլեկուլային բյուրեղներ

Այս դասի բնութագրական ներկայացուցիչներն են իներտ գազերի բյուրեղները:



Նկ. II.1

Ինչպես հայտնի է, իներտ գազերի ատոմներն ունեն լրացված (փակ) արտաքին էլեկտրոնային թաղանթ: Ազատ ատոմում էլեկտրոնների տարածական բաշխումն օժտված է գնդային համաչափությամբ, որը գործնականորեն մնում է անփոփոխ մաս բյուրեղում գտնվող ատոմում: Նկ. II.1-ում պատկերված է նեոնի (էլեկտրոնային փոխադասավորությունը՝ $1s^2 2s^2 2p^6$) շառավղային $r\psi(r)$ ալիքային ֆունկցիան երկու հարևան հանգույցների համար: Ինչպես երեւում է գծագրից, $1s$, $2p$, և $2s$ վիճակները թույլ չափով են «ծածկվում»:

Այս դասի բյուրեղների համար հատկանշական է ատոմների խիտ դարսվածքը: Բացի He^3 և He^4 իզոտոպներից, բոլոր իներտ գազերի բյուրեղներն ունեն նիստակենտրոնացված խորանարդային ցանց: Մեկուսիչներ են, ունեն կապի փոքր էներգիաներ և հալման ցածր ջերմաստիճաններ (Աղյուսակ II.1):

Ըստ մագնիսական հատկությունների դիամագնիսներ են: Բացի իներտ գազերի բյուրեղներից, այս դասին են պատկանում նաև H_2 , O_2 , N_2 , HCl , HBr , Cl_2 , NH_3 , CO_2 , CH_4 և բազմաթիվ այլ օրգանական միացությունների բյուրեղներ:

	Ցանցի հաստատում, Å	Կապի եներգիա, էՎ/ատոմ	Հալման ջերմաստիճան, K	Իոնացման պոտենցիալ, էՎ
He	—	—	—	24,58
Ne	3,13	0,02	24	21,56
Ar	3,76	0,08	84	15,76
Kr	4,01	0,116	117	14,00
Xe	4,35	0,17	161	12,13

բ) Իոնային բյուրեղներ

Իոնային բյուրեղները կազմված են մետաղական և ոչ մետաղական տարրերից: Այս դասի բնութագրական ներկայացուցիչներն են $A^I B^{VII}$ խմբի միացությունները (օրինակ՝ LiF , $NaCl$, KBr և այլն): $NaCl$ -ի օրինակով պարզենք, թե ինչպես են առաջանում իոնային բյուրեղները:

Առաջին խմբի մետաղներն ունեն համեմատաբար փոքր իոնացման պոտենցիալ, որն իրենից ներկայացնում է չեզոք ատոմից էլեկտրոն պոկելու և անվերջություն հեռացնելու համար անհրաժեշտ էներգիան: Երբ հալոգենի, օրինակ՝ քլորի (Cl) չեզոք ատոմը մոտենում է մետաղի, օրինակ՝ նատրիումի (Na) ատոմին, ապա այն դեպի իրեն է ձգում վերջինիս համեմատաբար քոյլ կապված արժեքական էլեկտրոնը, առաջացնելով կայուն Cl^- իոն: Լրացուցիչ էլեկտրոնի կապի էներգիան (այսպես կոչված «խնամակցության» էներգիան) Cl^- իոնի համար հավասար է $\sim 3,6$ էՎ, իսկ Na -ի իոնացման պոտենցիալը $\sim 5,1$ էՎ: Այսպիսով, Na -ի և Cl -ի չեզոք ատոմներից չփոխազդող, այսինքն՝ իրարից անվերջ հեռու գտնվող իոններ ստանալու համար պահանջվում է $(5,1 - 3,6)$ էՎ = $1,5$ էՎ էներգիա: Սակայն եթե նկատի ունենանք Na^+ և Cl^- իոնների կուլոնյան փոխազդեցության էներգիան, որը $a \sim 2,8 \text{ Å}$ հեռավորության դեպքում կազմում է $-e^2/a \approx -5,1$ էՎ, ապա $Na^+ Cl^-$ մոլեկուլին բաժին ընկնող էներգիայի համար կստանանք

(-5,1+1,5) էՎ $\cong$ -3,6 էՎ: Հետևաբար, իրարից անվերջ հեռու գտնվող չեզոք ատոմների գայությունն էներգիական տեսակետից ավելի ձեռնադուր չէ, քան իոններինը:

Մետաղի ատոմի արժեքական էլեկտրոնը հալոգենի ատոմին անցնելու

Աղյուսակ II.2

Բյուրեղ	Կապի էներգիա, էՎ/մ
LiF	10,51
NaCl	7,92
KBr	6,88
RbI	6,29

հետևանքով առաջանում են մետաղի դրական և հալոգենի բացասական իոններ, որոնցում էլեկտրոնային փոխդասավորությունը համապատասխանում է ns^2np^6 լրացված էլեկտրոնային թաղանթներին: Օրինակ՝ նատրիումի իոնի էլեկտրոնային փոխդասավորությունն է $1s^22s^22p^6$, որը համապատասխանում է նեոնի (Ne) ատոմին, քլորի

իոնինը՝ $1s^22s^22p^63s^23p^6$, որը համապատասխանում է արգոնի (Ar) ատոմին: Բյուրեղում գտնվող իոններում լիցքի բաշխումը գործնականորեն չի տարբերվում համապատասխան իներտ տարրի ատոմում լիցքի բաշխումից, որն օժտված է զնդային համաչափությամբ: Դրական և բացասական իոնների միջև գործող կուլոնյան ձգողության շնորհիվ էլ առաջանում է իոնային բյուրեղը:

Իոնային բյուրեղները հիմնականում ունեն նիստակենտրոնացված և ծավալակենտրոնացված խորանարդային կառուցվածքներ, որոնց բնորոշ է իոնների խիտ դարսվածքը: Իոնային բյուրեղներն ունեն կապի մեծ էներգիաներ (Աղյուսակ II.2-ում բերված են կապի էներգիայի՝ փորձում, սենյակային ջերմաստիճանում ստացված արժեքները): Ցածր ջերմաստիճաններում լավ մեկուսիչներ են (չնչին էլեկտրոնային հաղորդականություն), բարձր ջերմաստիճաններում օժտված են զգալի իոնային հաղորդականությամբ: Բնութագրվում են նաև ինֆրակարմիր ճառագայթների ուժեղ կլանումով: Ըստ մագնիսական հատկությունների դիամագնիսներ են:

գ) Կովալենտ բյուրեղներ

Կովալենտ բյուրեղներում կապը չեզոք ատոմների միջև առաջանում է երկու մոտակա ատոմների «ընդհանրացված» էլեկտրոնների շնորհիվ: Ի տարբերություն իոնային բյուրեղների, որոնցում արժեքական էլեկտրոն-

ները կապված են որոշակի խոնների հետ և որի հետևանքով երկու խոնների միջև ընկած տիրույթում էլեկտրոնային խտությունը փոքր է, կովալենտ կապի դեպքում այն կարող է լինել զգալի: Այսպես, օրինակ՝ NaCl-ի բյուրեղում էլեկտրոնային խտությունը մոտակա խոնները միացնող գծի երկայնքով նվազում է մինչև $0,1$ էլեկտրոն/Å³ և ավելի փոքր արժեք, իսկ ալմաստում, որը կովալենտ բյուրեղների դասի ամենացայտուն ներկայացուցիչն է, այն մեծ է 5 էլեկտրոն/Å³ -ից: Կապն առաջացնող էլեկտրոնային զույգում էլեկտրոնների սպինները հա-

Աղյուսակ II.3

Բյուրեղ	Կապի էներգիա, էՎմ
C (ալմաստ)	7,36
Si	4,64
Ge	3,87
α - Sn	3,12
SiC	12,23

կազուգահեռ են: Յուրաքանչյուր ատոմ կարող է ստեղծել սահմանափակ թվով կովալենտ կապեր, որոնց քանակը կախված է ատոմի արտաքին էլեկտրոնային թաղանթը լրացնելու համար անհրաժեշտ էլեկտրոնների թվից: Կովալենտ կապին բնորոշ այս հագեցվածության հատկությունը քիմիայում բնութագրվում է «արժեքականություն» հասկացությամբ: Օրինակ՝ ածխածնի (ալմաստի) ատոմի էլեկտրոնային փոխդասավորությունն է $1s^2 2s^2 2p^2$, այսինքն՝ $2p^6$ փակ թաղանթ կառուցելու համար անհրաժեշտ է 4 էլեկտրոն, ուստի ածխածնի ատոմի մոտ ի հայտ է գալիս այդ պակասը մոտակա չորս հարևանների արժեքական էլեկտրոններով լրացնելու ձգտում: Կովալենտ կապի մյուս բնութագրական հատկությունը նրա խիստ արտաահայտված տարածական ուղղորդվածությունն է: Դա է պատճառը, որ ալմաստի կառուցվածքով ցանցում ածխածնի յուրաքանչյուր ատոմ զբաղեցնում է մոտակա չորս հարևաններով կառուցված քառանիստի կենտրոնը (տես նկ. I.23):

Այս դասի բնութագրական ներկայացուցիչներն են IV խմբի տարրերը՝ C (ալմաստ), Si, Ge, α -Sn (գորշ անագ): Կովալենտ կապը գերակշռում է նաև $A^N B^{8-N}$ միացություններում, իրար մոտ N և 8-N թվերի դեպքում, օրինակ՝ $A^M B^V$ միացություններում:

Կովալենտ բյուրեղներն ունեն մեծ ամրություն, կապի մեծ էներգիաներ

(Աղյուսակ II.3), բայց և փխրուն են: Հաղորդականությունը շատ զգայուն է տարրեր խառնուրդների առկայության նկատմամբ և ջերմաստիճանից կախված փոփոխվում է զգալիորեն, բարձր ջերմաստիճաններում մոտենալով որոշ մետաղների հաղորդականությանը: Ունեն համեմատաբար մեծ դիէլեկտրական թափանցելիություն և բեկման ցուցիչ, թափանցիկ են երկարալիքային ճառագայթման համար, սակայն որոշակի ալիքի երկարությունից (տեսանելի կամ ինֆրակարմիր տիրույթում) սկսած դառնում են անթափանցիկ: Ըստ մագնիսական հատկությունների դիամագնիսներ են:

դ) Մետաղներ

Մետաղները բնութագրվում են մեծ էլեկտրա- և ջերմահաղորդականությամբ, լույսի կլանման մեծ գործակցով, մեծ պլաստիկությամբ և կոելիությամբ: Այս բոլոր հատկությունները հետևանք են մետաղներում ազատ էլեկտրոնների առկայության, որոնց համախումբը կարելի է դիտարկել որպես մետաղական՝ $n \sim 10^{23}$ սմ⁻³ կարգի խտությամբ էլեկտրոնային գազ:

Մետաղների կապի էներգիաներն ընկած են $1 \div 5$ էՎ/մ տիրույթում: Ալկալիական մետաղներում (Li, Na, K, Rb, Cs) այն համեմատաբար փոքր է՝ 1 էՎ/մ-ի կարգի, որի հետևանքով նրանց հալման ջերմաստիճանները հա-

Աղյուսակ II.4

Մետաղ	Կապի էներգիա, էՎ/մ	Հալման ջերմ., °C
Li	1,65	186
Na	1,13	97,5
K	0,941	62,5
Rb	0,858	38,7
Cs	0,827	30
Fe	4,29	1535
Mo	6,81	2625
W	8,66	3380
Ru	6,615	2450

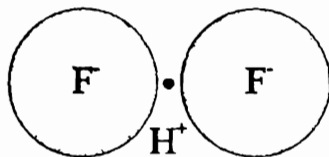
մեմատաքար ցածր են (Աղյուսակ II.4): Այս մետաղների բյուրեղները կարելի է պատկերել որպես տարածական ցանց, որի հանգույցներում գտնվում են դրական իոնները, և որն «ընկղմված» է էլեկտրոնային «ծովում»: Անցումային մետաղներում, որոնց ատոմներում կան ներքին չլրացված էլեկտրոնային թաղանթներ (օրինակ՝ Fe, W, Mo և այլն), կապի էներգիան հասնում է մեծ արժեքների: Այս հանգամանքը պայմանավորված է մետաղական իոնների չլրացված d-թաղանթների էլեկտրոնների միջև գործող մասամբ կովալենտ կապով, մասամբ էլ վանդերվաալսյան փոխազդեցությամբ:

Որպես կանոն, մետաղները բյուրեղանում են, առաջացնելով նիստակենտրոնացված, ծավալակենտրոնացված խորանարդային, հեքսագոնալ և այլ խիտ դարսվածքով կառուցվածքներ: Ըստ մագնիսական հատկությունների լինում են և՛ դիամագնիսներ, և՛ պարամագնիսներ, և՛ ֆերոմագնիսներ:

ե) Ջրածնային կապով բյուրեղներ

Բյուրեղական կառուցվածքների առաջացման ժամանակ ջրածինն իր յուրահատկությունների շնորհիվ խաղում է բոլորովին այլ դեր, քան մնացած բոլոր տարրերը:

Քանի որ ջրածնի չեզոք ատոմն ունի ընդամենը մեկ էլեկտրոն, ապա այն կարող է առաջացնել միայն մեկ կապ, որով կարող է կապվել այլ տարրի միայն մեկ ատոմի հետ: Սակայն հայտնի է, որ որոշակի պայմաններում ջրածնի ատոմը կարող է ձգողականության զգալի ուժերով կապված լինել միաժամանակ երկու (բայց ոչ ավելի) ատոմների հետ, առաջացնելով այսպես կոչված ջրածնային կապ, որի էներգիան 0,1 էՎ-ի կարգի է: Ջրածնային կապն ունի հիմնականում իոնային բնույթ: Սահմանային դեպքում ջրածնի ատոմը կորցնում է իր միակ էլեկտրոնը, տալով այն երկու ատոմներից որևէ մեկին և վերածվելով պրոտոնի, որը և առաջացնում է կապն ատոմների միջև: Պրոտոնի փոքր չափերը ($\sim 10^{-13}$ սմ) հնարավորություն չեն տալիս նրան իրար կապել երկուսից ավել ատոմներ (նկ. II.2):



Նկ. II.2

Ջրածնային կապով են պայմանավորված ջրի և սառույցի յուրահատկությունները, ինչպես նաև որոշ սեզնետա-

էլեկտրական բյուրեղների, մասնավորապես՝ կալիումի դիհիդրոֆոսֆատի և բազմապիսի օրգանական միացությունների ֆիզիկական հասկությունները:

Պինդ մարմինների վերը նկարագրված դասակարգումը համապատասխանում է այն սահմանային դեպքերին, երբ բյուրեղը կազմող մաս-

Աղյուսակ II.5

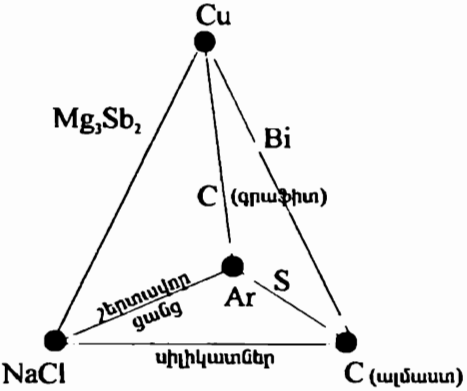
Բյուրեղ	Կապի խոնականության աստիճանը
Si	0,00
Ge	0,00
SiC	0.18
GaSb	0,26
GaAs	0,32
InSb	0,32
InP	0,44
ZnO	0,62
CuCl	0,75
NaCl	0,94
RbF	0,96

նիկների միջև կապն ամբողջությամբ վերագրվում է մեկ՝ որոշակի տեսակի փոխազդեցության: «Մաքուր» տեսքով կապերը հազվադեպ են հանդիպում: Գործնականում համարյա բոլոր բյուրեղներում միաժամանակ գործում են մեկից ավելի կապերի տեսակներ: Օրինակ՝ գորշ անագում առաջանում են կովալենտ կապին բնորոշ էլեկտրոնային զույգեր, սակայն փոքրաթիվ էլեկտրոններ կարող են «խուսափել» կապերին մասնակցելուց, ստեղծելով փոքր էլեկտրոնային հաղորդականություն, որը բնորոշ է մետաղական կապին: Ջրածնի մոլեկուլում հնարավոր է այնպիսի իրադրություն, երբ երկու էլեկտրոն-

ներն էլ գտնվում են միևնույն միջուկի մոտ, այսինքն, մոլեկուլում կապը դառնում է խոնային՝ առաջանում են իրար ձգող H^+ և H^- իոններ: Զանի որ այսպիսի վիճակը շատ կարճ է տևում ($\sim 10^{-17}$ վ), ապա կապը H_2 -ում դիտվում է որպես կովալենտ: Մի շարք նյութերում միաժամանակ գործում են և խոնային, և կովալենտ կապերը: Այդպիսիների թվին են պատկանում A^mB^v միացություններից շատերը, որոնք նկարագրվում են որպես կովալենտ բյուրեղներ, որոնց խոնային մնացորդների մոտ պահպանվել է հավելուրդային լիցք (Աղյուսակ II.5): Հարկ է նշել նաև, որ ցանկացած դեպքում ատոմների

(խմնների) միջև գործում են ունիվերսալ բնույթ ունեցող վանդերվաալսյան ուժեր, որոնք, սակայն խմնային և կովալենտ փոխազդեցություններից զգալի բույլ լինելու հետևանքով նրանց հետ միաժամանակ հաշվի չեն առնվում:

Տարբեր տեսակի կապերի միջև անցումները նպատակահարմար է պատկերել Գրիմի քառանիստի օգնությամբ, որի չորս գագաթներում գտնվում են «մաքուր» կապերի ներկայացուցիչները, իսկ կողմերը խորհրդանշում են անցումներն այդ կապերի միջև (նկ. II.3): Օրինակ՝ Bi-ի դեպքում վերադրվում են կովալենտ և մետաղական կապերը: Միջմետաղական Mg_3Sb_2 միացությունը ներկայացնում է անցումը մետաղական կապից խմնայինին: Գրաֆիտի շերտերն ունեն հստակ արտահայտված մետաղական հատկություններ և իրար հետ կապված են վանդերվաալսյան կապով: Սիլիկատները կազմում են բնորոշ անցումնային խումբ խմնական և կովալենտ կապերի միջև: Ծծումբի օդակում 8 ատոմներ կապված են կովալենտ կապով, իսկ առանձին օդակները կապվում են իրար հետ վանդերվաալսյան ուժերով:



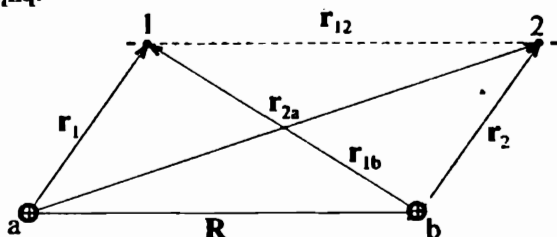
Նկ. II.3

§2. Վանդերվաալսյան կապի տեսությունը

Վանդերվաալսյան (ընդունված են նաև «ֆլուկտուացիոն», «դիսպերսիոն», «մոլեկուլային» անվանումները) կապի տեսությունը ջրածնի երկու ատոմների օրինակով առաջին անգամ տրվել է Ֆ.Լոնդոնի և Ռ.Այզենշիցի կողմից 1930թ.:

Դիտարկենք իրարից R հեռավորության վրա գտնվող ջրածնի երկու ատոմ (նկ. II.4): 1-ին էլեկտրոնի դիրքը a միջուկի նկատմամբ որոշվում է $r_1(x_1, y_1, z_1)$ շառավիղ-վեկտորով, 2-ինը՝ b միջուկի նկատմամբ՝

$r_2(x_2, y_2, z_2)$ -ով, կոորդինատական z առանցքն ուղղված է միջուկները միացնող ուղղով:



Նկ. II.4

Անշարժ a և b միջուկներից և 1-ին և 2-րդ էլեկտրոններից կազմված համակարգի համիլտոնիանն ունի հետևյալ տեսքը՝

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}}, \quad (2.1)$$

որտեղ Δ_1 և Δ_2 լապլասիաններն ագրում են համապատասխանաբար r_1 և r_2 փոփոխականների վրա, e^2/r_{12} անդամը «էլեկտրոն-էլեկտրոն» փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան է, $-e^2/r_{1b}$ -ն՝ «1-ին էլեկտրոն- b միջուկ», իսկ $-e^2/r_{2a}$ -ն՝ «2-րդ էլեկտրոն- a միջուկ» փոխազդեցության էներգիաները:

Եթե ատոմները գտնվում են իրարից մեծ հեռավորության վրա՝ $R \gg a_0$, որտեղ $a_0 = \hbar^2/me^2$ մեծությունը Բորի շառավիղն է, ապա $r_{12} \sim r_{1b} \sim r_{2a} \sim R$ և (2.1) արտահայտության վերջին չորս անդամների գումարը՝

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \quad (2.2)$$

կարելի է դիտել որպես զրգոում չփոխազդող ատոմների

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} \quad (2.3)$$

համիլտոնիանի նկատմամբ: Արտահայտելով r_{12} , r_{1b} և r_{2a} մեծությունները r_1 , r_2 և R վեկտորների միջոցով և հաշվի առնելով $r_1, r_2 \ll R$ անհավասարությունները, (2.2) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\hat{H}' = \frac{p_1 \cdot p_2}{R^3} - \frac{3(p_1 R) \cdot (p_2 R)}{R^5} \equiv -p_2 \cdot E_1, \quad (2.4)$$

որտեղ $p_1 = -e r_1$ և $p_2 = -e r_2$ վեկտորները a և b ատոմների դիպոլային մոմենտներն են, իսկ

$$E_1 = \frac{3R(p_1 R)}{R^5} - \frac{p_1}{R^3} \quad (2.5)$$

վեկտորը p_1 դիպոլի ստեղծած էլեկտրական դաշտի լարվածությունն է p_2 դիպոլի գտնվելու կետում: Այսպիսով, H' անդամը դիպոլ-դիպոլ փոխազդեցության համիլտոնիանն է:

$\hat{H}_0$ օպերատորի սեփական էներգիան՝

$$E_1^{(0)} = 2\varepsilon_1^{(0)}, \quad (2.6)$$

որտեղ $\varepsilon_1^{(0)}$ մեծությունը ջրածնի ատոմի էներգիան է հիմնական վիճակում: Գրգռումների տեսության առաջին մոտավորությամբ էներգիայի ուղղումը հավասար է գրգռման $\hat{H}'$ օպերատորի միջին արժեքին՝

$$E_1^{(1)} = \int \psi_{11}^*(r_1, r_2) \hat{H}' \psi_{11}(r_1, r_2) dr_1 dr_2, \quad (2.7)$$

որտեղ $\psi_{11}(r_1, r_2)$ -ը համակարգի հիմնական վիճակի ալիքային ֆունկցիան է զրոյական մոտավորությամբ: Զանի որ $R \gg a_0$, ապա կարելի է հաշվի չառնել էլեկտրոնների նույնականությամբ պայմանավորված փոխանակային փոխազդեցությունը և հիմնական վիճակի ալիքային ֆունկցիան ներկայացնել 1-ին և 2-րդ էլեկտրոնների հիմնական վիճակի ալիքային ֆունկցիաների արտադրյալի տեսքով՝

$$\psi_{11}(r_1, r_2) = \psi_1(r_1) \cdot \psi_2(r_2): \quad (2.8)$$

(2.7) և (2.8) բանաձևերից հետևում է, որ էներգիայի ուղղումը $E_1^{(1)} = 0$, քանի որ այն համեմատական է ատոմի դիպոլային մոմենտի պրոյեկցիաների միջինների արտադրյալին, որոնցից յուրաքանչյուրը՝

$$\langle p_i \rangle = -e \langle x_i \rangle \equiv -e \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i(r_1) x_i \psi_i(r_1) dr_1 = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.9)$$

ատոմի զնդային համաչափության հետևանքով:

Գրգռումների աեսության երկրորդ մոտավորությամբ հիմնական վիճակի համար էներգիայի ուղղումը տրվում է

$$E_1^{(2)} = \sum_{(n)} \frac{|\hat{H}'_{1n}|^2}{E_1^{(0)} - E_{(n)}^{(0)}}, \quad (2.10)$$

բանաձևով, որտեղ գումարը տարվում է բոլոր վիճակներով՝ (n) -ով, բացի հիմնականից, $E_{(n)}^{(0)}$ -ը չփոխազդող ատոմների համակարգի էներգիան է (n) վիճակում՝

$$E_{(n)}^{(0)} = \varepsilon_i^{(0)} + \varepsilon_k^{(0)}, \quad (2.11)$$

$$\varepsilon_i^{(0)} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{i^2}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (2.12)$$

ջրածնի ատոմի էներգիան է (i) բվանտային վիճակում:

Փոխազդեցության համիլտոնիանի $\hat{H}'_{1n}$ մատրիցական տարրը հարմար է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\begin{aligned} \hat{H}'_{1n} &= \int \psi_{11}(r_1, r_2) \hat{H}' \psi_{(n)}(r_1, r_2) dr_1 dr_2 = \\ &= \frac{e^2}{R^3} \int \psi_{11}(r_1, r_2) \omega \psi_{(n)}(r_1, r_2) dr_1 dr_2 \equiv \frac{e^2}{R^3} \langle 1, 1 | \omega | (n) \rangle \end{aligned} \quad (2.13)$$

որտեղ, համաձայն (2.4) արտահայտության

$$\omega = x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2, \quad (2.14)$$

իսկ զրգոված վիճակի ալիքային ֆունկցիան՝

$$\psi_{(n)}(r_1, r_2) = \psi_i(r_1) \cdot \psi_k(r_2): \quad (2.15)$$

(2.10) արտահայտության մեջ էներգիական հայտարարը բացասական է, բանի որ $\varepsilon_i^{(0)} + \varepsilon_k^{(0)} > 2\varepsilon_1^{(0)}$, հետևաբար երկու ատոմների փոխազդեցության էներգիան որոշվում է

$$W(R) \equiv E_1^{(2)} = -\frac{W_0}{R^6} \quad (2.16)$$

արտահայտությամբ, որտեղ

$$W_0 = e^4 \sum_{i,k} \frac{|\langle 1,1|\omega|i,k\rangle|^2}{|2\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}|} : \quad (2.17)$$

(2.16) արտահայտության համաձայն, $R \gg a_0$ հեռավորությունների վրա չեզոք ատոմների միջև գործում են ձգողականության ուժեր ($W(R) < 0$):

Այժմ գնահատենք (2.17) բանաձևով տրվող W_0 հաստատունը: Օգտվելով (2.12) բանաձևից, կստանանք, որ

$$\left. \frac{3me^4}{4\hbar^2} \right|_{i=2}^{k=2} \leq |2\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}| \leq \left. \frac{me^4}{\hbar^2} \right|_{i=\infty}^{k=\infty},$$

ուստի, բոլոր (i,k) -երի համար կարելի է բավարար ճշտությամբ ընդունել, որ

$$|2\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}| \approx \frac{me^4}{\hbar^2} : \quad (2.18)$$

Նկատի ունենալով (2.18) գնահատականը, W_0 հաստատունը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\begin{aligned} W_0 &\approx \frac{\hbar^2}{m} \sum_{i,k} |\langle 1,1|\omega|i,k\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m} \sum_{i,k} \langle 1,1|\omega|i,k\rangle \cdot \langle 1,1|\omega|i,k\rangle^* = \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \sum_{i,k} \langle 1,1|\omega|i,k\rangle \cdot \langle i,k|\omega|1,1\rangle = \frac{\hbar^2}{m} \langle 1,1|\omega^2|1,1\rangle : \end{aligned} \quad (2.19)$$

Քանի որ հիմնական վիճակում ատոմներն օժտված են զնդային համաչափությամբ, որի հետևանքով

$$\begin{aligned} \langle x_1 \rangle &= \langle x_2 \rangle = \dots = \langle z_2 \rangle = 0, \\ \langle x_1^2 \rangle &= \langle y_1^2 \rangle = \dots = \langle z_2^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle, \end{aligned} \quad (2.20)$$

ապա

$$\langle 1,1|\omega^2|1,1\rangle = \langle 1,1|x_1^2x_2^2 + y_1^2y_2^2 + 4z_1^2z_2^2|1,1\rangle = \frac{2}{3}\langle r^2\rangle^2 : \quad (2.21)$$

Օգտվելով ջրածնի ատոմի հիմնական վիճակի ալիքային ֆունկցիայի արտահայտությունից՝

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right), \quad (2.22)$$

$\langle r^2 \rangle$ մեծության համար կստանանք՝

$$\langle r^2 \rangle \equiv \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^4 dr d\varphi \sin \theta d\theta = 3a_0^2, \quad (2.23)$$

հետևաբար, ըստ (2.17)-(2.21), (2.23) բանաձևերի՝

$$W_0 \approx \frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{2}{3} (3a_0^2)^2 = 6e^2 a_0^5 : \quad (2.24)$$

Ավելի մանրակրկիտ հաշվումների համաձայն $W_0 \approx 6,47e^2 a_0^5$:

Անհրաժեշտ է նշել, որ (2.16) արտահայտությամբ տրվող վանդերվաալյան փոխազդեցությունն իր բնույթով քվանտային երևույթ է, քանզի երբ $\hbar \rightarrow 0$, $W(R) \rightarrow 0$:

Կամայական չեզոք ատոմների վանդերվաալյան փոխազդեցության համար W_0 հաստատունը կարելի է արտահայտել

$$W_0 \approx \frac{3}{2} \cdot \frac{I_a I_b}{I_a + I_b} \cdot \alpha_a \alpha_b \quad (2.25)$$

մոտավոր բանաձևով, որտեղ I_a (I_b)-ն a (b) ատոմի իոնացման պոտենցիալն է, α_a (α_b)-ն՝ ատոմի բևեռացվելիությունը:

Եթե փոխազդեցության $\hat{H}'$ համիլտոնիանի (2.2) արտահայտությունն ըստ a_0/R պարամետրի շարքի վերածելիս, բացի R^{-3} -ի կարգի անդամներից, սլահվեն նաև ավելի բարձր կարգի փոքրերը ($\sim R^{-4}, R^{-5}$), ապա փոխազդեցության էներգիայի համար կստացվի հետևյալ բանաձևը՝

$$W = -\frac{W_0}{R^6} - \frac{W_1}{R^8} - \frac{W_2}{R^{10}}, \quad (2.26)$$

որտեղ W_1 -ը դիպուկ-կվադրուսով, իսկ W_2 -ը՝ կվադրուսով-կվադրուսով փոխազդեցության հաստատուններն են:

Վանդերվաալսյան փոխազդեցության շնորհիվ չեզոք ատոմների համախմբից առաջանում է մոլեկուլային բյուրեղ: Ինչպես հետևում է (2.16) արտահայտությունից, R -ի փոքրացմանը գույզնաբազ ձգողական փոխազդեցությունն անվերջ աճում է, ինչը, ի վերջո, կբերի բյուրեղի անվերջ սեղմման: Սակայն ձգողական ուժերի հետ մեկտեղ բյուրեղում գործում են գործողության փոքր շառավղով և ատոմների միջև հեռավորության փոքրացման հետ չափազանց արագ աճող վանդակական ուժեր: Այդ ուժերը մասամբ հետևանք են ատոմների միջուկների և էլեկտրոնային ամպերի էլեկտրաստատիկ փոխազդեցության, սակայն հիմնական դերը խաղում են քվանտային ծագում ունեցող ուժերը, որոնց գոյությունը հետևանք է Պաուլիի սկզբունքի, համաձայն որի երկու էլեկտրոն չեն կարող գտնվել միևնույն քվանտային վիճակում: Երբ ատոմների էլեկտրոնային թաղանթները վերադրվում են, ապա մի ատոմի էլեկտրոնները ձգտում են տեղեր զբաղեցնել մյուս ատոմում և հակառակը: Պաուլիի սկզբունքը խոչընդոտում է այս ձգտմանը, և էլեկտրոնային «ամպերը» կարող են ծածկել իրար միայն այն դեպքում, երբ վերադրումն ուղեկցվում է որոշ էլեկտրոնների՝ ավելի մեծ էներգիաներով քվանտային վիճակների անցումներով: Այսպիսով, էլեկտրոնային թաղանթների վերադրումն ուղեկցվում է համակարգի լրիվ էներգիայի մեծացումով, ինչը համապատասխանում է վանդակական ուժերի ի հայտ գալուն: Այս ուժերը կարելի է հաշվարկել քվանտային մեխանիկայի մեթոդներով: Սակայն հաշվումները հուսալի արդյունքներ չեն տալիս, քանի որ փոխազդեցությանը մասնակցում են մեծ թվով էլեկտրոններ, ուստի ավելի նպատակահարմար է օգտվել փորձառական արտահայտություններից, որոնցով կատարված հաշվումները լավագույնս համընկնում են փորձի հետ:

§3. Մոլեկուլային բյուրեղի կապի էներգիայի հաշվարկը

Կապի էներգիան տեսականորեն հաշվարկելու համար անհրաժեշտ է տալ երկու մասնիկների վանդակական փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիայի համար որոշակի վերլուծական արտահայտություն:

Վանդողական փոխազդեցության էներգիան հաճախ ներկայացվում է

$$V(R) = AR^{-m} \quad (3.1)$$

տեսքով, որտեղ $m > 6$ ամբողջ թիվ է: Տեսական հաշվարկներ կատարելիս հարմար է օգտվել նաև

$$V(R) = \lambda \exp(-R/\rho) \quad (3.2)$$

տեսքից, որտեղ ρ -ն փոխազդեցության տիրույթի բնութագրական չափն է:

Երկու չեզոք ատոմների փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիայի համար լայնորեն կիրառվում է Լենարդ-Ջոնսի կամ «6-12» պոտենցիալը՝

$$\Phi(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right], \quad (3.3)$$

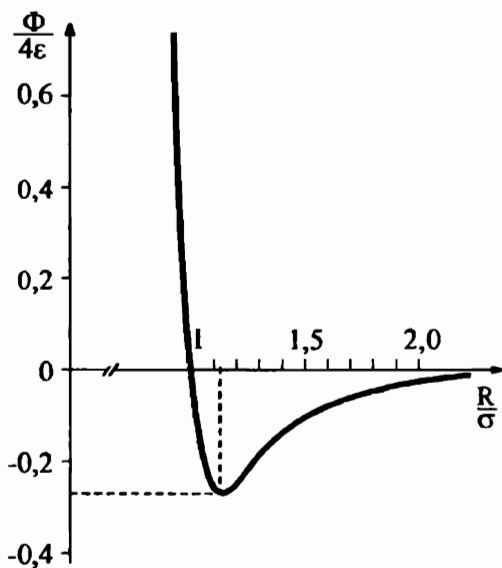
որտեղ ε և σ մեծությունները բնութագրում են ատոմները: (3.3) արտահայտության գրաֆիկը տրված է նկ. II.5-ում:

Եթե բյուրեղը բաղկացած է N ատոմից, ապա նրա լրիվ պոտենցիալ

էներգիան հավասար է բոլոր ատոմների զույգերի փոխազդեցության (3.3) էներգիաների գումարին՝

$$U = \frac{1}{2} N \sum_{R \neq 0} \Phi(R), \quad (3.4)$$

1/2 գործակցի շնորհիվ գումարում ատոմների յուրաքանչյուր զույգի փոխազդեցության էներգիան հաշվի է առնվում մեկ անգամ: (3.4) գումարը հաշվելու համար Բրալևի ցանցի ցանկացած R վեկտորի երկարությունը հարմար է արտահայտել ամենամոտ հարևանների միջև R հեռավորության և $\alpha(R)$ անչափ գործակցի



Նկ. II.5

միջոցով՝

$$|R| = R \cdot \alpha(R) : \quad (3.5)$$

Մեկ ատոմին բաժին ընկնող պոտենցիալ էներգիան՝

$$u(R) = \frac{U}{N} = 2\varepsilon \left[\sum_{R \neq 0} \left(\frac{\sigma}{|R|} \right)^{12} - \sum_{R \neq 0} \left(\frac{\sigma}{|R|} \right)^6 \right] = 2\varepsilon \left[A_{12} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - A_6 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right], \quad (3.6)$$

որտեղ

$$A_n = \sum_{R \neq 0} \frac{1}{\alpha^n(R)} : \quad (3.7)$$

A_n հաստատունի արժեքը կախված է n -ից և բյուրեղական կառուցվածքի տեսակից: Ամենամոտ հարևանների համար $\alpha(R) = 1$, ուստի

$$A_n = z_I + \sum_{R \neq 0, I} \frac{1}{\alpha^n(R)}, \quad (3.8)$$

որտեղ z_I մեծությունը ատոմների քիվն է I կոորդինացիոն խմբում, իսկ գումարը տարվում է II և հաջորդ բոլոր կոորդինացիոն խմբերով: Երբ $n \rightarrow \infty$, $A_n \rightarrow z_I$, իսկ երբ n -ը սկսում է փոքրանալ, A_n գործակիցն աճում է, քանի որ, բացի I կոորդինացիոն խմբից, գումարի մեջ ներդրում են տալիս նաև մյուս կոորդինացիոն խմբերը: Հարկավոր է նշել նաև, որ (3.8) գումարը տարամիտում է, երբ $n \leq 3$: Խորանարդային միատակենտրոնացված կառուցվածքի համար $z_I = 12$, $z_2 = 6$, $\alpha = \sqrt{2}$, ուստի II կոորդինացիոն խմբի ներդրումը կլինի հավասար

$$6 \cdot \frac{1}{(\sqrt{2})^{12}} = \frac{6}{64} \approx 0,09375,$$

իսկ III խմբինը՝ ($z_3 = 12$, $\alpha = 2$)

$$12 \cdot \frac{1}{2^{12}} = \frac{3}{2^{10}} \approx 0,00293,$$

որոնց օգնությամբ կստանանք՝ $A_{12} = 12,09668$: Ըստ ճշգրիտ հաշվարկների $A_{12} = 12,13188$, $A_6 = 14,445392$: Ինչպես հետևում է բերված թվային տվյալներից, $n = 12$ դեպքում շարքի գումարը շատ քիչ է տարբերվում

z_I -ից, սակայն $n = 6$ դեպքում A_6 գործակցի մեջ զգալի է II, III և հաջորդ կոորդինացիոն խմբերի ներդրումը:

Հավասարակշռության վիճակում համակարգի, հետևաբար և մեկ ատոմին բաժին ընկնող, պոտենցիալ էներգիան ամենափոքրն է, ուստի

$$\left(\frac{du}{dR} \right)_{R=R_0} = 0, \quad (3.9)$$

որտեղից (3.6) արտահայտության օգնությամբ հեշտությամբ ստացվում են ամենամոտ հարևանների միջև հավասարակշռական հեռավորության՝

$$R_0 = \sigma \left(\frac{2A_{12}}{A_6} \right)^{1/6} \approx 1,09\sigma \quad (3.10)$$

և պոտենցիալ էներգիայի՝

$$u_0 \equiv u(R_0) = -\frac{A_6^2}{2A_{12}} \varepsilon \approx -8,6\varepsilon \quad (3.11)$$

արտահայտությունները:

Տեսությունը փորձով ստուգելու համար նպատակահարմար է հաշվարկել նաև փորձնականորեն հեշտությամբ չափվող մեծություններ, որոնցից են, օրինակ՝ առաձգականության իզոթերմական (B_T) և ադիաբատական (B_S) ծավալային մոդուլները: Երբ $T = 0K$, B_T և B_S գործակիցները համընկնում են, ուստի, օգտվելով նաև թերմոդինամիկայի հիմնական հավասարումից՝ $dU = -PdV$, որտեղ P -ն ճնշումն է, իսկ V -ն՝ համակարգի ծավալը, կստանանք՝

$$B_0 = -V \frac{dP}{dV} = V \frac{d^2U}{dV^2} = v \frac{d^2u}{dv^2}, \quad (3.12)$$

որտեղ $v = V/N$ -ը մեկ ատոմին բաժին ընկնող ծավալն է: Արտահայտենք այն միջմասնիկային R հեռավորության միջոցով: Եթե նիստակենտրոնացված ցանցի տարրական խորանարդի կողոր նշանակենք a -ով, ապա $v = a^3/4 = R^3/\sqrt{2}$, քանի որ $a = \sqrt{2} \cdot R$: Նկատի ունենալով, որ

$$\frac{d}{dv} = \frac{d}{dR} \cdot \frac{dR}{dv} = \frac{\sqrt{2}}{3R^2} \cdot \frac{d}{dR}, \quad (3.13)$$

ինչպես նաև (3.9) պայմանը, առաձգականության ծավալային մոդուլի համար $T = 0\text{K}$ -ում կստանանք՝

$$B_0 = \frac{\sqrt{2}}{9R_0} \left(\frac{d^2 u}{dR^2} \right)_{R=R_0} = \frac{4\varepsilon}{\sigma^3} A_{12} \left(\frac{A_6}{A_{12}} \right)^{5/2} \approx \frac{75\varepsilon}{\sigma^3} \quad (3.14)$$

արտահայտությունը:

Աղյուսակ II.6-ում բերված են իներտ գազերի σ և ε բնութագրերով մոլեկուլային բյուրեղների R_0 , u_0 և B_0 մեծությունների տեսական և փորձում ստացված արժեքները:

Աղյուսակ II.6

			R_0 , Å		$-u_0$, էՎ/ատոմ		B_0 , դին/սմ ²	
	σ , Å	ε , էՎ	տես.	փորձ.	տես.	փորձ.	տես.	փորձ.
Ne	2,74	0,0031	2,99	3,13	0,027	0,02	1,81	1,1
Ar	3,40	0,0104	3,71	3,75	0,089	0,08	3,18	2,7
Kr	3,65	0,0140	3,98	3,99	0,120	0,11	3,46	3,5
Xe	3,98	0,0200	4,34	4,33	0,172	0,17	3,81	3,6

Ինչպես հետևում է աղյուսակից, R_0 հավասարակշռական հեռավորության տեսական և փորձնական արժեքների համընկնումը բավականաչափ լավ է, ընդ որում, ատոմի զանգվածի նվազմանը զուգընթաց փորձնական արժեքն ավելի և ավելի է գերազանցում տեսականը, ինչը պայմանավորված է ատոմների զրոյական տատանումների կինետիկական ε_0 էներգիայի առկայությամբ, որը տեսական հաշվարկներում անտեսված է: Այս էներգիան այնքան ավելի մեծ է, որքան փոքր է մեկ ատոմին բաժին ընկնող ծավալը՝

$$\varepsilon_0 \sim \frac{\hbar^2}{M_i (\Delta a)^2} \sim \frac{\hbar^2}{M_i} \cdot \frac{1}{R_0^2} \sim \frac{\hbar^2}{M_i v^{2/3}} \quad (3.15)$$

հետևաբար, այն գործում է որպես արդյունաբար վանողական «ուժ», որը մեծացնում է մոտակա հարևանների միջև հեռավորությունը: Համաձայն (3.15) բանաձևի, կապի էներգիայի մեջ զրոյական տատանումների ներ-

դրման հաշվառումը բերում է նրա փոքրացման, քանի որ ε_0 , մեծությունը դրական է և «խարխլում» է կապը, ինչն առավել զգալի է դառնում փոքր զանգվածների դեպքում:

Ինչ վերաբերում է B_0 գործակցին, ապա համընկնումը վործի հետ լավ է քսենոնի և կրիպտոնի դեպքում, սակայն արգոնի համար ստացված նրա տեսական արժեքը գերազանցում է փորձնականը 20%-ով, իսկ նեոնի մոտ՝ 60%-ով, ինչը պայմանավորված է B_0 գործակցի՝ σ պարամետրից ունեցած ուժեղ կախումով:

§4. Իոնական կապի տեսությունը

Կապը իոնային բյուրեղներում պայմանավորված է իոնների էլեկտրաստատիկ (կուլոնյան) փոխազդեցությամբ: Բյուրեղական կառուցվածք առաջանում է շնորհիվ այն բանի, որ տարանուն իոնների միջև գործող ձգողական ուժերը գերազանցում են նույնանուն իոնների միջև գործող վանողական ուժերին: Փոքր հեռավորությունների վրա իոնների միջև ծագում է նաև ոչ կուլոնյան բնույթի վանողական փոխազդեցություն, որին համապատասխանող էներգիան տրվում է (3.1) կամ (3.2) բանաձևերով: Կարելի է ենթադրել, որ իոնային բյուրեղի դեպքում (3.1) արտահայտության մեջ $m < 12$, քանի որ լրացուցիչ էլեկտրոնի առկայության հետևանքով էլեկտրոնային խտությունը բացասական իոնի մակերևույթի մոտ ավելի փոքր է, քան համապատասխան իներտ գազի ատոմի մոտ: Օրինակ՝ Cl^- իոնը և Ar ատոմն ունեն 18 էլեկտրոն, իսկ նրանց ծավալների հարաբերությունը հավասար է մոտ 1,2-ի: Հետագա հաշվարկներում կապի էներգիան որոշելիս բազմազանության համար կօգտագործենք վանողական փոխազդեցության էներգիայի՝ Բոռնի և Մայերի կողմից առաջարկված (3.2) արտահայտությունը: Իհարկե, իոնների միջև գործում է նաև վանդերվաալսյան փոխազդեցությունը, որը սակայն զգալի թույլ է կուլոնյանից և որի ներդրումը կապի էներգիայի մեջ կազմում է կուլոնյան փոխազդեցության էներգիայի ընդամենը $1 \div 2$ %-ը:

Այժմ հաշվենք իոնային բյուրեղի էլեկտրաստատիկ փոխազդեցության (Մադելունգի) էներգիան: Եթե i և j իոնների փոխազդեցության էներգիան

նշանակենք U_{ij} -ով, ապա որևէ իոնի փոխազդեցության էներգիան մնացած բոլոր իոնների հետ կլինի հավասար

$$U_i = \sum_{j \neq i} U_{ij} : \quad (4.1)$$

Ենթադրենք, որ U_{ij} -ն կարելի է ներկայացնել վանդերվալսի (3.2) պոտենցիալի և կոլոմյան պոտենցիալի գումարի տեսքով՝

$$U_{ij} = \lambda \exp(-R_{ij}/\rho) \pm \frac{e^2}{R_{ij}}, \quad (4.2)$$

որտեղ R_{ij} -ն հեռավորությունն է i և j իոնների միջև, (+) նշանը համապատասխանում է մույնանում, իսկ (-) նշանը՝ տարանում լիցքերի փոխազդեցությանը: Եթե i իոնը բյուրեղի մակերևութային շերտում չէ, ապա U_i -ի արժեքը կախված չէ նրա դիրքից: Արհամարանելով մակերևութային երևույթները, $2N$ իոններից բաղկացած բյուրեղի էներգիայի համար կստանանք

$$U = \frac{1}{2} \cdot 2N \cdot U_i = NU_i, \quad (4.3)$$

որտեղ $1/2$ գործակցի շնորհիվ յուրաքանչյուր իոնային գույգի փոխազդեցություն հաշվի է առնվում մեկ անգամ:

Քանի որ վանդերվալսի փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան հեռավորությունը մեծացնելիս նվազում է էքսպոնենցիալ օրենքով, ապա լրիվ էներգիան հաշվելիս կարելի է սահմանափակվել միայն ամենամոտ հարևանների վանդերվալսի փոխազդեցության ներդրումով: (4.1)-(4.3) արտահայտություններից լրիվ էներգիայի համար ստանում ենք՝

$$U = N \left(z \lambda e^{-R/\rho} - A \frac{e^2}{R} \right), \quad (4.4)$$

որտեղ z -ը իոնների թիվն է I կոորդինացիոն խմբում, R -ը՝ ամենամոտ հարևանների միջև հեռավորությունը,

$$A = \sum_{R \neq 0} \frac{(\pm 1)}{\alpha(R)}, \quad (4.5)$$

մեծությունը Մադելունգի հաստատունն է, իսկ $\alpha(R)$ անչափ գործակիցը արվում է (3.5) արտահայտությամբ: Մադելունգի հաստատունը իոնային

Բյուրեղական կառուցվածք	A	z
CsCl-ի կառուցվածք	1,7627	8
NaCl-ի կառուցվածք	1,7476	6
ZnS-ի կառուցվածք (սֆալերիտ)	1,6381	4
ZnS-ի հեքսագոնալ կառուցվածք (վյուրցիտ)	1.6413	6

բյուրեղի կարևորագույն բնութագիրն է, այն կախված է միայն բյուրեղական կառուցվածքի տեսակից (Աղյուսակ II.7): Ինչպես հետևում է Աղյուսակ II.7-ում բերված տվյալներից, կոորդինացիոն թվի մեծացման հետ A հաստատունն աճում է, այսինքն՝ որքան մեծ է

հակառակ նշանի լիցքով հարևանների թիվը, այնքան փոքր է էլեկտրաստատիկ փոխազդեցության էներգիան:

Էլեկտրաստատիկ փոխազդեցության էներգիայի, հետևաբար և Մադելունգի A հաստատունի հաշվարկին է նվիրված հաջորդ սլարագրաֆը:

Մեկ իոնային զույգին (մոլեկուլին) բաժին ընկնող էներգիան՝

$$u(R) = \frac{U}{N} = z\lambda e^{-R'/\rho} - A \frac{e^2}{R} : \quad (4.6)$$

Հավասարակշռության վիճակում

$$\left(\frac{du}{dR} \right)_{R_0} = 0 ,$$

որտեղից ստացվում է

$$R_0^2 e^{-R_0/\rho} = \frac{\rho A e^2}{z \lambda} \quad (4.7)$$

կապը, որի օգնությամբ (տրված λ և ρ մեծություններով) որոշվում է հավասարակշռական R_0 հեռավորությունը: Կապի էներգիայի հավասարակշռական արժեքը որոշվում է

$$u(R_0) = -\frac{A e^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0} \right) \quad (4.8)$$

արտահայտությամբ: ρ մեծությունը կարելի է գնահատել, փորձում չափելով առաձգականության ծավալային մոդուլը, որը $T = 0\text{K}$ ջերմաստիճա-

նում տրվում է (3.18) բանաձևով: Նկատի ունենալով, որ NaCl -ի կառուցվածքով ցանցի համար մեկ իոնային զույգին բաժին ընկնող ծավալը՝ $v = 2R^3$, (4.6), (4.7) և (3.12) բանաձևերից կստանանք՝

$$B_0 = \frac{Ae^2}{18R_0^4} \left(\frac{R_0}{\rho} - 2 \right): \quad (4.9)$$

Համաձայն չափումների, KCl -ի համար $B_0 = 1,97 \cdot 10^{11}$ դին/սմ², $R_0 = 3,14 \cdot 10^{-8}$ սմ, $A \cong 1,75$, հետևաբար

$$\frac{R_0}{\rho} = \frac{18B_0R_0^4}{Ae^2} + 2 \cong 10,4, \quad (4.10)$$

այսինքն՝ վանդակաձև փոխազդեցությունն ի հայտ է գալիս $\rho \cong 0,3 \text{ \AA}$ չափերով սիդրություն: Օգտվելով (4.10) և (4.8) արտահայտություններից, կապի էներգիայի համար կստանանք՝

$$u(R_0) = -\frac{Ae^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0} \right) = -7,26 \text{ էՎ}, \quad (4.11)$$

որը շատ լավ է համընկնում փորձում ստացված $u_0 = -7,397 \text{ էՎ}$ արժեքի հետ:

Վանդակաձև փոխազդեցության λ հաստատունի համար (4.7) և (4.10) արտահայտություններից ստացվում է ($z = 6$ դեպքում)

$$\lambda = \frac{A\rho e^2}{zR_0^2} \exp\left(\frac{R_0}{\rho}\right) \cong 4 \cdot 10^3 \text{ էՎ}$$

գնահատականը:

Եթե կապի էներգիայի հաշվարկը կատարվի (3.1) բանաձևի համաձայն, այս (4.11) արտահայտության փոխարեն կստանանք՝

$$u(R_0) = -\frac{Ae^2}{R_0} \left(1 - \frac{1}{m} \right), \quad (4.12)$$

որը հավասարեցնելով $u(R_0) \cong -7,26 \text{ էՎ}$ -ի, կարող ենք գնահատել m -ը՝

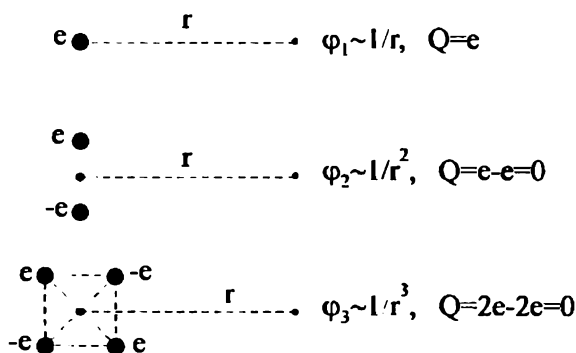
$$m = \frac{R_0}{\rho} \cong 10,4:$$

Ինչպես և սպասվում էր որակական դասադասություններից, $m < 12$: Ստացված արդյունքների համաձայն, Մադելունգի էներգիան՝ $-Ae^2/R_0$ անդամը, կազմում է (4.8) բանաձևով տրվող կապի էներգիայի հիմնական՝ մոտ 0,9 մասը, ուստի շատ կարևորվում է Մադելունգի հաստատունի հաշվման խնդիրը:

Իոնային ցանցի էլեկտրաստատիկ էներգիան հաշվելու համար անհրաժեշտ է գտնել որևէ իոնի զամկետի կետում մյուս բոլոր իոնների կողմից ստեղծված պոտենցիալը: Հաշվարկների ընթացքում ծագում է վատ զուգամիտող շարքի գումարը որոշելու խնդիր: Օրինակ, NaCl -ի կառուցվածքով ցանցի համար, համաձայն (4.5) բանաձևի, Մադելունգի հաստատունը տրվում է հետևյալ շարքով՝

$$A = \frac{6}{\sqrt{1}} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{\sqrt{4}} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \frac{24}{\sqrt{6}} + \frac{12}{\sqrt{8}} - \frac{24}{\sqrt{9}} + \dots, \quad (4.13)$$

որի գումարը հնարավոր չէ հաշվել անմիջական գումարման միջոցով: (4.13) շարքի գումարը գտնելու համար անհրաժեշտ է լավացնել նրա զուգամիտությունը: Դրան կարելի է հասնել, վերախմբավորելով շարքի անդամները, ինչը համապատասխանում է առանձին իոններից էլեկտրաչեզոք խմբեր կազմելուն, որոնց պոտենցիալները հեռավորությունից կախված շատ ավելի արագ են նվազում, քան լիցքավորված համակարգի պոտենցիալը (նկ. II.6): Մասնավորապես, բյուրեղը կարելի է սրտիկ էլեկտրաչեզոք, խորանարդային համաչափությամբ բաշխված լիցքով խորանարդների և հեշ-



Նկ. II.6

ստությամբ հաշվել ոչ մեծ թվով խոններ պարունակող յուրաքանչյուր խորանարդի էներգիան: Բյուրեղի էլեկտրաստատիկ էներգիան հավասար է այդ խորանարդների էներգիաների և նրանց փոխազդեցության էներգիաների գումարին: Վերջինները նվազում են հակադարձ համեմատական հեռավորության հինգերորդ աստիճանին, և նրանց գումարը սրվում է արագ գոյամիստող շարքի տեսքով, որը $V \rightarrow \infty$ սահմանում կախված չէ գումարման եղանակից:

§5*. Մադելունգի հաստատունի հաշվարկման մեթոդները

Այժմ ծանոթանանք (4.13) սխեմի շարքերի գումարը հաշվելու որոշ մեթոդների հետ, որոնց օգնությամբ որոշվում է պոսենցիալի վարքը տարածության մեջ որոշակի ձևով ընտրված էլեկտրաչեզոք (միաչափ, երկչափ կամ եռաչափ) ցանցի համար:

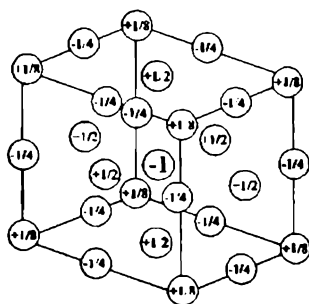
1. Էվլենի մեթոդ

Կառուցենք խորանարդ, որի նիստերը համընկնում են ատոմական հարթությունների հետ, ընդ որում նիստերի վրա զամկող լիցքերը «բաժանում» ենք երկու հարևան տարրական բջիջների միջև, կողերի վրա զամկող լիցքերը՝ չորս բջիջների միջև, իսկ զագաթներում զամկող լիցքերը՝ ութ բջիջների միջև (Նկ. II.7): Որպես I խորանարդի կենտրոն ընտրենք $-e$ լիցքը: Բացի $-e$ կենտրոնական լիցքից, I խորանարդին բաժին է ընկնում 6 հատ $(+e)$ լիցք՝ նիստերի վրա, 12 հատ $(-e)$ լիցք՝ կողերի վրա և 8 հատ $(+e)$ լիցք՝ զագաթներում, այնպես որ I խորանարդի գումարային լիցքը՝

$$q_I = 1 \cdot (-e) + 6 \cdot \frac{e}{2} + 12 \cdot \left(-\frac{e}{4}\right) + 8 \cdot \left(\frac{e}{8}\right) = 0,$$

իսկ նրա ներդրումը Մադելունգի հաստատունի մեջ՝

$$A_I = 6 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1} - 12 \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + 8 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} = 1,456:$$



Նկ. II.7

Այժմ խորանարդն ընդարձակենք x, y, z առանցքներով $-a$ -ից մինչև $+a$: Նոր՝ II խորանարդում I-ը պարունակվում է ամբողջությամբ, (200), (210) և (211) կետերը՝ կիսով չափ, (220), (221) կետերը՝ քառորդով, իսկ (222) կետերը՝ մեկ ութերորդով, հեռակաբար, Մադելունգի հաստատունի համար կստանանք՝

$$A_{II} = 6 \cdot 1 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{1}{2} \left(\frac{6}{\sqrt{4}} - \frac{24}{\sqrt{5}} + \frac{24}{\sqrt{6}} \right) + \\ + \frac{1}{4} \left(\frac{12}{\sqrt{8}} - \frac{24}{\sqrt{9}} \right) + \frac{1}{8} \cdot \frac{8}{\sqrt{12}} = 1,751769:$$

Եթե խորանարդն ընդարձակենք $-3a/2$ -ից մինչև $3a/2$ բոլոր առանցքներով, ապա Մադելունգի հաստատունի համար կստանանք $A_{III} = 1,747039$ արժեքը: Ինչպես հեռևում է այս արդյունքներից, $A_I, A_{II}, A_{III}, \dots$ մեծությունները կազմում են զուգամիտող հաջորդականություն: Ներկայումս NaCl-ի կառուցվածքի համար ընդունված է (վեցերորդ միջի ճշտությամբ) $A = 1,747565$ արժեքը:

Չնայած արագացված զուգամիտությանը, այս մեթոդը կապված է զգալի թվային հաշվարկների հետ, ուստի այն նպաստակահարմար է օգտագործել նոր բյուրեղական կառուցվածքի A հաստատունի նախնական գնահատման համար:

2. Մադելունգի մեթոդ

Բյուրեղը մտովի բաժանվում է էլեկտրաչեզոք ուղիղների և հարթությունների, որոնց ստեղծած պոտենցիալները հեռավորությունից կախված արագ նվազում են: Հեռակաբար, դաշտը սովյալ կետում ստեղծվում է հիմնականում ոչ մեծ թվով ուղիղներով և (կամ) հարթություններով:

Դիտարկենք NaCl-ի տիպի կառուցվածք և այն ներկայացնենք որպես x առանցքին զուգահեռ էլեկտրաչեզոք ուղիղների համախումբ:

Նախ որոշենք $x = na$ կետերում տեղադրված e դրական լիցքերի և $-e/a$ ֆոնի կոդմից ստեղծված դաշտի պոտենցիալը: Այսպիսի համակարգում լիցքի բաշխումը տրվում է

$$\rho(x, y, z) = \delta(y)\delta(z) \left[\sum_n e\delta(x-na) - \frac{e}{a} \right] \equiv \delta(y)\delta(z) \rho(x) \quad (5.1)$$

ֆունկցիայով, որը բավարարում է էլեկտրաչեզոքության պայմանին՝

$$\int \rho(x, y, z) dx dy dz = \int_0^L \left[\sum_n e\delta(x-na) - \frac{e}{a} \right] dx = eN - \frac{e}{a}L = 0, \quad (5.2)$$

որտեղ N -ը սաղրակալան (միաչափ) բջիջների թիվն է, իսկ L -ը՝ ցանցի երկարությունը x ուղղությամբ: Համաձայն (5.1) արտահայտության, լիցքի խտությունը միաչափ սլաքերական ֆունկցիա է, ուստի այն կարելի է ներկայացնել Ֆուրյեի միաչափ շարքի տեսքով, որի ֆուրյե-գործակիցները, համաձայն I.5.11 բանաձևի, սովորում են

$$\rho_g = \frac{1}{a} \int_0^a \rho(x) e^{-igx} dx = \frac{e}{a} (1 - \delta_{g,0}) \quad (5.3)$$

արտահայտությամբ, որտեղ $g = (2\pi/a) \cdot m$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots$: Արդյունքում (5.1) ֆունկցիան կներկայանա

$$\rho(x, y, z) = \delta(y)\delta(z) \frac{e}{a} \sum_{m \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{a} mx} \quad (5.4)$$

շարքի տեսքով: Օգտվելով Պուասոնի հավասարման լուծման ընդհանուր տեսքից և (5.4) արտահայտությունից, պտտենցիալի համար կստանանք՝

$$\varphi(R) = \int \frac{\rho(R')}{|R-R'|} dR' = \frac{e}{a} \sum_{m \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{a} xm} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i \frac{2\pi}{a} m(x'-x)}}{\sqrt{(x'-x)^2 + y^2 + z^2}} dx' : \quad (5.5)$$

Վերջին ինտեգրալն արտահայտվում է Մակ-Դոնալդի գրեկարգի ֆունկցիայի միջոցով, որի ինտեգրալային պատկերացումներից մեկն էլ

$$K_0(p) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipt}}{\sqrt{1+t^2}} dt, \quad p > 0 \quad (5.6)$$

արտահայտությունն է: (5.5) և (5.6) բանաձևերից հետևում է, որ

$$\varphi(R) = \frac{2e}{a} \sum_{m \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{a} xm} K_0\left(\frac{2\pi}{a} |m| r\right), \quad (5.7)$$

որտեղ $r = \sqrt{y^2 + z^2}$ հեռավորությունն է «զարից»: Ինչպես հետևում է (5.7)

բանաձևից և $K_0(p)$ -ի՝ $p \gg 1$ դեպքում ասիմպտոտական վարքից՝

$$K_0(p) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2p}} e^{-p} \left(1 - \frac{1}{8p} + \frac{1}{14p^2} + \dots \right), \quad (5.8)$$

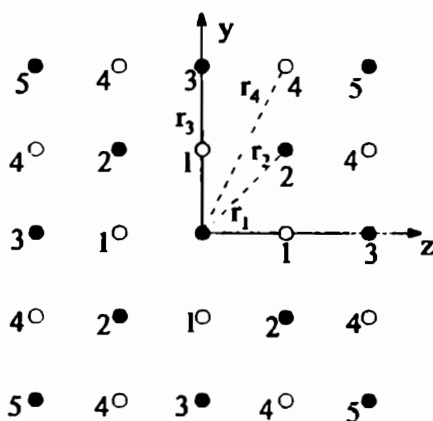
«լարից» հեռանալիս $\varphi(R)$ ֆունկցիան նվազում է էքսպոնենցիալ օրենքով:

Իրարից $a/2$ հեռավորության վրա գտնվող և իրար հաջորդող դրական և բացասական իռններով «լարի» պոտենցիալը հավասար է (5.7) բանաձևով ստացվող երկու շարքերի գումարին, ընդ որում, եթե e լիցքը դրված է $x = 0$ կետում, ապա

$$\begin{aligned} \Phi(x, r) &= \varphi(x, r) + \varphi\left(x + \frac{a}{2}, r\right) \Big|_{e \rightarrow -e} = \\ &= \frac{2e}{a} \sum_{m \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{a} x m} (1 - e^{i\pi m}) K_0\left(\frac{2\pi}{a} |m| r\right): \end{aligned} \quad (5.9)$$

Միավորելով $\pm m$ անդամները և նկատի ունենալով, որ (5.9) արտահայտության մեջ ներդրում են սալիս կենտ m -ով գումարելիները, կստանանք՝

$$\Phi(x, r) = \frac{8e}{a} \sum_{m=0}^{\infty} \cos\left[(2m+1) \frac{2\pi x}{a}\right] K_0\left[\frac{2\pi}{a} (2m+1) r\right]: \quad (5.10)$$



Նկ. II.8

Պոտենցիալը կոորդինատների սկզբնականում շրջապատի ուղիղների և 0 կետը պարունակող ուղղի ստեղծած պոտենցիալների գումարն է (նկ. II.8, x առանցքն ուղղահայաց է գծագրի հարթությանը): «1» ուղղի (կա 4 այդպիսի ուղիղ) պոտենցիալը, համաձայն (5.10) բանաձևի, հավասար է $\Phi(0, r_1)$ ($r_1 = a/2$): «2» ուղղի (կա մույնպես 4 ուղիղ) պոտենցիալը հավասար է $\Phi(a/2, r_2)$, ($r_2 =$

$= a/\sqrt{2}$), քանի որ «2» ուղիղը x առանցքի ուղղությամբ $\xi = a/2$ -ով շեղված է այն ուղղի նկատմամբ, որի համար գրված է (5.10) արտահայտությունը: Նման ձևով ստրվում են «3», «4» և այլ ուղիղների պոտենցիալները: Նպատակահարմար է հաշվարկները ներկայացնել աղյուսակի ձևով (Աղյուսակ II.8): Հաշվումներն էապես կենշառման, եթե (5.10) արտահայտության մեջ ըստ m -ի գումարում պահվի միայն $m = 0$ գումարելին: Այս մոտավորությունը հիմնավորված է, քանի որ անգամ ամենամոտ՝ «1» ուղղի համար $m = 1$ և $m = 0$ գումարելիների հարաբերությունը հավասար է

$$K_0\left(\frac{2\pi}{a} \cdot 3\frac{a}{2}\right) / K_0\left(\frac{2\pi}{a} \cdot \frac{a}{2}\right) = K_0(3\pi) / K_0(\pi) \approx 10^{-3} :$$

Աղյուսակ II.8

Ուղղի համարը	z	ξ	r	Ներդրումը պոտենցիալի մեջ	Ներդրման քվային արժեքը
0	1	0	0	$\frac{4e}{a} \ln 2$	$\frac{4e}{a} \cdot 0,6931$
1	4	0	$\frac{a}{2}$	$\approx 4 \cdot \frac{8e}{a} K_0(\pi)$	$4 \cdot \frac{8e}{a} \cdot 0,03$
2	4	$\frac{a}{2}$	$\frac{a}{\sqrt{2}}$	$\approx -4 \cdot \frac{8e}{a} K_0(\pi\sqrt{2})$	$-4 \cdot \frac{8e}{a} \cdot 0,007$
3	4	$\frac{a}{2}$	a	$\approx -4 \cdot \frac{8e}{a} K_0(2\pi)$	$-4 \cdot \frac{8e}{a} \cdot 0,0009$
4	8	0	$\frac{a\sqrt{5}}{2}$	$\approx 8 \cdot \frac{8e}{a} K_0(\pi\sqrt{5})$	$8 \cdot \frac{8e}{a} \cdot 0,0004$

Կոորդինատների սկզբնականում անցնող «0» ուղղի պոտենցիալը չի կարելի հաշվել (5.10) բանաձևով, քանի որ $y = z = 0$ կետում այն տարամիտում է՝ $K_0(x)_{x \rightarrow 0} \rightarrow -\infty$: Սակայն այդ ուղղի պոտենցիալը կարելի է հաշվել անմիջականորեն՝ (նկ. II.9)

$$\Phi_0(0) = 2 \left(\frac{e}{a/2} - \frac{e}{2 \cdot a/2} + \frac{e}{3 \cdot a/2} - \frac{e}{4 \cdot a/2} + \dots \right) =$$

$$= \frac{4e}{a} \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right) = \frac{4e}{a} \ln 2 :$$
(5.11)

Այս արտահայտության օգնությամբ կարելի է, ի դեպ, գտնել միաչափ իոնային բյուրեղի Մադելունգի հաստատունը՝

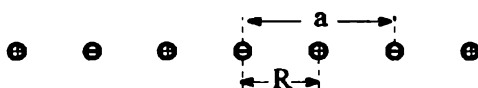
$$-e\Phi_0(0) = -\frac{e^2}{a/2} \cdot 2 \ln 2 \equiv -\frac{e^2}{R} A, \quad A = 2 \ln 2 :$$
(5.12)

Դիտարկվող մոտավորության շրջանակներում 0, 1, 2, 3 և 4 ուղիղների ստեղծած դաշտում $-e$ լիցքի էլեկտրաստատիկ էներգիան հավասար է Աղյուսակ II.8-ի վերջին սյունակում զրված ներդրումների գումարին՝ բազմապատկած $(-e)$ -ով, այսինքն՝

$$u_{el} \equiv -A \frac{e^2}{R} = -e \cdot \frac{8e}{a} (0,3465 + 0,12 - 0,028 - 0,0036 + 0,0032) =$$

$$= -\frac{e^2}{a/2} \cdot 1,7464 :$$
(5.13)

Քանի որ $R = a/2$, ապա (5.13) արտահայտությունից կստանանք Մադելունգի հաստատունի համար հետևյալ արժեքը՝ $A = 1,7464$, որը շատ քիչ է տարբերվում 1,747565 ճշգրիտ արժեքից:



Նկ. II.9

Նշենք մաս, որ հաշվարկների ճշտությունը կարելի է մեծացնել առանց դժվարությունների, հաշվի առնելով մաս ավելի հեռուից ($r > a\sqrt{5}/2$) անցնող ուղիղների ներդրումը 0 կետում պոտենցիալի արտահայտության մեջ:

3. Էվալյուի մեթոդ

Ենթադրվում է, որ դրական կետային լիցքերը տեղադրված են ցանցի հանգույցներում, իսկ բացասական լիցքը բաշխված է համասեռ, այնպես,

որ ցանցի ամեն մի բջիջ էլեկտրաչեզոք է: Քանի որ խոնային բյուրեղները կազմված են դրական և բացասական խոնային ցանցերից, լրիվ պոտենցիալը հաշվելիս ստորաձևով ցանցերի համասեռ բաշխված լիցքերն իրար համակշռում են, և արդյունքում մնում է դրական և բացասական խոնների ստեղծած դաշտը:

Ընտրված մոդելի շրջանակներում լիցքի խտությունը տրվում է հետևյալ պարբերական ֆունկցիայի ձևով՝

$$\rho(R) = \sum_l e \delta(R-l) - \frac{e}{v_0}, \quad (5.14)$$

որտեղ v_0 -ն սարքական բջջի ծավալն է, գումարը ստարվում է ըստ Բրավեի ցանցի հանգույցների: $\rho(R)$ ֆունկցիան կարելի է ներկայացնել Ֆուրյեի շարքի տեսքով, որի գործակիցներն են

$$\rho_g = \frac{1}{v_0} \int \rho(R) e^{-igR} dR = \frac{e}{v_0} (1 - \delta_{g,0}), \quad (5.15)$$

g -ն հակադարձ ցանցի կամայական վեկտոր է: Բյուրեղի պարբերականության հետևանքով ցանցի $\varphi(R)$ պոտենցիալը նույնպես կարելի է ներկայացնել Ֆուրյեի շարքի տեսքով՝

$$\varphi(R) = \sum_g \varphi_g e^{igR}, \quad (5.16)$$

որի φ_g գործակիցները կապված են ρ_g գործակիցների հետ

$$\varphi_g = \frac{4\pi}{g^2} \rho_g \quad (5.17)$$

առնչությամբ, որն անմիջականորեն բխում է Պուասոնի հավասարումից: (5.15)-(5.17) բանաձևերից ստացվում է պոտենցիալի համար հետևյալ արտահայտությունը՝

$$\varphi(R) = \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{g \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{igR}: \quad (5.18)$$

Ստացված շարքը նույնքան վատ է գուգամիատում, որքան և կուլոնյան $1/|R|$ անդամներով շարքը: Իրոք, եթե (5.18) բանաձևում մեծ $|g|$ -երի համար գումարից անցնենք ինտեգրալի, ապա $|g|$ և $|g| + |dg|$ սիմություն վի-

նակների թվի արտահայտության մեջ ծագող g^2 արտադրիչը կկրճատվի հայտարարի g^2 -ու հետ: Արդյունքում g վեկտորի մեծացման հետ $\exp(igR)$ արտադրիչը փոփոխում է նշանը, սակայն նրա մեծությունը չի փոքրանում, հետևաբար՝ շարքը չի զուգամիտում:

Շարքի զուգամիտությունը լավացնելու նպատակով $\delta(R)$ ֆունկցիան փոխարինենք գաուսյան բաշխման ֆունկցիայով՝

$$\delta(R) \rightarrow \varepsilon^3 \pi^{-3/2} \exp(-\varepsilon^2 R^2), \quad (5.19)$$

որտեղ ε պարամետրը որոշում է կորի լայնությունը, իսկ $\varepsilon^3 \pi^{-3/2}$ գործակիցը ապահովում է նորմավորումը: (5.14) բանաձևում կատարենք (5.19) փոխարինումը և գտնենք լիցքի բաշխման «նոր» $\rho^\varepsilon(R)$ ֆունկցիայի ֆուրյե-գործակիցները՝ (տես Հավելված 2)

$$\rho_g^\varepsilon = \frac{e}{v_0} \left(e^{-g^2/4\varepsilon^2} - \delta_{g,0} \right) \quad (5.20)$$

(5.17) և (5.20) բանաձևերի օգնությամբ կստանանք՝

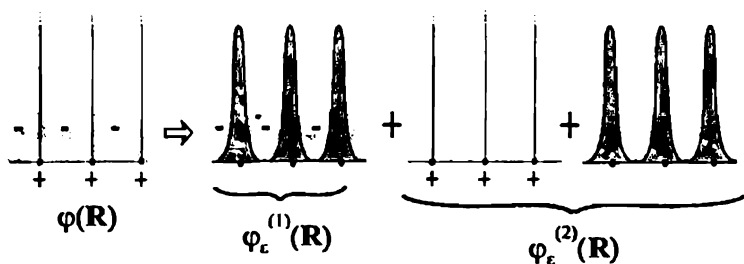
$$\varphi_\varepsilon^{(1)}(R) = \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{g \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{-g^2/4\varepsilon^2 + i g R} : \quad (5.21)$$

Այսպիսով, դրական գաուսյան բաշխումով լիցքի և բացասական համասեռ ֆոնի ստեղծած դաշտի պոտենցիալը, շնորհիվ $\exp(-g^2/4\varepsilon^2)$ արտադրիչի, շատ արագ զուգամիտում է:

Սակայն (5.21) արտահայտությունը չի համապատասխանում իրականությանը, քանի որ անհրաժեշտ է որոշել կետային դրական լիցքերի և բացասական ֆոնի դաշտը: Դրա համար ձևափոխենք (5.21) արտահայտությունը, գումարելով նրան ցանցի հանգույցներում գտնվող դրական կետային լիցքերի և գաուսյան բաշխումով բացասական լիցքերի ստեղծած պոտենցիալը: Վերջինս համակշռում է գաուսյան բաշխումով դրական լիցքերի պոտենցիալը (նկ. II.10):

Որոշենք դրական կետային լիցքերի և գաուսյան բաշխումով բացասական լիցքերի խտության՝

$$\rho_\varepsilon^{(2)}(R) = e \sum_l \delta(R-l) - e \pi^{-3/2} \varepsilon^3 \sum_l e^{-\varepsilon^2 (R-l)^2} \quad (5.22)$$



Նկ. II.10

ստեղծած $\varphi_{\varepsilon}^{(2)}(R)$ պոտենցիալը: Տեղադրելով (5.22) բաշխումը Պուասոնի հավասարման լուծման

$$\varphi_{\varepsilon}^{(2)}(R) = \int \frac{\rho(R')}{|R - R'|} dR' \quad (5.23)$$

արտահայտության մեջ և հաշվելով ի հայտ եկող ինտեգրալները (տես Հավելված 2), կստանանք՝

$$\varphi_{\varepsilon}^{(2)}(R) = \sum_l \frac{1}{|l - R|} \operatorname{erfc}(\varepsilon |l - R|), \quad (5.24)$$

որտեղ

$$\operatorname{erfc} x = 1 - \operatorname{erf} x = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (5.25)$$

արտահայտությունը սխալների լրացուցիչ ֆունկցիան է, իսկ $\operatorname{erf} x$ -ը՝ սխալների ֆունկցիան:

Կազմենք $\varphi_{\varepsilon}^{(1)}$ և $\varphi_{\varepsilon}^{(2)}$ ֆունկցիաների գումարը և գտնենք նրա ածանցյալն ըստ ε պարամետրի: (5.21) և (5.24) բանաձևերից ստացվում է

$$\frac{d\varphi_{\varepsilon}^{(1)}}{d\varepsilon} + \frac{d\varphi_{\varepsilon}^{(2)}}{d\varepsilon} = -\frac{2\pi e}{\varepsilon^3 v_0}$$

արտահայտությունը, որը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\frac{d}{d\varepsilon} \left(\varphi_{\varepsilon}^{(1)} + \varphi_{\varepsilon}^{(2)} - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0} \right) = 0 : \quad (5.26)$$

Այս առնչությունից հետևում է, որ

$$\Phi(R) = \varphi_{\varepsilon}^{(1)}(R) + \varphi_{\varepsilon}^{(2)}(R) - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0} \quad (5.27)$$

մեծությունը կախված չէ ε կամայական պարամետրից, ուստի հենց այս ֆունկցիան էլ ներկայացնում է խնդրի լուծումը:

Այսպիսով, դրական կետային լիցքերի (իոնների) և բացասական համասեռ ֆոնի դաշտի պոտենցիալը՝

$$\Phi^+(R) = \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{g \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{-g^2/4\varepsilon^2 + i g R} + \sum_l \frac{e}{|l-R|} \operatorname{erfc}(\varepsilon|l-R|) - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0} : \quad (5.28)$$

Երբ $\varepsilon \rightarrow \infty$, II և III գումարելիները ձգտում են զրոյի, իսկ $\exp(-g^2/4\varepsilon^2) \rightarrow 1$, և (5.28)-ից ստացվում է (5.18) արտահայտությունը:

Այժմ որոշենք ցանցի պոտենցիալը որևէ խոնի գտնվելու կետում: Այդ կետում դաշտը եզակիություն ունի, որը պայմանավորված է սովյալ խոնի $e/|R|$ պոտենցիալով, ուստի ցանցի մյուս բոլոր խոնների սաեղծած դաշտը $R=0$ կետում կլինի՝

$$\begin{aligned} \Phi^+(0) = \lim_{R \rightarrow 0} \left[\Phi^+(R) - \frac{e}{|R|} \right] &= \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{g \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{-g^2/4\varepsilon^2} + \\ &+ \sum_{l \neq 0} \frac{e}{|l-R|} \operatorname{erfc}(\varepsilon|l-R|) - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0} + e \lim_{R \rightarrow 0} \left[\frac{1}{R} \operatorname{erfc}(\varepsilon R) - \frac{1}{R} \right] : \end{aligned} \quad (5.29)$$

$x \ll 1$ տիրույթում

$$\operatorname{erfc} x \approx 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} x + \frac{2}{3\sqrt{\pi}} x^3 + \dots, \quad (5.30)$$

ուստի

$$\lim_{R \rightarrow 0} \left[\frac{1}{R} \operatorname{erfc}(\varepsilon R) - \frac{1}{R} \right] = -\frac{2\varepsilon}{\sqrt{\pi}} : \quad (5.31)$$

Այսպիսով, ցանցի սեփական պոտենցիալի համար կստանանք հետևյալ վերջնական արտահայտությունը՝

$$\Phi^+(0) = \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{g \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{-g^2/4\varepsilon^2} + \sum_{l \neq 0} \frac{e}{|l|} \operatorname{erfc}(\varepsilon|l|) - \frac{2\varepsilon e}{\sqrt{\pi}} - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0} : \quad (5.32)$$

Ցանկացած իոնային բյուրեղ կազմված է մի քանի պարզ ցանցերից, ուստի էլեկտրաստատիկ պոտենցիալը հավասար կլինի բոլոր պարզ ցանցերի ստեղծած պոտենցիալների գումարին՝

$$\Psi(R) = \sum_{i=1}^s \Phi_i(R - R_i), \quad (5.33)$$

որտեղ s -ը տարրական բջջում իոնների թիվն է: Մեկ տարրական բջջին բաժին ընկնող էլեկտրաստատիկ էներգիան՝

$$u_{el} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^s e_j \Psi(R_j) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^s e_j \Phi_j(0) + \frac{1}{2} \sum_{j=1, j \neq j}^s e_j \Phi_j(R_j - R_j): \quad (5.34)$$

Մասնավորապես, երկու պարզ ցանցերից բաղկացած իոնային բյուրեղների (օրինակ՝ NaCl , CsCl և այլն) դեպքում

$$e_1 = -e_2 = e, \Phi_1(R) \equiv \Phi^+(R), \Phi_2(R) \equiv \Phi^-(R) = \Phi^+(R) \Big|_{\mathbf{e} \rightarrow -\mathbf{e}} = -\Phi^+(R),$$

և (5.34) ընդհանուր արտահայտությունից ստացվում է

$$u_{el} = e \left[\Phi^+(0) - \Phi^-(R_-) \right], \quad (5.35)$$

որտեղ ենթադրվում է, որ դրական իոնը գտնվում է $R_1 = 0$, իսկ բացասական իոնը՝ $R_2 \equiv R_-$ կետում: (5.35) բանաձևում տեղադրելով (5.32) և (5.28) արտահայտությունները և արդյունքը հավասարեցնելով Մադելունգի $-e^2 A/R_0$ էներգիային, կստանանք Մադելունգի հաստատումի արտահայտությունը՝

$$A = \frac{2\varepsilon R_0}{\sqrt{\pi}} - \sum_{l \neq 0} \frac{R_0}{|l - R_-|} \operatorname{erfc}(\varepsilon |l - R_-|) + \sum_{l \neq 0} \frac{R_0}{|l|} \operatorname{erfc}(\varepsilon |l|) - \frac{R_0}{\pi v_0} \sum_{b \neq 0} \frac{1}{b^2} \exp\left(-\frac{\pi^2 b^2}{\varepsilon^2}\right) \left[1 - \exp(2\pi i b R_-) \right], \quad (5.36)$$

որտեղ $b = g/2\pi$, իսկ գումարումները կատարվում են ըստ ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հանգույցների: (5.36) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել ավելի հարմար տեսքով, եթե նշված գումարումները կատարվեն ըստ կոորդինացիոն զնդադրությունների: Եթե նշանակենք N_s -ով ուղիղ ցանցում R_s շառավղով զնդադրտի վրա գտնվող որոշակի նշանով իոնների թիվը ($\mu_s = 1$ դրական, $\mu_s = -1$ բացասական լիցքերի համար), v_s -ով՝ հակադարձ ցան-

ցում b_s շառավղով զնդողորտի վրա գտնվող հանգույցների թիվը, ինչպես նաև $\kappa_s = b \cdot R_-$, ապա կստանանք՝

$$A = \frac{2\varepsilon R_0}{\sqrt{\pi}} - R_0 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{R_s} \mu_s N_s \operatorname{erfc}(\varepsilon R_s) - \frac{R_0}{\pi v_0} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{v_s}{b_s^2} e^{-\pi^2 b_s^2 / \varepsilon^2} (1 - e^{i \cdot 2\pi \kappa_s}) : (5.37)$$

Այժմ պարզենք, թե ինչպես է լավագույն ձևով որոշվում դեռևս կամայական ε պարամետրը: Համաձայն (5.28) արտահայտության, երբ ε -ն աճում է, ուղիղ ցանցով գումարի գույքամիատոքյունն արագանում է, իսկ հակադարձ ցանցով գումարինը՝ դանդաղում: ε -ը նվազեցնիս դիտվում է հակառակ վարքը:

Ֆիզիկական դատողություններից ակնհայտ է, որ $\Phi^+(0)$ մեծությունը կախված չէ ε -ից և բացասական է: Հետևաբար, որքան փոքր է բացարձակ արժեքով (5.32) բանաձևում վերջին երկու անդամների գումարը, այնքան փոքր է անվերջ գումարների ներդրումը: Նշված գումարը նվազագույնն է, եթե

$$\frac{d}{d\varepsilon} \left(\frac{2\varepsilon}{\sqrt{\pi}} + \frac{\pi}{\varepsilon^2 v_0} \right) = 0 \quad \text{կամ} \quad \varepsilon_{\min} = \frac{\pi^{1/2}}{v_0^{1/3}} : \quad (5.38)$$

ε պարամետրը կարելի է ընտրել նաև այլ կերպ. օրինակ՝ այն պայմանից, որ ուղիղ և հակադարձ ցանցերով շարքերում էքսպոնենտները լինեն իրար հավասար՝

$$\exp\left(-\frac{\pi^2}{\varepsilon^2 R_0^2}\right) \sim \exp(-\varepsilon^2 R_0^2) \quad \text{կամ} \quad \varepsilon \approx \frac{\pi^{1/2}}{R_0} : \quad (5.39)$$

Մադելունգի հաստատունի հաշվարկի ընթացքն ուսումնասիրենք NaCl-ի օրինակի վրա: Ինչպես դրական, այնպես էլ բացասական իոնները կազմում են միասականությունացված խորանարդային ցանցեր, որոնք իրար նկատմամբ շեղված են $R_-(R_0, 0, 0)$ վեկտորով: Ուղիղ ցանցը տրվում է (տես I.1.20) $c_1(0, R_0, R_0)$, $c_2(R_0, 0, R_0)$, $c_3(R_0, R_0, 0)$ հիմնական վեկտորներով, իսկ հակադարձ (ծավալակենտրոնացված խորանարդային) ցանցը՝ (տես I.5.49) $b_1(-1/2R_0, 1/2R_0, 1/2R_0)$, $b_2(1/2R_0, -1/2R_0, 1/2R_0)$, $b_3(1/2R_0, 1/2R_0, -1/2R_0)$ հիմնական վեկտորներով: Տարրական բջջի ծավալը՝ $v_0 = 2R_0^3$, $\kappa_s = bR_- = b_x \cdot R_0 = (-n_1 + n_2 + n_3)/2$, հետևաբար (5.37)

արտահայտության վերջին անդամի մեջ ներդրում են տալիս միայն կենտ կոորդինացիոն զնդողորաները, որոնց համար $1 - \exp(2\pi i \kappa_s) = 1 - \exp[i\pi(-n_1 + n_2 + n_3)] = 2$: (5.38) պայմանից ստացվում է ε -ի գնահատականը՝

$$\varepsilon_{\min} = \frac{\pi^{1/2}}{2^{1/3} \cdot R_0} \approx \frac{1,4068}{R_0} : \quad (5.40)$$

Նպասակահարմար է (5.37) արտահայտության մեջ անցնել չափողականություն չունեցող մեծությունների՝

$$\varepsilon \cdot R_0 \rightarrow \varepsilon = 1,4068, \quad R_s/R_0 \rightarrow R_s, \quad b_s R_0 \rightarrow b_s,$$

որից հետո ստանում ենք

$$A = \frac{2\varepsilon}{\sqrt{\pi}} - \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\mu_s N_s}{R_s} \operatorname{erfc}(\varepsilon R_s) - \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\nu_s}{b_s^2} \exp\left(-\frac{\pi^2 b_s^2}{\varepsilon^2}\right) : \quad (5.41)$$

Աղյուսակ II.9

s	Բացասական լիցքեր՝ $\mu_s = -1$					Դրական լիցքեր՝ $\mu_s = +1$				
	n_1	n_2	n_3	R_s	N_s	n_1	n_2	n_3	R_s	N_s
1	± 1	0	0	$1^{1/2}$	6	± 1	± 1	0	$2^{1/2}$	12
2	± 1	± 1	± 1	$3^{1/2}$	8	± 2	0	0	$4^{1/2}$	6
3	± 2	± 1	0	$5^{1/2}$	24	± 2	± 1	± 1	$6^{1/2}$	24
4	± 2	± 2	± 1	$9^{1/2}$	24	± 2	± 2	0	$8^{1/2}$	12
	± 3	0	0	$9^{1/2}$	6					
5	± 3	± 1	± 1	$11^{1/2}$	24	± 3	± 1	0	$10^{1/2}$	24

Քանի որ $R_1 = 0$ կետում գտնվում է դրական իոնը, ապա բացասական իոնների կոորդինատները խորանարդային առանցքներով տրվում են ամբողջ քվերով, որոնց գումարը կենտ է: Որպեսզի հաշվենք $R_s = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^{1/2}$ շառավղով կոորդինացիոն զնդողորանի վրա գտնվող բոլոր կետերը, անհրա-

ժեշտ է գտնել $\pm n_1 \pm n_2 \pm n_3$ ($n_1, n_2, n_3 \geq 0$) թվերի տարբեր զուգորդությունների թիվը: Առյուսակ II.9-ում բերված են առաջին հինգ կոորդինացիոն զնդոլորտների համար (n_1, n_2, n_3), R_s և N_s մեծությունները դրական և բացասական իոնների համար:

Հարկ է նշել, որ $s = 4$, $\mu_s = -1$ դեպքում ըստ ուղիղ ցանցի զումարում 'պետք է վերցնել $N_s = 24 + 6 = 30$: Մինչև անգամ մեծ ճշտությամբ հաշվարկների համար բավական է հաշվի առնել երկու կոորդինացիոն զնդոլորտ հակադարձ տարածության մեջ և երեք-չորս կոորդինացիոն զնդոլորտ՝ ուղիղ ցանցի համար: Արդյունքում Մադելունգի հաստատունի համար ստացվում է $A = 1,7475645946$ արժեքը:

Մադելունգի էներգիայի համար ստացված $u(R_0) = -Ae^2/R_0$ արտահայտությունը կիրառելի է AB տիպի միացությունների համար: Ընդհանուր դեպքում $A_n B_m$ տիպի միացության Մադելունգի էներգիան տրվում է

$$u_{el} = -A(n+m) \cdot \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2R_0} \quad (5.42)$$

բանաձևով, որտեղ Z_1 -ը A ատոմի արժեքականությունն է, Z_2 -ը՝ B ատոմինը: Տարրական բջջի էլեկտրաչեզոքության պայմանից հետևում է $nZ_1 = mZ_2$ առնչությունը:

Մադելունգի հաստատունը կարելի է հաշվել ցանկացած ճշտությամբ, սակայն գործնականում կարելի է սահմանափակվել 10^{-3} -ի ճշտությամբ, քանի որ բյուրեղի լրիվ էներգիայի արտահայտության մեջ ներդրում են տալիս նաև այլ՝ ոչ կուլմյան բնույթի փոխազդեցություններ, որոնք հաշվվում են զգալի փոքր ճշտությամբ, քան Մադելունգի էներգիան, և որոնք փոփոխվում են մի նյութից մյուսին անցնելիս:

§6. Կովալենտ կապի տեսությունը

Վանդերվաալսյան և իոնային կապերի մոտավոր տեսությունները լավագույն ձևով բացատրում են փորձում դիտվող արդյունքները հիմնականում այն պատճառով, որ ատոմներում (մոլեկուլային բյուրեղներ) և իոններում (իոնային բյուրեղներ) էլեկտրոնների փոխադասավորությունը բյուրեղ

առաջանալիս գործնականորեն մնում է անփոփոխ:

Այլ է իրադրությունը կովալենտ բյուրեղներում, որոնց ատոմներում էլեկտրոնների (հիմնականում՝ վալենտական) բաշխումն էապես տարբերվում է ազատ ատոմում էլեկտրոնների բաշխումից: Այս դասի բյուրեղների կապի էներգիան որոշելիս չի կարելի սահմանափակվել թույլ կամ բոլորովին չձևափոխված ատոմների (իոնների) փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիայի հաշվարկով:

Ստորև առաջարկվող կապի տեսության հիմնական նպատակը ոչ թե փորձում դիտվող և տեսության տված արդյունքների համեմատությունն է, այլ որոշակի պայմաններում երկու չեզոք ատոմների միջև կայուն և բավականաչափ ամուր կապի առաջացման բացատրությունը, ինչը հնարավոր է միայն քվանտային տեսության շրջանակներում:

Պարզագույն մոլեկուլի՝ H_2 -ի համար կապի տեսությունը տվել են Վ.Հայտլերը և Ֆ.Լոնդոնը 1927թ.:

Ջրածնի երկու ատոմներից կազմված համակարգի համիլտոնիանը ներկայացնենք (տես §2)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (6.1)$$

տեսքով, որտեղ $\hat{H}_0$ -ն չփոխազդող ատոմների համակարգի համիլտոնիանն է, որի սեփական էներգիան է

$$E_1^{(0)} = 2\varepsilon_1^{(0)}, \quad (6.2)$$

իսկ ալիքային ֆունկցիան՝

$$\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) : \quad (6.3)$$

(6.2) և (6.3) արտահայտությունները նկարագրում են համակարգի հիմնական վիճակը: $\varepsilon_1^{(0)}$ -ն ջրածնի ատոմի հիմնական վիճակի էներգիան է,

$\psi_a(r_1)$ -ը՝ ալիքային ֆունկցիան: $\hat{H}'$ անդամը նկարագրում է ջրածնի երկու ատոմների փոխազդեցությունը և տրվում է (2.2) բանաձևով: Հետագա հաշվարկներում ենթադրվում է, որ այդ փոխազդեցությունը թույլ է, և կարելի է օգտվել զրգոումների տեսության մեթոդներից: Այս ենթադրությունն ակնհայտորեն խախտվում է, երբ ջրածնի ատոմների միջև հեռավորությունը դառնում է Բորի շառավղի ($a_0 = \hbar^2 / me^2 \approx 0,53 \text{ \AA}$) կարգի և ավելի փոքր՝

$R \leq a_0$, ուստի ստացվող արդյունքներն ունեն հիմնականում որակական արժեք:

Երկու փոխազդող ատոմներից բաղկացած համակարգի էներգիան գրգռումների տեսության առաջին մոտավորությամբ կարելի է ներկայացնել

$$E = 2\varepsilon_1^{(0)} + W \quad (6.4)$$

տեսքով, որտեղ փոխազդեցության W էներգիան որոշվում է որպես $\hat{H}'$ օպերատորի միջին արժեք՝ ըստ հիմնական վիճակի ալիքային ֆունկցիայի՝

$$W = \int \psi_0^*(r_1, r_2) \hat{H}' \psi_0(r_1, r_2) dr_1 dr_2 : \quad (6.5)$$

$E_1^{(0)}$ էներգիայով հիմնական վիճակը կրկնակի այլասերված է, քանի որ կան այդ նույն էներգիայով երկու տարբեր վիճակներ, որոնք նկարագրվում են $\psi_a(r_1)\psi_b(r_2)$ և $\psi_a(r_2)\psi_b(r_1)$ ալիքային ֆունկցիաներով: Շրեդինգերի հավասարման զծայնության հետևանքով այդ ալիքային ֆունկցիաների

$$\psi_0(r_1, r_2) = \alpha \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \beta \psi_a(r_2)\psi_b(r_1) \quad (6.6)$$

զծային համակցությունը, որտեղ α -ն և β -ն հաստատուն գործակիցներ են, նույնպես բավարարում է Շրեդինգերի հավասարմանը:

Համաձայն տարրական մասնիկների նույնականության սկզբունքի, էլեկտրոնների փոխատեղությունը՝ $r_1 \leftrightarrow r_2$, չի կարող ազդել հավանականության խտության վրա, այսինքն՝

$$|\psi_0(r_1, r_2)|^2 = |\psi_0(r_2, r_1)|^2, \quad (6.7)$$

որտեղից էլ հետևում է $\alpha = \pm\beta$ առնչությունը: Այսպիսով, համաձայն (6.6) և (6.7) արտահայտությունների, հիմնական վիճակի ալիքային ֆունկցիան կարելի է ընտրել երկու ձևով՝

$$\psi_S(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_2)\psi_b(r_1), \quad (6.8)$$

որը համաչափ է՝

$$\psi_S(r_1, r_2) = \psi_S(r_2, r_1) \quad (6.9)$$

և

$$\psi_{AS}(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1), \quad (6.10)$$

որը հակահամաչափ է՝

$$\psi_{AS}(r_1, r_2) = -\psi_{AS}(r_2, r_1) : \quad (6.11)$$

Հարկ է նշել, որ (6.8) և (6.10) արտահայտությունները գրված են նորմավորման հաստատունի ճշտությամբ:

Երկու էլեկստրոններից կազմված համակարգի երկու սպինային վիճակներին համապատասխանում են հետևյալ սպինային ալիքային ֆունկցիաները.

ա) սինգլետ վիճակ. համակարգի լրիվ սպինը՝ $\sigma_1 + \sigma_2 = 0$,

$$\chi_{AS}(\sigma_1, \sigma_2) = \chi_{AS}(\sigma_2, \sigma_1), \quad (6.12)$$

բ) տրիպլետ վիճակ. համակարգի լրիվ սպինը՝ $|\sigma_1 + \sigma_2| = 2|\sigma_1| = 1$,

$$\chi_S(\sigma_1, \sigma_2) = \chi_S(\sigma_2, \sigma_1): \quad (6.13)$$

Համակարգի $\Phi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2)$ լրիվ ալիքային ֆունկցիան պետք է ընտրել այնպես, որ այն բավարարի Պաուլիի սկզբունքից հետևող հակահամաչափության հատկությանը՝

$$\Phi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2) = -\Phi(r_2, \sigma_2; r_1, \sigma_1): \quad (6.14)$$

Քանի որ $\hat{H}_0$ համիլտոնիանը կախված չէ սպինից, ապա լրիվ ալիքային ֆունկցիան կներկայացվի սպինային և կոորդինատական ալիքային ֆունկցիաների արտադրյալի տեսքով, ընդ որում, սինգլետ վիճակին համապատասխանում է համաչափ, իսկ տրիպլետ վիճակին՝ հակահամաչափ կոորդինատական ֆունկցիան:

Այսպիսով, փոխազդեցության էներգիայի հաշվարկներում սպինային ֆունկցիաներն ռոդակլիտորեն չեն մասնակցում, սակայն նրանք պարտադրում են (ըստ համաչափության պահանջների) տարբեր սպինային վիճակներին համապատասխան կոորդինատական ֆունկցիաների ընտրություն, որի հետևանքով փոխազդեցության էներգիան սինգլետ և տրիպլետ վիճակներում, միջատմական R հեռավորությունից կախված, փոխվում է տարբեր օրենքներով:

Անցնենք փոխազդեցության էներգիայի հաշվարկին, օգտագործելով նորմավորված ալիքային ֆունկցիաները՝

$$\psi_S(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}} [\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)] . \quad (6.15)$$

$$\psi_{AS}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1-S^2)}} [\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)] , \quad (6.16)$$

որտեղ

$$\begin{aligned} \psi_a(r_1) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \cdot \exp\left(-\frac{r_1}{a_0}\right), \\ \psi_a(r_2) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \cdot \exp\left(-\frac{r_{2a}}{a_0}\right), \\ \psi_b(r_2) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \cdot \exp\left(-\frac{r_2}{a_0}\right), \\ \psi_b(r_1) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \cdot \exp\left(-\frac{r_{1b}}{a_0}\right), \end{aligned} \quad (6.17)$$

իսկ

$$S = \int \psi_a(r_1) \cdot \psi_b(r_1) dr_1 \quad (6.18)$$

մեծությամբ «ծածկման» ինտեգրալն է: Ինչպես երևում է նկ. II.4-ից, (6.17) բանաձևերում առկա $r_{2a} \equiv |r_{2a}|$ և $r_{1b} \equiv |r_{1b}|$ մեծություններն արտահայտվում են r_1, r_2 փոփոխականների և R պարամետրի միջոցով՝

$$r_{2a} = r_2 + R, \quad r_{1b} = r_1 - R : \quad (6.19)$$

Սինգլետ վիճակում համակարգի էներգիան՝

$$E_s = 2\varepsilon_1^{(0)} + W_s, \quad (6.20)$$

որտեղ, համաձայն (6.5) բանաձևի՝

$$\begin{aligned} W_s &= \int \psi_s(r_1, r_2) \hat{H}' \psi_s(r_1, r_2) dr_1 dr_2 = \\ &= \frac{1}{2(1+S^2)} \int \{ \psi_a^2(r_1) H' \psi_b^2(r_2) + \psi_a^2(r_2) H' \psi_b^2(r_1) + \\ &+ \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) H' \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) + \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) H' \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) \} dr_1 dr_2 : \end{aligned} \quad (6.21)$$

(6.21) արտահայտության II և IV գումարելիներում կատարելով ինտեգրման փոփոխականների վերանշանակում՝ $r_1 \rightarrow -r_2, r_2 \rightarrow -r_1$, կստանանք՝

$$W_S = \frac{1}{1+S^2} \int \{ \psi_a^2(r_1) H' \psi_b^2(r_2) + \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) H' \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) \} dr_1 dr_2 \equiv \frac{Q+A}{1+S^2}. \quad (6.22)$$

Նույն ձևով տրիպլետ վիճակում փոխազդեցության էներգիայի համար ստացվում է

$$W_{AS} = \frac{Q-A}{1-S^2} \quad (6.23)$$

արտահայտությունը: (6.22) և (6.23) բանաձևերում Q -ով նշանակված է հետևյալ ինտեգրալը՝ (տես նաև (2.2) արտահայտությունը)

$$\begin{aligned} Q &= \int \psi_a^2(r_1) H' \psi_b^2(r_2) dr_1 dr_2 = \\ &= \int \psi_a^2(r_1) \left(\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \right) \psi_b^2(r_2) dr_1 dr_2 = \\ &= \frac{e^2}{R} + \int \psi_a^2(r_1) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_b^2(r_2) dr_1 dr_2 - \int \psi_a^2(r_1) \frac{e^2}{r_{1b}} dr_1 - \int \psi_b^2(r_2) \frac{e^2}{r_{2a}} dr_2: \end{aligned} \quad (6.24)$$

I գումարելին a և b միջուկների փոխազդեցության կուլոնյան էներգիան է, II գումարելին՝ երկու էլեկտրոնների, III գումարելին՝ b միջուկի և I-ին էլեկտրոնի (որը ստեղծում է լիցքի $\rho_a(r_1) = -e\psi_a^2(r_1)$ խտություն) և IV գումարելին՝ a միջուկի և 2-րդ էլեկտրոնի ($\rho_b(r_2) = -e\psi_b^2(r_2)$) փոխազդեցության կուլոնյան էներգիաները: Ակնհայտ է, որ III և IV գումարելիներն իրար հավասար են: (6.24) արտահայտությամբ որոշվող Q ինտեգրալը կրում է «կուլոնյան փոխազդեցության ինտեգրալ» անվանումը և ունի դասական իմաստ: Տեղադրելով (6.24) ինտեգրալում (6.17) բանաձևերով տրվող ալիքային ֆունկցիաները և հաշվելով ինտեգրալները, Q մեծության համար կստանանք՝

$$Q = \frac{e^2}{R} \exp\left(-\frac{2R}{a_0}\right) \left[1 + \frac{5}{8} \frac{R}{a_0} - \frac{3}{4} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{R}{a_0}\right)^3 \right] \quad (6.25)$$

արտահայտությունը:

(6.22) և (6.23) բանաձևերում A -ով նշանակված է այսպես կոչված փոխանակային ինտեգրալ՝

$$\begin{aligned} A &= \int \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) H' \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) dr_1 dr_2 = \\ &= \int \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) \left(\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \right) \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) dr_1 dr_2 = \\ &= \frac{e^2}{R} S^2 + \int \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) dr_1 dr_2 - \\ &- S \int \psi_a(r_1) \frac{e^2}{r_{1b}} \psi_b(r_1) dr_1 - S \int \psi_b(r_2) \frac{e^2}{r_{2a}} \psi_a(r_2) dr_2 : \end{aligned} \quad (6.26)$$

(6.26) արտահայտության III և IV գումարելիները հավասար են:

Փոխանակային էներգիան համապատասխանում է էլեկտրոնների և միջուկների միջև գործող կալոնյան փոխազդեցության այն մասին, որը պայմանավորված է էլեկտրոնների շարժումների միջև ծագող փոխադարձ կոռելյացիայով, ինչը հետևանք է Պաուլիի սկզբունքից բխող քվանտային փոխազդեցության:

Փոխանակային էներգիայի հաշվարկը կապված է զգալի դժվարությոնների հետ: Արդյունքում ստացվում է հետևյալ արտահայտությունը՝

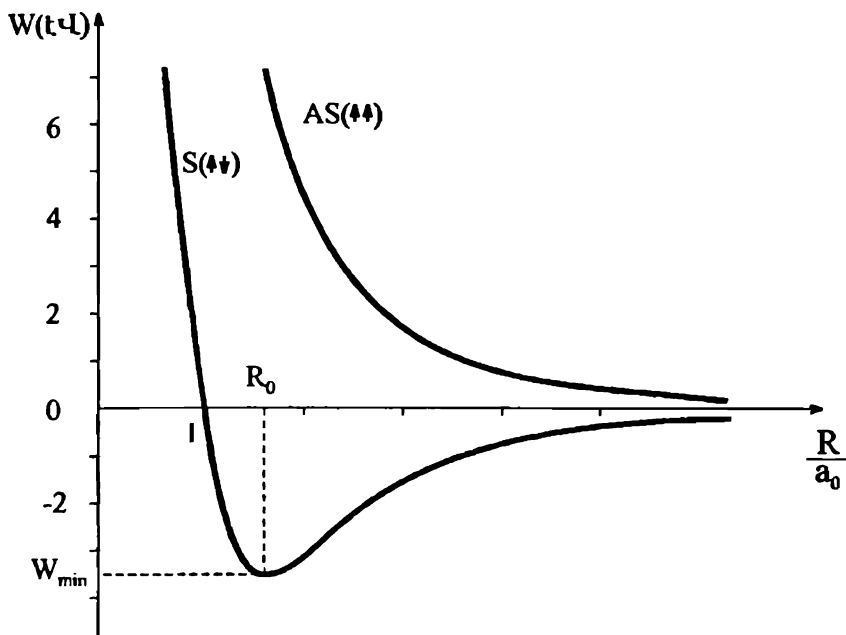
$$\begin{aligned} A &= \frac{e^2}{R} \left\{ S^2 \left[1 + \frac{6}{5} \left(C + \ln \frac{R}{a_0} \right) \right] - \frac{R}{a_0} \exp \left(-\frac{2R}{a_0} \right) \left[\frac{11}{8} + \frac{103}{20} \frac{R}{a_0} + \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{49}{15} \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 + \frac{11}{15} \left(\frac{R}{a_0} \right)^3 \right] - \frac{6M}{5} \left[M \operatorname{Ei} \left(\frac{4R}{a_0} \right) - 2S \operatorname{Ei} \left(\frac{2R}{a_0} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6.27)$$

որտեղ

$$S = \exp \left(-\frac{R}{a_0} \right) \left[1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 \right], \quad M = S(R \rightarrow -R), \quad (6.28)$$

$C = 0,57722$ էյլերի հաստատունն է, իսկ

$$\operatorname{Ei}(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-\xi}}{\xi} d\xi \quad (6.29)$$



Նկ. II.11

ֆունկցիան ինտեգրալային էքսպոնենտն է:

Նկ. II.11-ում պատկերված է ջրածնի երկու ատոմների փոխազդեցության էներգիայի կախումը R հեռավորությունից սինգլետ (S) և տրիպլետ (AS) վիճակների համար:

Սինգլետ ($\uparrow\downarrow$) վիճակում փոխազդեցության էներգիան $R_0 = 1,51a_0 \approx 0,8\text{\AA}$ կետում ունի նվազագույն արժեք՝ $W_{\min} = -3,2\text{ էվ}$ և հեռավորության հետագա փոքրացմանը զուգընթաց կտրուկ աճում է:

Տրիպլետ ($\uparrow\uparrow$) վիճակում փոխազդեցության էներգիան R հեռավորությունը փոքրացնելիս աճում է մոնոտոն, ինչը համապատասխանում է ատոմների միջև գործող վանդերվալսկան ուժերին: Փորձում ջրածնի մոլեկուլի կապի էներգիայի ($|W_{\min}|$) և հավասարակշռական R_0 հեռավորության համար ստացված են հետևյալ արժեքները՝ $|W_{\min}|_{\text{ex}} \approx 4,5\text{ էվ}$, $R_0^{\text{ex}} \approx 0,74\text{\AA}$:

Տեսության ոչ բավարար համընկնումը փորձի հետ հասկանալի է, քանի որ գրգռումների տեսությունը կիրառելի է $R \gg R_0$, բայց ոչ $R \leq R_0$ հեռավորությունների դեպքում, սակայն այն որակապես ճիշտ է նկարագրում ջրածնի երկու ատոմների միջև փոխազդեցության առանձնահատկությունները:

Կովալենտ կապի էներգիայի արժեքները մի քանի ատոմների զույգերի համար բերված են Աղյուսակ II.10-ում:

Աղյուսակ II.10

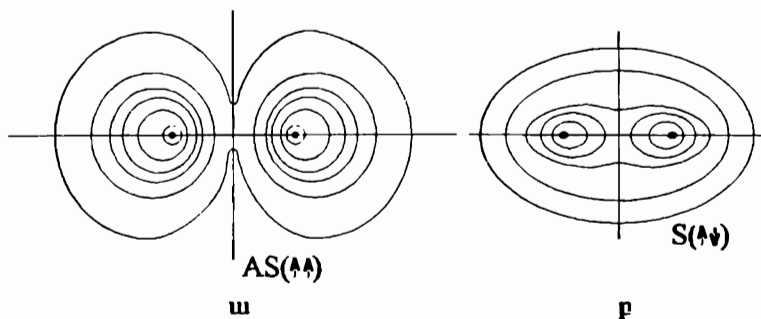
Զույգեր	Կապի էներգիա, էՎ
H-H	4,5
C-C	3,6
Si-Si	1,8
Ge-Ge	1,6
P-P	2,2
O-O	1,4
Te-Te	1,4
Cl-Cl	2,5

Այսպիսով, կապի առաջացումը ջրածնի ատոմների միջև սինգլետ վիճակում և նրանց փոխադարձ վանումը տրիպլետ վիճակում պայմանավորված է այդ վիճակներում էլեկտրոնների շարժման կոռելյացիայի տարբեր բնույթով: Նշված կոռելյացիան հետևանք է էլեկտրոնների սպինների փոխադարձ դիրքորոշման և պայմանավորված չէ էլեկտրոնների մագնիսական մոմենտների փոխազդեցությամբ, որը $\mu_B^2/R_0^3 \sim 10^{-4}$ էՎ կարգի մեծություն է:

Սինգլետ և տրիպլետ վիճակներում փոխազդեցության բնույթի տարբերությունը կարելի է հասկանալ, ուսումնա-

սիրելով համապատասխան կոօրդինատական ֆունկցիաների վարքը (նկ. II.12): Տրիպլետ վիճակին համապատասխանող (6.16) $\psi_{AS}(r_1, r_2)$ ֆունկցիան ունի հանգույց միջուկները միացնող ուղղին ուղղահայաց և այն կիսող հարթության մեջ՝ $\psi_{AS}(r_1, r_2) = 0$ կամ $\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) = \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)$: Ընդհակառակը, սինգլետ վիճակի $\psi_S(r_1, r_2)$ ֆունկցիան այդ հարթության մեջ ունի առավելագույն արժեք, հետևաբար, էլեկտրոնների՝ միջուկների միջև գտնվելու հավանականությունը մեծ է: Էլեկտրոնների և միջուկների միջև գործող ձգողական ուժերն էլ հենց բերում են կապված վիճակի առաջացման: Նկարում պատկերված են միևնույն էլեկտրոնային խտության գծերը: (ա) դեպքում լիցքի խտությունը ատոմների միջև ունի նվազագույն արժեք, բացասական լիցքը հիմնականում տեղայնացված է առանձին միջուկների

մոտ: (բ) դեպքում էլեկտրոնային ամպերը միանում են իրար և ստեղծում մի միասնական էլեկտրոնային ամպ, որը «պարտություն է» երկու միջուկները:



Նկ. II.12

Կապի առաջացումը կարելի է հեշտությամբ հասկանալ մասնաճառային առարկայի առարկայի օգնությամբ: Իրոք, եթե էլեկտրոնը գտնվում է մի միջուկի մոտ, և նրա կոորդինատի անորոշությունը ատոմի չափերի կարգի է, ապա նրա իմպուլսի անորոշությունը կլինի $\Delta p \sim \hbar/a$, իսկ էներգիայի անորոշությունը՝ $\Delta \varepsilon \sim \hbar^2/ma^2$ կարգի: Եթե էլեկտրոնը կարողանա գտնվել երկու միջուկների մոտ, ապա նրա կոորդինատի անորոշությունը՝ $b > a$, հետևաբար $\Delta p' \sim \hbar/b < \hbar/a$ և $\Delta \varepsilon' \sim \hbar^2/mb^2 < \Delta \varepsilon$, այսինքն՝ էլեկտրոնի կլինելի էներգիան կնվազի: Եթե այդ նվազումը գերազանցում է վանդերվալային պայմանավորված էներգիայի աճը, ապա արդյունքում կստացվի ձգողություն:

Կովալենտ կապի կարևոր հատկությունն է նրա հագեցվածությունը, այսինքն՝ տվյալ կապի մեջ կարող է մասնակցել միայն երկու էլեկտրոն: Այսպես, օրինակ, եթե ջրածնի մոլեկուլին մոտեցվում է ջրածնի երրորդ ատոմը, ապա փոխազդեցության էներգիան փոփոխվում է միայն դասական կոլոնյան էներգիայի հաշվին, իսկ փոխաձայնային փոխազդեցություն չի առաջանում, հետևաբար, ջրածնի երրորդ ատոմը կվանվի մոլեկուլից:

Կովալենտ կապի մյուս կարևոր հատկությունը նրա տարածական ուղղորդվածությունն է: Սա հետևանք է այն բանի, որ արժեքական էլեկտրոնների ստեղծած արդյունաբար էլեկտրոնային ամպն ընդհանուր դեպ-

քում օժտված չէ գնդային համաչափությամբ, այլ ձգված է որոշակի ուղ-
ղություններով: Մյուս կողմից, կապի առաջացման համար անհրաժեշտ է
փոխազդող ատոմների էլեկտրոնային ամպերի վերադրում, որի հետևան-
քով էլ կապվող ատոմները կողմնորոշված են միմյանց նկատմամբ որոշա-
կի ձևով:

Կովալենտ կապի տարածական ուղղորդվածությունը խոչընդոտում է
ատոմների՝ իրար նկատմամբ տեղափոխությանը (սահքին), որի հետևան-
քով կովալենտ բյուրեղները կոշտ են, ռմեն մեծ ամրություն, բայց միաժա-
մանակ և փխրուն են:

Միջատոմական հեռավորության մեծացման հետ կովալենտ փոխազ-
դեցության ուժերը նվազում են էքսպոնենտական օրենքով (տես (6.25),
(6.27)-(6.29) բանաձևերը):

§7. Մետաղական կապի տեսությունը

Մետաղական կապն իր բնությամբ շատ ավելի բարդ է, քան կապի մյուս
տեսակները: Պարզեք, թե ինչպես է այն առաջանում:

Իդալից մեծ՝ $R \gg a_0$ հեռավորությունների վրա գտնվող ատոմների
միջև գործում են վանդերվաալսյան ձգողականության ուժեր, որոնց ազդե-
ցության տակ ատոմներն իրար են մոտենում: Երբ $R \geq a_0$, ատոմների
էլեկտրոնային թաղանթները սկսում են վերադրվել: Պատվիի սկզբունքի հա-
մաձայն, որոշ էլեկտրոններ ստիպված անցնում են մեծ էներգիաներով վի-
ճակների, ընդ որում ատոմի մեջ համեմատաբար թույլ կապված արժեքա-
կան էլեկտրոնները «պոկվում» են ատոմից, և առաջանում են ազատ էլեկտ-
րոններ և դրական իոններ: Իմացման հետևանքով զգալիորեն մեծանում է
պոկված էլեկտրոնի կոորդինատի անորոշությունը և, անորոշությունների
առնչության համաձայն, զգալիորեն փոքրանում է նրա իմպուլսն ու էներ-
գիան: Արդյունքում ատոմներից պոկված և ընդհանրացված էլեկտրոնների
միջին էներգիան, հետևաբար և բոլոր էլեկտրոններից և իոններից կազմված
համակարգի լրիվ էներգիան փոքրանում է չեզոք ատոմներից կազմված
համակարգի էներգիայի համեմատությամբ, ինչն էլ, ի վերջո, բերում է մե-
տաղական կապի առաջացման:

Մետաղական կապի առաջացումը որակապես կարելի է բացատրել պարզագույն մոդելի շրջանակներում, որի համաձայն մետաղն իրենից ներկայացնում է դրական կետային խոռոչներից կազմված տարածական ցանց, որը «գտնվում» է էլեկտրոնային գազում:

Համակարգի լրիվ էներգիան բաղկացած է երկու հիմնական մասից՝ էլեկտրոնների և խոռոչների կուլոնյան փոխազդեցության էներգիայից և էլեկտրոնների շարժման կինետիկական էներգիայից, որը $T = 0\text{K}$ ջերմաստիճանում բացառապես պայմանավորված է Պաուլիի սկզբունքով:

Էլեկտրոնների և խոռոչների կուլոնյան (էլեկտրաստատիկ) փոխազդեցության էներգիան կարելի է ներկայացնել

$$E_{el} = -A^* \frac{z^2 e^2}{R} N \quad (7.1)$$

արտահայտությամբ, որտեղ z -ը խոռոչի արժեքականությունն է, R -ը՝ երկու մոտակա խոռոչների միջև հեռավորությունը, N -ը՝ խոռոչների թիվը, իսկ A^* գործակիցը Մադելունգի հաստատունի նմանակն է:

Վիճակագրական ֆիզիկայից հայտնի է, որ էլեկտրոնային գազի միջին կինետիկական էներգիան $T = 0\text{K}$ -ում տրվում է

$$E_{kin} = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N_e}{V} \right)^{2/3} \cdot N_e \quad (7.2)$$

բանաձևով, որտեղ N_e -ն էլեկտրոնների թիվն է, իսկ V -ն՝ համակարգի (մետաղի) ծավալը: Մետաղի էլեկտրաչեզոքության պայմանից հետևում է, որ $N_e = zN$:

Եթե տարրական բջիջը պարունակում է մեկ խոռոչ, ապա նրան բաժին ընկնող լրիվ էներգիան՝

$$u(R) = \frac{1}{N} (E_{el} + E_{kin}) = -A^* \frac{z^2 e^2}{R} + \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2 z^{5/3}}{2m} n^{2/3}, \quad (7.3)$$

որտեղ n -ը խոռոչների խտությունն է: Խոռոչների խտությունը և մոտակա խոռոչների միջև R հեռավորությունը կապված են

$$n = \beta R^{-3} \quad (7.4)$$

առնչությամբ, իսկ β թվային գործակցի արժեքը կախված է տարրական բջջի երկրաչափությունից: Որպես տարրական բջիջ ընտրենք Վիգներ-

Ձեյտցի բջիջը, որն, իր հերթին, մոտարկենք $R/2$ շառավիղ ունեցող գնդով: Եթե (7.4) առնչությունը ներկայացնենք

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{V/N} = \frac{6}{\pi} R^{-3} \quad (7.5)$$

տեսքով, ապա β գործակցի համար կստանանք հետևյալ արժեքը

$$\beta = 6/\pi : \quad (7.6)$$

Այս մոտավորության շրջանակներում մեծ ճշտությամբ կարելի է ծավալակենտրոնացված, նիստակենտրոնացված խորանարդային, ինչպես նաև խիտ դարավածքով հեքսագոնալ կառուցվածքների համար (7.1) բանաձևում ընդունել $A^* = 1,8$:

(7.2), (7.4) և (7.6) արտահայտությունների միջոցով $u(R)$ էներգիան կարելի է ներկայացնել

$$u(R) = -\frac{a}{R} + \frac{b}{R^2} \quad (7.7)$$

տեսքով, որտեղ

$$a = A^* z^2 e^2, \quad b = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2 z^{5/3}}{2m} \beta^{2/3} : \quad (7.8)$$

(7.7) արտահայտության II գումարելին վանդական ուժերի ներդրումն է:

$u(R)$ էներգիան ունի նվազագույն արժեք հավասարակշռական R_0 հեռավորության համար, որը որոշվում է

$$\left(\frac{du}{dR} \right)_{R=R_0} = 0 \quad (7.9)$$

պայմանից և արտահայտվում է a և b հաստատունների միջոցով՝

$$R_0 = \frac{2b}{a} = \frac{3(18\pi)^{2/3}}{5A^* z^{1/3}} a_0 \simeq \frac{2,6}{z^{1/3}} \text{ \AA} , \quad (7.10)$$

որը ցանցի հաստատունի կարգի է: Մեկ բջջին բաժին ընկնող հավասարակշռական էներգիայի համար (7.7) և (7.10) արտահայտություններից կստանանք՝

$$u_0 \equiv u(R_0) = -\frac{a^2}{4b} = -\frac{5A^{*2} z^{7/2}}{(18\pi)^{2/3}} Ry , \quad (7.11)$$

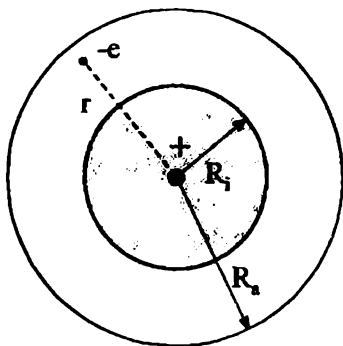
որտեղ $Ry = me^4 / 2\hbar^2 \approx 13,6$ էվ: Երբ $z = 1$, $u_0 \approx -5$ էվ:

(7.7), (7.9)-(7.11) բանաձևերի օգնությամբ (3.12) սահմանումից կարելի է ստանալ սեղմման առաձգական մոդուլի արտահայտությունը՝

$$B_0 = v \frac{d^2 u(R)}{dv^2} = v \cdot \frac{d^2 u(R)}{dR^2} \left(\frac{dR}{dv} \right)^2 = \frac{2 |u_0|}{9 v_0} = \frac{a^5}{24\pi b^4}, \quad (7.12)$$

որտեղ v_0 -ն տարրական բջջի ծավալն է հավասարակշռական վիճակում և ըստ (5.5) բանաձևի, հավասար է $\pi R_0^3/6$: Թվային գնահատումների համաձայն, $B_0 \approx 10^{11}$ դին/սմ², որը, ինչպես և R_0 և u_0 մեծությունների համար ստացված արժեքները, բավական մոտ է փորձում դիտվող արժեքներին:

Քննարկված մոդելն ունի բացահայտ որակական բերություն, քանի որ հավասարակշռական R_0 հեռավորությունը կախված չէ կոնկրետ մետաղի բնութագրերից: Համաձայն (7.10) բանաձևի, այն նույն արժեքն ունի միևնույն արժեքականությամբ բոլոր մետաղների համար: Այս բերությունը հետևանք է կետային խոնների մոտավորության և բերում է երկու հիմնական գործոնների անտեսման:



Նկ. II.13

Առաջին, քանի որ խոններն ունեն վերջավոր ծավալ, ապա իրական էլեկտրոնային խտությունը՝

$$n_e = \frac{N_e}{V - V_i} = \frac{N_e}{V - v_i N} = \frac{n_{e0}}{1 - v_i/v_0} = \frac{n_{e0}}{1 - (R_i/R_a)^3} > n_{e0}, \quad (7.13)$$

որտեղ R_i -ն խոնի շառավիղն է, n_{e0} -ն՝ տեսության մեջ օգտագործված էլեկտրոնային խտությունը ($R_i = 0$ դեպք), $R_a = R/2$: $n_e > n_{e0}$ անհավասարությունը բերում է էլեկտրոնների կինետիկական էներգիայի մեծացման և ցանցի հաստատունի աճին: (7.13) առնչության համաձայն, n_e իրական էլեկտրոնային խտությունը կախված է նյութի տեսակից խոնի շառավիղի միջոցով:

Երկրորդ, խոնների վերջավոր չափերի պատճառով էլեկտրոնները չեն

կարող թափանցել իոնների կողմից զբաղեցված տիրույթները, ուստի միջին հաշվով ավելի հեռու կգտնվեն իոնի կենտրոնից, քան կետային իոնի դեպքում, որն էլ կբերի կուլոնյան էներգիայի բացարձակ արժեքի փոքրացման: Իրոք, եթե էլեկտրոնը գտնվում է $R_i < R_o$, շառավիղներով զնդերի միջև (նկ. II.13), ապա կուլոնյան փոխազդեցության էներգիայի մեծության միջինը՝

$$\bar{\varepsilon} \equiv \left(\frac{e^2}{r} \right)_{av} = \frac{e^2 \int_{R_i}^{R_o} \frac{1}{r} \cdot 4\pi r^2 dr}{4\pi(R_o^3 - R_i^3)/3} = \frac{3e^2}{2R_o} \left[1 + \frac{(R_i/R_o)^2}{1 + R_i/R_o} \right]^{-1} : \quad (7.14)$$

Համաձայն այս զնախատականի

$$\bar{\varepsilon}(R_i = 0) > \bar{\varepsilon}(R_i \neq 0) : \quad (7.15)$$

Այսպիսով, նշված երկու գործոններն էլ իոնի շառավղի մեծացմանը գույզընթաց բերում են ցանցի հաստատունի մեծացման, ինչն, իրոք համապատասխանում է փորձում դիտվող արդյունքներին:

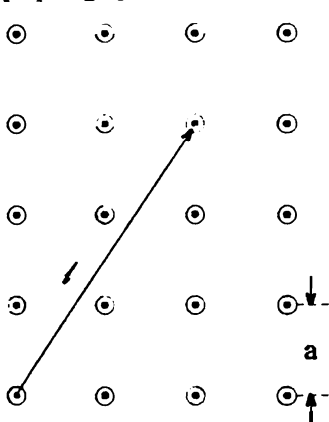
Իրականում մետաղի կապի էներգիայի մեջ վերը նշված երկու հիմնական ներդրումներից բացի, զգալի ներդրումներ են տալիս նաև մի շարք այլ փոխազդեցություններ (փոխանակային, կոռելյացիոն և այլն): Մասնավորապես, ցանցի փոքր հաստատուններ ունեցող բյուրեղներում, օրինակ՝ ազնիվ մետաղներում (Cu, Ag, Au), ինչպես նաև անցումային մետաղներում (Mo, W, Re), էական դեր է խաղում իոնների չլրացված ներքին թաղանթների էլեկտրոնների միջև փոխազդեցությունը, որն իր բնույթով մոտ է կովալենտականին (տես Աղյուսակ II.4): Մյուս կողմից, առաջին խմբի մետաղների մոտ, որոնք ունեն ցանցի համեմատաբար մեծ հաստատուններ, նշված փոխազդեցությունը գործնականորեն բացակայում է:

Մետաղական կապն ապահովող էլեկտրաստատիկ ուժերի բնույթով է պայմանավորված մետաղների առաձգական և պլաստիկ հատկությունները: Քանի որ էլեկտրաստատիկ ուժերն ուղղորդված չեն, ապա իոնները կարող են համեմատաբար հեշտությամբ մի տեղից մյուսը տեղափոխվել, եթե դրան չեն խոչընդոտում իոնի սեփական չափերը: Կապի էներգիան հիմնականում կախված է իոնների դարսման խտությունից, ուստի համակարգը հեշտությամբ հարմարվում է ցանցի կանոնավոր կառուցվածքի տեղային խախտումներին, որը բերում է մետաղների մոտ պլաստիկության առավել ցայտուն դրսևորման:

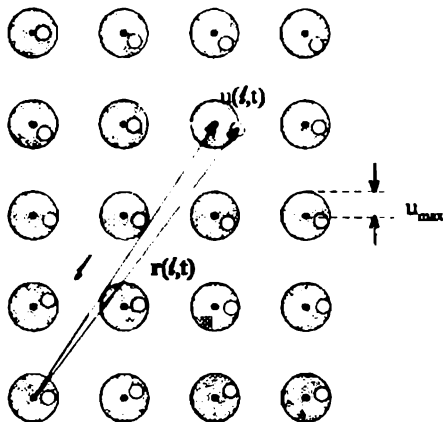
ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ՑԱՆՑԻ ԴԻՆԱՄԻԿԱՆ

§1. Ներդաշնակ մոտավորություն

Բյուրեղական կառուցվածքներն ուսումնասիրելիս ենթադրվում է, որ ատոմները (իոնները) անշարժ ամրացված են բյուրեղական ցանցի հանգույցներում (տարածական ցանցի ստատիկ մոդել, նկ. III.1): Այս ենթադրությունն իրականում շատ արհեստական է, քանի որ ցանկացած ջերմաստիճանում, ներառյալ նաև $T = 0K$, ատոմները կատարում են տատանողական շարժում:



Նկ. III.1



Նկ. III.2

Իրականությանն ավելի մոտ է հետևյալ ենթադրությունը՝ յուրաքանչյուր ատոմի հավասարակշռության դիրք համընկնում է Բրավեի ցանցի որևէ հանգույցի հետ:

Այս ենթադրությունը թույլ է տալիս բացատրել պինդ մարմինների բյուրեղական կառուցվածքը և հավասարագոր է այն պնդմանը, որ, չնայած ատոմների շարժմանը, պինդ մարմնում պահպանվում է Բրավեի ցանցը, որը սակայն նկարագրում է ատոմների ոչ թե ակնթարթային, այլ միջինաց-

ված դիրքերը: Այսպիսով, կարելի է միարժեքորեն որոշել ամեն մի ատոմի դիրքը, տալով Բրավեի ցանցի l հանգույցը, որի շուրջ ատոմը կատարում է տատանումներ: Ատոմի ակնթարթային դիրքը նկարագրող $r(l, t)$ վեկտորը կարելի է ներկայացնել

$$r(l, t) = l + u(l, t), \quad (1.1)$$

տեսքով, որտեղ $u(l, t)$ վեկտորը l հանգույցի ատոմի շեղումն է իր հավասարակշռության դիրքից տվյալ t պահին: $u(l, t)$ շեղման միջինը տատանման պարբերության համար՝

$$\langle u(l, t) \rangle = 0 : \quad (1.2)$$

Բարդ (բազիսով) բյուրեղական ցանցի դեպքում (1.1) առնչության փոխարեն ակնթարթային դիրքը որոշվում է

$$r_j(l, t) = l + d_j + u_j(l, t) \quad (1.3)$$

արտահայտությամբ, որտեղ d_j վեկտորով տրվում է j -րդ ատոմի հավասարակշռության դիրքը տարրական բջջում:

Հիմնվելով բազմաթիվ փորձառական փաստերի վրա, կարելի է անել ևս մի ենթադրություն, համաձայն որի ցանկացած ատոմի առավելագույն շեղումն իր հավասարակշռության դիրքից շատ փոքր է միջատոմական հեռավորությունից (ցանցի հաստատունից)՝

$$|u(l, t)| \leq u_{\max} \ll a : \quad (1.4)$$

Այս ենթադրության շնորհիվ բյուրեղական ցանցի դինամիկայի հիմնական խնդիրը բերվում է մեծ թվով ազատության աստիճաններ ունեցող մեխանիկական համակարգի փոքր տատանումների ուսումնասիրությամբ:

Եթե բյուրեղական ցանցի պտտենցիալ էներգիան, որը ցանցը կազմող ատոմների կոորդինատների ֆունկցիա է, վերածենք շարքի ըստ հավասարակշռության դիրքերից ունեցած փոքր $u(l, t)$ շեղումների և արհամարհենք քառակուսային անդամին հաջորդող մյուս անդամները, ապա կստանանք պտտենցիալ էներգիայի արտահայտությունն այսպես կոչված ներդաշնակ (հարմոնիկ) մոտավորությամբ: Այս մոտավորության շրջանակներում ստացվում են բազմաթիվ քանակական արդյունքներ, որոնք շատ հաճախ լավագույնս համընկնում են փորձի հետ:

Բնականաբար, ներդաշնակ մոտավորությունն ի վիճակի չէ բացատ-

րել մի շարք ֆիզիկական երևույթներ, որոնցում սկզբունքային նշանակություն ունի ցանցի պոտենցիալ էներգիայի վերլուծության մեջ ոչ ներդաշնակ ($\sim O(u^3), O(u^4)$) անդամների հաշվառումը: Դրանց թվին են պատկանում ջերմային ընդարձակումը, ջերմաեաղորդականության գործակցի վերջավոր լինելը, առաձգական հաստատունների ջերմաստիճանային կախումները և այլն:

Գործնականում (1.4) պայմանը խախտվում է միայն պինդ հեղուկի դեպքում, որը նկարագրելու համար ստեղծված է առանձին տեսություն:

Հետագա ուսումնասիրությունների ժամանակ ենթադրվում է, որ բյուրեղական ցանցը կարելի է նկարագրել դասական մեխանիկայի շրջանակներում: Այս ենթադրությունը լիովին հիմնավորված է բարձր ջերմաստիճաններում: Ցածր ջերմաստիճանների տիրույթում, երբ առավելապես դրսևորվում են ատոմների քվանտային հատկությունները, բյուրեղական ցանցի տեսությունը հիմնվում է քվանտային մեխանիկայի օրինաչափությունների վրա:

§2. Տատանումները և ալիքները պարզ միաչափ ցանցում

Բյուրեղական ցանցի տատանողական շարժման ուսումնասիրությունը նպատակահարմար է սկսել միաչափ պարզ ցանցի մոդելի մանրամասն քննարկումից:

Ունենք միևնույն m զանգվածով $N+1$ աստիճան, որոնք կարող են ազատ շարժվել մեկ ուղղությամբ: Կենթադրենք, որ այս համակարգի Φ պոտենցիալ էներգիան նվազագույնն է, երբ աստիճանները դասավորված են միմյանցից միևնույն a հեռավորության վրա: Նշանակենք u_n -ով n -րդ աստիճանի շեղումը հավասարակշռության դիրքից:

Ներդաշնակ մոտավորությամբ համակարգի պոտենցիալ էներգիան՝

$$\Phi(u_0, u_1, \dots, u_N) = \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{n, n'} A(n, n') \cdot u_n \cdot u_{n'}, \quad (2.1)$$

որտեղ Φ_0 հաստատուն անդամը պոտենցիալ էներգիան է հավասարակշռության վիճակում,

$$A(n, n') = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_n \partial u_{n'}} \right)_0 = A(n', n) \quad (2.2)$$

մեծություններն ուժային հաստատուններն են (n և n' ատոմների համար), որոնք որոշվում են պոտենցիալ էներգիայի ածանցյալների արժեքներով $u_n = 0$ հավասարակշռության դիրքերում: (2.1) վերլուծության մեջ բացակայում է ըստ u_n շեղումների գծային անդամը, քանի որ, ենթադրության համաձայն, հավասարակշռության վիճակում համակարգի պոտենցիալ էներգիան նվազագույնն է:

Եթե n -րդ ատոմը շեղված է հավասարակշռության դիրքից, ապա ցանցի մնացած ատոմների կողմից նրա վրա ազդող ուժը՝

$$\begin{aligned} F_n &= -\frac{\partial U}{\partial u_n} = -\frac{1}{2} \sum_{n', n''} A(n', n'') \frac{\partial}{\partial u_n} (u_{n'} u_{n''}) = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{n', n''} A(n', n'') (u_{n'} \delta_{n, n''} + u_{n''} \delta_{n, n'}) = - \sum_{n'} A(n, n') u_{n'}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

որտեղ δ_{ik} -ն Կրոնեկերի խորհրդանիշն է: $A(n, n')$ գործակիցը թվապես հավասար է այն ռժին, որն ազդում է $u_{n'}$ = 1-ով շեղված n' -րդ ատոմի կողմից n -րդ ատոմի վրա: Անվերջ ($N \rightarrow \infty$) շղթայի դեպքում, երբ եզրային երևույթները կարելի է արհամարհել, այդ ուժը կախված է միմիայն n և n' ատոմների միջև հեռավորությունից՝

$$A(n', n) = A(n' - n) = A(n - n') \equiv A(|n - n'|) : \quad (2.4)$$

Եթե բոլոր ատոմները տեղաշարժվեն միևնույն $\Delta u_n = \text{const}$ չափով, ապա F_n ուժը կմնա անփոփոխ՝

$$\Delta F_n = - \sum_{n'} A(n, n') \Delta u_{n'} = - \text{const} \cdot \sum_{n'} A(n, n') = 0 ,$$

հետևաբար՝ ցանկացած n -ի համար

$$\sum_{n'} A(n - n') = 0 : \quad (2.5)$$

Գրենք n -րդ ատոմի շարժման հավասարումը՝

$$m \ddot{u}_n = - \sum_{n'} A(n - n') u_{n'} : \quad (2.6)$$

u_n շեղումը կարող է կախված լինել ժամանակից և ցանցում առմամի զբաղեցրած դիրքից: (2.6) արտահայտության՝ ներդաշնակ տատանակի հավասարման հետ ունեցած նմանությունից հետևում է, որ

$$u_n(t) = u_n^0 e^{-i\omega t}, \quad (2.7)$$

իսկ u_n^0 մեծությունները որոշվում են

$$m\omega^2 u_n^0 - \sum_{n'} A(n' - n) u_{n'}^0 = 0 \quad (2.8)$$

զծային հավասարումների համակարգից: Ֆանցի տեղափոխական համաչափության հատկությունից հետևում է, որ մույն՝ (2.8) հավասարումը կարելի է գրել ցանկացած u_{n+k}^0 ($k = 1, 2, \dots$) շեղման համար: Իրոք, (2.8) արտահայտության մեջ n -ից անցնելով $n+k$ -ին, կտանանք՝

$$m\omega^2 u_{n+k}^0 = \sum_{n'} A(n' - n - k) u_{n'}^0 = \sum_{n''} A(n'' - n) u_{n''+k}^0, \quad (2.9)$$

այսինքն՝ (2.8) արտահայտությունը:

(2.8) և (2.9) հավասարումների մույնությունից հետևում է, որ նրանց լուծումները կարող են իրարից տարբերվել միայն հաստատուն (n -ից չկախված) արտադրիչով՝

$$u_{n+k}^0 = b_k \cdot u_n^0: \quad (2.10)$$

Դժվար չէ տեսնել, որ b_k գործակիցները բավարարում են հետևյալ ֆունկցիոնալ հավասարմանը՝

$$b_{k+l} = b_k \cdot b_l, \quad (2.11)$$

որի լուծումներն են

$$b_k = e^{ikqa}: \quad (2.12)$$

(2.10)-(2.12) առնչություններից հետևում է, որ

$$u_n^0 = u(0) e^{inqa}, \quad (2.13)$$

որտեղ $u(0)$ -ն հաստատուն գործակից է, իսկ q պարամետրը որոշվում է սահմանային պայմաններից: Այսպիսով, (2.6) հավասարման լուծումը (2.7) և (2.13) առնչությունների միջոցով կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$u_n(t) = u(0) e^{i(nqa - \omega t)}: \quad (2.14)$$

(2.14) արտահայտությունը նկարագրում է հարթ ալիք, որի հաճախությունը

ω է, աղբյուրից ունեցած հեռավորությունը՝ na , իսկ ալիքային թիվը՝ q : Եթե (2.14) լուծումը տեղադրենք շարժման (2.6) հավասարման մեջ, կստանանք միաչափ պարզ ցանցում ալիքի հաճախության և ալիքային թվի միջև կապը (դիսպերսիոն հավասարումը)՝

$$m\omega^2 = \sum_{n'} A(n' - n) e^{iqa(n' - n)} = \sum_l A(l) e^{iqal} : \quad (2.15)$$

Այսպիսով, դիսպերսիոն հավասարումը պատասխանում է այն հարցին, թե տվյալ միջավայրում տրված q ալիքային թվով ալիքն ինչպիսի հաճախություն կարող է ունենալ, ընդ որում այդ կապը որոշվում է համակարգի ֆիզիկական բնութագրերով (ատոմի m զանգվածով, ցանցի a հաստատունով, ուժային $A(l)$ հաստատուններով) :

Որոշենք, թե ինչպիսի արժեքներ կարող է ընդունել q ալիքային թիվը :

Եթե շղթան շատ երկար է, ապա նրա ծայրերը չպետք է էապես ազդեն շղթայի ֆիզիկական հատկությունների վրա, հետևաբար շղթայի ծայրերի վրա կարելի է դնել հարմար սահմանային պայմաններ : Սովորաբար օգտվում են մաթեմատիկական տեսակետից շատ պարզ շրջանային կամ Բոռնի և Կարմանի պայմաններից, որոնց համաձայն շղթայի ծայրերը շարժվում են միևնույն փուլում : Միաչափ շղթայի դեպքում կարելի է պատկերացնել, որ շղթայի ծայրերը համընկած են իրար հետ, այսինքն՝

$$u_n(t) = u_{n+N}(t) : \quad (2.16)$$

(2.16) և (2.14) առնչություններից հետևում է, որ

$$e^{iNqa} = 1 , \quad (2.17)$$

կամ

$$q_j = \frac{2\pi}{Na} j = \frac{2\pi}{L} j , \text{ որտեղ } j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots : \quad (2.18)$$

Այսպիսով, q ալիքային թիվն ընդունում է ընդհատ (դիսկրետ), այսինքն՝ ամբողջ թվով $2\pi/Na$ արժեքներ :

Մյուս կողմից, (2.17) հավասարումը չի փոխվի, եթե նրանում q -ի փոխարեն տեղադրվի $q + \frac{2\pi}{a}$ (ամբողջ թիվ), հետևաբար՝ q -ի փոփոխման անվերջ տիրույթը կարելի է սահմանափակել $2\pi/a$ մեծությամբ

$$-\frac{\pi}{a} \leq q_j < \frac{\pi}{a} \quad (2.19)$$

տիրույթով: Քանի որ ալիքային թվի՝ (2.18) առնչությամբ տրվող երկու մոտակա արժեքների միջև հեռավորությունը՝

$$\Delta q_{j,j-1} = q_j - q_{j-1} = \frac{2\pi}{Na} \equiv \Delta q, \quad (2.20)$$

կախված չէ j -ից, ապա q_j արժեքները q առանցքի վրա բաշխված են հավասարաչափ, իսկ (2.19) տիրույթում q ալիքային թվի թույլատրելի արժեքների թիվը հավասար է

$$\frac{2\pi/a}{\Delta q} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{Na}{2\pi} = N, \quad (2.21)$$

այսինքն՝ ցանցի տարրական բջիջների թվին: (2.19) տիրույթը կոչվում է միաչափ ցանցի Բրիլյուենի առաջին զոնա: Ալիքային թվի՝ այս զոնայում ընկած արժեքների համար j -ն փոփոխվում է

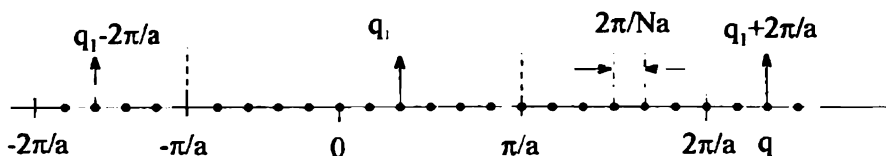
$$-\frac{N}{2} \leq j < \frac{N}{2} \quad (2.22)$$

տիրույթում: Մակրոսկոպական նմուշի դեպքում, երբ $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$, $N/L = 1/a < \infty$ (թերմոդինամիկական սահման), $\Delta q \sim 1/N \rightarrow 0$, և q ալիքային թիվն ընդունում է անընդհատ արժեքներ: Սակայն, քանի որ անկախ Δq -ի մեծությունից, ալիքային թիվը Բրիլյուենի զոնայում ընդունում է հաշվելի թվով (N հատ) արժեքներ (տես (2.21)), ապա ընդունված է q ալիքային թիվը համարել քվազիանընդհատ մեծություն: Այս հանգամանքը հաճախ էապես դյուրացնում է մաթեմատիկական հաշվարկների կատարումը, քանի որ թույլ է տալիս հաշվարկներում գումարներից անցնել ինտեգրալների:

Համաձայն (2.15) և (2.14) առնչությունների, q_j և $q_j + 2\pi n'/a$ ալիքային թվերին համապատասխանում է միևնույն հաճախությունը՝ $\omega(q_j) = \omega(q_j + 2\pi n'/a)$ և միևնույն տեղափոխությունը՝ $u_{n,q_j}(t) = u_{n,q_j+2\pi n'/a}(t)$:

Այս արդյունքն արտահայտում է այն փաստը, որ ֆիզիկական իմաստ ունեն միայն m զանգվածի տեղափոխությունները, քանի որ $q > \pi/a$ կամ

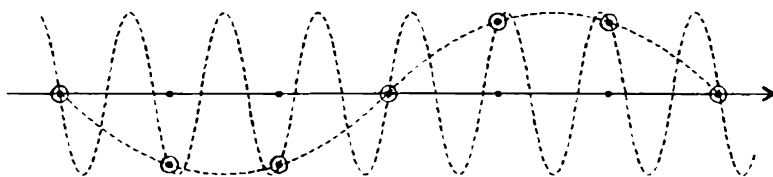
$\lambda = 2\pi/q < 2a$ երկարությամբ ալիքները չեն համապատասխանում նոր տատանումների:



Նկ. III.3

Ամենակարճ ալիքները, որոնք կարող են տարածվել ցանցում, ունեն $q = \pm\pi/a$ ալիքային թիվ և $\lambda_{\min} = 2a$ երկարություն: $2a \leq \lambda < \infty$ երկարությամբ ալիքներին համապատասխանող ալիքային թվերը լրացնում են Բրիլյուենի առաջին զոնան (նկ. III.3):

Նկ. III.3-ում $q_1 = \pi/3a$ և $q_2 = q_1 + 2\pi/a = 7\pi/3a$, որոնց համապատասխանում են միևնույն հաճախությամբ երկու՝ $\lambda_1 = 2\pi/q_1 = 6a$ և $\lambda_2 = 2\pi/q_2 = 6a/7$ երկարությամբ ալիքներ (նկ. III.4):



Նկ. III.4

Հետագայում հակիրճության համար կօգտագործենք «մոդ» տերմինը, որպես տրված q ալիքային թվով և $\omega(q)$ հաճախությամբ ալիքի կամ տատանողական վիճակի անվանում:

Այսպիսով, տատանման քույրատրեկի և ֆիզիկական իմաստ ունեցող մոդերը լրացնում են Բրիլյուենի առաջին զոնան: Ջոնայի սահմաններին համապատասխանում են $q = \pm\pi/a$ երկու մոդեր առավելագույն՝

$$\omega_{\max}^2 = \frac{2A(0)}{m} \left[1 + \frac{2}{A(0)} (A(2) + A(4) + \dots) \right] \quad (2.23)$$

հաճախությամբ և

$$u_n(t) = u(0) e^{-i\omega_{\max} t} \cdot e^{\pm i \frac{\pi}{a} n a} = (-1)^n \cdot u(0) e^{-i\omega_{\max} t} \quad (2.24)$$

շեղումով, որը նկարագրում է կանգուն ալիք, որում հարևան ատոմները տատանվում են հակափուլերում:

Մենք ստացանք (2.14) արտահայտությամբ տրվող մասնավոր լուծումների հավաքածու, որոնց քիվը հավասար է անկախ մոդերի (բյուրեղական ցանցի ազատության աստիճանների) N քվին: Շարժման (2.6) հավասարման ընդհանուր լուծումը (2.14) լուծումների գծային համակցություն է՝

$$u_n(t) = \sum_q A_q e^{[i a n q - \omega(q) t]} , \quad (2.25)$$

այսինքն, n -րդ ատոմի շեղումը A_q ամպլիտուդներով հարք ալիքների վերադրում է: Մյուս կողմից, (2.25) ընդհանուր լուծումը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$u_n(t) = \sum_q \eta_q e^{i a n q} , \quad (2.26)$$

որտեղ

$$\eta_q = A_q e^{-i \omega(q) t} \quad (2.27)$$

մեծություններն այսպես կոչված նորմալ կոորդինատներն են:

(2.26) առնչությունը կապ է հաստատում $\{u_n(t)\}$ և $\{\eta_q(t)\}$ կոորդինատական երկու տարրեր հավաքածուների միջև: Ի տարբերություն $u_n(t)$ շեղումների, $\eta_q(t)$ կոորդինատներն իրարից անկախ են: Դրանում հեշտ է համոզվել, եթե տեղադրենք (2.26) առնչությունը (2.6) հավասարման մեջ.

$$m \sum_q \ddot{\eta}_q e^{i a n q} + \sum_{n', q} A(n - n') \eta_q e^{i a n' q} = 0 : \quad (2.28)$$

Ձևափոխենք երկրորդ գումարելին, նկատի ունենալով (2.15) կապը՝

$$\sum_{n'} A(n - n') e^{i a q (n' - n)} \cdot e^{i a n q} = e^{i a n q} \sum_l A(l) e^{i q a l} = e^{i a n q} m \omega^2 : \quad (2.29)$$

(2.28) և (2.29) արտահայտություններից կստանանք՝

$$\sum_q [\ddot{\eta}_q + \omega^2(q) \eta_q] \cdot e^{i q a n} = 0 : \quad (2.30)$$

Քանի որ η_q մեծություններն իրարից անկախ են, ապա (2.30) հավասար-

քումից հետևում է, որ

$$\ddot{\eta}_q + \omega^2(q) \eta_q = 0 : \quad (2.31)$$

Ստացանք կարևորագույն արդյունք՝ կոորդինատների (2.26) ձևավոյությունը ցանցի սառսանումների դիսամիկական խնդիրը բերում է անկախ ներդաշնակ սառսանակների հավաքածուի խնդիրն:

Եթե նկատի ունենանք, որ $u_n(t)$ շեղումն իրական մեծություն է՝

$$u_n^*(t) = u_n(t) , \quad (2.32)$$

ապա (2.26) առնչությունից կբխի η_q կոորդինատների

$$\eta_q^* = \eta_{-q} , \quad (2.33)$$

հատկությունը, հետևաբար, N հատ η_q նորմալ կոորդինատներից միայն $N/2$ հատն է անկախ: Սակայն, նկատի ունենալով η_q մեծության կոմպլեքս լինելը, համոզվում ենք, որ անկախ նորմալ կոորդինատների թիվը ճշտորեն հավասար է համակարգի ազատության աստիճանների թվին:

§3. Ամենամոտ հարևանների մոտավորությունը

Վերը սառնցված արդյունքները կարելի է պարզեցնել և ավելի մատչելի դարձնել ամենամոտ հարևանների մոտավորության օգնությամբ, համաձայն որի շարժման (2.6) հավասարման մեջ հաշվի է առնվում սովյալ առոմի փոխազդեցությունը միայն իր աջ և ձախ հարևանի հետ: Սա համարժեք է ուժային հասսաստումների հեռկյալ մոտարկմանը՝

$$A(0) \neq 0, \quad A(1) \neq 0, \quad A(n-n') = 0, \quad |n-n'| = 2, 3, 4, \dots, \quad (3.1)$$

ընդ որում, համաձայն (2.5) պայմանի

$$A(0) + 2A(1) = 0 : \quad (3.2)$$

Քանի որ $A(0) > 0$, ապա $A(1) = -\beta < 0$, որսեղ $\beta > 0$ և բնութագրում է մոտակա հարևանների փոխազդեցությունը: Նկատի ունենալով, որ

$$A(1) = -\beta, \quad A(0) = 2\beta, \quad A(2) = A(3) = \dots = 0, \quad (3.3)$$

n -րդ ասումի վրա ազդող ուժի համար (2.3) ընդհանուր արաահայաությունից կսառանք՝

$$F_n = -\beta(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = \\ = -\beta(u_n - u_{n+1}) - \beta(u_n - u_{n-1}) \equiv f_{n,n+1} + f_{n,n-1}, \quad (3.4)$$

որտեղ

$$f_{n,n\pm 1} = -\beta(u_n - u_{n\pm 1}) \quad (3.5)$$

n -րդ աստմի վրա աջ (ձախ) $n+1$ ($n-1$) աստմի կողմից ազդող ուժն է, որն ունի առաձգականության ուժի բնույթ, իսկ β -ն կոշտության գործակիցն է:

Շարժման (2.6) հավասարումն ընդունում է հետևյալ տեսքը՝

$$m\ddot{u}_n = -\beta(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}), \quad (3.6)$$

իսկ (2.15) դիսպերսիոն հավասարումը՝

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m}(1 - \cos qa) : \quad (3.7)$$

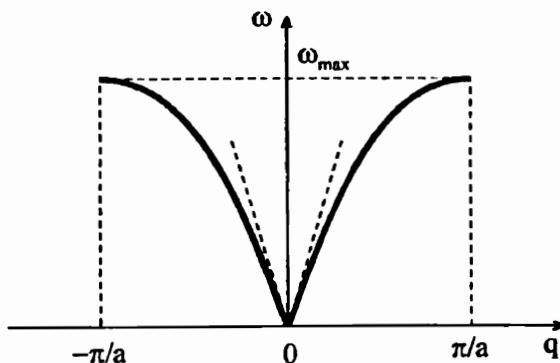
Ինչպես երևում է (3.7) առնչությունից (նաև ավելի ընդհանուր (2.15) հավասարումից)

$$\omega^2(-q) = \omega^2(q) \quad (3.8)$$

և

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| = \omega_{\max} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|, \quad (3.9)$$

որտեղ, համաձայն (2.23) և (3.3) արտահայտությունների



Նկ. III.5

$$\omega_{\max} = \sqrt{\frac{2A(0)}{m}} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} : \quad (2.43)$$

(3.9) դիսպերսիոն հավասարումը պատկերված է նկ. III.5-ում:

Նկարից հետևում է տեղավորիսական համաչափությամբ օժտված դիսկրետ համակարգերի մի կարևոր առանձնահատկություն՝ $\omega_{\max}$ առավելագույն հաճախության գոյությունը: $\omega > \omega_{\max}$ հաճախությամբ ալիքներ ցանցում տարածվել չեն կարող:

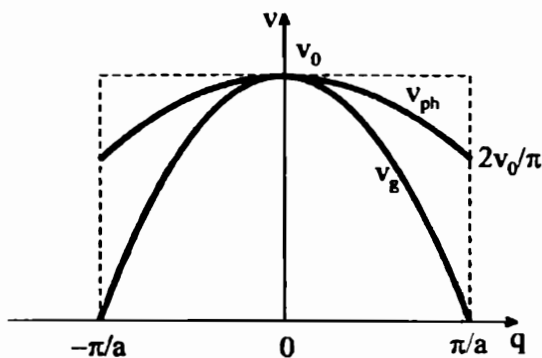
Փոքր ալիքային թվերի կամ երկարալիքային սահմանում ($aq \ll 1$ կամ $\lambda \gg a$) (3.9) բանաձևից ստանում ենք՝

$$\omega(q) \approx \omega_{\max} \cdot \frac{qa}{2} = a \left(\frac{\beta}{m} \right)^{1/2} \cdot q \equiv v_0 \cdot q, \quad (3.11)$$

որտեղ

$$v_0 = a \left(\frac{\beta}{m} \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (3.12)$$

մեծությունը ձայնի տարածման արագությունն է համասեռ հոծ ձողում (ρ -ն ձողի նյութի խտությունն է, E -ն՝ Յունգի մոդուլը):



Նկ. III.6

Ընդհանուր դեպքում $\omega(q)$ կախումը սարքերվում է գծային (3.11) կապից, այսինքն, կարելի է ներմուծել ալիքների փուլային և խմբային արա-

գործյունները, որոնք չեն համընկնում: Այս դեպքում ընդունված է ասել, որ միջավայրն օժտված է դիսպերսիայով: Համաձայն սահմանման, փուլային արագությունը՝

$$v_{ph} = \frac{\omega}{|q|} = \frac{\omega_{\max} \cdot a}{2} \frac{\left| \sin \frac{qa}{2} \right|}{\frac{|q|a}{2}} = v_0 \frac{\left| \sin \frac{qa}{2} \right|}{\frac{qa}{2}}, \quad (3.13)$$

իսկ խմբային արագությունը՝

$$v_g = \left| \frac{d\omega}{dq} \right| = \frac{\omega_{\max} \cdot a}{2} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| = v_0 \left| \cos \frac{qa}{2} \right|: \quad (3.14)$$

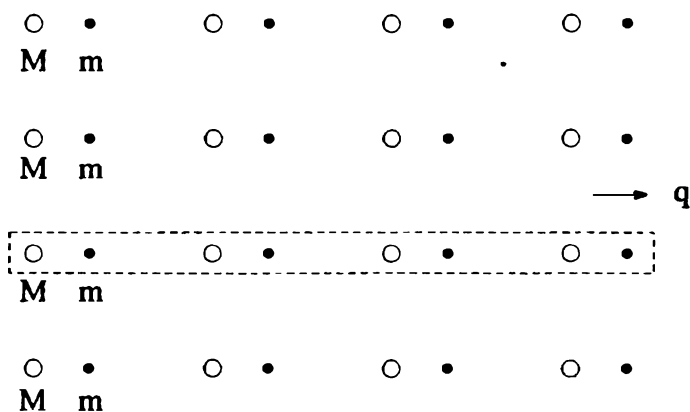
Երբ $qa \ll 1$, համաձայն (3.13) և (3.14) բանաձևերի, $v_{ph} = v_g = v_0$: Հակառակ սահմանում, երբ $qa = \pm\pi$, $v_g(\pm\pi/a) = 0$, այսինքն, էներգիայի հոսքը շղթայով բացակայում է, ինչը համապատասխանում է կանգուն ալիքի հաստատմանը: Նկ. III.6-ում պատկերված են $v_{ph}(q)$ և $v_g(q)$ կախումները:

§4 Տատանումները և ալիքները բարդ (բազիսով) միաչափ ցանցում

Միաչափ ցանցի համար ստացված արդյունքները կարելի է օգտագործել պարզ, ծավալակենտրոնացված և նիստակենտրոնացված ցանցերի՝ համաչափության որոշակի առանցքին ուղղահայաց ատոմական հարթությունների տատանումներն ուսումնասիրելիս, երբ ալիքը տարածվում է այդ նույն համաչափության առանցքի ուղղությամբ:

Քննարկենք այժմ այն դեպքը, երբ խտրանարդային բյուրեղը կազմված է սալրեր զանգվածներով երկու տեսակի աստմներից, ընդ որում M զանգվածով աստմները կազմում են հարթությունների մի համակարգ, իսկ m զանգվածները՝ մի այլ համակարգ, որի հարթությունները զանվում են M զանգվածով աստմների հարթությունների միջև (նկ. III.7-ում պատկերված է հավասարակշռության վիճակը): Ուսումնասիրենք ալիքների տարածումը համաչափության այն առանցքի ուղղությամբ, որին ուղղահայաց յուրաքանչյուր առանձին հարթություն պարունակում է միայն մեկ տեսակի

ատոմներ: Օրինակ՝ NaCl -ի տիպի կառուցվածքում այդպիսին է $[111]$ ուղղությամբ: Նկ. III.8-ում պատկերված է նկ. III.7-ում կետագծերով նշված ատոմական շղթան սառսանման վիճակում: Ալիքը տարածվում է սլաքի ուղղությամբ: U_n -ով նշանակված է n -րդ բջջում M զանգվածի շեղումը, u_n -ով՝ m զանգվածի շեղումը, β_1 և β_2 գործակիցները ուժային հաստատուններն են (գույանակների կոշտության գործակիցները): Շղթայի յուրաքանչյուր բջիջ պարունակում է երկու մասնիկ (բարդ ցանց): Կենթադրենք, որ միաժամանակ m և M զանգվածները, ինչպես նաև β_1 և β_2 գործակիցներն իրար հավասար լինել չեն կարող (նկ. III.8-ում ենթադրված է, որ $\beta_1 > \beta_2$):



Նկ. III.7

Ամենամոտ հարևանների մոտավորությամբ բարդ գծային ցանցի պոտենցիալ էներգիան արվում է

$$\Phi = \frac{1}{2} \beta_1 \sum_n (U_n - u_n)^2 + \frac{1}{2} \beta_2 \sum_n (u_n - U_{n+1})^2 \quad (4.1)$$

արտահայտությամբ, որի օգնությամբ կարող ենք հաշվել m և M զանգվածների վրա ազդող ուժերը և գրել շարժման հավասարումները՝

$$m \ddot{u}_n = - \frac{\partial \Phi}{\partial u_n} = - \beta_1 (u_n - U_n) - \beta_2 (u_n - U_{n+1}), \quad (4.2)$$

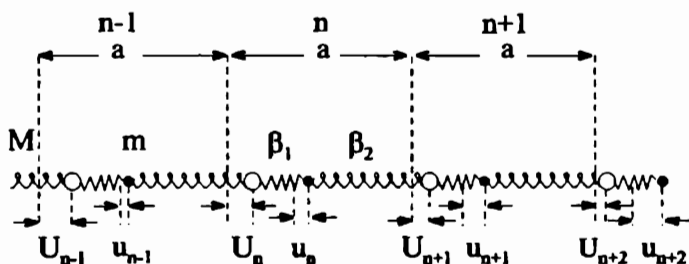
$$M\ddot{U}_n = -\frac{\partial\Phi}{\partial U_n} = -\beta_1(U_n - u_n) - \beta_2(U_n - u_{n-1}) : \quad (4.3)$$

$2N$ անհայտների համար ստացված $2N$ հավասարումների համակարգը ցանցի սեղափոխական համաչափության հասկության շնորհիվ բերվում է երկու անհայտով երկու հավասարումների համակարգի՝ անհայտ B և b ամպլիտուդների համար, քանի որ բոլոր միասեռակ առումները կատարում են միևնույն հաճախությամբ և միևնույն ամպլիտուդով տատանումներ, որոնք իրարից կարող են տարբերվել միմիայն տատանումների փուլերով, ինչը պայմանավորված է ցանցում նրանց զբաղեցրած դիրքերի տարբերությամբ: Այսպիսով, (4.2) և (4.3) հավասարումների լուծումները կներկայացնենք հետևյալ տեսքով՝

$$U_n(t) = B \exp[i(aqn - \omega t)] , \quad (4.4)$$

$$u_n(t) = b \exp[i(aqn - \omega t)] , \quad (4.5)$$

ընդ որում B/b հարաբերությունը տալիս է տարրական բջջում առումների (իոնների) հարաբերական ամպլիտուդները և տատանումների փուլը:



Նկ. III.8

Քանի որ սահմանային պայմանները նույնն են, ինչ որ պարզ (միասում) գծային ցանցի դեպքում, ապա q ալիքային թվի ընդունած արժեքները տրվում են (2.18) բանաձևով, իսկ ֆիզիկական տարբեր մոդեր նկարագրող արժեքներն ընկած են Բրիլյուենի առաջին զոնայում՝ $-\pi/a \leq q < \pi/a$:

Տեղադրելով (4.4) և (4.5) արտահայտությունները շարժման հավասարումների մեջ և կրճատելով $\exp[i(qan - \omega t)]$ ընդհանուր արտադրիչը, B և b անհայտների համար կստանանք համասեռ հավասարումների համակարգ՝

$$\left[m\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) \right] b + (\beta_1 + \beta_2 e^{iqa}) B = 0, \quad (4.6)$$

$$(\beta_1 + \beta_2 e^{-iqa}) b + [M\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)] B = 0: \quad (4.7)$$

Այս համակարգի ոչ զրոյական լուծում ունենալու պայմանը համակարգի որոշիչի զրոյի հավասար լինելն է՝

$$\begin{vmatrix} m\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) & \beta_1 + \beta_2 e^{iqa} \\ \beta_1 + \beta_2 e^{-iqa} & M\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) \end{vmatrix} = 0, \quad (4.8)$$

որտեղից ստացվում է կապը (4.4) և (4.5) արտահայտություններով տրվող ալիքների հաճախության և ալիքային թվի միջև՝ $\omega \equiv \omega(q)$ դիսպերսիոն հավասարումը: Բացելով (4.8) որոշիչը և կատարելով պարզ ձևափոխություններ, ω^2 -ու համար ստանում ենք քառակուսային հավասարում՝

$$\omega^4 - \omega_0^2 \cdot \omega^2 + \frac{4\beta_1\beta_2}{mM} \sin^2 \frac{qa}{2} = 0, \quad (4.9)$$

որտեղ

$$\omega_0^2 = \frac{(\beta_1 + \beta_2)(m + M)}{mM}: \quad (4.10)$$

(4.9) հավասարման լուծումներն են

$$\omega_1^2 = \frac{\omega_0^2}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}} \right], \quad (4.11)$$

$$\omega_2^2 = \frac{\omega_0^2}{2} \left[1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}} \right], \quad (4.12)$$

որտեղ

$$\gamma^2 = 16 \frac{\beta_1\beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)^2} \cdot \frac{mM}{(m + M)^2} \leq 1: \quad (4.13)$$

(4.13) բանաձևում հավասարության նշանը համապատասխանում է $\beta_1 = \beta_2$ և $m = M$ դեպքին, որը կրճատվում է առանձին:

Քանի որ $\gamma^2 \leq 1$, ապա $\omega_1(q)$ և $\omega_2(q)$ ֆունկցիաներն ընդունում են միայն իրական արժեքներ:

Պարզ շղթայի համեմատությամբ կարևոր տարրերությունը կայանում է նրանում, որ (4.11) և (4.12) հավասարումները որոշում են դիսպերսիայի երկու ճյուղեր՝ ձայնային՝ $\omega_1(q) \equiv \omega_{ac}(q)$ և օպտիկական՝ $\omega_2(q) \equiv \omega_{op}(q)$: Այսպիսով, q ալիքային թվի ամեն մի արժեքին համապատասխանում են երկու հաճախություններ, որոնցից մեկը սլաակնում է ձայնային, մյուսը՝ օպտիկական ճյուղին: Հետևաբար, բարդ միաչափ ցանցում անկախ տատանումների (մոդերի) թիվը կլինի հավասար N (q -երի թիվը Բրիլյուենի գնայում) $\times 2$ (ճյուղերի թիվ) $= 2N$, որը հավասար է ցանցի ազատության աստիճանների թվին:

Նկատի ունենալով

$$\omega_1(-q) = \omega_1(q) \text{ և } \omega_2(-q) = \omega_2(q) \quad (4.14)$$

գոյգության հատկությունը, այսուհետև կենթադրենք, որ $\omega_1, \omega_2 > 0$ և տրվում են հետևյալ բանաձևերով՝

$$\omega_{ac}(q) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}}, \quad (4.15)$$

$$\omega_{op}(q) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}}: \quad (4.16)$$

Ուսումնասիրենք այս ֆունկցիաների վարքը սարքեր մասնավոր դեպքերում:

ա) Երկարալիքային սահման՝ $qa \ll 1$ ($\lambda \gg a$)

Ձայնային ճյուղի հաճախությունների համար (4.15) բանաձևից ստացված

$$\omega_{ac}(q) \simeq \frac{1}{4} \omega_0 \gamma a q \equiv v \cdot q \quad (4.17)$$

գծային կապը բնութագրական է ձայնային ալիքների համար (այստեղից էլ՝ ճյուղի անվանումը), որոնք տարածվում են

$$v = a \sqrt{\frac{\beta_1 \cdot \beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)(m + M)}} \quad (4.18)$$

արագությամբ:

Օպտիկական ճյուղի հաճախությունների համար՝

$$\omega_{op}(q) \approx \omega_0 \left(1 - \frac{\gamma^2 a^2}{32} q^2 \right) : \quad (4.19)$$

Երբ $q \rightarrow 0$, $\omega_{ac} \rightarrow 0$, իսկ $\omega_{op} \rightarrow \omega_0$:

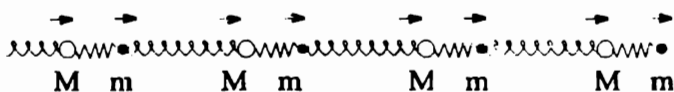
Շեղումների և սասանումների ամպլիտուդների հարաբերությունը, համաձայն (4.6) և (4.7) արտահայտությունների, հավասար է

$$\frac{u_n}{U_n} = \frac{b}{B} = \frac{\beta_1 + \beta_2 e^{iqa}}{\beta_1 + \beta_2 - m\omega^2} = \frac{\beta_1 + \beta_2 - M\omega^2}{\beta_1 + \beta_2 e^{-iqa}} : \quad (4.20)$$

Չայնային ճյուղի սասանումների համար, ըստ (4.20) առնչության, երբ $q \rightarrow 0$

$$\left(\frac{b}{B} \right)_{ac} = 1, \quad \text{և} \quad u_n(t) = U_n(t), \quad (4.21)$$

այսինքն՝ բջջում ատոմները սատանվում են մույն փուլում (նկ. III.9)



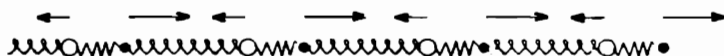
Նկ. III.9

Օպտիկական ճյուղի սասանումների համար, երբ $q \rightarrow 0$

$$\left(\frac{b}{B} \right)_{op} = \frac{\beta_1 + \beta_2}{\beta_1 + \beta_2 - m\omega_0^2} = -\frac{M}{m}, \quad (4.22)$$

այսինքն, բջջում ատոմները տատանվում են հակադիր փուլերում, ընդ որում այնպես, որ բջջի զանգվածի կենտրոնը մնում է անշարժ՝ (նկ. III.10)

$$mu_n(t) + MU_n(t) = 0 : \quad (4.23)$$



Նկ. III.10

p) Կարծալիքային սահման՝ $qa = \pi$ ($\lambda = 2a$):

Բրիլլուենի զոնայի սահմաններին ($qa = \pm\pi$) համապատասխանում են ձայնային և օպտիկական ճյուղի հաճախությունների հետևյալ արժեքները՝

$$\omega_{ac}(\pm\frac{\pi}{a}) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \gamma^2}} \equiv \omega_{ac}^{\max}, \quad (4.24)$$

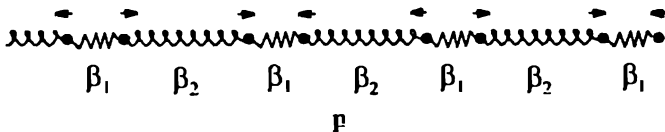
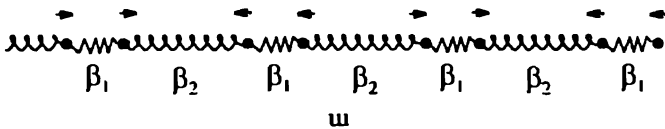
$$\omega_{op}(\pm\frac{\pi}{a}) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - \gamma^2}} \equiv \omega_{op}^{\min}: \quad (4.25)$$

Ինչպես հետևում է (4.4) և (4.5) արտահայտություններից, այս դեպքում $u_{n+1} = -u_n$, $U_{n+1} = -U_n$, այսինքն, հարևան բջիջներում և՛ ձայնային, և՛ օպտիկական ճյուղերի սասանումներն իրար նկատմամբ շեղված են 180° -ով:

Խմբային արագությունների համար (4.15) և (4.16) բանաձևերի համաձայն, ստանում ենք

$$v_{ac,g} = \left| \frac{d\omega_{ac}}{dq} \right|_{\pi/a} = 0, \quad v_{op,g} = \left| \frac{d\omega_{op}}{dq} \right|_{\pi/a} = 0, \quad (4.26)$$

ինչը համապատասխանում է կանգուն ալիքների հաստատմանը:



Նկ. III.11

(4.20), (4.15) և (4.16) արտահայտություններից ձայնային (–) և օպտիկական (+) ճյուղերի համար շեղումների հարաբերությունը՝

$$\left(\frac{u_n}{U_n}\right)_{ac}^{op} = \frac{\beta_1 - \beta_2}{(\beta_1 + \beta_2) \left\{ 1 - \frac{m+M}{2M} \left[1 \mp \sqrt{1 - \frac{16\beta_1\beta_2 m M}{(\beta_1 + \beta_2)^2 (m+M)^2}} \right] \right\}} : \quad (4.27)$$

Հնարավոր բազմաթիվ դեպքերից բննարկենք $m = M$, $\beta_1 > \beta_2$ դեպքը:
(4.27) բանաձևից հետևում է

$$\left(\frac{u_n}{U_n}\right)_{ac} = 1, \quad \left(\frac{u_n}{U_n}\right)_{op} = -1, \quad (4.28)$$

այսինքն՝ ձայնային տատանումների դեպքում ձգվում-սեղմվում են β_2 կոշտությամբ զսպանակները (նկ. III.11, ա), իսկ օպտիկական տատանումների դեպքում՝ β_1 կոշտությամբ զսպանակները (նկ. III.11, բ):

զ) $\beta_1 \ll \beta_2$ մոտավորություն

Այժմ ուսումնասիրենք ձայնային և օպտիկական տատանումներն այն մասնավոր դեպքում, երբ $\beta_1 \ll \beta_2$: Համաձայն (4.13) բանաձևի, $\gamma^2 \sim \beta_1/\beta_2 \ll 1$, հետևաբար, (4.15), (4.16) և (4.20) արտահայտությունները վերլուծելով շարքի, կստանանք՝

$$\omega_{ac} = 2\sqrt{\frac{\beta_2}{m+M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \cdot [1 + O(\gamma^2)], \quad \frac{u_n}{U_n} \approx 1, \quad (4.29)$$

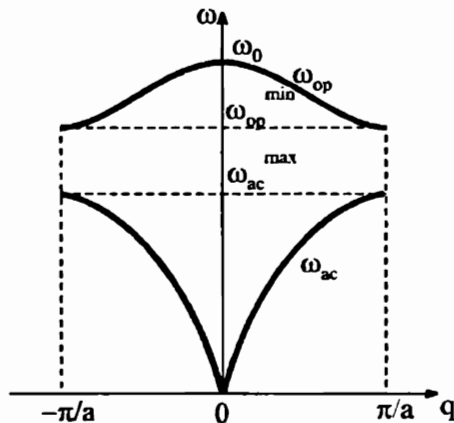
$$\omega_{op} = \sqrt{\beta_1 \frac{(m+M)}{mM}} \cdot [1 + O(\gamma^2)], \quad \frac{u_n}{U_n} \approx -1 : \quad (4.30)$$

Ինչպես հետևում է (4.30) արտահայտությունից, օպտիկական ճյուղի տատանումների համար դիսպերսիան բացակայում է, այսինքն՝ ω_{op} հաճախությունը կախված չէ q ալիքային քվից և հավասար է m և M զանգվածներից և β_1 զսպանակից բաղկացած մոլեկուլի տատանման հաճախությանը, իսկ մոլեկուլի մեջ մտնող ատոմները շարժվում են հակափուլերում:

Ձայնային ճյուղի համար ստացված (4.29) արտահայտությունը համընկնում է $(m+M)$ զանգվածով և β_2 զսպանակներով իրար կապված ատոմների գծային պարզ շղթայի դիսպերսիոն հավասարման հետ, իսկ

յուրաքանչյուր բջջում աստիճանները շարժվում են միևնույն փուլում, որի հետևանքով էլ β_1 գսպանակները համարյա չեն սեղմվում և ձգվում: (4.15) և (4.16) բանաձևերով տրվող ձայնային և օպտիկական ճյուղերը պատկերված են նկ. III.12-ում:

Երբ q ալիքային թիվը փոփոխվում է Բրիլյուենի զոնայում, օպտիկական ճյուղի հաճախությունները փոփոխվում են $\omega_{op}^{\min} \leq \omega_{op}(q) \leq \omega_0$, իսկ ձայնային ճյուղի հաճախությունները՝ $0 \leq \omega_{ac}(q) \leq \omega_{ac}^{\max}$ տիրույթում: $\omega_{ac}^{\max}$ և $\omega_{op}^{\min}$ արժեքների միջև ընկած տիրույթը կոչվում է արգելված գոտի, որի լայնությունը՝



Նկ. III.12

$$\Delta\omega_g = \omega_{op}^{\min} - \omega_{ac}^{\max} : \quad (4.31)$$

Արգելված գոտուն պատկանող հաճախություններով ալիքները ցանցում տարածվել չեն կարող, բանի որ արագ մարում են: Նույնը կարելի է ասել նաև $\omega > \omega_0$ հաճախություններով ալիքների մասին:

Դրանում կարելի է համոզվել, եթե արգելված գոտուն պատկանող որևէ ω հաճախություն տեղադրենք (4.15) կամ (4.16) բանաձևի մեջ: Արդյունքում ստացված արտահայտությունը կարելի է դիտել որպես հավասարում $q(\omega)$ ալիքային թիվը որոշելու համար: Այն ունի հետևյալ տեսքը՝

$$\cos qa = 1 - \frac{8}{\gamma^2} \cdot \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \right) \equiv -\delta : \quad (4.32)$$

Բանի որ $\delta \geq 1$, ապա (4.32) հավասարման լուծումն ունի կոմպլեքս տեսք՝

$$q = q_1 + i q_2 : \quad (4.33)$$

Տեղադրելով (4.33) արտահայտությունը (4.32) հավասարման մեջ և հավասարեցնելով աջ և ձախ մասերում ստացված արտահայտությունների իրական և կեղծ մասերը, կստանանք՝

$$q_1 = \frac{\pi}{a}, \quad q_2 = \pm \frac{1}{a} \ln \left(\delta + \sqrt{\delta^2 - 1} \right) \equiv q_2(\omega) \quad (4.34)$$

(4.32) հավասարումով որոշված $\delta(\omega)$ ֆունկցիան արգելված գոտու եզրերին հավասարվում է միավորի՝

$$\delta(\omega_{ac}^{\max}) = \delta(\omega_{op}^{\min}) = 1$$

և ընդունում է առավելագույն արժեք արգելված գոտում, $\omega_0/\sqrt{2}$ կետում, որին համապատասխանում է

$$q_2^{\max} = \frac{1}{a} \ln \left[\frac{2}{\gamma^2} - 1 + \sqrt{\left(\frac{2}{\gamma^2} - 1 \right)^2 - 1} \right] \quad (4.35)$$

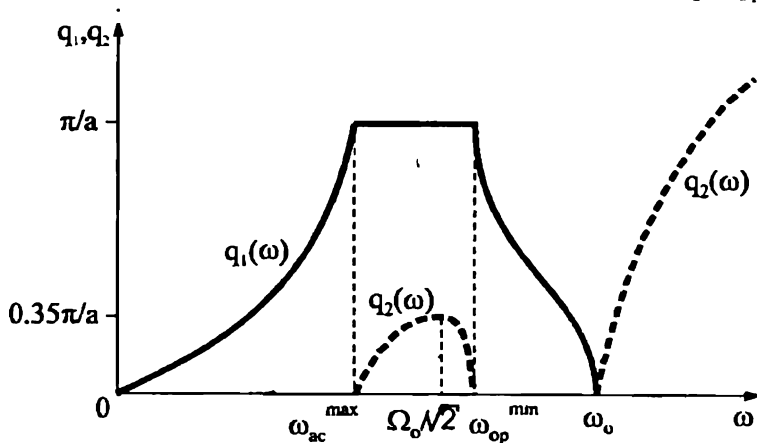
արժեքը: Նույն ձևով $\omega > \omega_0$ հաճախությունների համար կստանանք՝

$$q_1 = 0, \quad q_2 = \pm \frac{1}{a} \ln \left(\delta_1 + \sqrt{\delta_1^2 - 1} \right), \quad (4.36)$$

որտեղ

$$\delta_1(\omega) = \frac{8}{\gamma^2} \cdot \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \left(\frac{\omega^2}{\omega_0^2} - 1 \right) + 1 : \quad (4.37)$$

Եթե (4.4) և (4.5) բանաձևերում տեղադրենք ալիքային թվի $q = q_1 + iq_2$



Նկ. III.13

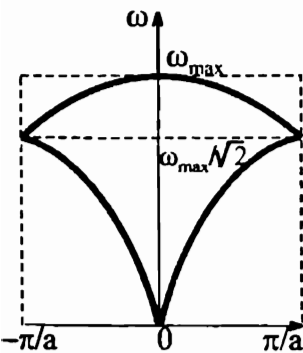
արտահայտությունը, ապա կստանանք, որ m , M զանգվածով մասնիկների տասանման ամպլիտուդները՝ կախված բջջի դիրքից, փոխվում են $\exp(-anq_2)$ օրենքով, ընդ որում, երբ $q_2 > 0$, տատանումները մարում են, իսկ $q_2 < 0$ դեպքում՝ ուժեղանում էքսպոնենցիալ օրենքով: Ալիքային թվի իրական և կեղծ մասերի հաճախային կախումները պատկերված են նկ. III.13-ում (զծագիրն արված է $\gamma^2 = 0,75$ արժեքի համար):

Դիտարկենք այժմ «այլասերման» դեպքը, երբ $\gamma^2 = 1$ ($m = M$, $\beta_1 = \beta_2 \equiv \beta$): (4.15) և (4.16) բանաձևերից ձայնային և օպտիկական ճյուղերի համար ստացվում են հետևյալ արտահայտություններ՝

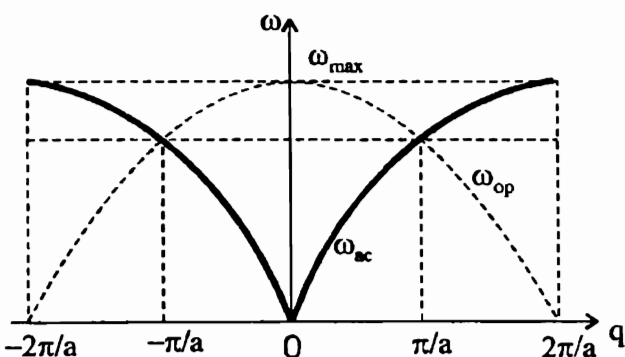
$$\omega_{ac}(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{4} \right| = \omega_{\max} \left| \sin \frac{qa}{4} \right|, \quad (4.38)$$

$$\omega_{op}(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \cos \frac{qa}{4} \right| = \omega_{\max} \left| \cos \frac{qa}{4} \right|: \quad (4.39)$$

Բրիլյուենի զոնայի սահմանի վրա ($qa = \pm\pi$) $\omega_{ac}(\pm\pi/a) = \omega_{op}(\pm\pi/a)$, և արգելված գոտին վերանում է՝ $\Delta\omega_g = 0$, ինչը վկայում է համակարգում տեղի ունեցած որակական փոփոխության մասին (նկ. III.14): Իրոք, տվյալ դեպքում ատոմների նույնությունից և կասերի միատեսակությունից հետևում է, որ բոլոր ատոմների միջև հեռավորությունները պետք է իրար հավասար լինեն, ուստի ցանցի պարբերությունը՝ $a' = a/2$: Բրիլյուենի զոնան



Նկ. III.14



Նկ. III.15

սահմանափակված է $\pm \pi/a'$ արժեքներով, այսինքն՝ մեծացած է երկու անգամ: $(0, \pi/a)$ տիրույթում $\omega_{ac}(q)$ ճյուղը համընկնում է պարզ ցանցի դիսպերսիոն հավասարման հետ՝

$$\omega_{ac}(q) = \omega_{\max} \left| \sin \frac{a'q}{2} \right|, \quad (4.40)$$

իսկ ω_{op} ճյուղը՝ նույն հավասարման հետ $(\pi/a, 2\pi/a)$ տիրույթում՝ $q' = 2\pi/a - q$ համապատասխան արժեքներով, քանի որ

$$\cos \frac{aq'}{4} = \cos \left(\frac{\pi}{2} - \frac{qa}{4} \right) = \sin \frac{qa}{4} = \sin \frac{a'q}{2} :$$

Ավարտելով միաչափ ցանցի տատանումների ուսումնասիրությունը, հարկ է նշել հետևյալը:

Մենք բննարկեցինք միայն երկայնական ալիքների տարածումը միաչափ ցանցում: Հասկանալի է, որ միաչափ ցանցում հնարավոր է գրգռել նաև լայնական ալիքներ, որոնցում մասնիկների շեղումներն ուղղահայաց են շրթային:

Լայնական ալիքների բնութագրերն ընդհանուր դեպքում ստացվում են շատ նման երկայնական ալիքների բնութագրերին: Զանի որ լայնական և երկայնական ալիքներում մասնիկների շեղումները կատարվում են փոխուղղահայաց ուղղություններով, ապա այս երկու տեսակի ալիքները կարող են գրգռվել միաժամանակ և առաջին մոտավորությամբ իրարից անկախ: Լայնական ալիքներ կարելի է գրգռել երկու փոխուղղահայաց ուղղություններով միաժամանակ:

§5. Եռաչափ բարդ ցանցի տատանումները

Այժմ ուսումնասիրենք եռաչափ բյուրեղական ցանցի տատանումներն ընդհանուր դեպքում, երբ տարրական բջիջը պարունակում է մեկից ավելի տարբեր ատոմներ: Նշանակենք m_k -ով k տեսակի ատոմի զանգվածը, իսկ s -ով՝ ատոմների տեսակների թիվը ($k = 1, 2, \dots, s$): k տեսակի ատոմի դիրքը որոշվում է

$$r_n^k = n + d_k \quad (5.1)$$

վեկտորով, որտեղ n -ը ցանցի տեղափոխության վեկտորն է, իսկ d_k -ն որոշում է k տեսակի ատոմի դիրքը տարրական բջջում ($d_1, d_2, \dots, d_s$ վեկտորների համախառմը որոշում է ցանցի բազիսը): n տեղափոխության վեկտորով բջջի k տեսակի ատոմի շեղման վեկտորի α -րդ պրոյեկցիան նշանակենք $u_{n\alpha}^k$ -ով ($\alpha = x, y, z$):

Բյուրեղական ցանցի պոտենցիալ էներգիան $3sN$ փոփոխականների՝ $u_{n\alpha}^k$ -երի ֆունկցիա է, որն ունի մինիմում, երբ բոլոր $u_{n\alpha}^k = 0$, այսինքն՝

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial u_{n\alpha}^k} \right)_0 = 0 : \quad (5.2)$$

Ընտրելով որպես էներգիայի հաշվարկի սկիզբ պոտենցիալ էներգիայի նվազագույն արժեքը, ներդաշնակ մոտավորությամբ կարող ենք գրել՝

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{n, n', k, k'} \Phi_{\alpha\beta}(kn; k'n') \cdot u_{n\alpha}^k u_{n'\beta}^{k'} , \quad (5.3)$$

որտեղ

$$\Phi_{\alpha\beta}(kn; k'n') = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_{n\alpha}^k \partial u_{n'\beta}^{k'}} \right)_{00} \quad (5.4)$$

մեծություններն ուժային հաստատուններն են: Ինչպես հետևում է այս սահմանումից՝

$$\Phi_{\alpha\beta}(kn; k'n') = \Phi_{\beta\alpha}(k'n'; kn) : \quad (5.5)$$

Ատոմների միջև գործող փոխազդեցության ուժերը կախված են ատոմների տեսակից և նրանց միջև հեռավորությունից, ուստի $\Phi_{\alpha\beta}$ գործակիցները կախված են $|n - n'|$ մեծությունից, այսինքն՝

$$\Phi_{\alpha\beta}(kn; k'n') = \Phi_{\alpha\beta}(k, k'; n - n') : \quad (5.6)$$

Օգտվելով (5.3) արտահայտությունից, կարող ենք գտնել n -րդ բջջում k տեսակի ատոմի վրա ազդող ուժի α -րդ պրոյեկցիան՝

$$F_{na}^k = -\frac{\partial \Phi}{\partial u_{na}^k} = -\sum_{n'k'\beta} \Phi_{a\beta}(kn; k'n') \cdot u_{n'\beta}^{k'} : \quad (5.7)$$

Եթե բոլոր ատոմները շեղվեն միևնույն u_0 վեկտորով, ապա բյուրեղը որպես ամբողջություն կտեղափոխվի տարածության մեջ: Քանի որ (n, k) ատոմի վրա ազդող ուժը հավասարակշռության վիճակում հավասար է զրոյի, ապա (5.7) արտահայտությունից կստանանք՝

$$\left(F_{na}^k\right)_0 = -\sum_{\beta} u_{0\beta} \sum_{n'k'} \Phi_{a\beta}(kn; k'n') = 0: \quad (5.8)$$

$u_{0\beta}$ -ների անկախությունից բխում է, որ

$$\sum_{n'k'} \Phi_{a\beta}(kn; k'n') = 0, \quad (5.9)$$

ինչը (2.5) առնչության ընդհանրացումն է: Բացի (5.5), (5.6) և (5.9) հատկություններից, $\Phi_{a\beta}(kn; k'n')$ ուժային հաստատունները բավարարում են նաև այլ առնչությունների, որոնք տվյալ բյուրեղական կառուցվածքի պոտենցիալ էներգիայի համաչափության հատկությունների հետևանք են:

$\Phi_{a\beta}(kn; k'n')$ գործակիցը թվապես հավասար է (n, k) ատոմի վրա ազդող ուժի α առանցքով ուղղված բաղադրիչին, երբ (n', k') ատոմը β առանցքի ուղղությամբ շեղվում է միավոր երկարության հատվածով:

Շարժման հավասարումը (n, k) ատոմի համար ունի հետևյալ տեսքը՝

$$m_k \ddot{u}_{na}^k = F_{na}^k = -\sum_{n'k'\beta} \Phi_{a\beta}(kn; k'n') \cdot u_{n'\beta}^{k'} : \quad (5.10)$$

Գրելով նույն հավասարումը բոլոր ատոմների շեղումների պրոյեկցիաների համար, կստանանք $3sN$ հավասարումների համակարգ $3sN$ անհայտ u_{na}^k շեղումների համար, որը կարելի է զգալիորեն պարզեցնել, եթե հաշվի առնենք ցանցի պարբերականությունը:

Իրոք, քանի որ բոլոր սարքական բջիջները նույնական են, ապա տարբեր բջիջներում միևնույն տեսակի ատոմները տատանվում են նույն ամպլիտուդով, այսինքն՝ այն կախված է միայն ատոմի k տեսակից, բայց ոչ տարրական բջիջի դիրքը որոշող n վեկտորից: (5.10) հավասարումները համակարգի լուծումը կփնտրենք վազող ալիքի տեսքով՝

$$u_{n\alpha}^k(t) = \frac{1}{\sqrt{m_k}} A_{\alpha}^k(q) e^{i(qn - \omega t)}, \quad (5.11)$$

որտեղ թվային $m_k^{-1/2}$ գործակիցը գրված է հարմարության նկատառումով:

Տեղադրելով (5.11) արտահայտությունը շարժման հավասարումների (5.10) համակարգում, կստանանք՝

$$\omega^2 A_{\alpha}^k(q) = \sum_{k'\beta} D_{\alpha\beta}^{kk'}(q) A_{\beta}^{k'}(q), \quad (5.12)$$

որտեղ

$$D_{\alpha\beta}^{kk'}(q) = \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_{n'} \Phi_{\alpha\beta}(k n; k' n') e^{i q(n' - n)} \quad (5.13)$$

արտահայտությունը որոշում է բյուրեղի դինամիկական մատրիցի տարրերը: Այս մատրիցի տարրերը համարակալվում են (k, α) , իսկ սյունները՝ (k', β) կրկնակի ցուցիչներով, որոնք ընդունում են $3s$ հատ արժեքներ, հետևաբար մատրիցի ռանգը $3s$ է:

Այսպիսով, ցանցի պարբերականության շնորհիվ $3sN$ հավասարումների համակարգի փոխարեն ստացվեց $3s$ գծային հավասարումների (5.12) համակարգը՝ անհայտ $A_{\alpha}^k(q)$ ամպլիտուդների համար, որը կարելի է ներկայացնել սեղմ տեսքով՝

$$\sum_{k'\beta} \{ D_{\alpha\beta}^{kk'}(q) - \omega^2 \delta_{k\beta} \delta_{\alpha\beta} \} A_{\beta}^{k'}(q) = 0, \quad (5.14)$$

$$(k = 1, 2, \dots, s; \quad \alpha = x, y, z):$$

(5.14) համակարգն ունի ոչ զրոյական լուծումներ, եթե համակարգի որոշիչը հավասար է զրոյի՝

$$\left| D_{\alpha\beta}^{kk'}(q) - \omega^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{kk'} \right| = 0: \quad (5.15)$$

Այս բնութագրական (դիսպերսիոն) հավասարումից, որը $3s$ կարգի հավասարում է ω^2 -ու նկատմամբ, տրված q ալիքային վեկտորի համար որոշվում են $\omega^2(q)$ ֆունկցիայի հնարավոր արժեքները, որոնց թիվն ընդհանուր դեպքում $3s$ է և որոնք հետագայում կհամարակալենք $j (= 1, 2, \dots, 3s)$ ցուցիչով՝ $\omega_j(q)$:

Համաձայն (5.13) սահմանման՝

$$D_{\alpha\beta}^{k^*k'}(q) = D_{\beta\alpha}^{k'k}(q) . \quad (5.16)$$

այսինքն՝ դինամիկական մատրիցն էրմիտական է, հետևաբար՝ նրա բոլոր ω_j^2 սեփական արժեքներն իրական են, իսկ ω_j -երը՝ կամ իրական, կամ գուռ կեղծ: Վերջին դեպքում (5.11) շեղման ժամանակային կախումն արտահայտող $\exp(-i\omega t) = \exp(\gamma t) \equiv \exp(\pm|\gamma|t)$ արտադրիչը կարող է անվերջ մեծ լինել անցյալում ($t \rightarrow -\infty$) կամ ապագայում ($t \rightarrow +\infty$), ինչը համարժեք է ցանցի քայքայմանը: Ցանցի կայունության պայմանից բխում է, որ բոլոր j -երի համար $\omega_j^2(q) \geq 0$: Դրա համար անհրաժեշտ է, որ դինամիկական մատրիցի գլխավոր միներմները լինեն դրական: Այս պահանջն իր հերթին լրացուցիչ պայմաններ է դնում $\Phi_{\alpha\beta}(kn; k'n')$ ուժային հաստատունների վրա, որոնք հետևում են հավասարակշռության վիճակում ցանցի պոտենցիալ էներգիայի մինիմումի գոյության պայմանից: Յոս հատ $\omega_j^2(q)$ ֆունկցիաները կարելի է դիտել որպես $\omega^2(q)$ բազմարժեք ֆունկցիայի տարբեր ճյուղեր: Տարրական բջջի համաչափության հետևանքով որոշ ω_j արժատներ կարող են համընկնել, ուստի արժատների թիվը կարող է փոքր լինել $3s$ -ից:

Ընդհանուր դեպքում հնարավոր չէ տալ դիսպերսիոն հավասարման՝

$$\omega = \omega_j(q), \quad j = 1, 2, \dots, 3s \quad (5.17)$$

կախման վերլուծական արտահայտությունը, քանի որ գոյություն չունի $3s$ ($s > 1$) աստիճանի հանրահաշվական հավասարման լուծման ալգորիթմ: Սակայն որոշ մասնավոր դեպքերում այն կարելի է տալ բյուրեղի պարզ մոդելների համար:

Այժմ որոշենք դինամիկական մատրիցի սեփական վեկտորները (5.12) հավասարումից, որի մեջ տեղադրված է $\omega = \omega_j(q)$ սեփական արժեքը՝

$$\omega_j^2(q) e_{j\alpha}(q) = \sum_{k\beta} D_{\alpha\beta}^{k^*k'}(q) e_{jk\beta}(q) , \quad (5.18)$$

որտեղ $e_{j\alpha}(q)$ մեծությունը $e_{jk}(q)$ սեփական վեկտորի α -րդ բաղադրիչն

է: Ակնհայտ է, որ j -րդ ճյուղին համապատասխանող ստատանման $A_{j\alpha}^k(q)$ ամպլիտուդը հաստատունի ճշտությամբ համընկնում է $e_{j\alpha}(q)$ մեծության հետ: e_{jk} վեկտորն անվանում են բևեռացման վեկտոր, այն որոշում է տատանման ուղղությունը: Դինամիկական մատրիցն էրմիտական է, ուստի նրա սեփական վեկտորներն օրթոգոնալ են՝

$$\sum_{k\alpha} e_{j\alpha} e_{j'\alpha}^* = \delta_{jj'} \quad (5.19)$$

և, քանի որ $e_{j\alpha}(q)$ պրոյեկցիաները որոշվում են համասեռ հավասարումների (5.18) համակարգից, ապա դրանք կարելի է նորմավորել՝

$$\sum_j e_{j\alpha} e_{jk\beta}^* = \delta_{k\alpha} \delta_{\alpha\beta} : \quad (5.20)$$

Սեփական վեկտորների և սեփական արժեքների համաչափության մի հատկություն ենարավոր է ապացուցել, եթե նկատի ունենանք, որ (5.13) տախճանման համաձայն

$$D_{\alpha\beta}^{kk'}(q) = D_{\alpha\beta}^{k'k}(-q) : \quad (5.21)$$

Գրելով (5.18) հավասարման կոմպլեքս համալուծը և նկատի ունենալով (5.21) հատկությունը, կստանանք, որ

$$e_{j\alpha}(q) = e_{j\alpha}^*(-q) \quad (5.22)$$

կամ

$$e_{j\alpha}(q) = -e_{j\alpha}^*(-q) : \quad (5.23)$$

Վերջին առնչությունը հարմար է կիրառել իրական e_{jk} վեկտորների դեպքում, քանի որ այն նշանակում է, որ $e_{j\alpha}(q)$ բաղադրիչը ձևափոխվում է նույն ձևով, ինչպես որ q_α պրոյեկցիան:

Սեփական արժեքների համար տեղի ունի

$$\omega_j^2(-q) = \omega_j^2(q) \quad (5.24)$$

համաչափության հատկությունը, որը հետևանք է մեխանիկայի հավասարումների՝ $t \rightarrow -t$ ձևափոխության նկատմամբ ինվարիանտության:

Եթե դինամիկական մատրիցում q վեկտորի փոխարեն տեղադրենք

$q' = q + g$, որտեղ g -ն հակադարձ ցանցի կամայական տեղափոխության վեկտոր է, ապա կստանանք, որ

$$D_{\alpha\beta}^{kk'}(q+g) = \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_{n'} \Phi_{\alpha\beta}(kn; k'n') e^{i(q+g)(n'-n)} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_{n'} \Phi_{\alpha\beta}(kn; k'n') e^{iq(n'-n)} = D_{\alpha\beta}^{kk'}(q), \quad (5.25)$$

քանի որ $g(n'-n) = 2\pi \times$ ամբողջ քիվ: Հետևաբար, կհամընկնեն $q' = q + g$ և q ալիքային վեկտորներին համապատասխանող սեփական արժեքները և սեփական վեկտորները՝

$$\omega_j(q+g) = \omega_j(q), \quad (5.26)$$

$$u_n^k(q+g) = u_n^k(q): \quad (5.27)$$

Համաձայն այս արդյունքների, q' ալիքային վեկտորով ալիքը համընկնում է q վեկտորով ալիքի հետ, այսինքն՝ q' և q վեկտորները ֆիզիկորեն համարժեք են: Սա հնարավորություն է տալիս դիտարկել q վեկտորի փոփոխությունը սահմանափակ ափսոսանքով: Ընտրելով g և $n' - n$ վեկտորների ամենավտոր ոչ զրոյական արժեքները՝ $g = 2\pi b_i$ ($i = 1, 2, 3$), $n' - n = a_i$ ($i = 1, 2, 3$), որտեղ a_i -ն և b_i -ն ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հիմնական վեկտորներն են, կստանանք՝

$$q'a_i = (q + 2\pi b_i)a_i = qa_i + 2\pi: \quad (5.28)$$

Այսպիսով, qa_i մեծությունը միշտ կարելի է սահմանափակել $(0, 2\pi)$ ափսոսանքով: Նպատակահարմար է այն ընտրել համաչափ ձևով, որպես ափսոսանքի կենտրոն ընտրելով $q = 0$ կետը՝

$$-\pi \leq qa_i < \pi \quad (i = 1, 2, 3): \quad (5.29)$$

(5.29) արտահայտությամբ տրվող 3 առնչությունները որոշում են Բրիլյուենի առաջին զոնան, կամ որ նույնն է, Վիգներ-Չեյտցի բջիջը հակադարձ տարածության մեջ (տես 1.2):

Երբ q վեկտորը փոփոխվում է Բրիլյուենի առաջին զոնայում, դիսպերսիոն հավասարման յուրաքանչյուր ճյուղի համար ստացվում է $\omega_j(q) = \text{const}$ մակերևույթների մի ընտանիք, որոնք կոչվում են հավասար-

րահաճախային (հավասարաէներգիական $\hbar\omega_j(q) = \varepsilon_j(q)$) և (5.24) հատկության համաձայն՝ ունեն ինվերսիայի (համաչափության) կենտրոն: Հավասարահաճախային մակերևութների պատկերը կրկնվում է հակադարձ ցանցի բջիջներում և Բրիլյուենի զոնաներում, բանի որ $\omega_j(q)$ ֆունկցիան

$2\pi b_1$ պարբերություններով տառապի պարբերական ֆունկցիա է (տես (5.26) և նկ. III.16):

Ընտրենք q տարածության մեջ այնպիսի մի s ուղղություն, որի համար

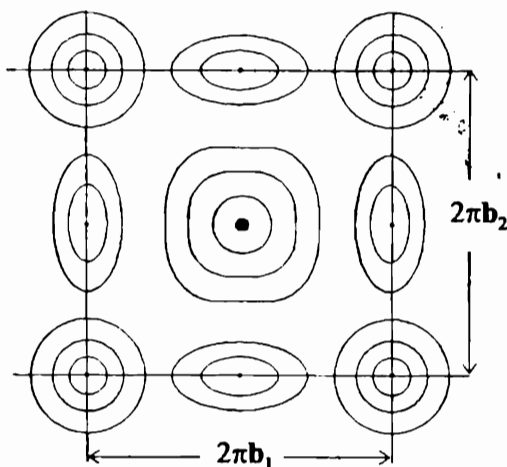
$$\omega_j(-q_s) = \omega_j(q_s): \quad (5.30)$$

Մասնավորապես, այն կարող է համընկնել q վեկտորի ուղղության հետ:

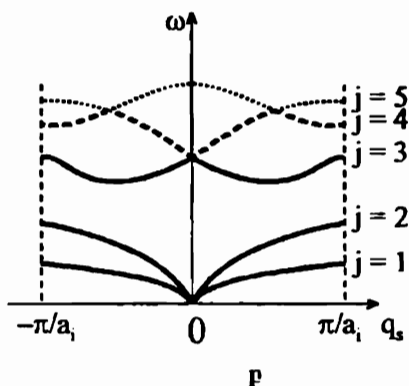
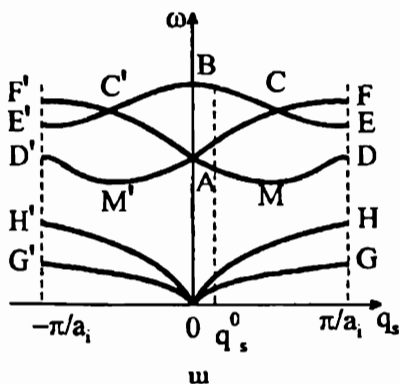
Եթե $\omega_j(q)$ ֆունկցիայի

երկու (կամ ավելի) ճյուղեր որևէ կետում ընդունում են

միևնույն արժեքը, այսինքն՝ այդ ճյուղերը հատվում են, ապա տեղի ունի



Նկ. III.16



Նկ. III.17

այլասերում (նկ. III.17, O, A, C, C' կետերը): Այս դեպքում հարց է ծագում, թե ինչպես որոշել տատանման տրված ճյուղը ավիթային վեկտորի փոփոխման ողջ տիրույթում: Ինչպես երևում է նկ. III.17-ից, տրված ω_j ճյուղը կարելի է ընտրել հետևյալ կորերով՝ DMAC'F', DMAC'E' կամ DMAM'D':

Պայմանավորվենք վերահամարակալել ճյուղերն այնպես, որ տրված $q_s = q_s^0$ -ի համար տեղի ունենան հետևյալ անհավասարությունները՝

$$\omega_1(q_s^0) < \omega_2(q_s^0) < \omega_3(q_s^0) < \omega_4(q_s^0) < \omega_5(q_s^0) :$$

Կենթադրենք այժմ, որ գրված անհավասարությունները տեղի ունեն թուր q_s -երի համար, ինչն էլ հենց որոշում է ճյուղերի համարակալումը q_s -ի փոփոխման ողջ տիրույթում (նկ. III.17, P): Վերահամարակալված թուր ճյուղերի համար էլ տեղի ունի $\omega_j(-q_s) = \omega_j(q_s)$ պայմանը:

Այլասերման դեպքում q'_s հատման կետերում $(\partial\omega_j/\partial q_s)_{q'_s}$ ածանցյալը, որպես կանոն, թոփք ունի: Օրինակ՝ պարզ միաչափ ցանցի համար

$$\omega^2 = \omega_{\max}^2 \sin^2 \frac{qa}{2} \quad \text{և} \quad \omega = \pm \omega_{\max} \sin \frac{qa}{2} ,$$

այսինքն՝ $q = 0$ կետը ճյուղավորման կետ է: Մենք դեն ենք նետում երկու ($\pm$) ճյուղերի բացասական հաճախություններին համապատասխանող մասերը և ձայնային ճյուղը որոշում (3.9) բանաձևով:

Եթե $q = 0$ կետում այլասերում չկա (նկ. III.17, ա, B կետը), այսինքն՝ չկա տատանման մի քանի ճյուղերի հատում, ապա $\omega_j(q)$ ֆունկցիան կարելի է վերածել շարքի ըստ q_α պրոյեկցիաների ($\alpha = x, y, z$) աստիճանների՝

$$\omega_j(q) = \omega_j(0) + \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial \omega_j}{\partial q_{\alpha}} \right)_0 q_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \beta} \left(\frac{\partial^2 \omega_j}{\partial q_{\alpha} \partial q_{\beta}} \right)_0 q_{\alpha} q_{\beta} + \dots : \quad (5.31)$$

Քանի որ $\omega_j(q)$ -ն գույգ ֆունկցիա է, (տես (5.24) հատկությունը), ապա

$$\left(\frac{\partial \omega_j}{\partial q_{\alpha}} \right)_0 = 0 : \quad (5.32)$$

II կարգի համաչափ

$$R_{\alpha\beta}^j = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \omega_j}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} \right)_0 \quad (5.33)$$

տենզորը կարելի է բերել անկյունագծային տեսքի, այնպես որ (5.31) վերլուծությունը կարող ենք ներկայացնել

$$\omega_j(q) = \omega_j(0) + \sum_\alpha q_\alpha^2 R_{\alpha\alpha}^j, \quad (5.34)$$

տեսքով, այսինքն, $q = 0$ կետում $\omega_j(q) - \omega_j(0)$ վերլուծությունը սկսվում է q_α^2 մեծություններից համեմատական անդամներից: Մասնավորապես, խորանարդային բյուրեղի համար $R_{xx} = R_{yy} = R_{zz} \equiv R$, ուստի

$$\omega_j(q) = \omega_j(0) + R q^2, \quad (5.35)$$

այսինքն՝ փոքր q -երի համար $\omega_j(q) = \text{const}$ հավասարահաճախային մակերևույթները գնդեր են (նկ. III.16):

Հարկ է նշել, որ $\omega_j(q)$ ֆունկցիան էքստրեմալ արժեքներ կարող է ընդունել ոչ միայն Բրիլյուենի գոնայի կենտրոնում (նկ. III.17, ա, B կես) կամ սահմանի վրա (նկ. III.17, ա, F, F', ..., H, H' կետեր), այլև գոնայի ներսում (նկ. III.17, ա, M, M' կետեր):

Այժմ ուսումնասիրենք ցանցի տատանումների բնույթը երկարալիքային սահմանում ($\lambda \rightarrow \infty, q \rightarrow 0$): Այս դեպքում, ըստ (5.13) սահմանման, $D_{\alpha\beta}^{kk'}(0)$ մեծություններն իրական են, հետևաբար, իրական կլինեն նաև (5.12) հավասարումից $q = 0$ դեպքում ստացվող

$$\omega^2(0) A_\alpha^k(0) = \sum_{k'\beta n'} \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(k n; k' n') A_\beta^{k'}(0) \quad (5.36)$$

հավասարման $A_\alpha^k(0)$ լուծումները: Ենթադրենք այժմ, որ j -րդ ճյուղին պատկանող ամպլիտուդը՝

$$A_{j\beta}^{k'}(0) = \sqrt{m_{k'}} \cdot \text{const} \quad (\text{ըստ } k' \text{-ի}), \quad (5.37)$$

այսինքն՝ $u_{n\beta}^{k'}$ շեղումները կախված չեն ատոմի տեսակից (տես (5.11) արտահայտությունը): (5.36) և (5.37) հավասարումներից հետևում է, որ

$$\frac{1}{\sqrt{m_k}} \sum_{\beta} \frac{A_{j\beta}^{k'}(0)}{\sqrt{m_{k'}}} \sum_{k'n'} \Phi_{\alpha\beta}(k n; k' n') = 0 : \quad (5.38)$$

Բայց քանի որ մեզ չի հետաքրքրում $A_{j\alpha}^k(0) = 0$ ($\alpha = x, y, z$) լուծումը, ապա (5.36) հավասարումից կստանանք՝

$$\omega_j(0) = 0 : \quad (5.39)$$

Մյուս կողմից, (5.39) պայմանը տեղի կունենա, եթե $A_{j\alpha}^k(0) \neq 0$ գոնե α -ի մեկ արժեքի համար, ուստի բնական է ենթադրել, որ կան տատանումների երեք ($j = 1, 2, 3$) ճյուղեր, որոնց համար $\omega_j(q) \rightarrow 0$, երբ $q \rightarrow 0$:

Այս երեք ճյուղերը, որոնց համար առումների շեղումները կախված չեն աստմի տեսակից, կոչվում են ձայնային և նման են միաչափ ցանցի ձայնային ճյուղին:

Այժմ քննարկենք $q = 0$ դեպքը, բայց առանց (5.37) ենթադրության: Արտագրենք (5.36) հավասարումը հետևյալ տեսքով

$$m_k \omega_j^2(0) \frac{A_{j\alpha}^k(0)}{\sqrt{m_k}} = \sum_{k'\beta n'} \frac{1}{\sqrt{m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(k n; k' n') A_{j\beta}^{k'}(0) : \quad (5.40)$$

Բազմապատկելով հավասարման երկու մասերը $e^{-i\omega t}$ արտադրիչով, օգտվելով (5.11) արտահայտությունից և կատարելով գումարում ըստ k -ի, կստանանք, որ

$$\omega_j^2(0) \sum_k m_k u_{n\alpha j}^k(t) = \sum_{k'\beta} u_{n\beta j}^{k'}(t) \sum_{kn} \Phi_{\alpha\beta}(k n; k' n') = 0 \quad (5.41)$$

համաձայն (5.9) հատկության: Քանի որ $\omega_j(0) \neq 0$, ապա

$$\sum_{k=1}^3 m_k u_{n\alpha j}^k(t) = 0 , \quad (5.42)$$

այսինքն՝ երկարալիքային տատանումների ժամանակ բջջի ծանրության կենտրոնը մնում է անշարժ: Տատանումների այս ճյուղերը կոչվում են օպտիկական և նման են միաչափ ցանցի օպտիկական ճյուղին:

Այսպիսով, բյուրեղի դիսպերսիոն հավասարման բոլոր $3s$ ճյուղերից 3 -ը ձայնային ճյուղերն են՝ $\omega_j = 0$ ($j = 1, 2, 3$), իսկ մնացած $3s - 3$ -ը՝ օպտիկական ճյուղերը՝ $\omega_j = \omega_j(0)$ ($j = 4, 5, 6, \dots, 3s$):

Կարելի է ցույց տալ, որ ինչպես և միաչափ դեպքում, երկարալիքային սահմանում ($q \cdot a, \ll 1$) ձայնային ճյուղերի հաճախությունները կարելի է ներկայացնել

$$\omega_j(q) = v_{0j}(\theta, \varphi) \cdot |q|, \quad j = 1, 2, 3 \quad (5.43)$$

տեսքով, որտեղ v_{0j} -ն j -րդ ճյուղի ալիքի տարածման արագությունն է և կախված է ալիքի տարածման ուղղությունից (θ, φ անկյունները որոշում են q վեկտորի ուղղությունը), իսկ օպտիկական ճյուղերի համար $\omega_j(q)$ դիսպերսիոն հավասարումը տրվում է (5.35) արտահայտությամբ, այսինքն՝ ունի էքստրեմում (մաքսիմում): Այլասերման բացակայության դեպքում $\omega_j(q)$ ֆունկցիան էքստրեմալ է նաև Բրիլյուենի զոնայի սահմանների վրա:

Տատանումների լրիվ պատկերը ստանալու համար անհրաժեշտ է լուծել (5.15) բնութագրական հավասարումը q վեկտորի բոլոր արժեքների համար, ինչը հնարավոր է իրականացնել միայն թվային մեթոդներով:

Այժմ ներմուծենք նորմալ կոորդինատները եռաչափ ցանցի համար: j -րդ ճյուղին պատկանող և q ալիքային վեկտորով տատանմանը համապատասխանող շեղումը տրվում է (5.11) հավասարումով: (5.10) շարժման հավասարումների համակարգի գծայնությունից հետևում է, որ ընդհանուր դեպքում շեղման վեկտորը կարելի է ներկայացնել բյուրեղի բոլոր սեփական տատանումների գծային համակցության տեսքով՝

$$u_{n\alpha}^k(t) = \frac{1}{\sqrt{Nm_k}} \sum_{qj} e_{jka}(q) a_j(q, t) e^{iqn}, \quad (5.44)$$

որտեղ առայժմ անհայտ $a_j(q, t)$ գործակիցները հանդես են գալիս որպես նորմալ կոորդինատներ:

Տեղադրենք (5.44) արտահայտությունը շարժման (5.10) հավասարումների մեջ՝

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{m_k}{N}} \sum_q e^{iqn} [e_{jka}(q) \ddot{a}_j(q, t) + \\ & + \sum_{n'} e_{jk'\beta}(q) a_j(q, t) \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(k n; k' n') e^{iq(n'-n)}] = 0 \end{aligned} \quad (5.45)$$

և նկատի ունենանք, որ համաձայն (5.13) և (5.18) առնչությունների,

$$\sum_{k'\beta} e_{jk'\beta}(q) \sum_{n'} \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(k n; k' n') e^{iq(n'-n)} =$$

$$= \sum_{k'\beta} e_{jk'\beta}(q) D_{\alpha\beta}^{kk'}(q) = \omega_j^2(q) e_{j\alpha k}(q): \quad (5.46)$$

(5.45) և (5.46) առնչություններից հետևում է, որ $a_j(q, t)$ մեծությունները բավարարում են

$$\ddot{a}_j(q, t) + \omega_j^2(q) a_j(q, t) = 0: \quad (5.47)$$

հավասարմանը: Քանի որ $u_{n\alpha}^k(t)$ շեղումներն իրական մեծություններ են, ապա (5.44) արտահայտությունից հետևում է $a_j(q, t)$ նորմալ կոորդինատների համաչափության հետևյալ հատկությունը՝

$$a_j(q) = a_j^*(-q): \quad (5.48)$$

Նորմալ կոորդինատների քիվը հավասար է $3sN$ -ի, այսինքն՝ բյուրեղական ցանցի ազատության աստիճանների թվին:

§6. Սահմանային պայմանների ուսումնասիրությունը

Այժմ պարզենք, թե ինչպիսի արժեքներ կարող է ընդունել ալիքային վեկտորը: Դիմենք շեղման վեկտորների վրա դրվող սահմանային պայմաններին:

Դիտարկենք անվերջ բյուրեղ, որը բաղկացած է մակրոբյուրեղներից, որոնցից յուրաքանչյուրը $N_1 a_1$, $N_2 a_2$ և $N_3 a_3$ կողերով զուգահեռանիստ է և պարունակում է $N_1 N_2 N_3 \equiv N$ տարրական բջիջ: Ենթադրվում է, որ N_1, N_2, N_3 թվերը շատ մեծ են մեկից. օրինակ՝ եթե մակրոբյուրեղի չափերն ընտրենք $1\text{սմ} \times 1\text{սմ} \times 1\text{սմ}$, ապա $N_1 \sim N_2 \sim N_3 \sim 10^7$: Յուրաքանչյուր մակրոբյուրեղ կարելի է դիտել որպես ֆիզիկական բյուրեղ, որի տատանողական հատկություններն անհրաժեշտ է ուսումնասիրել:

Օգտվենք սահմանային պայմաններից, որոնք միաչափ բյուրեղի դեպքում օգտագործված (2.16) շրջանային կամ Բոռնի և Կարմանի սահման-

նային պայմանի հռաչափ ընդհանրացումն են և որոնց համաձայն ատոմների շեղումները պետք է լինեն սլարբերական ըստ մակրոբյուրեղի չափերի՝

$$u_n^k(t) = u_{n+N_1 a_1}^k(t) = u_{n+N_2 a_2}^k(t) = u_{n+N_3 a_3}^k(t) : \quad (6.1)$$

Նկատի ունենալով շեղման վեկտորի (5.11) արտահայտությունը, (6.1) սահմանային պայմաններից կստանանք՝

$$e^{i q a_1 N_1} = e^{i q a_2 N_2} = e^{i q a_3 N_3} = 1 , \quad (6.2)$$

այսինքն՝

$$q a_1 N_1 = 2\pi p_1 , \quad q a_2 N_2 = 2\pi p_2 , \quad q a_3 N_3 = 2\pi p_3 , \quad (6.3)$$

որտեղ $p_1, p_2, p_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots$ կամայական ամբողջ թվեր են: Ստացված երեք հավասարումներից որոշվող q վեկտորը փոփոխվում է հակադարձ տարածության մեջ (տես 1.5) և, հետևաբար, կարող է ներկայացվել հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների միջոցով

$$q = h_1 b_1 + h_2 b_2 + h_3 b_3 : \quad (6.4)$$

Որոշենք h_1, h_2, h_3 անհայտ գործակիցները: (6.3), (6.4) հավասարումներից և (1.5.23) առնչությունից կստանանք՝

$$q a_1 N_1 = (h_1 a_1 b_1 + h_2 a_2 b_2 + h_3 a_3 b_3) N_1 = h_1 N_1 = 2\pi p_1 ,$$

այսինքն՝

$$h_1 = \frac{2\pi}{N_1} p_1 : \quad (6.5)$$

Նույն եղանակով h_2 և h_3 համար կստանանք՝

$$h_2 = \frac{2\pi}{N_2} p_2 , \quad h_3 = \frac{2\pi}{N_3} p_3 : \quad (6.6)$$

Այսպիսով, q ալիքային վեկտորի ընդունած արժեքները տրվում են

$$q = \frac{2\pi p_1}{N_1} b_1 + \frac{2\pi p_2}{N_2} b_2 + \frac{2\pi p_3}{N_3} b_3, \quad p_1, p_2, p_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots \quad (6.7)$$

արտահայտությամբ: Եթե q վեկտորի փոփոխման տիրույթը Բրիլյուենի գոնան է՝

$$-\pi \leq q a_i < \pi \quad (i = 1, 2, 3)$$

ապա

$$-\frac{N_1}{2} \leq p_1 < \frac{N_1}{2}, \quad -\frac{N_2}{2} \leq p_2 < \frac{N_2}{2}, \quad -\frac{N_3}{2} \leq p_3 < \frac{N_3}{2} : \quad (6.8)$$

q վեկտորի՝ Բրիլյուսենի գոնայում ընդունած տարբեր արժեքների թիվը հավասար է (6.8) պայմաններին բավարարող (p_1, p_2, p_3) եռյակի ընդունած արժեքների թվին, որը հավասար է $N_1 N_2 N_3 \equiv N$: Այսպիսով, գալիս ենք կարևոր եզրակացության՝ ալիքային վեկտորը Բրիլյուսենի գոնայում ընդունում է ճիշտ այնքան տարբեր արժեքներ, քանի տարրական բջիջներից որ կազմված է տվյալ բյուրեղը:

Այժմ ցույց տանք, որ q ալիքային վեկտորի արժեքները հակադարձ տարածության մեջ բաշխված են հաստատուն խտությամբ: (6.4) և (6.7) արտահայտություններից հետևում է, որ հակադարձ տարածության i -րդ էլեմենտական կոորդինատական առանցքի վրա q վեկտորի երկու ամենամոտ ($\Delta p_i = 1$) արժեքների միջև տարբերությունը՝

$$\Delta q_i = \Delta h_i \cdot b_i = b_i \cdot (2\pi \Delta p_i / N_i) = 2\pi b_i / N_i : \quad (6.9)$$

Հետևաբար, յուրաքանչյուր q վեկտորի հակադարձ տարածության մեջ բաժին կընկնի

$$\Omega_1 \equiv (\Delta q_1 [\Delta q_2 \times \Delta q_3]) = \frac{(2\pi)^3}{N_1 N_2 N_3} (b_1 [b_2 \times b_3]) = \frac{(2\pi)^3}{N \cdot v_0} = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad (6.10)$$

ծավալ, որտեղ v_0 -ն տարրական բջջի, իսկ V -ն՝ ամբողջ բյուրեղի ծավալն է: (6.10) արտահայտությունը կարելի է ստանալ նաև այլ եղանակով: Եթե նկատի ունենանք, որ q վեկտորի բոլոր, իրարից տարբեր N հատ արժեքներն ընկած են Բրիլյուսենի գոնայում, որի ծավալը՝ $\Omega_0 = (2\pi)^3 / v_0$, ապա մեկ վիճակին (մեկ q վեկտորին) բաժին ընկնող ծավալը՝ $\Omega_1 = \Omega_0 / N = (2\pi)^3 / N v_0 = (2\pi)^3 / V$:

Երբ $V \rightarrow \infty$, ապա $\Omega_1 \sim 1/V \rightarrow 0$ և q ալիքային վեկտորն ընդունում է անընդհատ արժեքներ, կամ, նկատի ունենալով Բրիլյուսենի գոնայում նրա ընդունած արժեքների վերջավոր (N) թիվը, կարելի է համարել, որ q վեկտորը քվադրանդիալ է (տես §2): Նկատի ունենալով այս հանգամանքը, գրենք հակադարձ տարածության dq ծավալում վիճակների թիվը՝

$$dN = \frac{dq}{\Omega_1} = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot dq \equiv D_q dq : \quad (6.11)$$

(6.11) արտահայտության մեջ dq ծավալի տարրի գործակիցը՝ $D_q = V/(2\pi)^3$ մեծությունը հակադարձ տարածության միավոր ծավալում (1սմ⁻³-ում) վիճակների թիվն է: D_q խտությունը կախված չէ q -ից, այսինքն՝ q վեկտորի արժեքները բաշխված են հաստատուն խտությամբ:

Օգտվելով մակրոսկոպական մոլուխի դեպքում q վեկտորի քվադրանդնդիատության հատկությունից, կարելի է հաշվել $\sum_q F_q$ տիպի գումարներ: Իրոք, եթե $V \rightarrow \infty$, ապա ըստ q -ի գումարի մեջ մտնող անդամները կարելի է խմբավորել $q + dq$ տիրույթում, որտեղ նրանց թիվը $dN = Vdq/(2\pi)^3$ է, և ապա ինտեգրել ըստ q -ի բոլոր հնարավոր արժեքների, այսինքն՝

$$\sum_q F_q = \int F(q) \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} dq, \quad (6.12)$$

որտեղ $F(q)$ -ն դիտվում է որպես q -ի անընդհատ ֆունկցիա: Մասնավորապես, L երկարությամբ միաչափ և S մակերեսով երկչափ համակարգերի դեպքում

$$\sum_q F_q = \frac{L}{2\pi} \int F(q) dq = \int F(q) \frac{dq}{\Delta q} = \int F(q) \frac{dq}{(2\pi/L)} \quad (6.13)$$

և

$$\sum_{q_1} F_{q_1} = \frac{S}{(2\pi)^2} \int F(q_1) dq_1 = \int F(q_1) \frac{dq_1}{\Delta q_1} = \int F(q_1) \frac{dq_1}{(2\pi)^2/S} : \quad (6.14)$$

Շրջանային սահմանային պայմանների օգտագործումը մաթեմատիկական հնարք է, որը շատ հեշտացնում է հաշվումները: Սակայն ծագում է հետևյալ ոչ հասարակ հարցը. կփոխվի՞ արդյոք q վեկտորի սեփական արժեքների բաշխումը, եթե օգտվենք կոնկրետ սահմանային պայմաններից և այնուհետև բջիջների թիվը՝ $N \rightarrow \infty$: Այս հարցը պարզաբանելու համար կդիմենք Լեդերմանի թեորեմին, որի համաձայն եթե էրմիտական

մատրիցի s տողերի և s սյունների տարրերը փոփոխենք ցանկացած ձևով, բայց այնպես, որ մատրիցը մնա էրմիտական, ապա մատրիցի սեփական արժեքների թիվը ցանկացած տիրույթում չի կարող աճել կամ նվազել ավելի, քան $2s$ -ով:

Վերադառնանք շարժման (5.10) հավասարմանը և նրա լուծումը փնտրենք

$$u_{n\alpha}^k(t) = \frac{1}{\sqrt{m_k}} v_{n\alpha}^k e^{-i\omega t} \quad (6.15)$$

տեսքով, որտեղ առկա անհայտ $v_{n\alpha}^k$ մեծությունները որոշվում են հետևյալ համակարգից՝

$$\omega^2 v_{n\alpha}^k = \sum_{k'\beta n'} \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(k n; k' n') v_{n'\beta}^{k'} \equiv \sum_{k'\beta n'} D_{\alpha\beta}^{kk'}(n, n') v_{n'\beta}^{k'} : \quad (6.16)$$

Ինչպես հետևում է սահմանումից, $D_{\alpha\beta}^{kk'}(n, n') = (m_k m_{k'})^{-1/2} \Phi_{\alpha\beta}(k n; k' n')$ տարրերն իրական են և համաչափ, այսինքն $\|D_{\alpha\beta}^{kk'}(n, n')\|$ մատրիցն էրմիտական է:

Անվերջ բյուրեղի, ինչպես նաև շրջանային սահմանային պայմաններին բավարարող բյուրեղի համար $D_{\alpha\beta}^{kk'}(n, n')$ տարրերը կախված են n -ից և n' -ից միայն $n - n'$ տարբերության ձևով: Եթե վերցնենք իրական վերջավոր բյուրեղ, որը պարունակում է մոյն թվով տարրական բջիջներ, ինչ որ շրջանային սահմանային պայմաններին բավարարող ցանցը, սակայն որի ատոմների շեղումների վրա դրված են ազատ կամ բնական սահմանային պայմաններ (այն է՝ մակերևութային շերտի ատոմների վրա արտաքին ուժեր չեն ազդում), ապա $D_{\alpha\beta}^{kk'}(n, n')$ մեծությունը կլինի կախված և՛ n -ից, և՛ n' -ից: Մյուս կողմից, եթե (n, k) և (n', k') ատոմները գտնվում են բյուրեղի մակերևութից ավելի մեծ հեռավորության վրա, քան միջատոմական ուժերի գործողության շառավիղն է, ապա համապատասխան $D_{\alpha\beta}^{kk'}(n, n')$ տարրը նորից կախված կլինի միայն $|n - n'|$ հեռավորությունից: Մակերևութային շերտում գտնվող ատոմի համար $D_{\alpha\beta}^{kk'}(n, n')$

տարրերը, որոնք համապատասխանում են բյուրեղից դուրս գտնվող ատոմների հետ փոխազդեցությանը, հավասար են զրոյի: Հետևաբար, եթե երկու (միևնույն թվով տարրական բջիջներից բաղկացած) բյուրեղներից մեկի վրա դրված են շրջանային, իսկ մյուսի վրա՝ բնական սահմանային պայմաններ, ապա նրանց $\|D_{\alpha\beta}^{k'k'}(n, n')\|$ մատրիցներն իրարից կտարբերվեն այն տողերի և սյունակների տարրերով, որոնք համապատասխանում են մակերևութային շերտում գտնվող ատոմներին: Քանի որ միջատոմական ուժերի գործողության շառավիղը կախված չէ ատոմների թվից, ապա իրարից տարբեր տողերի և սյունակների թիվը երկու մատրիցում էլ $3s(N_1N_2 + N_2N_3 + N_1N_3)$ կարգի է, իսկ մատրիցի տողերի և սյունակների լրիվ թիվը $3sN_1N_2N_3$ է: Համաձայն Լեդերմանի թեորեմի՝ շրջանայինից բնական սահմանային պայմաններին անցնելիս հաճախությունների թվի հարաբերական փոփոխությունը՝

$$\frac{N_1N_2 + N_2N_3 + N_1N_3}{N_1N_2N_3} = \frac{1}{N_1} + \frac{1}{N_2} + \frac{1}{N_3} \sim N^{-1/3} \quad (N_1 \sim N_2 \sim N_3) \quad 6.17$$

կարգի մեծություն է և մեծ N -երի համար ձգտում է զրոյի:

Ընդհանուր դեպքում, եթե միջատոմական ուժերը զրոյից տարբեր են միայն վերջավոր թվով հարևանների համար, ապա կոնկրետ սահմանային պայմանների ազդեցությունն անվերջ փոքր է, եթե միայն մակերևութային շերտի ատոմների թվի հարաբերությունը բյուրեղի ողջ ատոմների թվին շատ փոքր է մեկից:

§7. Տատանումների բաշխումը սպեկտրում: Վիճակների խտության ֆունկցիան

Բյուրեղի՝ ցանցի տատանումներով պայմանավորված մի շարք ֆիզիկական հատկություններ բացատրելու համար բոլորովին պարտադիր չէ ունենալ $\omega_j = \omega_j(q)$ դիսպերսիոն հավասարումներով սուրվող լրիվ ինֆորմացիան, բավական է գիտենալ միայն տատանումների (մոդերի) բաշխումն ըստ հաճախությունների:

Ինչպես գիտենք, մակրոսկոպական նմուշի համար ալիքային վեկտորի արժեքները հակադարձ տարածության մեջ բաշխված են $V/(2\pi)^3$ խտությամբ, այնպես որ, երբ $V \rightarrow \infty$, կարելի է համարել, որ ալիքային վեկտորը Բրիլլուենի զոնայում ընդունում է անընդհատ արժեքներ: Նկատի ունենալով կապը ալիքային վեկտորի և սովյալ ճյուղին պատկանող հաճախությունների միջև, կարելի է համարել, որ ω_j -ն նույնպես ընդունում է անընդհատ արժեքներ, ուստի կարելի է որոշել, թե քանի տատանողական մոդ է պարունակվում հաճախությունների $\omega, \omega + d\omega$ տիրույթում:

Նշանակենք j -րդ ճյուղին պատկանող մոդերի թիվը $\omega, \omega + d\omega$ տիրույթում $dN_j(\omega)$ -ով, որը համեմատական է $d\omega$ -ին՝

$$dN_j(\omega) = g_j(\omega)d\omega, \quad (7.1)$$

որտեղ $g_j(\omega)$ ֆունկցիան հաճախությունների միավոր տիրույթում j -րդ ճյուղի մոդերի թիվն է և կոչվում է վիճակների խտության ֆունկցիա: Ցանկացած ճյուղի վիճակների խտության ֆունկցիա բավարարում է

$$\int_{\omega_{j\min}}^{\omega_{j\max}} g_j(\omega)d\omega = N \quad (7.2)$$

նորմավորման պայմանին, որտեղ N -ը բյուրեղում տարրական բջիջների թիվն է, իսկ $\omega_{j\min}$ -ը և $\omega_{j\max}$ -ը՝ j -րդ ճյուղին պատկանող նվազագույն և առավելագույն հաճախությունները:

Այժմ ստանանք արտահայտություն վիճակների խտության ֆունկցիայի համար և ուսումնասիրենք նրա հատկությունները:

Ցանցի հատկություններով պայմանավորված որոշ մեծություններ, համաձայն (6.12) բանաձևի, կարող են ներկայացվել հետևյալ ընդհանուր տեսքով՝

$$\sum_{\mathbf{q}, j} Q(\omega, (\mathbf{q})) = \sum_j \int \frac{V}{(2\pi)^3} d\mathbf{q} Q(\omega, (\mathbf{q})) : \quad (7.3)$$

Այս հավասարության ձախ մասը բոլոր $3Ns$ մոդերի ներդրումների գումարն է, որը բոլոր ճյուղերին պատկանող մոդերի թիվը $\omega, \omega + d\omega$ տիրույթում $g(\omega)d\omega$ նշանակելուց հետո կարելի է ներկայացնել նաև

$$\int d\omega g(\omega) Q(\omega) \quad (7.4)$$

տեսքով: (7.3) և (7.4) ամփոփումներից բխում է, որ

$$g(\omega) = \sum_j \frac{V}{(2\pi)^3} \int dq \delta[\omega - \omega_j(q)] \equiv \sum_j g_j(\omega) : \quad (7.5)$$

Հետևաբար, j -րդ ճյուղի վիճակների խտության ֆունկցիան՝

$$g_j(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int dq \delta[\omega - \omega_j(q)], \quad (7.6)$$

որտեղ ինտեգրումն ըստ q -ի կատարվում է Բրիլյուենի զոնայի կամ հակադարձ ցանցի տարրական բջջի ծավալով: Ստացված (7.6) արտահայտության օգնությամբ վիճակների խտության ֆունկցիայի համար կարելի է տալ տարբեր մաթեմատիկական բանաձևեր, օգտագործելով դելտա-ֆունկցիայի զանազան պատկերացումներ:

Ձևափոխենք այժմ (7.6) արտահայտությունը:

Մոդերի թիվը $\omega, \omega + d\omega$ տիրույթում կարելի է ստանալ, բաժանելով $\omega_j(q) = \omega = \text{const}$ և $\omega_j(q) = \omega + d\omega = \text{const}$ մակերևույթների միջև ընկած

q -տարածության ծավալը (նկ. III.18) մեկ մոդին բաժին ընկնող $(2\pi)^3/V$

ծավալի վրա: Այս նպատակով հաշվենք

նշված ծավալը: Կառուցենք dS հիմքի

մակերեսով մի գլան, որի կողմնային մա-

կերևույթն ուղղահայաց է $\omega_j(q) = \omega$ մա-

կերևույթին: Ինչպես հայտնի է, $\omega_j(q)$

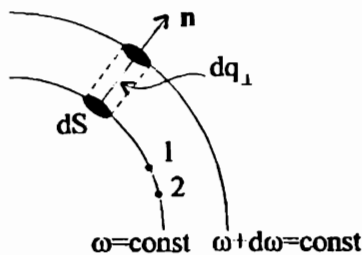
ֆունկցիայի գրադիենտն ուղղահայաց է

$\omega_j(q) = \text{const}$ մակերևույթին: Դրանում

ենշտ է համոզվել, եթե գրենք $\omega_j(q)$ ֆունկ-

ցիայի փոփոխության արտահայտությունը

նույն հավասարահաճախային մակերևույթին պատկանող երկու անվերջ մոտ 1 և 2 կետերի միջև (նկ. III.18): Իրոք՝



Նկ. III.18

$$\omega_2 - \omega_1 \equiv \frac{\partial \omega}{\partial q} \cdot \delta q_{12} + \dots = 0 : \quad (7.7)$$

Մյուս կողմից, քանի որ δq_{12} վեկտորը զանգված է $\omega_j(q) = const$ մակերևույթի վրա (ավելի ճշգրիտ՝ 1 կետում $\omega_j(q) = const$ մակերևույթին սաղաված շոշափող հարթության մեջ), ապա, ըստ (7.7) առնչության

$$\nabla_q \omega_j \equiv \frac{\partial \omega_j}{\partial q} \perp \delta q_{12} ,$$

այսինքն՝ $\nabla_q \omega_j$ վեկտորն ուղղված է q կետում $\omega_j(q) = const$ մակերևույթի n նորմալի ուղղությամբ:

dS հիմքի մակերեսով զլանի ծավալը հավասար է

$$dS \cdot dq_{\perp} = dS \cdot \frac{d\omega}{\left| \partial \omega_j / \partial q \right|} \equiv \frac{dS d\omega}{\left| \nabla_q \omega_j(q) \right|} , \quad (7.8)$$

հետևաբար՝ $\omega = const$ և $\omega + d\omega = const$ մակերևույթների միջև ընկած ծավալը՝

$$d\Omega(\omega) \equiv \iiint_{\omega \leq \omega_j(q) \leq \omega + d\omega} dS dq_{\perp} = d\omega \iint_{\omega_j(q) = \omega} \frac{dS}{\left| \partial \omega_j / \partial q \right|} \equiv d\omega \oint \frac{dS}{\left| \partial \omega_j / \partial q \right|} , \quad (7.9)$$

որտեղ ինտեգրումը կատարվում է $\omega = \omega_j(q) = const$ հավասարահաճախային մակերևույթով: Բաժանելով (7.9) արտահայտությունը $(2\pi)^3/V$ ծավալի վրա և արդյունքը հավասարեցնելով $\omega, \omega + d\omega$ տիրույթում մոդերի լիժին, կստանանք՝

$$g_j(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \oint \frac{dS}{\left| \partial \omega_j / \partial q \right|} = \frac{V}{(2\pi)^3} \oint \frac{dS}{\left| v_{jg}(q) \right|} , \quad (7.10)$$

որտեղ

$$v_{jg}(q) = \frac{\partial \omega_j(q)}{\partial q} \equiv \nabla_q \omega_j(q) \quad (7.11)$$

վեկտորը q ալիքային վեկտորով փաթեթի խմբային արագությունն է $\omega_j(q)$ դիսպերսիոն հավասարումով նկարագրվող միջավայրում:

Ինչպես գիտենք, $\omega_j(q)$ ֆունկցիան սյարբերական է q -տարածության մեջ և յուրաքանչյուր j -ի համար սահմանափակ է վերից և վարից, ինչպես նաև ընդհանուր դեպքում՝ ամենուրեք դիֆերենցելի: Այս փաստերից անմիջապես հետևում է, որ հակադարձ ցանցի յուրաքանչյուր տարրական բջջում պետք է լինեն կետեր, որոնցում $|\nabla_q \omega_j(q)| = 0$: Այդ կետերն ընդունված է անվանել կրիտիկական: Կրիտիկական կետերում (7.10) ինտեգրալում ծագում են եզակիություններ: Ուսումնասիրենք $g_j(\omega)$ ֆունկցիայի վարքը կրիտիկական կետերի շրջակայքում:

Քանի որ $\omega(q)$ -ն (ստորև j ցուցիչը բաց է թողնված) q -ի անընդհատ ֆունկցիա է, ապա այն կարելի է վերածել շարքի q_c կրիտիկական կետի շրջակայքում՝

$$\omega(q) = \omega_c + \gamma_1 q_x^2 + \gamma_2 q_y^2 + \gamma_3 q_z^2 : \quad (7.12)$$

Այս արտահայտության մեջ քառակուսային անդամները բերված են անկյունագծային տեսքի, $\omega_c \equiv \omega(q_c)$, $q - q_c$ տարբերությունը փոխարինված է $q(q_x, q_y, q_z)$ -ով, իսկ վերլուծության գծային անդամները, կրիտիկական կետի սահմանման համաձայն, բացակայում են: Կախված γ_i գործակիցների ճշանդներից, հնարավոր է չորս դեպք:

1. Եթե երեք գործակիցներն էլ դրական են՝ $\gamma_i > 0$ ($i = 1, 2, 3$), ապա $\omega(q)$ ֆունկցիան ω_c կետում ունի տեղային մինիմում, և $\omega(q) = \omega = \text{const}$ մակերևույթն էլիպսարդ է, որով սահմանափակված ծավալը՝

$$\Omega(\omega) = \frac{4\pi (\omega - \omega_c)^{3/2}}{3 (\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^{1/2}} , \quad (7.13)$$

իսկ ω և $\omega + d\omega$ հավասարահաճախային մակերևույթների միջև պարփակված ծավալը՝

$$d\Omega = \Omega(\omega + d\omega) - \Omega(\omega) = \frac{2\pi}{(\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^{1/2}} (\omega - \omega_c)^{1/2} d\omega : \quad (7.14)$$

(7.14) և (7.9) բանաձևերի օգնությամբ կստանանք՝

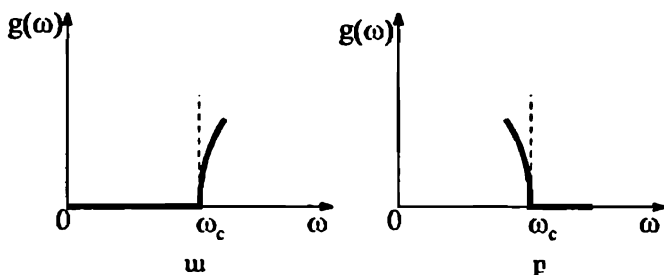
$$dN(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} d\Omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{2\pi(\omega - \omega_c)^{1/2}}{(\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^{1/2}} d\omega \equiv g(\omega) d\omega, \quad (7.15)$$

որտեղից էլ հետևում է վիճակների խտության ֆունկցիայի տեսքը՝

$$g(\omega) = \frac{V}{4\pi^2 (\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^{1/2}} (\omega - \omega_c)^{1/2} : \quad (7.16)$$

Այս բանաձևը սեղի ունի $\omega > \omega_c$ սիդություն: $\omega < \omega_c$ սիդությոն $g(\omega)$ ֆունկցիայում ներդրում չի սալիս: Այսպիսով, $\omega = \omega_c$ կետում $g(\omega)$ ֆունկցիան անընդհատ է, իսկ նրա ածանցյալը տարամիսում է $(\omega - \omega_c)^{-1/2}$ օրենքով (նկ. III.19, ա)՝

$$\left. \frac{dg(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega \rightarrow \omega_c} = \frac{V}{8\pi^2 (\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^{1/2}} \frac{1}{(\omega - \omega_c)^{1/2}} \rightarrow +\infty : \quad (7.17)$$



Նկ. III.19

2. Եթե բոլոր գործակիցները բացասական են՝ $\gamma_i < 0$ ($i = 1, 2, 3$), ապա $\omega(q)$ ֆունկցիան ω_c կետում ունի սեղային մաքսիմում: Հավասարահաճախային

$$\omega_c - \omega = |\gamma_1| q_x^2 + |\gamma_2| q_y^2 + |\gamma_3| q_z^2 \quad (7.18)$$

մակերևույթը նորից էլիպսարդ է, որի ծավալը՝

$$\Omega(\omega) = \frac{4\pi}{3} \frac{(\omega_c - \omega)^{3/2}}{|\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3|^{1/2}} : \quad (7.19)$$

Երբ ω -ն աճում է, ապա $\Omega(\omega)$ -ն նվազում է, հետևաբար՝ վիճակների խտության ֆունկցիան պետք է որոշել

$$g(\omega) = -\frac{d\Omega}{d\omega} \quad (7.20)$$

բանաձևի միջոցով: Տվյալ դեպքում, ըստ (7.19) և (7.20) առնչությունների՝

$$g(\omega) = \frac{V}{4\pi^2 |\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3|^{1/2}} (\omega_c - \omega)^{1/2}, \quad (7.21)$$

երբ $\omega < \omega_c$, իսկ $\omega > \omega_c$ սիտույթը ներդրում չի տալիս: $\omega = \omega_c$ կետում $g(\omega)$ ֆունկցիան անընդհատ է, իսկ նրա ածանցյալը՝

$$\left. \frac{dg(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega \rightarrow \omega_c} = -\frac{V}{8\pi^2 |\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3|^{1/2}} \frac{1}{(\omega_c - \omega)^{1/2}} \rightarrow -\infty: \quad (7.22)$$

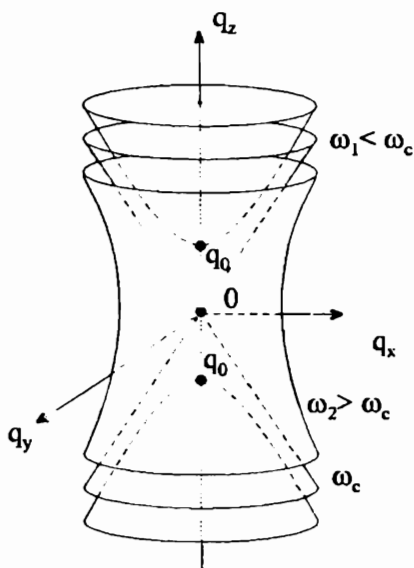
$g(\omega)$ ֆունկցիայի վարքը կրիտիկական կետի շրջակայքում պատկերված է նկ. III.19, բ-ում:

3. Եթե երեք գործակիցներից երկուսը, դիցուք՝ γ_1 -ը և γ_2 -ը, դրական են, իսկ γ_3 -ը՝ բացասական, ապա ω_c -ն I տեսակի (S_1) բաժրային կետ է: Հետագա հաշվարկների պարզեցման համար ենթադրենք, որ $\gamma_1 = \gamma_2 \equiv \gamma$: Այս դեպքում $\omega(q) = \text{const}$ մակերևույթը q_z առանցքով պտտման հիպերբոլարդ է՝

$$\omega - \omega_c = \gamma (q_x^2 + q_y^2) - |\gamma_3| q_z^2, \quad (7.23)$$

ընդ որում $\omega = \omega_c$ արժեքն ընկած է

$$q_1 \equiv \sqrt{q_x^2 + q_y^2} = \left(\frac{|\gamma_3|}{\gamma} \right)^{1/2} |q_z| \quad (7.24)$$



Նկ. III.20

կոնի մակերևույթի վրա (նկ. III.20): Եթե $\omega < \omega_c$, ապա (7.23) հավասարումը ներկայացնում է երկխառու հիպերբոլադների ընտանիք, իսկ $\omega > \omega_c$ դեպքում՝ միախառու հիպերբոլադների ընտանիք (նկ. III.20):

Հաշվենք q -տարածության այն տիրույթի ծավալը, որը սահմանափակված է հիպերբոլադով և $q_z^0 > q_0 = [(\omega_c - \omega)/|\gamma_3|]^{1/2}$ հարթությամբ՝

$$\begin{aligned}\Omega(\omega) &= 2 \int_{q_0}^{q_z^0} \pi (q_x^2 + q_y^2) dq_z = \frac{2\pi|\gamma_3|}{\gamma} \int_{q_0}^{q_z^0} (q_z^2 - q_0^2) dq_z = \\ &= \frac{2\pi|\gamma_3|}{\gamma} \left[\frac{q_z^{03}}{3} + \frac{2}{3} \left(\frac{\omega_c - \omega}{|\gamma_3|} \right)^{3/2} + q_z^0 \frac{\omega - \omega_c}{|\gamma_3|} \right],\end{aligned}\quad (7.25)$$

որտեղ 2 գործակիցը հաշվի է առնում հիպերբոլադի երկու խառուների առկայությունը, իսկ q_0 -ն հիպերբոլադի գագաթի կոորդինատն է: (7.25), (7.14), (7.15) բանաձևերից կստանանք՝

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 \gamma \sqrt{|\gamma_3|}} \left[\sqrt{|\gamma_3|} q_z^0 - (\omega_c - \omega)^{1/2} \right], \quad \omega < \omega_c: \quad (7.26)$$

Երբ $\omega > \omega_c$, իզոհաձախային մակերևույթն ունի միախառու հիպերբոլադի տեսք, և q_z^0 և $-q_z^0$ հարթություններով և հիպերբոլադով սլարփակված ծավալը՝

$$\begin{aligned}\Omega(\omega) &= \int_{-q_z^0}^{q_z^0} \pi q_1^2 dq_z = 2\pi \int_0^{q_z^0} \left(\frac{\omega - \omega_c}{\gamma} + \frac{|\gamma_3|}{\gamma} q_z^2 \right) dq_z = \\ &= \frac{2\pi|\gamma_3|}{\gamma} \left[\frac{\omega - \omega_c}{|\gamma_3|} q_z^0 + \frac{1}{3} q_z^{03} \right],\end{aligned}$$

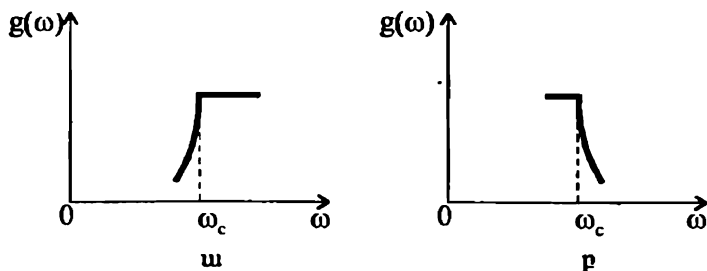
որտեղից էլ

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 \gamma} q_z^0, \quad \omega > \omega_c: \quad (7.27)$$

Ինչպես հետևում է (7.26) և (7.27) բանաձևերից, $g(\omega)$ ֆունկցիան անընդհատ է $\omega = \omega_c$ կետում, ածանցյալն աջից հավասար է զրոյի, իսկ ձախից՝

$$\left. \frac{dg(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega \rightarrow \omega_c} = -\frac{V}{8\pi^2 \gamma \sqrt{|\gamma_3|}} \frac{1}{(\omega_c - \omega)^{1/2}} \rightarrow +\infty : \quad (7.28)$$

Նկ. III.21, ա-ում պատկերված է $g(\omega)$ ֆունկցիայի վարքը $\omega \sim \omega_c$ կետի շրջակայքում:



Նկ. III.21

4. Եթե երեք գործակիցներից երկուսը, դիցուք՝ γ_1 -ը և γ_2 -ը, բացասական են, իսկ γ_3 -ը՝ դրական, ապա ω_c կետը II տեսակի (S_2) քամբային կետ է:

Կատարելով նույն գործողությունները, ինչ որ 3. դեպքում, կստանանք՝

$$\Omega(\omega) = \frac{2\pi\gamma_3}{|\gamma|} \left[\frac{1}{3} (q_z^0)^3 + \frac{2}{3} \frac{(\omega - \omega_c)^{3/2}}{\gamma_3^{3/2}} - \frac{\omega - \omega_c}{\gamma_3} q_z^0 \right], \text{ երբ } \omega > \omega_c, \quad (7.29)$$

$$\Omega(\omega) = \frac{2\pi\gamma_3}{|\gamma|} \left[\frac{1}{3} (q_z^0)^3 + \frac{\omega_c - \omega}{\gamma_3} q_z^0 \right], \text{ երբ } \omega < \omega_c : \quad (7.30)$$

$\Omega(\omega)$ ֆունկցիան աճում է, երբ ω -ն նվազում է, ուստի, օգտվելով (7.20) բանաձևից, կստանանք՝

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 |\gamma| \sqrt{\gamma_3}} \left[\sqrt{\gamma_3} q_z^0 - (\omega - \omega_c)^{1/2} \right], \text{ երբ } \omega > \omega_c, \quad (7.31)$$

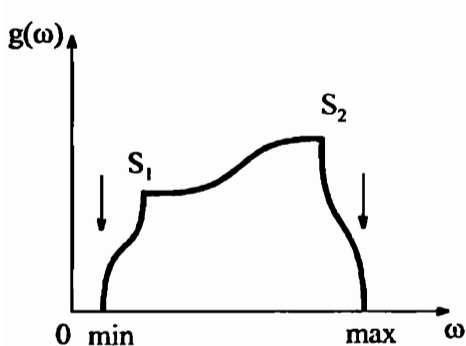
$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 |\gamma|} q_z^0, \text{ երբ } \omega < \omega_c : \quad (7.32)$$

Համաձայն (7.31) և (7.32) արտահայտությունների, $g(\omega)$ ֆունկցիան

անընդհատ է $\omega = \omega_c$ կեսում, ածանցյալը ձախից հավասար է զրոյի, իսկ աջից

$$\frac{dg(\omega)}{d\omega} = -\frac{V}{8\pi^2\gamma\sqrt{|\gamma_3|}} \frac{1}{(\omega - \omega_c)^{1/2}} \rightarrow -\infty : \quad (7.33)$$

Քննարկված օրինակներից գալիս ենք այն եզրակացությանը, որ եռաչափ ցանցի ցանկացած ճյուղի վիճակների խտության ֆունկցիան՝ հաճախությունից կախված անընդհատ է, իսկ նրա ածանցյալը կրիտիկական կետերում ձգտում է անվերջի: Վիճակների խտության ֆունկցիայի՝ հաճախությունից կախման որակական վարքը սլաքակերպված է նկ. III.22-ում: Ընդհանուր դեպքում վիճակների խտության ֆունկցիայի եզակիությունների բանալը և աեսակները որոշվում են Վան-Հոֆի թեորեմով, որի համաձայն եռաչափ ցանցի տառանդումների սպեկտրը յուրաքանչյուր ճյուղի համար սյարունակում է առնվազն մեկական կրիտիկական կետ S_1 և



Նկ. III.22

S_2 տեսակի, իսկ սպեկտրի վերին սահմանի վրա վիճակների խտության ֆունկցիայի ածանցյալը պետք է ձգտի $-\infty$: Հարկ է նշել, որ կրիտիկական կետերի փաստական թիվը կարող է զգալիորեն գերազանցել թեորեմով պահանջվող նվազագույն թիվը:

Բյուրեղական ցանցի վիճակների խտության լրիվ ֆունկցիան առանձին ճյուղերի վիճակ-

ների խտության ֆունկցիաների գումար է (աես (7.5) բանաձևը), ուստի նրա գրաֆիկը բաղկացած է նկ. III.22-ի սխալի գրաֆիկների գումարից, որոնց թամբային S_1 և S_2 , ինչպես նաև $\max$ և $\min$ կետերը դասավորված են տարբեր հաճախությունների վրա:

Այժմ ուսումնասիրենք միաչափ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան:

Եթե (7.6) ընդհանուր արտահայտության մեջ վիճակների թվի եռաչափ արտահայտությունից անցնենք միաչափ արտահայտությանը՝

$$\frac{V}{(2\pi)^3} dq \rightarrow \frac{L}{2\pi} dq_z \equiv \frac{L}{2\pi} dq, \quad (7.34)$$

կստանանք՝

$$g_j(\omega) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq \delta[\omega - \omega_j(q)] : \quad (7.35)$$

Նկատի ունենալով $\omega_j(q)$ ֆունկցիայի զույգությունը, ինչպես նաև դելտա-ֆունկցիայի հետևյալ հատկությունը՝

$$\delta[\varphi(x)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|\varphi'(x)|_{x=x_i}}, \quad (7.36)$$

որտեղ x_i -ն $\varphi(x) = 0$ հավասարման i -րդ արմատն է, վիճակների խտության ֆունկցիան կարող ենք ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

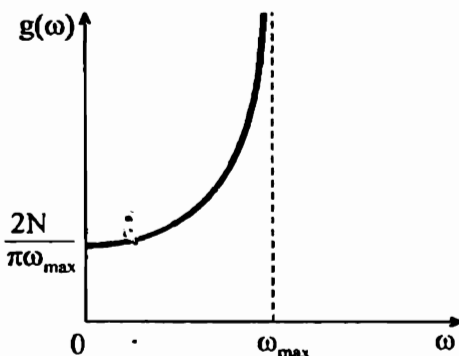
$$g_j(\omega) = \frac{L}{2\pi} \sum_i \left| \frac{d\omega_j}{dq} \right|_{q=q_i}^{-1} : \quad (7.37)$$

Պարզ ցանցի դեպքում, օգտվելով (3.9) դիսպերսիոն հավասարումից, վիճակների խտության ֆունկցիայի համար ստանում ենք հետևյալ արտահայտությունը (նկ. III.23)

$$g(\omega) = \frac{2N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} : \quad (7.38)$$

Այս արտահայտությունը կարելի է ստանալ նաև ավելի անմիջական ձևով, այն է՝ իրար հավասարեցնելով dq և $d\omega$ տիրույթներում արված վիճակների միևնույն թիվը՝

$$2 \frac{dq}{2\pi/L} = g(\omega) d\omega \quad (7.39)$$



Նկ. III.23

կամ

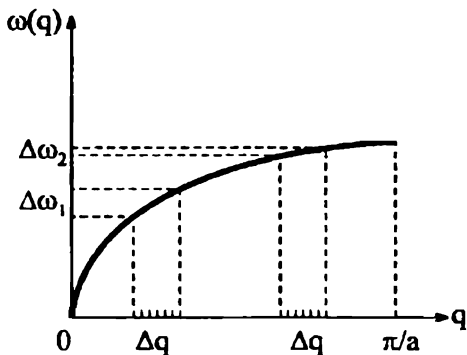
$$g(\omega) = \frac{L}{2\pi} \left| \frac{dq}{d\omega} \right| = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{|v_g|} ; \quad (7.40)$$

(7.39) արտահայտության ձախ մասի 2 գործակիցը հաշվի է առնում այն փաստը, որ $d\omega$ ափրոյթում ներդրում են սալիս և դրական, և բացասական q -երը (նկ. III.5): Միաչափ ցանցի (3.9) դիսպերսիոն հավասարումից որոշելով $q(\omega)$ ֆունկցիան՝

$$q = \frac{2}{a} \arcsin \frac{\omega}{\omega_{\max}} , \quad (7.41)$$

և նրա ածանցյալի արտահայտությունը տեղադրելով (7.40) բանաձևում, կստանանք (7.38) արտահայտությունը:

Ինչպես հեռևում է (7.38) բանաձևից, երբ $\omega \rightarrow \omega_{\max}$, $g(\omega) \rightarrow \infty$



Նկ. III.24

$(\omega_{\max} - \omega)^{-1/2}$ օրենքով, այսինքն՝ միաչափ դեպքում եզակիությունն ավելի խիստ է արտահայտված, քան եռաչափ դեպքում՝ տարամիտում է ոչ միայն ածանցյալը, այլ նաև ֆունկցիան: Սակայն այս եզակիությունը նույնպես ինտեգրելի է, քանի որ մոդերի լրիվ թիվը, համաձայն մորմավորման (7.2) պայմանի, վերջավոր է (և հավասար $g(\omega)$ կորով սահմանա-

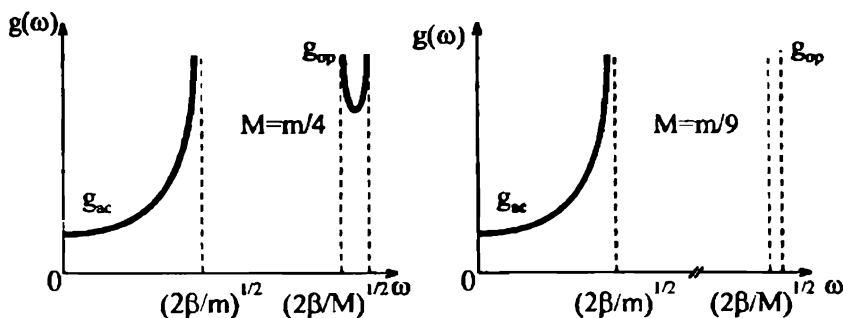
փակված մակերեսին, նկ. III.23): Վիճակների խտության ֆունկցիայի արագ աճը Բրիյուոնի գոնայի սահմանին մոտենալիս ($\omega \rightarrow \omega_{\max}$) արտահայտում է այն փաստը, որ տարբեր մոդերին համապատասխանող վիճակները բաշխվում են ավելի և ավելի խիտ (նկ. III.24)՝ վիճակների միևնույն թիվը $(L/2\pi)\Delta q$, բաշխված է $\Delta\omega_2 < \Delta\omega_1$ հաճախային ափրոյթներում:

Եթե $\omega = \omega(q)$ կախումը լինի ոչ մոնոտոն, ապա միաչափ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան կունենա եզակիություններ մալ Բրիլյուսնի զոնայի ներքին կետերում:

Միաչափ բարդ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան բաղկացած է երկու՝ ձայնային և օպտիկական ճյուղերից, որոնք տրվում են (7.37) բանաձևով ($j = 1$ ձայնային ճյուղ, $j = 2$ ՝ օպտիկական): Մասնավորապես, երկու տարբեր զանգվածներով և միևնույն ուժային հաստատուններով ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիայի ձայնային և օպտիկական ճյուղերը զանգվածների հարաբերության երկու տարբեր արժեքների համար պատկերված են նկ. III.25-ում: Ակնհայտ է, որ զոնայի եզրերին մոտենալիս, երբ $v_g \rightarrow 0$, $g_j(\omega) \rightarrow \infty$, սակայն նրա ինտեգրալը վերջավոր է՝

$$\int_0^{\infty} g(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_{ac}(\pi/a)} g_{ac}(\omega) d\omega + \int_{\omega_{op}(\pi/a)}^{\omega_0} g_{op}(\omega) d\omega = N + N = 2N : \quad (7.42)$$

Հարկ է նշել, որ բջջի ասումների զանգվածների հարաբերության մեծ արժեքների համար օպտիկական ճյուղի մոդերի խմբային արագությունը մոտ է զրոյին, որի հետևանքով օպտիկական ճյուղերը գործնականում չեն մասնակցում ցանցում էներգիայի տեղափոխմանը:



Նկ. III.25

Ինչպես հետևում է ստացված արտահայտություններից, ինչպես նաև III.23 և III.25 նկարներից, միաչափ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան սպեկտրի սկզբնամասում ($\omega \rightarrow 0$) զրոյից տարբեր վերջավոր մեծությամբ է, իսկ եզրերի մոտ $g(\omega) \rightarrow \infty$:

ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ՑԱՆՅԻ ՋԵՐՄԱՅԻՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

§1. Պինդ մարմնի ջերմունակության դասական տեսությունը

Մեծ թվով մասնիկներից բաղկացած մակրոհամակարգի՝ բյուրեղական ցանցի դիսկրետային ուսումնասիրությունը թույլ է տալիս վիճակագրական ֆիզիկայի մեթոդներով և որոշակի մոդելների շրջանակներում հաշվարկել պինդ մարմնի ջերմային հատկությունները բնութագրող մեծությունները:

Տարածական ցանցի ստատիկ մոդելի համաձայն, ցանցի հանգույցներում գտնվում են անշարժ ատոմները (իոնները), որոնց վախճաղեցության պոտենցիալ էներգիան հավասարակշռության վիճակում նվազագույնն է:

Ըստ դասական պատկերացումների, համակարգն այդպիսի վիճակում բնութագրվում է $T = 0\text{K}$ ջերմաստիճանով: Բացարձակ զրոյից տարրեր ջերմաստիճաններում ատոմները կատարում են անկանոն, քառասային շարժումներ հավասարակշռության դիրքերի շուրջը: Տատանվող ատոմների համակարգի մեխանիկական էներգիան ատոմների շարժման կինետիկական և նրանց վախճաղեցության պոտենցիալ էներգիաների գումարն է, որի միջին արժեքը ջերմային հավասարակշռության վիճակում իրենից ներկայացնում է համակարգի ներքին էներգիան:

Ստանանք բյուրեղական ցանցի ներքին էներգիայի արտահայտությունը դասական տեսության շրջանակներում:

Դասական համակարգի յուրաքանչյուր միկրոսկոպական վիճակ միարժեքորեն որոշվում է համակարգը կազմող բոլոր մասնիկների $(r_1, r_2, \dots, r_N) \equiv r$ կոորդինատներով և $(p_1, p_2, \dots, p_N) \equiv p$ իմպուլսներով, N -ը մասնիկների թիվն է: Որևէ $A(r_1, r_2, \dots, r_N; p_1, p_2, \dots, p_N) \equiv A(r, p)$ դիսկրետական մեծության միջին արժեքը ջերմային հավասարակշռության վիճակում, համաձայն վիճակագրական ֆիզիկայի, որոշվում է

$$\bar{A} = \int A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\Gamma \quad (1.1)$$

արտահայտությամբ, որտեղ $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N) \equiv f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ ֆունկցիան համակարգի բաշխման ֆունկցիան է,

$$d\Gamma = d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \dots d\mathbf{p}_N = \prod_{i=1}^N d\mathbf{r}_i d\mathbf{p}_i, \quad (1.2)$$

արտադրյալը՝ ֆազային ծավալի տարրը $6N$ -չափանի ֆազային տարածության մեջ, որտեղ համակարգի վիճակը պատկերվում է մեկ կետով, որի կոորդինատներն են $r_{1x}, r_{1y}, r_{1z}, r_{2x}, r_{2y}, r_{2z}, \dots, r_{Nx}, r_{Ny}, r_{Nz}, p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}, p_{2x}, p_{2y}, p_{2z}, \dots, p_{Nx}, p_{Ny}, p_{Nz}$ $6N$ անկախ փոփոխականները: $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\Gamma$ արտահայտությունը հավանականությունն է այն բանի, որ համակարգի վիճակը պատկերող կետն ընկած է $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ կետն ընդգրկող $d\Gamma$ ֆազային ծավալում:

Բաշխման ֆունկցիան բավարարում է նորմավորման պայմանին՝

$$\int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\Gamma = 1, \quad (1.3)$$

որտեղ ինտեգրումն ըստ իմպուլսների պրոյեկցիաների կատարվում է $(-\infty, \infty)$ սահմաններում, իսկ ըստ կոորդինատների՝ համակարգի V ծավալում:

Դասական վիճակագրական ֆիզիկայում բաշխման ֆունկցիան տրվում է բոլցմանյան բաշխման աեսքով՝

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = Z^{-1} \exp \left[-\frac{E(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{k_B T} \right], \quad (1.4)$$

որտեղ $E(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$ -ն համակարգի լրիվ մեխանիկական էներգիան է $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ վիճակում, T -ն՝ բացարձակ ջերմաստիճանը, $k_B = 1,38 \cdot 10^{-16}$ էրգ/աստ.՝ Բոլցմանի հաստատունը, իսկ Z -ը՝ համակարգի վիճակագրական ինտեգրալ՝

$$Z(T, V, N) = \int \exp \left[-\frac{E(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{k_B T} \right] d\Gamma, \quad (1.5)$$

որը որոշվում է (1.3) նորմավորման պայմանից: (1.1), (1.4) և (1.5) բանաձևերի օգնությամբ ցանցի ներքին էներգիայի համար ստացվում է հետևյալ արտահայտությունը՝

$$\begin{aligned}
 U &= \int E(r, p) f(r, p) d\Gamma = \frac{1}{Z} \int E(r, p) \exp \left[-\frac{E(r, p)}{k_B T} \right] d\Gamma = \\
 &= -\frac{1}{Z} \frac{d}{d\beta} \int \exp[-\beta E(r, p)] d\Gamma = -\frac{1}{Z} \frac{dZ}{d\beta} = -\frac{d}{d\beta} \ln Z,
 \end{aligned}
 \tag{1.6}$$

որտեղ

$$\beta = \frac{1}{k_B T} : \tag{1.7}$$

Համաձայն (1.6) առնչության, ներքին էներգիայի հաշվարկը բերվում է վիճակագրական ինտեգրալի՝ β -ից ունեցած կախման բացահայտմանը:

Ցանցի ներքին էներգիան որպես (T, V, N) պարամետրերի ֆունկցիա որոշելու համար անհրաժեշտ է (1.6) բանաձևում տեղադրել ցանցի լրիվ մեխանիկական էներգիայի արտահայտությունը: Ներդաշնակ մոտավորության շրջանակներում այն կարելի է ներկայացնել

$$E(p, u) = \sum_{i=1}^{3N} \sum_{k=1}^s \frac{p_{ik}^2}{2M_k} + \Phi_0 + \Phi(u) \equiv \Phi_0 + \varepsilon(p, u) \tag{1.8}$$

գումարի տեսքով, որտեղ Φ_0 -ն հավասարակշռության դիրքերում գտնվող ատոմների փոխազդեցության էներգիան է, $\Phi(u)$ -ն՝ ստատանոմներով պայմանավորված պոտենցիալ էներգիան (տես III.5.3 բանաձևը), M_k -ն k տեսակի մասնիկի զանգվածը: Համաձայն (1.8) արտահայտության, $\varepsilon(p, u)$ էներգիան մասնիկների իմպուլսների և կոորդինատների բառակուսային ֆունկցիա է, ուստի Z վիճակագրական ինտեգրալը կարվի Պուասոնի ինտեգրալների արտադրյալի տեսքով (Հավելված 2):

Սակայն վիճակագրական ինտեգրալի՝ մեզ հետաքրքրող ջերմաստիճանային կախումը կարելի է ստանալ ավելի դյուրին եղանակով:

Պարզ ցանցի դեպքում $\varepsilon(p, u)$ ֆունկցիան կախված է $3N$ իմպուլսներից և $3N$ շեղումներից, ուստի եթե (1.6) ինտեգրալում անցնենք ինտեգրման նոր փոփոխականների՝

$$p'_i = \sqrt{\beta} p_i, \quad u'_i = \sqrt{\beta} u_i, \quad (i = 1, 2, \dots, 3N),$$

ապա

$$d\Gamma = du_{1x} du_{1y} du_{1z} \dots dp_{Nx} dp_{Ny} dp_{Nz} = \beta^{-3N} d\Gamma', \quad (1.10)$$

$$\varepsilon(p, u) = \beta^{-1} \varepsilon(p', u'),$$

և վիճակագրական ինտեգրալի համար կստանանք

$$Z = C \exp(-\beta U_0) \beta^{-3N} \quad (1.11)$$

արտահայտությունը, որտեղ C մեծությունը կախված չէ β պարամետրից:

(1.6), (1.7) և (1.11) բանաձևերից ցանցի ներքին էներգիայի համար ստացվում է

$$U = U_0 + 3Nk_B T \quad (1.12)$$

արտահայտությունը, որի համաձայն հավասարակշռության դիրքի շուրջ տատանվող յուրաքանչյուր աստմի բաժին է ընկնում $3k_B T$ էներգիա, կամ տատանողական յուրաքանչյուր ազատության աստիճանին՝ $k_B T$ էներգիա: Այս արդյունքը հետևանք է ներդաշնակ մոտավորության այն հատկության, որի համաձայն N փոխազդող մասնիկների համակարգին կարելի է համապատասխանության մեջ դնել անկախ, իրար հետ չփոխազդող ներդաշնակ միաչափ տատանակների համախումբ (տես III.2. III.5), որոնց թիվը հավասար է համակարգի ազատության աստիճանների թվին (տվյալ դեպքում՝ $3N$ -ի):

Եթե տարրական բջիջը պարունակում է s աստմ, ապա ցանցի ազատության աստիճանների թիվը կլինի $3sN$, հետևաբար, նրա ներքին էներգիայի համար կստացվի

$$U = U_0 + 3sNk_B T \quad (1.13)$$

արտահայտությունը: $T = 0\text{K}$ ջերմաստիճանում (1.12) և (1.13) բանաձևերից ստացվում է ստատիկ ցանցի մոտավորության արդյունքը՝ $U = U_0$: Որպես կանոն, մեկ մասնիկին բաժին ընկնող հավասարակշռական էներգիան $U_0/N = u_0 \sim 1$ էՎ կարգի մեծություն է, իսկ ջերմային էներգիան՝

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{N} (U - U_0) = 3k_B T, \quad (1.14)$$

զգալի փոքր է 1 էՎ-ից ($T = 300\text{K}$ -ում $k_B T = 0,025875$ էՎ), հետևաբար, (1.12), (1.13) բանաձևերում II գումարելին փոքր ուղղում է U_0 -ի համեմատությամբ, և որի անմիջական չափումը կապված է զգալի դժվարությամբ-

ների հետ: Փորձնականորեն շատ ավելի հարմար է չափել համակարգի ջերմունակությունը՝

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3sNk_B : \quad (1.15)$$

Համաձայն (1.15) բանաձևի, պինդ մարմնի ջերմունակությունը հաստատուն մեծություն է, և պարզ ցանց ($s = 1$) ունեցող նյութի մեկ մոլի համար ($N = N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ մոլ⁻¹) այն հավասար է՝

$$C_V^\mu = 3N_A k_B = 3R , \quad (1.16)$$

որտեղ R -ը գազային հաստատունն է

$$R = k_B N_A = 8,314 \cdot 10^7 \text{ էրգ/մոլ-աստ} = 8,314 \text{ Ջ/մոլ-աստ} \approx \\ \approx 1,98 \text{ կալ/մոլ-աստ} : \quad (1.17)$$

(1.16) արտահայտությունը Դյուլոնգի և Պաիի օրենքն է, որի համաձայն պինդ մարմնի ջերմունակությունը հաստատուն մեծություն է և կախված չէ պինդ մարմնի տեսակից: Հարկ է շեշտել, որ կատարված հաշվարկները վերաբերվում են միայն ցանցային ջերմունակությանը, այլ կերպ ասած, մեկուսիչ բյուրեղական մարմիններին, որոնցում բացակայում է ազատ էլեկտրոնային զազը: Սակայն Դյուլոնգի և Պաիի փորձերում, որոնք կատարվել են սենյակային ջերմաստիճաններում, (1.16) արդյունքը ստացվել է և՛ մեկուսիչների, և՛ մետաղների համար:

Ինչպես ցույց տվեցին հետագա փորձերը, ջերմաստիճանի նվազման հետ պինդ մարմնի ջերմունակությունը նվազում է և ձգտում զրոյի, երբ $T \rightarrow 0\text{K}$: Այսպիսով, դասական տեսությունն ի վիճակի չէ բացատրել պինդ մարմնի ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումը: Ավելացնենք նաև, որ բարձր ջերմաստիճաններում էլ ջերմունակությունը թույլ ձևով կախված է ջերմաստիճանից և որոշ, չնայած և փոքր, չափով տարբերվում է $3R$ դասական արժեքից: Սակայն եթե վերջին փաստը պայմանավորված է ներդաշնակ ցանցի մոլեկուլային ընտրությամբ, ապա ցածր ջերմաստիճաններում փորձի և տեսության հակասությունը հետևանք է դասական տեսության սահմանափակության:

Ինչպես հայտնի է, դասական նկարագրությունը համապատասխանում է իրականությանն այնպիսի պայմաններում, երբ քվանտային երևույթներն էական դեր չեն խաղում: Եթե համակարգը կազմող մասնիկների միջև

միջին հեռավորությունը $\bar{r}$ է, ապա դասական նկարագրության կիրառելիության չափանիշը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\bar{r} \gg \bar{\lambda}_B, \quad (1.18)$$

որտեղ $\bar{\lambda}_B$ մեծությունը մասնիկին վերագրվող դրբրոյլյան ալիքի երկարության միջինն է, որը ստացվում է Դը Բրոյլի ալիքի $\lambda = hp^{-1}$ արտահայտությունն ըստ իմպուլսների բաշխման միջինացումից՝

$$\bar{\lambda}_B = \overline{hp^{-1}} = \frac{h \int_0^\infty \frac{1}{p} 4\pi p^2 \exp\left(-\frac{p^2}{2Mk_B T}\right) dp}{\int_0^\infty 4\pi p^2 \exp\left(-\frac{p^2}{2Mk_B T}\right) dp} = \frac{2h}{(2\pi M k_B T)^{1/2}}, \quad (1.19)$$

որտեղ M -ը ասումի զանգվածն է, $h = 6,6262 \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ-ը՝ Պլանկի հաստատունը: Քանի որ $\bar{r} \approx (V/N)^{1/3}$, ապա (1.18) և (1.19) առնչություններից կստանանք՝

$$\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{M k_B T} \right)^{3/2} \ll 1, \quad (1.20)$$

համաձայն որի դասական նկարագրությունը համապատասխանում է իրականությանը փոքր խտությունների և բարձր ջերմաստիճանների ափսոսաբանում:

Թվային գնահատումներ կատարելու համար հարմար է (1.20) չափանիշում անցնել նյութը բնութագրող պարամետրերի: Նկատի ունենալով, որ

$$\frac{N}{V} = \frac{\rho}{\mu} N_A, \quad M = \frac{\mu}{N_A},$$

որտեղ ρ -ն մարմնի խտությունն է, μ -ն՝ մոլային զանգվածը, և տեղադրելով հաստատումների թվային արժեքները, կստանանք՝

$$5 \cdot 10^4 \frac{\rho}{\mu^{5/2} T^{3/2}} \ll 1: \quad (1.21)$$

Տարրերի մեծամասնության համար $T \approx 100\text{K}$ -ում (1.21) անհավասարության ձախ մասը $10^{-3} \div 10^{-2}$ կարգի մեծություն է, այսինքն՝ սենյակային ջերմաստիճաններում քվանտային երևույթներն էական դեր չեն խաղում:

Սակայն որոշ տարրերի համար (**Be**, **B**, **C**) այն ընդունում է 0,1 և ավելի մեծ արժեքներ: Հետևաբար, այդ նյութերի ջերմային հատկությունների, մասնավորապես՝ ջերմունակության, հաշվարկը դասական վիճակագրության մեթոդներով կարող է համապատասխանել իրականությանը սենյակայինից զգալի բարձր ջերմաստիճաններում, և քվանտային օրինաչափությունները կարող են ի հայտ գալ անգամ սենյակային ջերմաստիճաններում:

Այսպիսով, ջերմունակության, ինչպես նաև այլ թերմոդինամիկական մեծությունների ջերմաստիճանային կախումները ջերմաստիճանային ամբողջ տիրույթում հնարավոր է ստանալ միայն քվանտային տեսության շրջանակներում:

§2. Պինդ մարմնի ջերմունակության քվանտային տեսությունը

Համակարգի յուրաքանչյուր միկրովիճակ քվանտային մեխանիկայում միարժեքորեն տրվում է քվանտային քվերի լրիվ հավաքածուով: Ինչպես և դասական նկարագրության դեպքում, համակարգի որևէ մակրոսկոպական բնութագրի հաշվելու համար անհրաժեշտ է կատարել միջինացում ըստ համակարգի բոլոր հնարավոր միկրոսկոպական (քվանտային) վիճակների: Որևէ մեծության միջին արժեքը ջերմային հավասարակշռության վիճակում որոշվում է

$$\overline{A} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \cdot w_{\alpha} \quad (2.1)$$

արտահայտությամբ, որտեղ $\alpha \equiv (n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)$ համակարգի տվյալ քվանտային վիճակը որոշող քվանտային քվերի լրիվ հավաքածուն է, $A_{\alpha} \equiv A_{(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)}$ -ն՝ $\hat{A}$ օպերատորի միջին արժեքը α քվանտային վիճակում, իսկ $w_{\alpha} \equiv w_{(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)}$ -ն՝ այդ վիճակում գտնվելու հավանականությունը:

Համակարգի՝ որևէ քվանտային վիճակում գտնվելու հավանականությունը հաստատ պատահար է, ուստի w_{α} հավանականությունը բավարարում է նորմավորման պայմանին՝

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} \equiv \sum_{(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)} w_{(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)} = 1 : \quad (2.2)$$

w_α հավանականությունը սրվում է բոլորմանյան բաշխման բանաձևով՝

$$w_\alpha = Z^{-1} \exp\left(-\frac{E_\alpha}{k_B T}\right), \quad (2.3)$$

որտեղ E_α -ն համակարգի էներգիան է α քվանտային վիճակում, իսկ Z գործակիցը որոշվում է նորմավորման (2.2) պայմանից՝

$$Z(T, V, N) = \sum_\alpha \exp\left(-\frac{E_\alpha}{k_B T}\right) \equiv \sum_\alpha \exp(-\beta E_\alpha) \quad (2.4)$$

և կոչվում է համակարգի վիճակագրական գումար:

Համակարգի ներքին էներգիան, ինչպես և դասական վիճակագրության մեջ, արտահայտվում է վիճակագրական (2.4) գումարի միջոցով (1.6) բանաձևով, ուստի խնդիրը բերվում է վիճակագրական գումարի հաշվմանը: Դրա համար, (2.4) բանաձևի համաձայն, անհրաժեշտ է տալ համակարգի էներգիական սպեկտրը՝ E_α մեծությունների բազմությունը:

Ինչպես հայտնի է, համակարգի էներգիայի սեփական արժեքները որոշվում են Շրեդինգերի հավասարումից: Ընդհանուր դեպքում էներգիական սպեկտրի գտնելը կապված է զգալի մաթեմատիկական դժվարությունների հետ, սակայն ցանցի ներդաշնակ մոտավորության շրջանակներում, երբ N փոխազդող ատոմների խնդիրը բերվում է $3N$ չփոխազդող, միաչափ տատանակների խնդրին, որոնցից յուրաքանչյուրն ունի տատանման իր սեփական հաճախությունը, խնդրի լուծումն էապես հեշտանում է:

Քվանտային մեխանիկայում ներդաշնակ միաչափ տատանակի էներգիական սպեկտրը սրվում է

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (2.5)$$

բանաձևով, որտեղ ω -ն տատանակի սեփական հաճախությունն է, իսկ նրա վիճակը որոշվում է մեկ քվանտային թվով՝ n -ով, որն ընդունում է ամբողջ դրական արժեքներ՝ $n = 0, 1, 2, \dots$: (2.5) սպեկտրում առկա $\hbar\omega/2$ գումարելին զրոյական տատանումների էներգիան է, որի գոյությունը հետևանք է անորոշությունների առնչության և որը համապատասխանում է տատանակի հիմնական՝ $n = 0$ վիճակին:

$n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_{3N}$ քվանտային վիճակներում գտնվող տատանականների համախմբի էներգիան իրենից ներկայացնում է (2.5) արտահայտությունների գումար, հետևաբար՝ ցանցի էներգիան $\alpha \equiv (n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_{3N})$ միկրոսկոպական վիճակում՝

$$E_{(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_{3N})} = U_0 + \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) : \quad (2.6)$$

Ցանցի հիմնական վիճակի էներգիան՝

$$E_{(0,0,\dots,0,\dots,0)} \equiv E_0 = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i : \quad (2.7)$$

Տեղադրենք էներգիայի (2.6) բանաձևը վիճակագրական գումարի (2.4) արտահայտության մեջ և կատարենք գումարում ըստ համակարգի բոլոր հնարավոր քվանտային վիճակների, այսինքն՝ $n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_{3N}$ քվերին տանք բոլոր հնարավոր արժեքները՝

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{(n_1, n_2, \dots)} \exp \left\{ -\beta \left[U_0 + \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} = \\ &= \exp \left[-\beta \left(U_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i \right) \right] \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \sum_{n_{3N}=0}^{\infty} \exp \left(-\beta \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i n_i \right) = \\ &= \exp \left[-\beta \left(U_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i \right) \right] \sum_{n_1=0}^{\infty} \exp(-\hbar \beta \omega_1 n_1) \sum_{n_2=0}^{\infty} \exp(-\hbar \beta \omega_2 n_2) \dots \\ &\dots \sum_{n_{3N}=0}^{\infty} \exp(-\hbar \beta \omega_{3N} n_{3N}) \equiv \exp(-\beta E_0) \prod_{i=1}^{3N} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\hbar \beta \omega_i n) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Ստացված արտահայտության վերաբերյալ անհրաժեշտ է կատարել հետևյալ պարզաբանումը: Ճշգրիտ մոտեցման դեպքում գումարումներն ըստ n_i -ի ($i = 1, 2, \dots, 3N$) պետք է կատարել միայն փոքր n_i -երի համար, քանի որ մեծ n_i -երի դեպքում էական է դառնում աններդաշնակության դերը: Սակայն արված մոտավորությունը լրիվ հիմնավորված է, որովհետև մեծ քվանտային թվերով վիճակների ներդրումը գումարներում էքսպոնենցիալ կարգի փոքր է:

(2.8) արտահայտության մեջ արտադրյալի նշանի տակ գրված արտադրիչներից յուրաքանչյուրը նվազող երկրաչափական պրոգրեսիայի գումար է՝

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\hbar\omega_i} = 1 + e^{-\hbar\omega_i} + e^{-2\hbar\omega_i} + \dots = \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega_i}}, \quad (2.9)$$

ուստի

$$Z = \exp \left[-\beta \left(U_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \hbar\omega_i \right) \right] \prod_{i=1}^{3N} (1 - e^{-\hbar\omega_i})^{-1} : \quad (2.10)$$

Տեղադրելով (2.10) արտահայտությունը (1.6) բանաձևում, կստանանք ցանցի ներքին էներգիայի արտահայտությունը ներդաշնակ մոտավորությամբ՝

$$U = U_0 + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{1}{2} \hbar\omega_i + \frac{\hbar\omega_i}{e^{\hbar\omega_i/k_B T} - 1} \right) \equiv U_0 + \sum_{i=1}^{3N} \varepsilon(\omega_i, T), \quad (2.11)$$

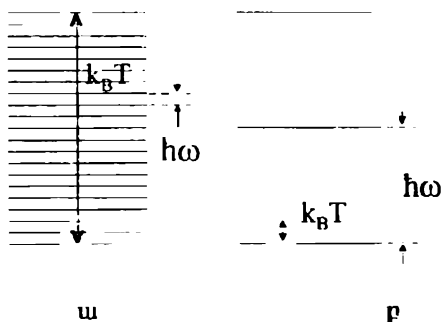
որտեղ

$$\varepsilon(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \frac{\hbar\omega}{2} + \varepsilon_{th} = \frac{\hbar\omega}{2} \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \quad (2.12)$$

արտահայտությունը ω հաճախությամբ տատանակի միջին էներգիան է, ε_{th} -ը՝ ջերմային էներգիան: (2.12) բանաձևը տեղի ունի ջերմաստիճանների ամբողջ սիրություն և իրենից ներկայացնում է Պլանկի էլեկտրամագնիսական տատանակի միջին (ջերմային) էներգիայի արտահայտության մեկնակը ցանցային տատանումների դեպքում: Ցանցի մեխանիկական տատանումների քվանտացման գաղափարը պատկանում է Ա.Էյնշտեյնին:

Ուսումնասիրենք (2.12) բանաձևը:

Երբ տատանակի բնութագրական $\hbar\omega$ էներգիան (տատանակի երկու հարևան մակարդակների միջև հեռավորությունը) շատ փոքր է արտաքին ջերմային



Նկ. IV.1

գրգռման $k_B T$ բնութագրական էներգիայից՝ $\hbar\omega \ll k_B T$ (բարձր ջերմաստիճաններ), ապա (2.12) բանաձևում էքսպոնենտը վերածելով շարքի և սահմանափակվելով $(\hbar\omega/k_B T)^2$ կարգի անդամների ճշտությամբ, կստանանք՝

$$\varepsilon(\omega, T) \approx k_B T, \quad (2.13)$$

որը դասական միաչափ տատանակի ջերմային էներգիան է: Ստացված արդյունքը ֆիզիկորեն հասկանալի է. երբ գրգռման էներգիան զգալիորեն գերազանցում է էներգիական սպեկտրի քվանտացման բնութագրական չափը, քվանտացումը ոչ մի դեր չի խաղում (նկ. IV.1, ա):

Հակառակ սահմանային դեպքում, երբ $\hbar\omega \gg k_B T$ (ցածր ջերմաստիճաններ), (2.12) բանաձևից ստացվում է հետևյալ մոտավորությունը՝

$$\varepsilon(\omega, T) \approx \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right), \quad (2.14)$$

որի համաձայն հիմնական դերը խաղում է էներգիական սպեկտրի քվանտացումը: Տատանակը «դժվար» է գրգռել, քանի որ գրգռման «քվանտի» $k_B T$ էներգիան զգալիորեն փոքր է քվանտացման չափից, ուստի տատանակը գործնականում մնում է հիմնական վիճակում (նկ. IV.1, բ):

(2.12) արտահայտությունից հետևում է այն կարևոր եզրակացությունը, որ ջերմաստիճանի նվազմանը զուգընթաց մեծանում է փոքր հաճախություններով տատանակների ներդրումը ջերմային էներգիայի մեջ:

Եռաչափ ցանցում յուրաքանչյուր տատանակի սեփական հաճախությունը բնութագրվում է q ալիքային վեկտորով և j ցուցիչով, այսինքն՝ $i = (q, j)$: Ալիքային թիվը Բրիլյուենի գոնայում ընդունում է N հատ արժեք, իսկ $1 \leq j \leq 3$, եթե ցանցը պարզ է, և $1 \leq j \leq 3s$, եթե ցանցը բարդ է:

Ներքին էներգիայի (2.11) արտահայտությունն արտագրենք

$$U = E_0 + \sum_q \sum_{j=1}^{3s} \frac{\hbar\omega_j(q)}{e^{\hbar\omega_j(q)/k_B T} - 1} \quad (2.15)$$

տեսքով, որտեղ E_0 գումարելին կախված չէ ջերմաստիճանից և տրվում է (2.7) բանաձևով (որտեղ $\omega_i \rightarrow \omega_j(q)$): Ջերմունակության համար (2.15) արտահայտությունից կստանանք՝

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = k_B \sum_q \sum_{j=1}^{3s} \left(\frac{\hbar \omega_j(q)}{k_B T} \right)^2 \cdot \frac{e^{\hbar \omega_j(q)/k_B T}}{[e^{\hbar \omega_j(q)/k_B T} - 1]^2}, \quad (2.16)$$

որը պինդ մարմնի ջերմունակության քվանտային տեսության հիմնական բանաձևն է:

Ձևափոխենք ներքին էներգիայի և ջերմունակության (2.15) և (2.16) արտահայտությունները, նկատի ունենալով, որ մակրոսկոպական նմուշի համար q ալիքային վեկտորի արժեքները Բրիլյուենի գոնայում բաշխված են $V/(2\pi)^3$ խտությամբ, և թերմոդինամիկական սահմանում ($V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, $N/V < \infty$) կարելի է համարել, որ q , հետևաբար և $\omega_j(q)$ մեծություններն ընդունում են անընդհատ արժեքներ: Կատարելով անցում գումարից ինտեգրալի՝ համաձայն (տես III.5)

$$\sum_q (\dots) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int (\dots) dq \quad (2.17)$$

առնչության, որտեղ ինտեգրման տիրույթը Բրիլյուենի գոնայի կամ հսկա-դարձ ցանցի տարրական բջջի ծավալն է, (2.15) և (2.16) բանաձևերից կստանանք՝

$$U = E_0 + \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{3s} \int \frac{\hbar \omega_j(q)}{e^{\hbar \omega_j(q)/k_B T} - 1} dq, \quad (2.18)$$

$$C_V = \frac{k_B V}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{3s} \int \left(\frac{\hbar \omega_j(q)}{k_B T} \right)^2 \cdot \frac{e^{\hbar \omega_j(q)/k_B T}}{[e^{\hbar \omega_j(q)/k_B T} - 1]^2} dq: \quad (2.19)$$

Այս արտահայտություններն առավել հավաք տեսքով կարելի է ներկայացնել վիճակների խտության ֆունկցիայի միջոցով (III.7)

$$g(\omega) = \sum_{j=1}^{3s} g_j(\omega). \quad (2.20)$$

որտեղ

$$g_j(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int dq \delta[\omega - \omega_j(q)] \quad (2.21)$$

վիճակների խտության ֆունկցիան է j ճյուղի համար:

(2.18)-(2.22) բանաձևերի համաձայն

$$U = E_0 + \int \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} g(\omega) d\omega, \quad (2.22)$$

$$C_V = k_B \int \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/k_B T}}{[e^{\hbar\omega/k_B T} - 1]^2} g(\omega) d\omega : \quad (2.23)$$

Այսպիսով, ներքին էներգիայի, ջերմունակության, ինչպես նաև այլ թերմոդինամիկական բնութագրերի հաշվարկի համար անհրաժեշտ է գիտենալ վիճակների խտության ֆունկցիան: Այնուամենայնիվ, կարելի է որոշ հետևություններ անել (2.22) և (2.23) բանաձևերից, առանց կոնկրետացնելու $g(\omega)$ ֆունկցիայի տեսքը:

Ինչպես գիտենք, ընդհատ միջավայրերում ալիքների տարածման առանձնահատկություններից մեկն էլ այն է, որ գոյություն ունի առավելագույն $\omega_{\max}$ հաճախություն, այսինքն՝ $\omega > \omega_{\max}$ հաճախությամբ ալիքները տվյալ միջավայրում չեն կարող տարածվել (տես III.4): Այստեղից բխում է, որ կարելի է ջերմաստիճանն ընտրել այնքան բարձր, որ տեղի ունենա $\hbar\omega \leq \hbar\omega_{\max} \ll k_B T$ անհավասարությունը, որի օգնությամբ կարող ենք ստանալ ջերմունակության բարձրջերմաստիճանային սահմանը: Հարմար է (2.23) արտահայտությունը ներկայացնել

$$C_V = k_B \int g(\omega) E \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right) d\omega \quad (2.24)$$

տեսքով, որտեղ

$$E(x) = \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} = x^2 e^{-x} (1 - e^{-x})^{-2} \quad (2.25)$$

և կոչվում է Էյնշտեյնի ֆունկցիա: Բարձրջերմաստիճանային սահմանում $x \ll 1$ և $E(x)$ ֆունկցիան տրվում է

$$E(x) \approx 1 - \frac{x^2}{12} + \frac{x^4}{240} + \dots \quad (2.26)$$

շարքի տեսքով, ուստի ջերմունակության համար կստանանք՝

$$C_V \approx k_B \int g(\omega) \left[1 - \frac{1}{12} \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 + \frac{1}{240} \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^4 + \dots \right] d\omega : \quad (2.27)$$

Նկատի ունենալով, որ համակարգում տատանումների (մոդերի) լրիվ թիվը՝

$$\int g(\omega) d\omega = 3Ns, \quad (2.28)$$

ջերմունակության համար (2.27) արտահայտությունից կստանանք՝

$$C_V \approx 3Nsk_B - \frac{k_B}{12} \left(\frac{\hbar}{k_B T} \right)^2 \int g(\omega) \omega^2 d\omega + \frac{k_B}{240} \left(\frac{\hbar}{k_B T} \right)^4 \int g(\omega) \omega^4 d\omega + \dots : \quad (2.29)$$

Առաջին գումարելին ջերմունակության դասական արտահայտությունն է, որից շեղումները պայմանավորված են քվանտային երևույթներով ($\hbar \rightarrow 0$ դեպքում այդ ուղղումները դառնում են հավասար զրոյի)։ Ջերմունակության դասական արժեքի ուղղումներն անմիջականորեն արտահայտվում են բյուրեղի ուժային հաստատունների միջոցով։

§3. Պինդ մարմնի ջերմունակության էյնշտեյնի տեսությունը

Պինդ մարմնի ջերմունակության քվանտային տեսությունը պինդ մարմնի (ցանցի) որոշակի մոդելի շրջանակներում ստվել է Ա.էյնշտեյնի կողմից 1907թ.։ Համաձայն այդ մոդելի, պինդ մարմինը ներկայացվում է որպես նույն հաճախությամբ, ներդաշնակ, չվիոխազդող տատանակների համախումբ։ (2.15) և (2.16) բանաձևերում վերցնելով բոլոր հաճախություններն իրար հավասար՝ $\omega_j(q) = \omega_E$, կստանանք՝

$$U = U_0 + 3Ns \hbar \omega_E \left(\exp \frac{\hbar \omega_E}{k_B T} - 1 \right)^{-1}, \quad (3.1)$$

$$C_V = 3Nsk_B \left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2 \exp \left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right) \cdot \left(\exp \left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right) - 1 \right)^{-2} \equiv 3Nsk_B E \left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right) : \quad (3.2)$$

Սահմաններ էյնշտեյնի բնութագրական ջերմաստիճանը՝

$$\theta_E = \frac{\hbar \omega_E}{k_B} , \quad (3.3)$$

և պինդ մարմնի ջերմունակության (3.2) արտահայտությունը ներկայացնենք հետևյալ վերջնական տեսքով՝

$$C_V = 3Nsk_B \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \cdot \frac{\exp(\theta_E/T)}{(\exp(\theta_E/T) - 1)^2} \equiv 3Nsk_B E \left(\frac{\theta_E}{T} \right) : \quad (3.4)$$

Այս բանաձևն արտահայտում է ջերմունակության էյնշտեյնյան տեսության հիմնական արդյունքը՝ ջերմունակությունը արվում է որպես ջերմաստիճանի ֆունկցիա ջերմաստիճանների ամբողջ տիրույթում: θ_E բնութագրական ջերմաստիճանն օգտագործվում է որպես պարամետր՝ փորձի հետ (3.4) բանաձևն առավելագույնս համաձայնեցնելու համար: Այս ձևով ալմաստի համար էյնշտեյնը ստացել է $\theta_E = 1320\text{K}$ արժեքը: Պինդ մարմինների մեծ մասի համար θ_E ջերմաստիճանն ընկած է $100 \div 300\text{K}$ տիրույթում:

Քննարկենք ջերմունակության վարքը տարբեր ջերմաստիճանային տիրույթներում:

Բարձր ջերմաստիճաններ՝ $T \gg \theta_E$: Նկատի ունենալով էյնշտեյնի ֆունկցիայի (2.26) վերլուծությունը, ջերմունակության համար կստանանք

$$C_V \approx 3Nsk_B \left[1 - \frac{1}{12} \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 + \dots \right] \approx 3Nsk_B \quad (3.5)$$

դասական արտահայտությունը:

Ցածր ջերմաստիճաններ՝ $T \ll \theta_E$: Նկատի ունենալով $\exp(\theta_E/T) \gg 1$ անհավասարությունը, (3.4) բանաձևից կստանանք՝

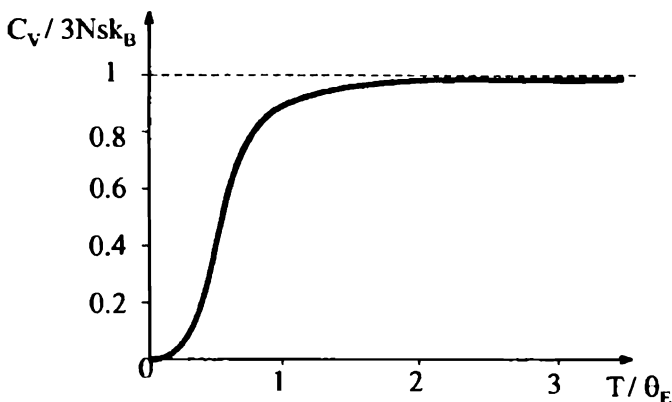
$$C_V \approx 3Nsk_B \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \exp \left(-\frac{\theta_E}{T} \right) , \quad (3.6)$$

և երբ $T \rightarrow 0\text{K}$, ջերմունակությունը ձգտում է զրոյի էքսպոնենցիալ օրենքով:

Ջերմունակության կախումը ջերմաստիճանից պատկերված է նկ. IV.2-ում, որտեղ կետագծերով տրված է ջերմունակության դասական

արժեքը: Ինչպես հետևում է կորի վարքից, բարձրջերմաստիճանային մոտավորությունը ճիշտ է $T \geq 2\theta_E$ տիրույթում:

Ինչպես ցույց են տալիս փորձերը, $T \sim T_E$ և ավելի բարձր ջերմաստիճաններում (3.4) բանաձևը շատ լավ է նկարագրում ջերմունակության վարքը, սակայն ավելի ցածր ջերմաստիճաններում փորձի և ջերմունակության (3.4) բանաձևով տրվող արժեքների միջև շեղումը մեծանում է: $T \ll \theta_E$ տիրույթում (3.6) բանաձևը հակասում է փորձից ջերմունակության համար ստացվող T^3 կախմանը:



Նկ. IV.2

Ցածր ջերմաստիճաններում փորձի և էյնշտեյնի մոդելի անհամապատասխանությունը հետևանք է այն բանի, որ փոխազդող ատոմների համակարգում տատանումների բոլոր հաճախությունները միևնույնը լինել չեն կարող: Մակրոսկոպական պինդ մարմնում ցանկացած չափով ցածր ջերմաստիճաններում էլ միշտ կան այնպիսի մոդեր, որոնց համար $\hbar\omega \gg k_B T$ պայմանը խախտվում է: Այդպիսի մոդերն իրենց պահում են «դասական» ձևով, այսինքն՝ նրանից յուրաքանչյուրին բաժին է ընկնում $k_B T$ ջերմային էներգիա: Նքե դասական մոդերի առավելագույն հաճախությունը նշանակենք ω_0 -ով, ապա $\hbar\omega_0 \approx k_B T$, և բոլոր այդպիսի մոդերն ընկած են $0 \leq \omega \leq \omega_0$ տիրույթում: q -տարածության մեջ նրանք ընկած են $q_0 \sim \omega_0$ շառավղով և $q = 0$ կենտրոնով գնդի մեջ, ուստի դասական մոդերի

N_d թիվը հավասար կլինի այդ զոնի ծավալի և մոդերի (վիճակների) $V/(2\pi)^3$ խտության արտադրյալին՝

$$N_d = \frac{4\pi}{3} q_0^3 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \sim \omega_0^3 V \sim V \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3, \quad (3.7)$$

իսկ նրանց ներդրումը ցանցի ներքին էներգիայի և ջերմունակության մեջ՝

$$U \simeq k_B T \cdot N_d \sim V \cdot T^4 \quad (3.8)$$

և

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \sim V \cdot T^3 : \quad (3.9)$$

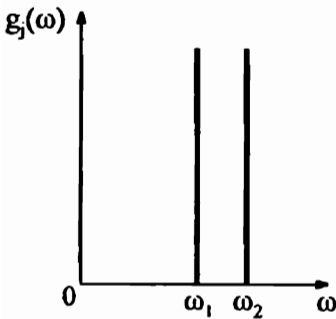
Այսպիսով, ցածր ջերմաստիճաններում ջերմունակությունը ձգտում է զրոյի, սակայն շատ ավելի դանդաղ, քան այդ հետևում է էյնշտեյնի մոդելից:

Այսուհանդերձ, էյնշտեյնի մոդելը շատ պարզ է, ակնառու և հաճախ օգտագործվում է տարրեր որակական արդյունքներ ստանալու համար:

Նկատի ունենալով այս հանգամանքը, ստանանք վիճակների խտության $g(\omega)$ ֆունկցիայի տեսքը էյնշտեյնի մոդելի շրջանակներում:

(2.21) արտահայտության մեջ տեղադրենք $\omega_j(q) = \omega_E$.

$$g_j(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int dq \delta(\omega - \omega_E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_E) \int dq = N \delta(\omega - \omega_E) \quad (3.10)$$



Նկ. IV.3

ամեն մի ճյուղի համար, իսկ վիճակների խտության լրիվ ֆունկցիան՝

$$g(\omega) = \sum_{j=1}^{3s} g_j(\omega) = 3Ns \cdot \delta(\omega - \omega_E) : \quad (3.11)$$

Հաճախ մնան ֆունկցիաներով նկարագրվում են ցանցային տատանումների սպեկտրում սահմանային հաճախությունների տիրույթի նեղ և խիստ բնդգծված մաքսիմումները:

Վիճակների խտության ֆունկցիաների մոտարկումը $\delta(\omega - \omega_j)$ ֆունկցիաներով

կարելի է կիրառել նաև օպտիկական որոշ ճյուղերի նկարագրության համար, երբ բարդ ցանցը կազմող ատոմների զանգվածներն իրարից խիստ տարբերվում են (նկ.IV.3, տես նաև նկ. III.25):

§4. Պինդ մարմնի ջերմունակության Դեբայի տեսությունը

Պինդ մարմնի ջերմունակության շեղումն իր դասական արժեքից՝ Դյուլոնգի և Պտիի օրենքից, զգալի է դառնում սենյակայինից ցածր ջերմաստիճաններում, իսկ « T^3 » օրենքը տեղի ունի շատ ցածր ջերմաստիճաններում: Հետևաբար, կա ջերմաստիճանների մի ընդարձակ սփռույթ՝ մի քանի K -ից մինչև սենյակային ջերմաստիճաններ, որտեղ չի կարելի օգտվել բնմարկված բարձր- և ցածրջերմաստիճանային մոտավորություններից, այլ հաշվարկները պետք է կատարել (2.18) արտահայտության օգնությամբ: Դրա համար անհրաժեշտ է տալ վիճակների խտության $g(\omega)$ ֆունկցիան, որն, իր հերթին, որոշվում է $\omega_j(q)$ ($j = 1, 2, \dots, 3s$) դիսպերսիոն հավասարումների միջոցով: Սակայն $\omega_j(q)$ ֆունկցիաների որոշումն ընդհանուր դեպքում կապված է զգալի դժվարությունների հետ: Այս տեսանկյունից կարևոր նշանակություն են ստանում վիճակների խտության ֆունկցիայի տարբեր մոտարկումները, որոնց միջոցով ստացվում են ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումն արտահայտող բանաձևեր: Ինչպես երևում է (2.25) բանաձևից, $E(\hbar\omega/k_B T) \sim \exp(-\hbar\omega/k_B T) \rightarrow 0$, երբ $\hbar\omega \gg k_B T$, ուստի բարձրհաճախային սփռույթի ներդրումը ջերմունակության մեջ, համաձայն (2.24) բանաձևի, էական չէ: Այս հանգամանքը կարելի է օգտագործել ջերմունակության հաշվարկը պարզեցնելու համար՝ $g(\omega)$ ֆունկցիան ավելի պարզ և միաժամանակ վիճակների խտության ֆունկցիայի վարքը որակապես ճիշտ արտահայտող ֆունկցիայով փոխարինելու միջոցով:

Առավել հայտնի և հաջող փորձն այս ուղղությամբ կատարել է Պ.Դեբայը (1912թ.):

Դեբայի ենթադրության համաձայն, բյուրեղական ցանցի տատանում-

Ներքի սպեկտրը համընկնում է հոծ, իզոտրոպ, առաձգական միջավայրի տատանումների սպեկտրի հետ: Ինչպես հայտնի է, այդպիսի միջավայրում կարող են տարածվել մեկ երկայնական և երկու իրարից անկախ լայնական ալիքներ, որոնց արագություններն են համապատասխանաբար v_l և v_t ($v_l > v_t$): Ալիքային վեկտորը $q, q + dq$ զնդային շերտում ընդունում է

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi q^2 dq = \frac{V}{2\pi^2} q^2 dq \quad (4.1)$$

հատ արժեք, հետևաբար, երկայնական տատանումների թիվը հաճախությունների $\omega, \omega + d\omega$ տիրույթում, համաձայն $\omega = v_l \cdot q$ առնչության հավասար է

$$\frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{\omega}{v_l} \right)^2 \frac{d\omega}{v_l} = \frac{V}{2\pi^2 v_l^3} \omega^2 d\omega : \quad (4.2)$$

Լայնական տատանումների թիվը նույն տիրույթում, համաձայն $\omega = v_t \cdot q$ առնչության և երկու լայնական ալիքների գոյության փաստի, կլինի հավասար

$$2 \cdot \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{\omega}{v_t} \right)^2 \frac{d\omega}{v_t} = 2 \cdot \frac{V}{2\pi^2 v_t^3} \omega^2 d\omega : \quad (4.3)$$

Տատանումների լրիվ թիվը $\omega, \omega + d\omega$ տիրույթում հավասար է (4.2) և (4.3) արտահայտությունների գումարին՝

$$g(\omega) d\omega = \frac{V\omega^2}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right) d\omega = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} d\omega , \quad (4.4)$$

որտեղ կատարված է հետևյալ նշանակումը՝

$$\frac{1}{v^3} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right) : \quad (4.5)$$

Այսպիսով, հոծ, իզոտրոպ առաձգական միջավայրի տատանումների սպեկտրը ցանկացած հաճախությունների համար նկարագրվում է

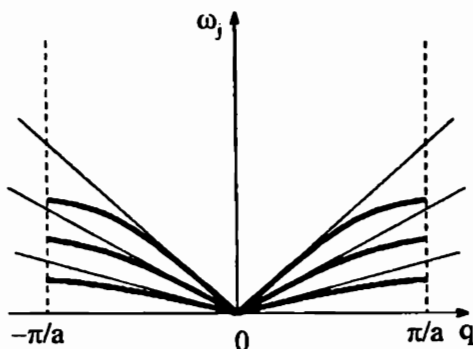
$$g(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} \sim \omega^2 \quad (4.6)$$

ֆունկցիայով:

Ինչ վերաբերվում է ցանցի տատանումներին, ապա փոքր ալիքային վեկտորների համար j -րդ ձայնային ճյուղի դիսպերսիոն հավասարումը կարելի է մոտարկել ըստ $|q|$ -ի գծային օրենքով (տես III.5)

$$\omega_j(q) = v_j(\theta, \varphi) \cdot |q|, \quad (j = 1, 2, 3), \quad (4.7)$$

որտեղ ալիքի $v_j(\theta, \varphi)$ արագությունը կախված է բյուրեղում ալիքի տարածման $n(\theta, \varphi)$ ուղղությունից (անիզոտրոպություն): Այս դեպքում, երբ փոքր հաճախություններով տատանումներին մասնակցում են միաժամանակ մեծ թվով մասնիկներ ($\lambda \gg a$), միջավայրի (ցանցի) ընդհատ լինելու փաստը կարելի է հաշվի չառնել: Սակայն ցանցի նույնացումը հոծ միջավայրի հետ հիմնավորված չէ բարձր հաճախությունների տիրույթում, քանի որ, ի տարբերություն հոծ միջավայրի, ցանցում ալիքի տարածման արագությունը կախված է q ալիքային վեկտորից, այսինքն՝ ցանցն օժտված է դիսպերսիայով: Դեբայի ենթադրության համաձայն, դիսպերսիայի առկայությունը մեծ հաճախությունների տիրույթում հաշվի չի առնվում (բացառվում է): Մյուս կողմից, ի տարբերություն հոծ



Նկ. IV.4

միջավայրի, որտեղ տատանումների թիվն անսահմանափակ է, ցանցում կարող են տարածվել միայն վերջավոր թվով ալիքներ, որոնց երկարությունները գերազանցում են միջատոմական հեռավորությունները:

Այսպիսով, հետևելով Դեբային, կենթադրենք, որ (4.7) գծային դիսպերսիոն հավասարումը սուղի ունի նաև ոչ փոքր ալիքային վեկտորների համար (նկ. IV.4):

j -րդ ձայնային ճյուղին պատկանող վիճակների խտության ֆունկցիայի (2.21) և (4.7) բանաձևերից կստանանք՝

$$g_j(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \delta[\omega - v_j(\theta, \varphi) \cdot q] q^2 dq d\Omega = \frac{V\omega^2}{(2\pi)^3} \int_{(4\pi)} \frac{d\Omega}{v_j^3(\theta, \varphi)}, \quad (4.8)$$

որտեղ ինտեգրումը կատարվում է ըստ $d\Omega = \sin \theta \cdot d\varphi d\theta$ մարմնային ամկյան: (2.20) և (4.8) արտահայտությունների համաձայն, վիճակների խտության ֆունկցիան կարելի է ներկայացնել

$$g(\omega) = \sum_{j=1}^3 g_j(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3}, \quad (4.9)$$

տեսքով, որտեղ ներմուծված է հակադարձ խորանարդային արագության միջինը՝

$$\frac{1}{v^3} = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 \frac{1}{4\pi} \int_{(4\pi)} \frac{d\Omega}{v_j^3(\theta, \varphi)} : \quad (4.10)$$

Ընդհանուր դեպքում $v_j(\theta, \varphi)$ արագություններն արտահայտվում են ցանցի ուժային հաստատունների միջոցով: Ստորև ենթադրվում է, որ (4.10) բանաձևով որոշված V արագությունը տրված մեծություն է և այն կարելի է արտահայտել տեսության բնութագրական պարամետրերի միջոցով: Իզոտրոպ դեպքում (4.10) բանաձևից ստացվում է (4.5) կապը:

Այժմ որոշենք (2.22) և (2.23) արտահայտություններում ըստ հաճախության ինտեգրման սահմանները:

Մակրոսկոպական մոլուխի համար կատարված հաշվարկներում միշտ ենթադրվում է անցում թերմոդինամիկական սահմանին ($N \rightarrow \infty$, $V \sim \sim L^3 \rightarrow \infty$, L -ը համակարգի գծային չափն է), ուստի միջավայրում տարածվող ալիքների երկարությունները սահմանափակված չեն երկարալիքային տիրույթում՝ $\lambda \sim L \rightarrow \infty$ և նվազագույն հաճախությունը՝ $\omega_{\min} \sim \lambda_{\max}^{-1} \sim \sim L^{-1} \rightarrow 0$: Սակայն եթե բյուրեղի չափերը շատ վաթք են, ապա նրանում տարածվող ամենաերկար ալիքի երկարությունը՝ $\lambda_{\max} \approx L$: Եթե բյուրեղի ջերմաստիճանը՝ $T < T_0 \approx \hbar \omega_{\min} / k_B \approx \hbar v / k_B L$, ապա հնարավոր են շեղումներ Դեբայի տեսությունից: $L \sim 10^{-6}$ սմ կարգի մոլուխի համար, բնդունելով $v \sim 10^5$ սմ/վ, կստանանք $T_0 \approx 1$ K: Փորձում, նրբափոշու ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումն ուսումնասիրելիս, $T \leq 1$ K տիրույթում, իրոք,

դիտվել են շեղումներ սևությունից:

Հաճախության $\omega_{\max}$ առավելագույն արժեքը, որի գոյությունը հետևանք է ցանցի ընդհատության, որոշվում է Դեբայի երկրորդ ենթադրության օգնությամբ, համաձայն որի բոլոր ձայնային ճյուղերում տատանումների լրիվ թիվը հավասար է $3N$ -ի: Օգտվելով (4.9) արտահայտությունից և նորմավորման

$$3N = \int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_{\max}} \omega^2 d\omega = \frac{V \omega_{\max}^3}{2\pi^2 v^3} \quad (4.11)$$

պայմանից, ստանում ենք $\omega_{\max}$ կամ Դեբայի (ω_D) սահմանային հաճախության համար արտահայտություն՝

$$\omega_{\max} \equiv \omega_D = v \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} = v \left(\frac{6\pi^2}{v_0} \right)^{1/3}, \quad (4.12)$$

որտեղ $v_0 = V/N$ տարրական բջջի ծավալն է: $\omega_{\max}$ հաճախությանը համապատասխանում է $q_{\max}$ կամ Դեբայի (q_D) ալիքային թիվը, որը որոշվում է (4.11) պայմանին համարժեք

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} q_D^3 = N \quad (4.13)$$

պայմանից, որի համաձայն Բրիլյուենի գոման փոխարինված է q_D շառավղով զնդով, որը պարունակում է նույնքան տատանողական մոդ, որքան Բրիլյուենի գոման: Դեբայի ալիքային թիվը՝

$$q_D = \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} = \left(\frac{6\pi^2}{v_0} \right)^{1/3} = \frac{\omega_D}{v}, \quad (4.14)$$

որոշում է սահմանային (ամենակարճ) ալիքի երկարությունը՝

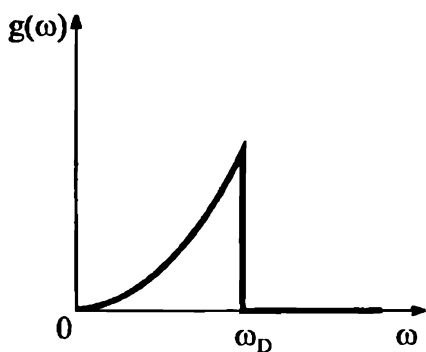
$$\lambda_D = \frac{2\pi}{q_D} = \left(\frac{4\pi^2}{3} v_0 \right)^{1/3}: \quad (4.15)$$

Գնահատենք ω_D , q_D և λ_D սահմանային բնութագրերը: Քանի որ $v_0 = \alpha \cdot a^3$, որտեղ $\alpha \sim 10^{-8}$ սմ տարրական խորանարդի կողի երկարությունն է, $\alpha \sim 1$ ($\alpha = 1, 1/2$ և $1/4$ համապատասխանաբար պարզ, ծավա-

լակնատրոնացված և նիստակնատրոնացված խորանարդային ցանցի համար), և $v \sim 10^5$ սմ/վ, ապա կստանանք՝

$$\begin{aligned}\omega_D &= \frac{v}{a} \left(\frac{6\pi^2}{\alpha} \right)^{1/3} \sim 10^{13} \text{ ռադ/վ}, \\ q_D &= \frac{1}{a} \left(\frac{6\pi^2}{\alpha} \right)^{1/3} \sim 10^8 \text{ սմ}^{-1}, \\ \lambda_D &= \left(\frac{4\pi^2 \alpha}{3} \right)^{1/3} a \sim 10^{-8} \text{ սմ}:\end{aligned}\quad (4.16)$$

Նպատակահարմար է միջավայրում ձայնի միջին v արագությունից (4.12) բանաձևի օգնությամբ անցնել Դեբայի սեւտության հիմնական պարամետրերից մեկին՝ ω_D հաճախությանը: Վիճակների խտության ֆունկցիայի համար Դեբայի մոտավորությամբ կստանանք (նկ.IV.5)՝



Նկ. IV.5

ձևերի մեջ՝

$$g(\omega) = \begin{cases} 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3}, & \omega \leq \omega_D, \\ 0, & \omega > \omega_D. \end{cases} \quad (4.17)$$

Տեղադրենք Դեբայի մոտավորությամբ ստացված վիճակների խտության ֆունկցիայի (4.17) արտահայտությունը ներքին էներգիայի և ջերմունակության (2.22) և (2.23) բանա-

$$U = E_0 + 9N\omega_D^{-3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \omega^2 d\omega, \quad (4.18)$$

$$C_V = 9Nk_B \omega_D^{-3} \int_0^{\omega_D} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/k_B T}}{[e^{\hbar\omega/k_B T} - 1]^2} \omega^2 d\omega: \quad (4.19)$$

Եթե (4.18) և (4.19) բանաձևերում կատարենք փոփոխականի փոխարինում՝ $t = \hbar\omega/k_B T$, ապա ինտեգրման վերին սահմանը կդառնա

$\hbar\omega_{\max}/k_B T$: Մտցնենք պինդ մարմնի Դեբայի բնութագրական ջերմաստիճանը՝

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B} \left(\frac{18\pi^2 N}{V} \right) \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right)^{-1/3}, \quad (4.20)$$

ինչպես նաև կատարենք հետևյալ նշանակումները՝

$$D_E(x) = \frac{3}{x^4} \int_0^x \frac{t^3 dt}{e^t - 1} \quad (4.21)$$

որը հայտնի է որպես էներգիայի Դեբայի ֆունկցիա և

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{t^4 e^t}{(e^t - 1)^2} dt = \frac{3}{x^3} \int_0^x t^2 E(t) dt, \quad (4.22)$$

որը հայտնի է որպես ջերմունակության Դեբայի ֆունկցիա, իսկ $E(t)$ ֆունկցիան տրվում է (2.25) բանաձևով:

(4.18)-(4.22) արտահայտություններից ներքին էներգիայի և ջերմունակության համար ստացվում են հետևյալ վերջնական բանաձևերը՝

$$U = E_0 + 3Nk_B\theta_D \cdot D_E\left(\frac{\theta_D}{T}\right), \quad (4.23)$$

$$C_V = 3Nk_B D\left(\frac{\theta_D}{T}\right), \quad (4.24)$$

որոնք կիրառելի են ջերմաստիճանների ամբողջ տիրույթում և հայտնի են որպես Դեբայի ներմտարկման (ինտերպոլյացիոն) բանաձևեր:

Դժվար չէ համոզվել, որ $D_E(x)$ և $D(x)$ ֆունկցիաները կապված են

$$D(x) = 4x \cdot D_E(x) - 3x(e^x - 1)^{-1} \quad (4.25)$$

առնչությամբ, որը ստացվում է (4.22) արտահայտությունը մասերով ինտեգրելուց հետո: Սակայն նպաստակահարմար է հետագա հաշվարկներում այդ ֆունկցիաների միաժամանակյա օգտագործումը:

$D(x)$ և $D_E(x)$ ֆունկցիաները տրված են աղյուսակների ձևով, սակայն նրանց միջոցով կարելի է սահմանային դեպքերում ստանալ ներքին էներգիայի և ջերմունակության վերլուծական արտահայտություններ:

Ներքին էներգիայի և ջերմունակության կախումը պինդ մարմնի բնութագրերից ստիպում է մեկ մեծության՝ Դևիայի θ_D ջերմաստիճանի միջոցով, որն արտահայտվում է մարմնի խտության և նրանում ձայնի տարածման միջին արագության միջոցով: Գնահատումների համաձայն

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} \approx \frac{\hbar v}{k_B a} \sim 100 \text{K} : \quad (4.26)$$

Տարբեր մարմինների համար, որպես կանոն, θ_D պարամետրի բնորոշ արժեքներն ընկած են մի քանի տասնյակից մինչև մի քանի հարյուր K տիրույթում (տես Աղյուսակ IV.1):

Այժմ ուսումնասիրենք U և C_V ֆունկցիաների վարքը ջերմաստիճանների տարբեր տիրույթներում:

Բարձր ջերմաստիճաններ՝ $T \gg \theta_D$ ($x = \theta_D/T \ll 1$)

Նկատի ունենալով (4.21) և (4.22) ինտեգրալներում ինտեգրման վերին սահմանի փոքրությունը՝ $x \ll 1$, ընդհանուրապես ֆունկցիաները կարելի է վերածել շարքի $t = 0$ կետի շուրջը: $D_E(x)$ ֆունկցիայի համար կստանանք՝

$$D_E(x) = \frac{3}{x^4} \int_0^x \frac{t^3 dt}{(1+t+t^2/2+\dots)-1} \approx \frac{3}{x^4} \int_0^x t^2 \left(1 - \frac{t}{2} + \frac{t^2}{12} + \dots \right) dt = \quad (4.27)$$

$$= \frac{1}{x} - \frac{3}{8} + \frac{1}{20} x + \dots:$$

$D(x)$ ֆունկցիայի արտահայտությունը $x \ll 1$ դեպքում հեշտությամբ ստացվում է (4.22) սահմանումից՝ $E(t)$ ֆունկցիայի (2.26) վերլուծության օգնությամբ՝

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x t^2 E(t) dt \approx \frac{3}{x^3} \int_0^x t^2 \left(1 - \frac{1}{12} t^2 + \frac{1}{240} t^4 + \dots \right) dt = 1 - \frac{1}{20} x^2 + \dots : \quad (4.28)$$

Տեղադրելով (4.27) և (4.28) վերլուծությունները (4.23) և (4.24) արտահայտություններում, կստանանք՝

$$U = E_0 + 3Nk_B T \left[1 - \frac{3}{8} \frac{\theta_D}{T} + \frac{1}{20} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right], \quad (4.29)$$

$$C_V = 3Nk_B \left[1 - \frac{1}{20} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right], \quad (4.30)$$

դրանք համընկնում են պինդ մարմնի դասական տեսության արդյունքների հետ:

Ցածր ջերմաստիճաններ՝ $T \ll \theta_D$ ($x = \theta_D/T \gg 1$)

Ներկայացնենք (4.21) ինտեգրալը երկու ինտեգրալների տարբերության տեսքով՝

$$\int_0^x \frac{t^3 dt}{e^t - 1} = \int_0^\infty \frac{t^3 dt}{e^t - 1} - \int_x^\infty \frac{t^3 dt}{e^t - 1} : \quad (4.31)$$

Առաջին գումարելին՝

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{t^3 dt}{e^t - 1} &= \int_0^\infty t^3 e^{-t} \frac{dt}{1 - e^{-t}} = \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty t^3 e^{-nt} dt = - \sum_{n=1}^\infty \frac{\partial^3}{\partial n^3} \int_0^\infty e^{-nt} dt = \\ &= - \sum_{n=1}^\infty \frac{\partial^3}{\partial n^3} \left(\frac{1}{n} \right) = 6 \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = 6 \cdot \frac{\pi^4}{90} = \frac{\pi^4}{15} : \end{aligned} \quad (4.32)$$

Նման եղանակով II գումարելին կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\begin{aligned} \int_x^\infty \frac{t^3 dt}{e^t - 1} &= - \sum_{n=1}^\infty \frac{\partial^3}{\partial n^3} \int_x^\infty e^{-nt} dt = - \sum_{n=1}^\infty \frac{\partial^3}{\partial n^3} \left(\frac{1}{n} e^{-nx} \right) = \\ &= \sum_{n=1}^\infty e^{-nx} \left(\frac{6}{n^4} + \frac{6}{n^3} x + \frac{3}{n^2} x^2 + \frac{1}{n} x^3 \right) : \end{aligned} \quad (4.33)$$

Քանի որ $x \gg 1$, ապա կարելի է սահմանափակվել գումարի միայն $n = 1$ առաջին անդամով, վերջինիս մեջ թողնելով ամենամեծ՝ x^3 անդամը: Այս մոտավորությամբ

$$D_E(x) \approx \frac{3}{x^4} \left(\frac{\pi^4}{15} - x^3 e^{-x} \right) = \frac{\pi^4}{5x^3} - \frac{3}{x} e^{-x} : \quad (4.34)$$

Նույն մոտավորությամբ (4.25) առնչությունից կստանանք՝

$$D(x) \approx \frac{4\pi^4}{5x^3} - 3xe^{-x} : \quad (4.35)$$

Այս բանաձևերի օգնությամբ (4.23) և (4.24) ընդհանուր արտահայտություններից ստացվում են ներքին էներգիայի և ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումները՝

$$U = E_0 + 3Nk_B T \left[\frac{\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 - 3 \exp \left(-\frac{\theta_D}{T} \right) \right], \quad (4.36)$$

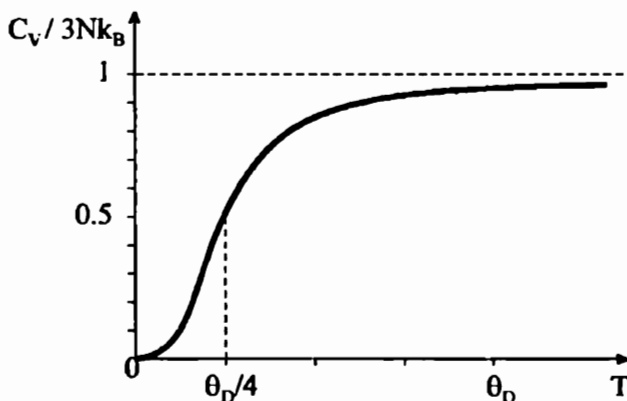
$$C_V = 3Nk_B \left[\frac{4\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 - 3 \frac{\theta_D}{T} \exp \left(-\frac{\theta_D}{T} \right) \right] : \quad (4.37)$$

Այս բանաձևերը հիմնավորում են որակական դասադասությունների օգնությամբ ստացված (3.8) և (3.9) գնահատականները:

(4.37) բանաձևի առաջին գումարելին պինդ մարմնի (ցանցային) ջերմունակության « T^3 -օրենքի» արտահայտությունն է՝

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 = 234 Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 : \quad (4.38)$$

Նկ. IV.6-ում պատկերված է ջերմունակության ջերմաստիճանային կախման կորը համաձայն (4.24) բանաձևի: Ինչպես հետևում է կորի վաղից, ջերմունակության ամենաարագ փոփոխման տիրույթը գտնվում է



Նկ. IV.6

$\theta_D/4$ կետի շրջակայքում, այնպես որ դասական արտահայտությունները փաստորեն կիրառելի են $T \geq \theta_D$, այլ ոչ թե $T \gg \theta_D$ դեպքում (մեծ թվով նյութերի համար խիստ անհավասարությունը պինդ վիճակում տեղի ունենալ չի կարող հալման հետևանքով): Քվանտային արտահայտությունները կիրառելի են $0 < T < 0,1\theta_D$ տիրույթում:

Դեբայի մոդելի շրջանակներում կարելի է գնահատել էյնշտեյնի բնութագրական ω_E հաճախությունը: Կարելի է այն վերցնել հավասար Դեբայի տեսությամբ միջին հաճախության համար ստացվող արժեքին՝

$$\omega_E \equiv \bar{\omega} = \frac{\int_0^{\omega_D} \omega g(\omega) d\omega}{\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega} = \frac{\int_0^{\omega_D} \omega^3 d\omega}{\int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega} = \frac{3}{4} \omega_D$$

կամ

$$\theta_E = 0.75\theta_D : \quad (4.39)$$

Այսպիսի ընտրության դեպքում էյնշտեյնի և Դեբայի տեսությամբ տրվող չեղմունակության կորերը համընկնում են մեծ ճշտությամբ ընդհուպ մինչև $T \geq 0,5\theta_D$ արժեքները:

ω_E հաճախությունը կարելի է որոշել, օգտվելով նաև այն հանգամանքից, որ բարձր ջերմաստիճանների տիրույթում երկու տեսություններն էլ տալիս են դասական տեսության արդյունքը: Հավասարեցնելով իրար (3.5) և (4.30) բանաձևերում առկա քառակուսային ուղղումները, կստանանք՝

$$\frac{1}{20} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 = \frac{1}{12} \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2$$

կամ

$$\theta_E = \sqrt{\frac{3}{5}} \theta_D \approx 0,775 \theta_D, \quad (4.40)$$

որն առանձնապես չի տարբերվում (4.39) արդյունքից:

Էյնշտեյնի և Դեբայի տեսությունները բերում են էապես տարբեր որակական և քանակական արդյունքների $T < 0,5\theta_D$ ջերմաստիճաններում:

§5*. Դեբայի տեսության քննարկումը

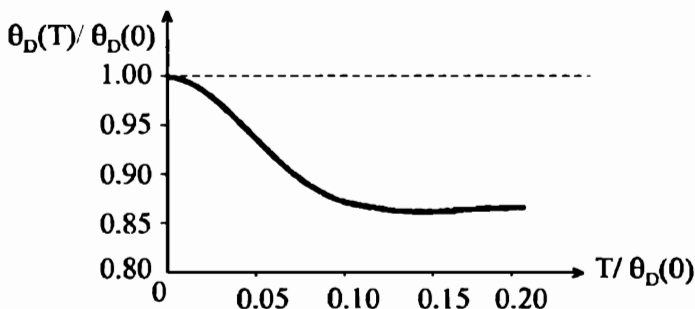
Դեբայի տեսությամբ պինդ մարմնի ներքին էներգիան և ջերմունակությունը, որոնք արվում են (4.23) և (4.24) բանաձևերով, ցանկացած ջերմաստիճանում որոշվում են միայն մեկ մեծությամբ՝ θ_D/T հարաբերությամբ: Եթե յուրաքանչյուր բյուրեղի վերագրվի որոշակի բնութագրական θ_D ջերմաստիճան, ապա ջերմունակության բոլոր կորերը կհամընկնեն իրար հետ: Սակայն պարզվում է, որ սովյալ մարմնի θ_D -ն կախված է այն ջերմաստիճանից, որի դեպքում վործում ենք համապատասխանեցնել ջերմունակության տեսական և փորձնական կորերը: Իրոք, եթե ջերմունակության՝ վործում կամ որևէ տեսությամբ ստացված $C_V(T)$ արժեքը յուրաքանչյուր կետում հավասարեցվի Դեբայի տեսությամբ արվող (4.24) բանաձևից ստացվող արժեքին՝

$$C_V(T) = C_V^D(T, \theta_D), \quad (5.1)$$

դրա համար օգտագործելով θ_D մեծությունը որպես «հարմարեցման» պարամետր, ապա (5.1) առնչությունից կստացվի այդ պարամետրի՝ ջերմաստիճանից ունեցած կախման արտահայտությունը՝

$$\theta_D = \theta_D(T): \quad (5.2)$$

Նկ. IV.7-ում պատկերված է արգոնի և կրիպտոնի Դեբայի ջերմաստիճանի ջերմաստիճանային կախման գրաֆիկը (կետագծով արված է Դեբայի մոտավորությանը համապատասխանող $\theta_D \equiv \theta_D(0) = \text{const}$ արժեքը):



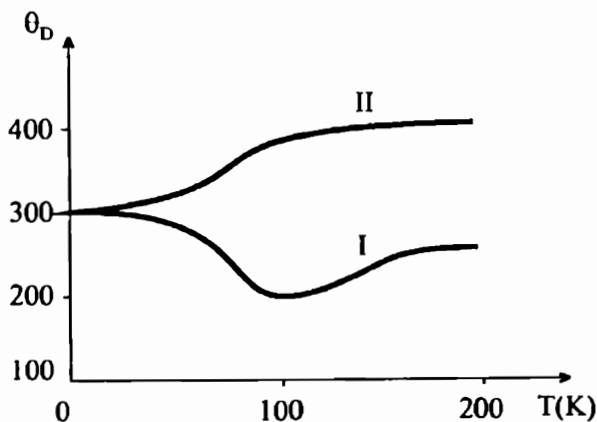
Նկ. IV.7

Քանի որ Γ -երայի տեսության մեջ θ_D մեծությունը հաստատուն է, որի արժեքը կախված է միայն ցանցի ուժային (ատոմազական) հաստատուններից, ապա $\theta_D(T)$ կախումը հետևանք է ցանցի իրական սպեկտրը Γ -երայի (4.17) սպեկտրով փոխարինելուն և կարող է ծառայել որպես ցանցի տատանողական սպեկտրը հաշվարկելիս օգտագործված ուժային հաստատունների մոդելի պիտանիության զգայուն չափանիշ:

Պարզ ցանցերի վիճակների խտության ֆունկցիան և նրա միջոցով ջերմունակության և θ_D պարամետրի ջերմաստիճանային կախումները ցանցային տեսությամբ ստացվել են Բլեկմենի կողմից: Համաձայն Բլեկմենի, $\theta_D(T)$ ֆունկցիան ունի մինիմում միջանկյալ ջերմաստիճանների տիրույթում: Քանի որ θ_D պարամետրը կախված է ատոմազական հաստատուններից (ν_l և ν_t արագությունների միջոցով), ապա նրանցից է կախված և այն ջերմաստիճանը, որի դեպքում տեղի ունի $T \ll \theta_D$ խիստ անհավասարությունը: Այն բյուրեղները, որոնցում միջատոմական փոխազդեցությունն ուժեղ է (օրինակ՝ ալմաստ, շափյուղա), ունեն բարձր θ_D -եր: Աղյուսակ IV.1-ում բերված են մի քանի տարրերի համար Γ -երայի ջերմաստիճանի արժեքները, ստացված

ա) ըստ (4.24) բանաձևի այն կետում, որտեղ $C_V = 3Nk_B/2$,

բ) ըստ (4.20) բանաձևով ձայնի արագության հաշվարկի:



Նկ. IV.8

Տարր	θ_D , K (ա)	θ_D , K (բ)	Տարր	θ_D , K (ա)	θ_D , K (բ)
Li	400		Pb	88	72
Na	150	164	Ar	85	
K	100		Cu	315	329
Be	1000		Ag	215	212
B	1250		Au	170	
Al	394	399	Cd	120	168
Ga	240		Fe	420	467
C (ալմաստ)	1860		Pt	230	226
Si	625		Gd	152	

Ընդունված է նաև θ_D պարամետրի որոշումը (4.38) բանաձևի միջոցով (C_V -ի T^3 -ից կախման ուղղի թեքության միջոցով):

Որոշ պարզ նյութերի մոտ ջերմաստիճանի բարձրացմանը զուգընթաց θ_D -ն նվազում է (I խումբ), իսկ մյուսների մոտ՝ աճում (II խումբ), ինչը որակապես պատկերված է նկ. IV.8-ում: Դեբայի ջերմաստիճանի նման վարքը պայմանավորված է հետևյալ հանգամանքով: (2.29) և (4.30) բանաձևերի համաձայն, բարձր ջերմաստիճանների տիրույթում Դեբայի $\theta_D(\infty)$ ջերմաստիճանը կապված է $\theta_D \equiv \theta_D(0)$ պարամետրի հետ

$$\overline{\theta_D^2}(\infty) = \theta_D^2(0) \frac{\overline{\omega^2}}{\omega_D^2} \quad (5.3)$$

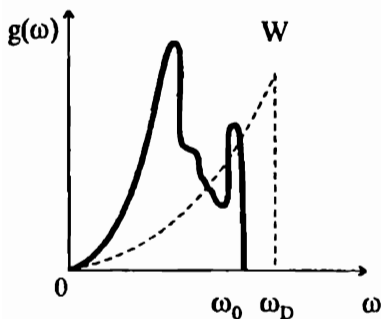
առնչությամբ, որտեղ $\overline{\omega^2}$ -ն հաճախության քառակուսային միջինն է ըստ ցանցային տեսության՝

$$\overline{\omega^2} = \frac{\int_0^{\omega_0} \omega^2 g(\omega) d\omega}{\int_0^{\omega_0} g(\omega) d\omega}, \quad (5.4)$$

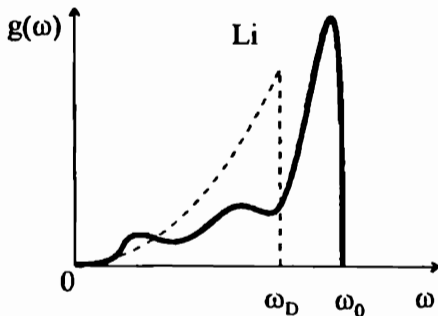
իսկ $\overline{\omega_D^2}$ -ն՝ ըստ Դեբայի մոտավորության

$$\overline{\omega_D^2} = \frac{\int_0^{\omega_D} \omega^2 g(\omega) d\omega}{\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega} = \frac{3}{5} \omega_D^2 : \quad (5.5)$$

Նկ. IV.9-ում և նկ. IV.10-ում պատկերված են վոլֆրամի (I խումբ) և լիթիումի (II խումբ) վիճակների խտության ֆունկցիաներն ըստ ցանցային տեսության (կետագծերով ստրված է Դեբայի մոտավորությունը):



Նկ. IV.9



Նկ. IV.10

Քանի որ հոծ գծերով և կետագծերով սահմանափակված մակերեսներն իրար հավասար են ($u = 3N$ -ի), ապա I խմբի համար $\overline{\omega^2} < \overline{\omega_D^2}$ և $\theta_D(\infty) < \theta_D(0)$, իսկ II խմբի համար $\overline{\omega^2} > \overline{\omega_D^2}$ և $\theta_D(\infty) > \theta_D(0)$:

Որակապես բացատրենք I և II խմբի նյութերի համար ցանցային տեսությամբ վիճակների խտության ֆունկցիայի համար ստացված կորերը:

Նախ դիտարկենք վոլֆրամի սպեկտրը (նկ. IV.9):

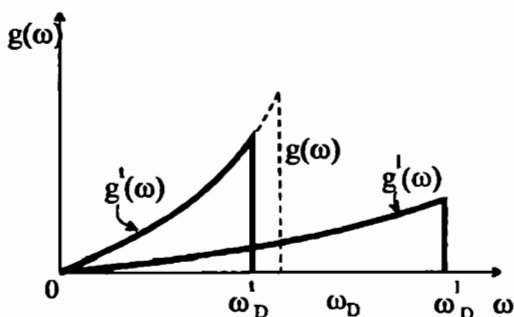
Ինչպես հայտնի է, վոլֆրամի մոմուլը մեծ ճշտությամբ կարելի է համարել իզոտրոպ միջավայր, որտեղ $v_l \approx 2v_t$: Դեբայի տեսությունը բարելավելու նպատակով լայնական և երկայնական ալիքները սահմանափակենք ω_D' և ω_D'' սահմանային հաճախություններով այնպես, որ լայնական մոդերին համապատասխանի $2N$ վիճակ, իսկ երկայնականներին՝ N վիճակ: Այս պայմաններից կստանանք՝

$$\omega_D' = v_l \cdot q_D, \quad \omega_D' = v_l \cdot q_D \approx \frac{1}{2} \omega_D' : \quad (5.6)$$

Դերայի ω_D հաճախությունն արտահայտելով ω_D' -ի միջոցով՝

$$\omega_D = \frac{\omega_D'}{\left[\frac{1}{3} \left(2 + \left(\frac{v_l^3}{v_l'} \right) \right) \right]^{1/3}} = \frac{\omega_D'}{\left[\frac{1}{3} \left(2 + \frac{1}{8} \right) \right]^{1/3}} \approx 1,12 \omega_D' \quad (5.7)$$

տեսնում ենք, որ այն շատ մոտ է լայնական մոդերի ω_D' սահմանային հաճախությանը (նկ. IV.11), այսինքն՝ հիմնական ներդրումը սպեկտրում տալիս են լայնական մոդերը: Գործնականորեն բոլոր բարձրահաճախային



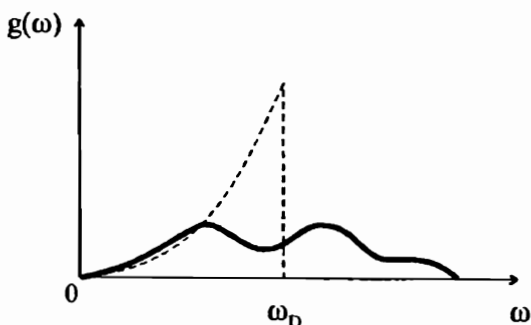
Նկ. IV.11

մոդերը հաշվի չեն առնվում: Սակայն Դերայի տեսության այս անհետևողականությունն էլ հենց նրա հաջողության պատճառն է: Բանն այն է, որ ցանցում կարճ ալիքներն ունեն ավելի փոքր հաճախություններ, քան հոծ միջավայրում (նկ. IV.4): Դրա պատճառն այն է, որ ցանցն ավելի իներտ է, քան հոծ միջավայրը, քանի որ ցանցում զանգվածը կենտրոնացված է ցանցի հանգույցներում, իսկ հոծ միջավայրում այն բաշխված է անընդհատ: Եվ երբ նրանում տարածվում է ալիք, ապա միջավայրի զանգվածի մի մասը, լինելով տատանման հանգույցներում, մնում է դադարի վիճակում: Այլ կերպ ասած, տատանումներին մասնակցում է ոչ լրիվ զանգվածը: Արդյունքում ցանցային տեսությամբ հաշվված սպեկտրը շեղված է դեպի փոքր հաճախությունների կողմը, ինչը, համեմայն դեպս՝ մոտավոր ձևով, համակշռում է Դերայի տեսության մեջ մեծ հաճախությունների արհամարհումը:

Եթե հոծ միջավայրը խիստ անիզոտրոպ է (լիթիումի դեպքը), ապա տատանումներն այլևս չի կարելի բաժանել լայնականի և երկայնականի,

քանի որ բևեռացման ուղղությունները, ինչպես և արագությունները, էապես կախված են ալիքային վեկտորի ուղղությունից: Այս դեպքում անհրաժեշտ է ալիքային վեկտորի ամեն մի (θ, φ) ուղղության համար կառուցել նկ. IV.11-ի նման սպեկտր երեք՝ $\omega_D^{(1)}(\theta, \varphi)$, $\omega_D^{(2)}(\theta, \varphi)$ և $\omega_D^{(3)}(\theta, \varphi)$ սահմանային հաճախություններով, որոնք համապատասխանում են $v_1(\theta, \varphi)$, $v_2(\theta, \varphi)$ և $v_3(\theta, \varphi)$ արագություններին, իսկ q_D սկարամետրը նորից տրվում է (4.13) պայմանի միջոցով:

Խիստ անիզոտրոպության հետևանքով $\omega_D^{(i)}(\theta, \varphi)$ հաճախություններն իրարից խիստ կտարբերվեն, ուստի գումարային սպեկտրը իզոտրոպ հոծ միջավայրի դեպքի համեմատությամբ կհարթվի (նկ. IV.12): Այսպիսով, անիզոտրոպությունը հակված է շեղելու սպեկտրը դեպի բարձր հաճախությունների կողմը, այն դեպքում, երբ ցանցի կառուցվածքի ընդհատության հաշվառումը բերում է հակառակ երևույթին:



Նկ. IV.12

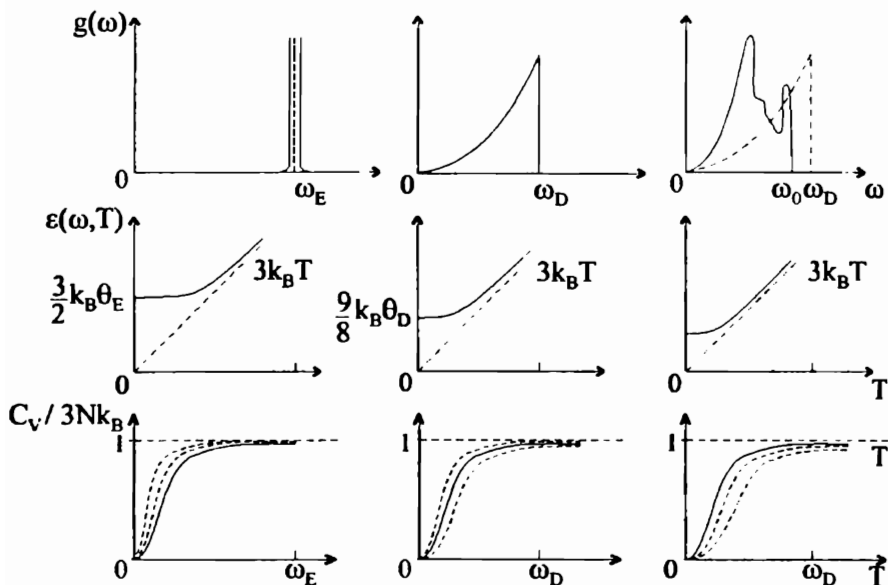
Ուժեղ անիզոտրոպության դեպքում ցանցի ընդհատության հաշվառումը չի կարող համակշռել անիզոտրոպության ազդեցությունը, ուստի և $\omega_0 > \omega_D$:

Վերադառնալով Դեբայի ջերմաստիճանի վարքին, կարող ենք նշել նրա երկու բնութագրական արժեքները՝ $\theta(0) \equiv \theta_D$, որը որոշվում է միայն միջավայրի առաձգական հաստատուններով և $\theta_\infty = \theta_D^2 \cdot \overline{\omega^2} / \omega_D^2$, որը որոշվում է ցանցային տեսության շրջանակներում ուժային հաստատունների միջոցով:

Համեմատենք այժմ Էյնշտեյնի, Դեբայի և ցանցային տեսության շրջանակներում տատանումների սպեկտրի մեկ ատոմին բաժին ընկնող լներգիայի և ջերմունակության համար ստացված կախումների գրաֆիկ-

ները վոլֆրամի օրինակով (նկ. IV.13), ընդունելով $\omega_E = \omega_D$:

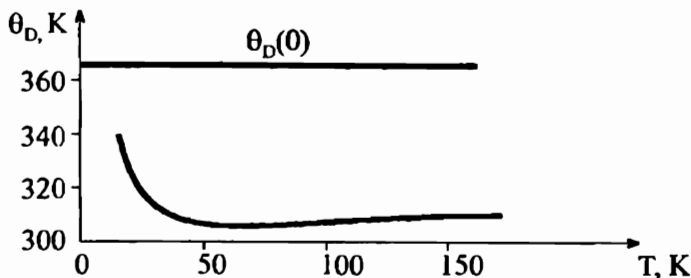
Չնայած տարբեր նախնական ենթադրություններին, ջերմունակություններն իրարից շատ չեն տարբերվում: $\theta_D(T)$ կախումը շատ ավելի զգալուն է սպեկտրի առաջի նկատմամբ: Ջերմունակության Դեբայի կորը



Նկ. IV.13

չափավոր բարձր ջերմաստիճաններում կարելի է համասեղել ջերմունակության ցանցային տեսությունից ստացված կորի հետ, եթե θ_D պարամետրն ընտրվի հավասար $\theta_\infty < \theta_D(0)$, ինչը հաստատվում է վոլֆրամի օրինակով: Վերջինիս մոտ $\theta_D(T)$ ֆունկցիան ջերմաստիճանն աճելիս նվազում է $\theta_D(0)$ արժեքի համեմատությամբ, ինչը պայմանավորված է միջավայրի առաձգական հաստատունների նվազումով: Սակայն սկսած 50K-ից մինչև 150K այն մոթից դառնում է հաստատուն, որի արժեքը համապատասխանում է ցանցային տեսությունից ստացված θ_∞ մեծությանը՝ $\theta_D = \theta_\infty$ (նկ. IV.14): Այս պատճառով « T^3 » օրենքը, որը համաձայն արտաձման,

խատորեն տեղի ունի միայն շատ ցածր՝ մի քանի K ջերմաստիճաններում և $\theta_D \equiv \theta_D(0) = const$ դեպքում, լավագույնս համընկնում է փորձի հետ մոտ $50 \div 150 K$ տիրույթում:



Նկ. IV.14

Այժմ համառոտալի ծանոթանանք Դեբայի տեսության կատարելագործման մի տարբերակի հետ, որն օգտագործում է ցանցային տեսության որոշ արդյունքներ:

Ինչպես տեսանք, փոքր հաճախությունների համար ցանցի տատանումների սպեկտրը կարող է նկարագրվել (4.9) արտահայտությամբ և ապահովել ճշգրիտ արդյունքների ստացումը ցածր ջերմաստիճաններում: Բարձր ջերմաստիճաններում ջերմունակության վարքը, համաձայն (2.29) բանաձևի, որոշվում է $\overline{\omega^2}$ և $\overline{\omega^4}$ միջիններով: Ուստի բնական է սպեկտրը կառուցել այնպես, որ փոքր հաճախությունների համար այն լինի Դեբայի տիպի, իսկ $\overline{\omega^2}$ և $\overline{\omega^4}$ մեծությունների համար տա արժեքներ, որոնք հետևում են ցանցային տեսությունից: Այս եղանակով հաշված ջերմունակությունը կհամընկնի փորձի հետ ինչպես ցածր, այնպես էլ բարձր ջերմաստիճաններում և կարող է ծառայել որպես ներմոտարկման բանաձև՝ միջանկյալ ջերմաստիճանների տիրույթում:

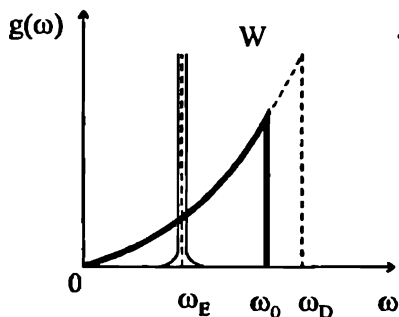
Կարելի է, օրինակ, սպեկտրն ընտրել որպես Դեբայի և Էյնշտեյնի սպեկտրերի գումար՝

$$g(\omega) = 3N \left[\frac{3\omega^2}{\omega_D^3} + \eta \cdot \delta(\omega - \omega_E) \right], \quad (5.8)$$

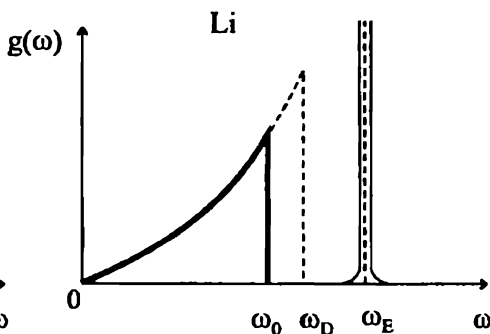
որտեղ η -ն էյնշտեյնյան հաճախությունների լրիվ քիվն է: Հասկանալի է, որ այժմ սպեկտրի քառակուսային մասը պետք է սահմանափակել ավելի փոքր ω_0 հաճախությամբ, քան ω_D պարամետրն է, որպեսզի հաճախությունների (մոդերի) լրիվ քիվը լինի $3N$: (5.8) արտահայտությունը բնութագրվում է ω_0 սահմանային հաճախությամբ, ինչպես նաև ω_E և η պարամետրերով, որոնք որոշվում են նորմավորման պայմանից և այն երկու պայմաններից, որոնց համաձայն $\overline{\omega^2}$ և $\overline{\omega^4}$ միջինները համընկնում են ցանցային տեսությամբ ստացվող արժեքների հետ: Որոշելով նշված երեք պարամետրերը, ջերմունակության արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$C_V = 3Nk_B \left[\left(1 - \eta\right) D\left(\frac{\theta_0}{T}\right) + \eta E\left(\frac{\theta_E}{T}\right) \right] \quad (5.9)$$

տեսքով, որտեղ $\theta_0 = \hbar\omega_0/k_B$, $\theta_E = \hbar\omega_E/k_B$, իսկ $D(x)$ և $E(y)$ ֆունկցիաները արվում են (4.22) և (2.25) բանաձևերով: Նկ. IV.15-ում և IV.16-ում պատկերված են վոլֆրամի և լիթիումի սպեկտրերն ըստ այս տեսության:



Նկ. IV.15



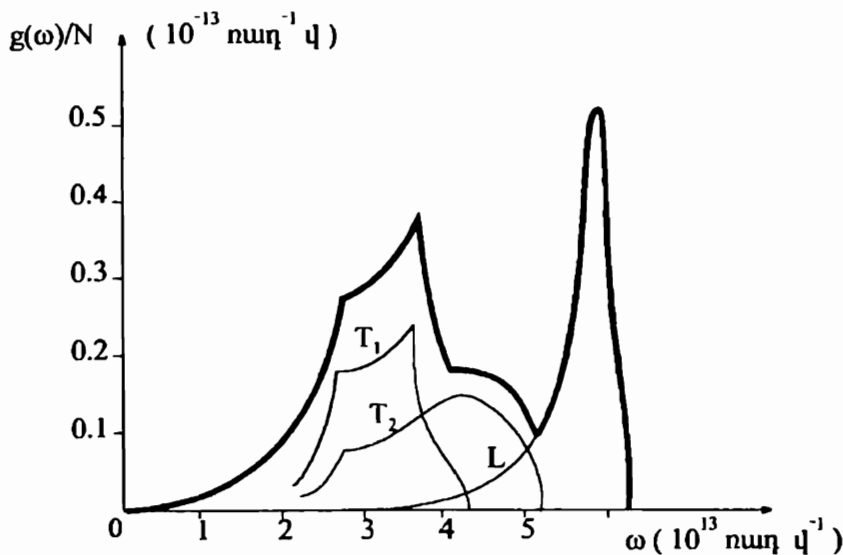
Նկ. IV.16

Նկարներից ակնհայտ է ստացված սպեկտրերի հիմնական զծերով նմանությունը ցանցային տեսությամբ հաշվարկված սպեկտրերին (նկ. IV.9 և IV.10):

Ցանցային տատանողական սպեկտրը հաճախ ստանում են փորձնական ճանապարհով: Փորձերում ուսումնասիրելով օպտիկական, ռենտ-

գենյան ճառագայթումների, ինչպես նաև նեյտրոնների ցրումը ցանցի տատանումների վրա, ստանում են ցանցի դիսպերսիոն հավասարումները տատանումների բոլոր ճյուղերի համար, որոնց միջոցով կառուցվում է ցանցի տատանողական սպեկտրը:

Նկ. IV.17-ում պատկերված է նեյտրոնների ցրման վորժերի հիման վրա ստացված վիճակների խառքյան ֆունկցիան AI -ում: Այն երկու լայնական (T_1, T_2) և երկայնական (L) տատանումների վիճակների խառքյան ֆունկցիաների գումարն է: N -ը տարրական բջիջների թիվն է, իսկ $g(\omega)/N$ հարաբերությունը կախված չէ բյուրեղի չափերից:



Նկ. IV.17

Նկարի վրա հստակ երևում են այն կետերը, որոնցում տարբեր ճյուղերի վիճակների խառքյան ֆունկցիաների ածանցյալները տարամիտում են (Վան Հոֆի եզակիություններ, III.6):

§6. Բյուրեղական ցանցի ջերմային առատանումները:

Հալման չափանիշը

Համաձայն բյուրեղական ցանցի սառսիկ մոդելի, պինդ մարմինը կազմող ատոմները զսնվում են անշարժ վիճակում, կոշտ տաքածական ցանցի հանգույցներում: Սակայն այս մոդելը միայն մոտավոր ձևով է նկարագրում ատոմների տաքածական դիրքերը, քանի որ ատոմների զանգվածները, ինչպես նաև նրանց միջև գործող փոխազդեցության ուժերը վերջավոր են: Դասական սեսությամբ շրջանակներում սառսիկ ցանցի մոդելը ճշմարիտ է միայն $T = 0\text{K}$ -ում, իսկ քվանտային սեսության շրջանակներում այն չի համապատասխանում իրականությանն անգամ $T = 0\text{K}$ -ում, քանի որ, համաձայն իմպուլսի և կոորդինատի անորոշությունների առնչության, ատոմներն օժտված են գոյից աաբբեր իմպուլսներով:

Ցանցի տատանումներն ի հայտ են գալիս բազմաբնույթ ֆիզիկական երևույթներում, ուստի ծագում է ջերմային հավասարակշռության վիճակում նրանց բնութագրման և գնահատման անհրաժեշտությունը:

Ներդաշնակ մոտավորությամբ, n -րդ տաքրական բջջում k տեսակի ատոմի շեղման α -րդ պրոյեկցիան սրվում է III.5.44 արտահայտությամբ՝

$$u_{n\alpha}^k(t) = \frac{1}{\sqrt{Nm_k}} \sum_{qj} e_{j,k\alpha}(q) a_j(q,t) e^{iqn} :$$

Ջերմային հավասարակշռության վիճակում շեղման $u_n^k(t)$ վեկտորի միջինը՝

$$\langle u_n^k \rangle = 0 , \quad (6.1)$$

քանի որ տատանումները հավասարակշռության դիրքի շուրջը կատարվում են բոլոր ուղղություններով միևնույն հավանականությամբ: Այս սկայմանը համընկնում է $u_n^k(t)$ շեղման ժամանակային միջինի համար գրված

$$\overline{u_n^k(t)} = 0 \quad (6.2)$$

սկայմանի հետ, որի համաձայն աառնը «դրվում» է տեղում, ինչը և հիմք է ծառայում ցանցի սառսիկ մոդելի համար: Շեղումների չափը բնութագրելու համար ստանանք միջին քառակուսային շեղման արտահայտությունը ջերմային հավասարակշռության վիճակում:

Սահմաններ շեղման քառակուսու միջինը հետևյալ ձևով՝

$$\left(u_n^2\right)_{av} = \frac{1}{M} \sum_{k_n} m_k \left(u_n^k\right)^2, \quad (6.3)$$

որտեղ M -ը նմուշի զանգվածն է: Մասնավոր դեպքում, երբ ցանցը կազմված է միատեսակ ատոմներից՝ $k = 1$, $M = Nm$, (6.3) առնչությունն ընդունում է

$$\left(u_n^2\right)_{av} = \frac{1}{N} \sum_n u_n^2 \equiv \frac{1}{N} \sum_{n\alpha} u_{n\alpha}^2 \quad (6.4)$$

տեսքը: Հետագա հաշվարկները կկատարենք պարզ ցանցի համար:

Տեղադրենք $u_{n\alpha}$ վեկտորի արաահայտությունը (6.4) սահմանման մեջ՝

$$\begin{aligned} \left(u_n^2\right)_{av} &= \frac{1}{N} \sum_{n\alpha} \frac{1}{Nm} \sum_{qq'jj'} e_{j\alpha}(q) e_{j'\alpha}^*(q') a_j(q, t) a_{j'}^*(q', t) e^{in(q-q')} = \\ &= \frac{1}{Nm} \sum_{qq'jj'} \sum_{\alpha} e_{j\alpha}(q) e_{j'\alpha}^*(q') a_j(q, t) a_{j'}^*(q', t) \frac{1}{N} \sum_n e^{in(q-q')}: \end{aligned} \quad (6.5)$$

Նկատի ունենալով

$$\sum_n e^{in(q-q')} = N \delta_{q, q'+g} \quad (6.6)$$

առնչությունը (Հավելված 2), որտեղ g -ն հսկադարձ ցանցի կամայական վեկտոր է, ինչպես նաև q' և $q'+g$ վեկտորներով բնութագրվող մոդերի համարժեքությունը և III.5.19 առնչությունը, (6.5) արտահայտությունից կստանանք՝

$$\begin{aligned} \left(u_n^2\right)_{av} &= \frac{1}{Nm} \sum_{qq'jj'} \sum_{\alpha} \delta_{q, q'+g} e_{j\alpha}(q) e_{j'\alpha}^*(q') a_j(q, t) a_{j'}^*(q', t) = \\ &= \frac{1}{Nm} \sum_{q, jj'} \sum_{\alpha} e_{j\alpha}(q') e_{j'\alpha}^*(q-g) a_j(q, t) a_{j'}^*(q-g, t) = \\ &= \frac{1}{Nm} \sum_{q, jj'} \sum_{\alpha} e_{j\alpha}(q) e_{j'\alpha}^*(q) a_j(q, t) a_{j'}^*(q, t) = \frac{1}{Nm} \sum_{q, j} \left| a_j(q, t) \right|^2: \end{aligned} \quad (6.7)$$

Նշենք, որ հաշվարկները կաատարելիս օգտագործեցինք շեղման վեկտորի իրական լինելու փաստը, ներկայացնելով $u_n^2 = u_n \cdot u_n^*$: Սակայն դժվար չէ

համոզվել, որ նույն արդյունքը կստացվի նաև անմիջապես քառակուսի բարձրացնելուց և միաժամանակ բևեռացման վեկտորի և նորմալ կոորդինատի համաչափության հատկությունները (III.5) օգտագործելուց հետո:

Միջինացնելով (6.7) արտահայտությունն ըստ ջերմային հավասարակշռության վիճակի, կստանանք՝

$$\langle (u_n^2)_{av} \rangle \equiv \langle u_n^2 \rangle = \frac{1}{Nm} \sum_{q,j} \langle |a_j(q,t)|^2 \rangle : \quad (6.8)$$

Գտնենք $\langle |a_j(q,t)|^2 \rangle$ մեծությունը:

Ինչպես հայտնի է, ցանցի տատանումների պոտենցիալ էներգիան ներդաշնակ մոտավորությամբ u_n շեղումների, (հետևապես և նորմալ կոորդինատների) քառակուսային ֆունկցիա է, որը սուրվում է III.5.3 բանաձևով: Տեղադրելով նրանում շեղման վեկտորի արտահայտությունը և կատարելով որոշ ձևափոխություններ, կստանանք՝

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{q,j} \omega_j^2(q) |a_j(q,t)|^2, \quad (6.9)$$

որն իրենից ներկայացնում է $\omega_j(q)$ հաճախություններով $3N$ տատանակների պոտենցիալ էներգիաների գումար: Միջինացնենք (6.9) արտահայտությունն ըստ ջերմային հավասարակշռության վիճակի: Քանի որ ներդաշնակ տատանակի պոտենցիալ և կինետիկական էներգիաների միջիններն իրար հավասար են, ապա ցանցի տատանողական էներգիայի միջինի համար կստանանք հետևյալ արտահայտությունը՝

$$\langle E \rangle = \langle K \rangle + \langle \Phi \rangle = 2\langle \Phi \rangle = \sum_{q,j} \omega_j^2(q) \langle |a_j(q,t)|^2 \rangle : \quad (6.10)$$

Համեմատելով այս արտահայտությունը բյուրեղի ներքին էներգիայի (2.11) բանաձևի հետ, կարող ենք տեսնել, որ

$$\langle E \rangle \equiv U - U_0 = \sum_{q,j} \varepsilon(\omega_j(q), T), \quad (6.11)$$

որտեղ $\varepsilon(\omega_j(q), T)$ մեծությունը միաչափ ներդաշնակ տատանակի էներգիան է ջերմային հավասարակշռության վիճակում և տրվում է (2.12) բանաձևով: (6.10) և (6.11) բանաձևերից որոնելի մեծության համար կստա-

ցանք՝

$$\langle |a_j(q, t)|^2 \rangle = \frac{\varepsilon(\omega_j(q), T)}{\omega_j^2(q)} \equiv \frac{\varepsilon_{qj}}{\omega_j^2(q)} : \quad (6.12)$$

Այսպիսով, միջին քառակուսային շեղման համար (6.8) և (6.12) արտահայտություններից սաացվում է հետևյալ արդյունքը՝

$$\begin{aligned} \langle u_n^2 \rangle &= \sum_{q,j} \frac{\varepsilon_{qj}}{Nm\omega_j^2(q)} = \frac{1}{Nm} \sum_{q,j} \frac{\hbar}{\omega_j(q)} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega_j(q)/k_B T} - 1} \right] = \\ &= \sum_{q,j} \frac{\hbar}{2Nm\omega_j(q)} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_j(q)}{2k_B T} : \end{aligned} \quad (6.13)$$

Ակնհայտ է, որ միջին քառակուսային շեղումը կախված չէ հանգույցի դիրքից՝ n -ից, ինչը ցանցի տեղափոխական համաչափության հետևանք է: Այն կախված չէ նաև առումների (տարրական բջիջների) թվից կամ բյուրեղի ծավալից: Վերջին պնդումն անմիջապես հետևում է $\langle u^2 \rangle$ -ի տեսքից, եթե (6.13) բանաձևում կատարենք անցում գումարից ինտեգրալի՝ (տես III.6.12 կանոնը)

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\hbar}{2(2\pi)^3 \rho} \sum_j \int \frac{dq}{\omega_j(q)} \cdot \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_j(q)}{2k_B T}, \quad (6.14)$$

որտեղ $\rho = mN/V = M/V$ -ն պինդ մարմնի խտությունն է:

$\langle u^2 \rangle$ -ը հաշվելու համար անհրաժեշտ է տալ $\omega_j(q)$ դիսպերսիոն հավասարումն ամեն մի ճյուղի համար, որի տեսքը q վեկտորի փոփոխման ամբողջ ափրոյթում հայանի չէ:

Նպատակ ունենալով սառնալ կոնկրետ քանակական արդյունքներ, հետագայում կօգտվենք Դեբայի մոտավորությունից, $\omega_j(q)$ կախումը ներկայացնելով գծային ֆոնկցիայի տեսքով (տես (4.7) բանաձևը): Անցնելով (6.13) բանաձևում ըստ հաճախության ինտեգրման՝

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\hbar}{2Nm} \int \frac{g(\omega)}{\omega} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} d\omega \equiv \frac{1}{Nm} \int \frac{g(\omega)}{\omega^2} \varepsilon(\omega, T) d\omega \quad (6.15)$$

և վիճակների խտության ֆոնկցիայի համար վերցնելով (4.17) արտահայ-

առաջությամբ, կատանանք՝

$$\langle u^2 \rangle = \frac{9\hbar}{2m\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} d\omega = \frac{9\hbar^2 T^2}{2mk_B \theta_D^3} \int_0^{\theta_D/T} t \operatorname{cth} \frac{t}{2} dt, \quad (6.16)$$

Ուսումնասիրենք այս արտահայտությունը սահմանային դեպքերում:

1. Յաճախ ջերմաստիճաններ՝ $T \ll \theta_D$

Նկատի ունենալով (6.13) բանաձևում օգտագործված

$$\operatorname{cth} \frac{t}{2} = 1 + \frac{2}{e^t - 1} \quad (6.17)$$

կապը, (6.16) արտահայտությունից կատանանք՝

$$\begin{aligned} \langle u^2 \rangle &= \frac{9\hbar^2 T^2}{2mk_B \theta_D^3} \int_0^{\theta_D/T} t \left(1 + \frac{2}{e^t - 1} \right) dt = \\ &= \frac{9\hbar^2 T^2}{2mk_B \theta_D^3} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + 2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{t dt}{e^t - 1} \right\}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Ինտեգրալի մեջ հիմնական ներդրումը տալիս են փոքր՝ $t \approx 0$ արժեքները, ուստի վերին սահմանը կարելի է փոխարինել ∞ -ով: Նկատի ունենալով, որ

$$\int_0^{\infty} \frac{t dt}{e^t - 1} = \frac{\pi^2}{6}, \quad (6.19)$$

միջին քառակուսային շեղման համար կատանանք հետևյալ արտահայտությունը՝

$$\langle u^2 \rangle = \frac{9\hbar^2}{4mk_B \theta_D} + \frac{3\pi^2 \hbar^2 T^2}{2mk_B \theta_D^3}: \quad (6.20)$$

Եթե $T \rightarrow 0$, ապա $\langle u^2 \rangle$ -ն մնում է վերջավոր, ինչը սլայմանավորված է ատոմների զրոյական տատանումներով՝

$$\langle u^2 \rangle_0 = \frac{9\hbar^2}{4mk_B \theta_D} = \frac{9}{4} \cdot \frac{\hbar}{m\omega_D} = \frac{3k_B^2 \theta_D^2}{8\pi^2 \rho \hbar v^3}: \quad (6.21)$$

Եթե (6.21) բանաձևում կատարենք $\hbar \rightarrow 0$ անցումը, ապա $\langle u^2 \rangle \rightarrow 0$, ինչը և ապացուցում է զրոյական տատանումների բացակային բնույթը: Համա-

ծայն (6.21) բանաձևի, միջին քառակուսային շեղման մեծությունը հակադարձ համեմատական է ատոմի զանգվածին և էական է հատկապես թեթև տարրերից կազմված բյուրեղներում: Աղյուսակ IV.2-ում բերված են (6.21) բանաձևով հաշվարկված $\tilde{u} = \sqrt{\langle u^2 \rangle}$ միջին շեղման, մոտակա հարևանների միջև a հեռավորության և $\tilde{u}/a$ հարաբերական շեղման արժեքները մի քանի բյուրեղների համար: Բերված տվյալներից պարզ երևում է $\tilde{u}$ մեծության կախումը ատոմի զանգվածից: Ալմաստի համար, չնայած ածխածնի ատոմի համեմատաբար փոքր զանգվածին, $\tilde{u}$ միջին շեղման փոքրությունը պայմանավորված է նրա արտակարգ բարձր Դեբայի ջերմաստիճանով (մեծ ω_D -ով, ինչը հետևանք է ալմաստի կարծրության):

Աղյուսակ IV.2

Բյուրեղ	$m, 10^{-24} \text{ գ}$	$\theta_0, \text{ K}$	$\tilde{u}, \text{ \AA}$	$a, \text{ \AA}$	$\tilde{u}/a$
Ne	33,51	63	0.293	3.155	0,093
Ar	66,33	85	0.179	3.756	0.048
Kr	139,1	63	0,144	3.993	0.036
Xe	217.9	55	0.123	4,313	0.028
C (ալմաստ)	19.92	~2000	0.067	1.540	0.019
Si	46.63	570	0.082	2.350	0.023
Ge	120.53	300	0.071	2,450	0.029
Na	38,17	160	0,172	3,659	0,047
K	64.92	130	0.146	4,525	0,032
Rb	141,91	70	0.134	4.837	0.028
Cu	105,50	310	0.074	2,556	0.029
Au	327.0	170	0.057	2.884	0.020
Al	44,80	400	0.101	2.863	0.035

2. Բարձր ջերմաստիճաններ՝ $T \geq \theta_D$

(6.16) բանաձևում ինտեգրալի վերին սահմանը՝ $\theta_D/T \leq 1$, ուստի ընդ-
ինտեգրալ արտահայտությունը վերածելով շարքի՝

$$t \operatorname{cht} \frac{t}{2} \approx t \left[\frac{2}{t} + \frac{1}{3} \cdot \frac{t}{2} - \frac{1}{45} \left(\frac{t}{2} \right)^3 + \dots \right] \approx 2 \left(1 + \frac{t^2}{12} - \frac{t^4}{720} + \dots \right)$$

և կատարելով անդամ առ անդամ ինտեգրում, կստանանք՝

$$\langle u^2 \rangle \approx \frac{9\hbar^2 T}{mk_B \theta_D^2} \left[1 + \frac{1}{36} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right] = \frac{9k_B T}{m\omega_D^2} \left[1 + \frac{1}{36} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right], \quad (6.22)$$

որը գուտ դասական արտահայտություն է (առանց երկրորդ վոքր գումա-
րելու): Այն անմիջապես հետևում է (6.15) բանաձևից, եթե վերջինի մեջ սե-
ղադրենք միաչափ տատանակի էներգիայի $\varepsilon(\omega, T) = k_B T$ դասական ար-
տահայտությունը:

Համեմատելով միջին քառակուսային շեղումները $0K$ -ում և բարձր
ջերմաստիճաններում, (6.21) և (6.22) բանաձևերից կստանանք՝

$$\frac{\langle u^2 \rangle_0}{\langle u^2 \rangle} = \frac{1}{4} \cdot \frac{\theta_D}{T} \left[1 - \frac{1}{36} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right], \quad (6.23)$$

այսինքն՝ $T \approx \theta_D$ ջերմաստիճանում միջին քառակուսային շեղումը մեծացել
է մոտ 4 անգամ:

Միջին քառակուսային շեղման (6.22) արտահայտության օգնությամբ
կարելի է ստանալ պինդ մարմնի հալման չափանիշը (Լինդեման), որը կապ
է հաստատում պինդ մարմնի հալման (T_m) և Դեբայի (θ_D) ջերմաստիճան-
ների միջև: Ննթադրենք, T_m հալման ջերմաստիճանում միջին շեղումը կազ-
մում է միջատոմական a_0 հեռավորության x մասը՝

$$\frac{\tilde{u}}{a_0} \equiv \frac{\sqrt{\langle u^2 \rangle}}{a_0} = x : \quad (6.24)$$

(6.22) և (6.24) արտահայտություններից հեռևում է որոնելի կապը՝

$$\theta_D = \left(\frac{9\hbar^2}{mk_B a_0^2 x^2} \right)^{1/2} \cdot T_m^{1/2} : \quad (6.25)$$

Գնահատումների համաձայն, պինդ մարմինների մեծամասնության համար x մեծության արժեքներն ընկած են $0,2 \div 0,25$ ափսոսաբար:

§7*. Դեբայ-Ուոլերի գործոնը

Բյուրեղական ցանցի ջերմային տատանումներն ի հայտ են գալիս մասնավորապես պինդ մարմնի հետ տարբեր տեսակի ճառագայթումների (օպտիկական, ռենտգենյան, էլեկտրոնային, մեյալոնային) հետ փոխազդեցության ժամանակ:

Ուսումնասիրենք ռենտգենյան ճառագայթների ցրումը պարզ ցանցի վրա: Ստաաիկ ցանցի վրա դիֆրակցիայի դեպքում ռենտգենյան ճառագայթների ցրումն առաձգական է, քանի որ ցրման հետևանքով փոփոխվում է միայն ռենտգենյան ալիքի $p = \hbar k$ իմպուլսի ուղղությունը, բայց ոչ մեծությունը: Ինտենսիվության բրեյլան մաքսիմումները ստացվում են այն դեպքում, երբ ռենտգենյան ալիքի k ալիքային վեկտորի փոփոխությունը հավասար է հակադարձ ցանցի որևէ վեկտորի՝

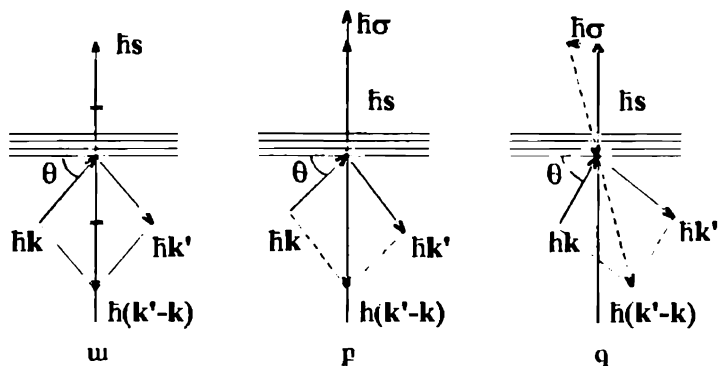
$$K = k' - k = g, \quad |k'| = |k|, \quad (7.1)$$

իսկ ցանցի կառուցվածքային գործոնը՝

$$S_K = \sum_i e^{iK \cdot r_i} = N \delta_{K, g} : \quad (7.2)$$

Առաձգական ցրման հետ մեկտեղ ռենտգենյան ճառագայթները ցանցում կարող են ցրվել մասնավորապես առաձգական ձևով, զրոգոնելով կամ մարելով որոշակի ցանցային տատանումներ, դրանով իսկ փոփոխելով ցանցի ներքին վիճակը: Այսպիսի ցրումներն ընդունված է անվանել ջերմային կամ դիֆուզիոն: Ռենտգենյան քվանտի էներգիան, որպես կանոն, մի քանի հազար էՎ-ի կարգի է, իսկ ցանցում տարածվող ալիքների առավելագույն էներգիան՝ $\hbar \omega_D = k_B \theta_D \sim 0,02 \div 0,03$ էՎ է, ուստի փոխազդեցության հետևանքով ռենտգենյան ալիքի էներգիայի փոփոխությունը կարելի է հաշվի չառնել: Սակայն 5 կէՎ էներգիայով ռենտգենյան քվանտի իմպուլսը՝ $\hbar \omega/c \sim (5000/3 \cdot 10^{10})$ էՎ·վ/սմ $\approx 0,167 \cdot 10^{-6}$ էՎ·վ/սմ, մյուս կարգի է, ինչ որ միջավայրում տարածվող ալիքի իմպուլսը՝ $p \approx \hbar \omega_D/v \approx k_B \theta_D/v \sim$

$\sim (0,03/3 \cdot 10^5) \text{ էՎ.վ/սմ} \approx 0,1 \cdot 10^{-6} \text{ էՎ.վ/սմ}$, հետևաբար, ջերմային ցրման ժամանակ ռենտգենյան քվանտի իմպուլսը կարող է զգալիորեն փոփոխվել: Նկ. IV.18-ում պատկերված են ռենտգենյան ճառագայթների բրեգյան (ա) և ջերմային ցրումները լայնական (բ) և երկայնական (գ) ալիքների վրա, $\hbar s$ -ը՝ ցանցի, $\hbar \sigma$ -ն՝ տատանման իմպուլսն է, $\hbar k$ և $\hbar k'$ -ը՝ ռենտգենյան քվանտինը՝ ցրումից առաջ և հետո: Բրեգի θ անկյան սակ ընկնող ունե-
զենյան քվանտների որոշ մասը միշտ կրում է ջերմային ցրում, որի հե-
տևանքով նվազում է անդրադարձած ռենտգենյան փնջի ինտենսիվությունը: Որոշենք այդ նվազումը բնութագրող մեծությունը:



Նկ. IV.18

Ինչպես հայտնի է, ցրված փնջի ինտենսիվությունը համեմատական է ցանցի կառուցվածքային գործոնի մոդուլի քառակուսուն: Որևէ n հան-
գույցի աստմի դիրքը t պահին սրվում է

$$R_n(t) = n + u_n(t) \quad (7.3)$$

վեկտորով, ուստի դիմամիկ ցանցի կառուցվածքային գործոնի համար կա-
րող ենք գրել՝

$$|S_K|^2 = \left| \sum_n e^{iK R_n(t)} \right|^2 = \sum_{n, n'} e^{iK(n - n')} \cdot e^{iK(u_n - u_{n'})} : \quad (7.4)$$

Գտնենք այս արտահայտության միջինը ջերմային հավասարակշռության
վիճակում:

Ցանցի պոտենցիալ էներգիան u_n շեղումների քառակուսային ֆունկցիա է: Եթե u_n շեղումներից անցնենք a_j նորմալ կոորդինատներին, ապա պոտենցիալ էներգիայի համար կստանանք (6.9) արտահայտությունը, որը տեղադրելով վիճակագրական բաշխման ֆունկցիայի բանաձևում, կստանանք առանձին a_j փոփոխականներից կախված գաուսյան ֆունկցիաների արտադրյալ: Միջինացնենք $\exp(i\kappa s)$ ֆունկցիան ըստ s փոփոխականից կախված գաուսյան ֆունկցիայի՝ (տես Հավելված 2)

$$f(s) = A \exp\left(-\frac{s^2}{2\langle s^2 \rangle}\right) \equiv A \exp(-\alpha s^2) \quad (7.5)$$

(κ գործակիցն ապահովում է κs մեծության անչափ լինելը, A -ն նորմավորման հաստատունն է)

$$\langle \exp(i\kappa s) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\kappa s} \cdot e^{-\alpha s^2} ds \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha s^2} ds = e^{\frac{\kappa^2}{4\alpha}} \equiv e^{\frac{1}{2}\kappa^2 \langle s^2 \rangle} :$$

Ընդհանուր դեպքում, եթե κs արտադրյալի փոխարեն էքսպոնենտի արգումենտում գրված է κs սկալյար արտադրյալը, ապա տեղի ունի

$$\langle e^{i(\kappa s)} \rangle = e^{\frac{1}{2}\kappa^2 \langle s^2 \rangle} \quad (7.6)$$

առնչությունը: (7.4) և (7.6) արտահայտությունների համաձայն,

$$\begin{aligned} \langle |S_K|^2 \rangle &= \sum_{n, n'} e^{iK(n-n')} \cdot \langle e^{iK(u_n - u_{n'})} \rangle = \\ &= \sum_{n, n'} e^{iK(n-n')} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \langle [K(u_n - u_{n'})]^2 \rangle\right\} \end{aligned} \quad (7.7)$$

Այժմ ձևափոխենք (7.7) արտահայտության երկրորդ արտադրիչի ցուցիչը, նրանում u_n շեղումներից անցնելով a_j նորմալ կոորդինատներին՝

$$\begin{aligned} \langle [K(u_n - u_{n'})]^2 \rangle &= \frac{1}{Nm} \sum_{qq', jj'} [K e_j(q)] [K e_j^*(q)] \langle a_j(q, t) a_{j'}^*(q, t) \rangle \times \\ &\times (e^{iqn} - e^{iqn'}) (e^{-iq'n} - e^{-iq'n'}): \end{aligned} \quad (7.8)$$

Եթե (jq) հավաքածուն տարբերվում է $(j'q')$ հավաքածուից, ապա

$a_j(q, t)$ և $a_j^*(q', t)$ մեծություններն անկախ են, ուստի, համաձայն (6.2) բանաձևի,

$$\langle a_j(q, t) a_{j'}(q', t) \rangle = \begin{cases} \langle a_j(q, t) \rangle \cdot \langle a_{j'}^*(q', t) \rangle = 0, & (jq) \neq (j'q') \\ \langle |a_j(q, t)|^2 \rangle, & (jq) = (j'q') \end{cases}$$

այսինքն՝

$$\langle a_j(q, t) a_{j'}(q', t) \rangle = \delta_{jj'} \delta_{qq'} \langle |a_j(q, t)|^2 \rangle : \quad (7.9)$$

(7.8) և (7.9) արտահայտությունների համաձայն

$$\langle [K(u_n - u_{n'})]^2 \rangle = \frac{2}{Nm} \sum_{q, j} |Ke_j(q)|^2 \langle |a_j(q, t)|^2 \rangle [1 - \cos q(n - n')]: \quad (7.10)$$

Ի վերջո, (7.7), (7.10) և (6.12) առնչությունների օգնությամբ, դիմամիկ ցանցի կողմից ցրված փնջի ինտենսիվության համար ստացվում է հետևյալ արտահայտությունը՝

$$I_d = I_s \cdot e^{-2W} \cdot \frac{1}{N^2} \sum_{n, n'} \exp \left\{ i K(n - n') + \right. \\ \left. + \frac{1}{Nm} \sum_{q, j} |Ke_j(q)|^2 \frac{\varepsilon_{qj}}{\omega_j^2(q)} \cos q(n - n') \right\} \quad (7.11)$$

որտեղ

$$W \equiv W(K) = \frac{1}{2Nm} \sum_{q, j} |Ke_j(q)|^2 \frac{\varepsilon_{qj}}{\omega_j^2(q)}, \quad (7.12)$$

իսկ I_s -ը ստատիկ ցանցի կողմից ցրված փնջի ինտենսիվությունն է: $\exp(-2W)$ արտադրիչը նկարագրում է ատոմների ջերմային տատանումների հետևանքով ցրված փնջի ինտենսիվության նվազումը և կոչվում է Դեբայ-Ուոլերի գործոն:

Ցրված փնջի ինտենսիվության նվազման երևույթը որակապես կարելի է բացատրել հետևյալ կերպ: Ինչպես գիտենք (1.6), ատոմի վերջավոր չափերով պայմանավորված ինտերֆերենցիոն երևույթները փոքրացնում են ատոմի՝ ռենտգենյան ճառագայթներ ցրելու ունակությունը: Ջերմային տատանումների հետևանքով ատոմը «լողոկվում» է ավելի մեծ սիլուրությով, քան

իդ սեփական ծավալն է, այսինքն՝ տեղի է ունենում ատոմի ծավալի «արդյունարար» աճ, ինչը բերում է ատոմի ցրտղ ունակության հետագա փոքրացման և ցրված փնջի ինտենսիվության նվազման:

Դերայ-Ուոլերի W գործոնի (7.12) արտահայտությունը զգալիորեն պարզեցվում է խորանարդային բյուրեղների դեպքում, երբ յուրաքանչյուր բևեռացման վեկտորի համար միջին հաշվով

$$\left[K \cdot e_j(q) \right]^2 = \frac{1}{3} K^2 : \quad (7.13)$$

Նկատի ունենալով (6.13) բանաձևը, կստանանք՝

$$2W = \frac{K^2}{3Nm} \sum_{q,j} \frac{\varepsilon_{qj}}{\omega_j^2(q)} = \frac{K^2}{3} \langle u^2 \rangle = K^2 \langle u_\alpha^2 \rangle, \quad \alpha = x, y, z \quad (7.14)$$

որտեղ օգտվել ենք շեղման պրոյեկցիաների քառակուսային միջինների հավասարությունից՝

$$\langle u_x^2 \rangle = \langle u_y^2 \rangle = \langle u_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle u^2 \rangle : \quad (7.15)$$

Համաձայն (7.14) և (6.13) բանաձևերի, ջերմաստիճանի բարձրացմանը զուգընթաց դիֆրակցիոն գծի ինտենսիվությունը նվազում է, ընդ որում այդ նվազումը հատկապես զգալի է մեծ ալիքային վեկտորներով անդրադարձումների համար:

Նկատի ունենալով միջին քառակուսային շեղումների փոքրությունը, (7.11) արտահայտության երկրորդ էքսպոնենտը վերածենք շարքի՝

$$I_d = e^{-2W} (I_0 + I_1 + \dots), \quad (7.16)$$

որտեղ կատարված են հետևյալ նշանակումները՝

$$I_0 = \frac{I_s}{N^2} \sum_{n,n'} e^{iK(n-n')}, \quad (7.17)$$

$$I_1 = \frac{I_s}{mN^3} \sum_{n,n',q,j} e^{iK(n-n')} \left| K e_j(q) \right|^2 \frac{\varepsilon_{qj}}{\omega_j^2(q)} \cos q(n-n') : \quad (7.18)$$

Եթե օգտվենք (7.2) արտահայտությունից, ապա (7.17) առնչությունից կստանանք՝

$$I_0 = I_s \cdot \delta_{K,0}, \quad (7.19)$$

որտեղ g -ն հակադարձ ցանցի կամայական վեկտոր է: Ըստ (7.19) բանաձևի, ցրումը տեղի է ունենում միմիայն Բրեզի պայմանին՝ $K = g$ հավասարմանը բավարարող ուղղությամբ (առածգական ցրում): Նկատի ունենալով (7.18) արտահայտության զույգությունն ըստ q -ի, ինչպես նաև (7.2) պայմանը, որոշ ձևափոխություններից հետո I_1 -ի համար կստանանք՝

$$I_1 = \frac{I_s}{mN} \sum_j \left| K e_j(q) \right|^2 \frac{\varepsilon_{qj}}{\omega_j^2(q)}, \quad K + q = g, \quad (7.20)$$

որն իրենից ներկայացնում է ոչ առածգական ցրման ինտենսիվությունը և, ի տարբերություն առածգական ցրման, զրոյից տարբեր է հակադարձ տարածության բոլոր կետերում: Այն բաշխված է անհավասարաչափ, քանի որ երբ $q \rightarrow 0$ կամ $g, \omega_j(q) \rightarrow 0$ ձայնային ճյուղերի համար, և ոչ առածգական (դիֆուզ) ցրման ինտենսիվությունը կտրուկ աճում է: Ընդհակառակը, օպտիկական ճյուղերի ներդրումը դիֆուզ ցրման մեջ չունի նման մասսիվումներ և հակադարձ տարածության մեջ բաշխված է ավելի հավասարաչափ:

Ստացված (7.20) արտահայտությունը հնարավորություն է տալիս, փորձում չափելով I_1 մեծությունը, գնահատել $\omega_j(q)$ հաճախությունը, որի ալիքային q վեկտորը որոշվում է ցրման անկյան միջոցով և, հետևաբար, որոշել դիսպերսիոն հավասարման ճյուղերը:

§8. Տատանումների աններդաշնակությամբ պայմանավորված երևույթներ բյուրեղներում

Բյուրեղական ցանցի դիմամիկան նկարագրող ներդաշնակ մոտավորության հիմքում ընկած է ցանցի հանգույցների, որպես հավասարակշռության դիրքերի, շուրջ տատանվող ատոմների առավելագույն շեղման փոքրությունը միջատոմական հեռավորությունից: Անգամ հալման ջերմաստիճանում $\sqrt{\langle u^2 \rangle}/a$ հարաբերությունը չի գերազանցում 0,25 արժեքը, ուստի եթե ջերմաստիճանը զգալի ցածր է պինդ մարմնի հալման ջերմաստիճանից, ապա ներդաշնակ մոտավորությունը մեծ ճշտությամբ բացասարժան է

փորձի արդյունքները (բացառությամբ պինդ հեղուկի): Նշված պայմաններում պոստենցիալ էներգիայի վերլուծության մեջ շեղումների խորանարդին և ավելի բարձր կարգի աստիճաններին համեմատական անդամները կարող են միայն ոչ էական ճշգրտումներ մտցնել հաշվարկներում: Մակայն կան բազմաթիվ ֆիզիկական երևույթներ, ինչպես հավասարակշռական, այնպես էլ անհավասարակշռական, որոնք սկզբունքորեն չեն կարող բացատրվել ներդաշնակ մոսավորության շրջանակներում, քանի որ դրանք պայմանավորված են աստմների փոխազդեցության պոստենցիալ էներգիայի աններդաշնակ՝ խորանարդային և ավելի բարձր կարգի անդամներով: Դրանց թվին են պատկանում այնպիսի հավասարակշռական երևույթներ, ինչպիսիք են՝ ջերմային ընդարձակումը, սաքբեր ջերմունակությունների ($C_p \neq C_v$) գոյությունը, բարձր ջերմաստիճաններում ջերմունակության ջերմաստիճանից կախված գծային աճը (շեղումը Դյուլոնգի և Պատիի օրենքից), բյուրեղի առածգական հաստատունների ջերմաստիճանային կախումը և այլն:

Աններդաշնակությամբ պայմանավորված անհավասարակշռական երևույթներից առաջին հերթին անհրաժեշտ է նշել ցանցային ջերմահաղորդականության վերջավորության փաստը:

Այժմ ուսումնասիրենք ցանցային տատանումների աններդաշնակությամբ պայմանավորված որոշ հավասարակշռական երևույթներ:

Ընդհանուր դեպքում ցանցի պոստենցիալ էներգիայի աններդաշնակ մասը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\Phi_a = \sum_{n=3}^{\infty} \Phi_n = \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \\ l_1, \dots, l_n}} \Phi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}^{(n)} \left(\begin{matrix} k_1, \dots, k_n \\ l_1, \dots, l_n \end{matrix} \right) u_{\lambda_1}^{k_1}(l_1) \dots u_{\lambda_n}^{k_n}(l_n) \quad (8.1)$$

որտեղ

$$\Phi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}^{(n)} \left(\begin{matrix} k_1, \dots, k_n \\ l_1, \dots, l_n \end{matrix} \right) \equiv \left(\frac{\partial^n \Phi}{\partial u_{\lambda_1}^{k_1}(l_1) \partial u_{\lambda_2}^{k_2}(l_2) \dots \partial u_{\lambda_n}^{k_n}(l_n)} \right)_0 \quad (8.2)$$

մեծությունները պոստենցիալ էներգիայի ածանցյալներն են հավասարակշռության դիրքերում («ուժային հաստատուններ»):

Մասնավորապես, պարզ ցանցի դեպքում ($k = 1$)

$$\Phi_3 = \frac{1}{3!} \sum_{\substack{l_1, l_2, l_3 \\ \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}} \Phi_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}^{(3)}(l_1, l_2, l_3) u_{\lambda_1}(l_1) u_{\lambda_2}(l_2) u_{\lambda_3}(l_3), \quad (8.3)$$

$$\Phi_4 = \frac{1}{4!} \sum_{\substack{l_1, \dots, l_4 \\ \lambda_1, \dots, \lambda_4}} \Phi_{\lambda_1, \dots, \lambda_4}^{(4)}(l_1, \dots, l_4) u_{\lambda_1}(l_1) u_{\lambda_2}(l_2) u_{\lambda_3}(l_3) u_{\lambda_4}(l_4) : \quad (8.4)$$

Սովորաբար, ելնելով շեղումների փոքրության մասին ենթադրությունից, (8.1) վերլուծության մեջ պահվում է միայն Φ_3 խորանարդային անդամը, սակայն պետք է նկատի ունենալ, որ այդպիսի մոտեցումը մաթեմատիկորեն հիմնավորված չէ: Բանն այն է, որ միայն խորանարդային անդամով համիլտոնիանն անկայուն է, այսինքն, ընտրելով համապատասխան ձևով u -ն, այն կարելի է դարձնել կամայական չափով մեծ և բացասական: Ասվածից հետևում է, որ Φ_3 աններդաշնակ անդամով համիլտոնիանը չունի հիմնական վիճակ, ուստի խնդրի սկզբնական մաթեմատիկական կոտեկտությունն ապահովելու համար անհրաժեշտ է վերլուծության նաև չորրորդ Φ_4 անդամի հաշվառումը: Որոշ դեպքերում Φ_4 անդամի հաշվառման անհրաժեշտությունը բխում է նաև պահպանման օրենքներից:

Հետագա հաշվարկներում կարևոր դեր է խաղում պինդ մարմնի վիճակի հավասարումը, որը տրվում է

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T \quad (8.5)$$

թերմոդինամիկական առնչությամբ, որտեղ $F \equiv F(T, V, N)$ մեծությունը համակարգի ազատ էներգիան է: Այն արտահայտվում է ներքին էներգիայի միջոցով Գիբս-Հելմհոլցի հավասարումով՝

$$U = F - TS = F + T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V, \quad (8.6)$$

որտեղից

$$F = -T \int_0^T \frac{U}{T'^2} dT' = U - T \int_0^T \frac{dT'}{T'} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \equiv U - T \int_0^T \frac{C_V dT'}{T'} : \quad (8.7)$$

(8.7) արտահայտության մեջ ինտեգրման հաստատունն ընտրված է թերմոդինամիկայի III օրենքի համաձայն՝ երբ $T \rightarrow 0$, համակարգի էնտրոպիան՝ $S \rightarrow 0$: Տեղադրելով (8.7) բանաձևում ջերմունակության (2.16) արտահայտությունը և կատարելով մասերով ինտեգրում, պինդ մարմնի ազատ էներգիայի համար կստանանք՝

$$F = E_0 + k_B T \sum_{q,j} \ln \left[1 - \exp \left(- \frac{\hbar \omega_j(q)}{k_B T} \right) \right], \quad (8.8)$$

որտեղ E_0 էներգիան կախված չէ ջերմաստիճանից և սուրվում է (2.7) առնչությամբ: Նշենք, որ (8.8) արտահայտությունը կարելի է ստանալ անմիջականորեն, օգտվելով վիճակագրական ֆիզիկայի հիմնական բանաձևից, որը կապ է հաստատում համակարգի ազատ էներգիայի և վիճակագրական գոմարի միջև:

(8.8) և (8.5) արտահայտություններից հետևում է, որ

$$P = - \left(\frac{\partial E_0}{\partial V} \right)_T + \sum_{q,j} \left[- \frac{\partial (\hbar \omega_j(q))}{\partial V} \right] \left[\exp \left(\frac{\hbar \omega_j(q)}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1} : \quad (8.9)$$

Առաջին անդամը պայմանավորված է հավասարակշռության դիրքերում գտնվող ատոմների փոխազդեցությամբ և գրոյական տատանումներով, իսկ երկրորդ անդամը պայմանավորում է ճնշման ջերմաստիճանային կախումը, որը հնարավոր է միայն հաճախության ծավալային կախման շնորհիվ:

Դժվար չէ համոզվել, որ ներդաշնակ մոտավորության շրջանակներում հաճախությունը կախված չէ մարմնի ծավալից, ռուտի և ճնշումը կախված չէ ջերմաստիճանից: Իրոք, ներդաշնակ տատանումների հաճախությունները որոշվում են բյուրեղի դինամիկական մատրիցի տարրերով, որոնք, իրենց հերթին, արտահայտվում են պոտենցիալ էներգիայի II կարգի ածանցյալների՝ հավասարակշռության դիրքերում ունեցած արժեքներով (տես III.5.12, III.5.13) և կախված չեն ատոմների դիրքերից, հետևաբար և համակարգի ծավալից:

Այժմ իաշվի առնենք պոտենցիալ էներգիայի աններդաշնակությունը, պահելով Φ_3 և Φ_4 անդամները, միաժամանակ, պարզության համար դի-

տարկելով միաչափ ցանցի մոդելը՝

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2!} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i \partial u_j} \right)_0 u_i u_j + \frac{1}{3!} \sum_{i,j,k} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial u_i \partial u_j \partial u_k} \right)_0 u_i u_j u_k + \frac{1}{4!} \sum_{i,j,k,l} \left(\frac{\partial^4 \Phi}{\partial u_i \partial u_j \partial u_k \partial u_l} \right)_0 u_i u_j u_k u_l : \quad (8.10)$$

II կարգի ածանցյալների համար (8.10) արտահայտությունից կստանանք՝

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i \partial u_j} = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i \partial u_j} \right)_0 + \sum_k \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial u_i \partial u_j \partial u_k} \right)_0 u_k + \sum_{k,l} \left(\frac{\partial^4 \Phi}{\partial u_i \partial u_j \partial u_k \partial u_l} \right)_0 u_k u_l \quad (8.11)$$

համաձայն որի, աններդաշնակության հաշվառումը համարժեք է $\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i \partial u_j} \right)_0$ հաստատունները ատոմական u_i շեղումներից և, դրանով

իսկ, միաչափ շղթայի երկարությունից կախված $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i \partial u_j}$ ֆունկցիաներով փոխարինելուն: Այսպիսով, կարելի է պահպանել ներդաշնակ մոտավորության պարզությունը և, մյուս կողմից, հաշվի առնել աններդաշնակության առկայությունը, ենթադրելով, որ ուժային «հաստատունները» կախված են ցանցի երկարությունից (եռաչափ ցանցում՝ ծավալից): Արդյունքում ուժային հաստատունների միջոցով արտահայտվող $\omega_j(q)$ հաճախությունները կախված կլինեն համակարգի ծավալից: Այս մոտավորությունը հայտնի է որպես քվազիներդաշնակ մոտավորություն:

Նորմալ մոդերի հաճախությունների կախումը ծավալից կարելի է բացատրել հետևյալ դատողությունների օգնությամբ: Համաձայն III.5.15 բնութագրական հավասարման, ուժային հաստատունների մեծացման հետ $\omega_j(q)$ հաճախությունները մեծանում են: Միջատոմական հեռավորությունների փոքրացման հետ փոխազդեցության էներգիայի կորի թերությունն անընդհատ մեծանում է (տես, օրինակ՝ նկ. II.5), հետևաբար, մեծանում են և էներգիայի II կարգի ածանցյալները՝ ուժային հաստատունները: Այսպիսով, ծավալի փոքրացման հետ նորմալ մոդերի հաճախությունները մեծանում են: Հակառակը, ծավալը մեծացնելիս հաճախությունները փոքրանում են,

այսինքն՝

$$\frac{d\omega_j(q)}{dV} < 0 : \quad (8.12)$$

Հետևելով Գրյունայզենին, կենթադրենք, որ հաճախության ածանցյալն ըստ ծավալի միևնույնն է բոլոր մոլերի համար և նրա միջոցով կսահմանենք Գրյունայզենի հաստատունը՝

$$\gamma = -\frac{V}{\omega_j} \frac{d\omega_j}{dV} \equiv -\frac{d \ln \omega_j}{d \ln V}, \quad (8.13)$$

որը չափագուրկ, դրական մեծություն է: Այս սահմանման համաձայն, հաճախությունը ծավալից կախված է

$$\omega_j \sim V^{-\gamma} \quad (8.14)$$

օրենքով: γ մեծությունը դիտվում է որպես պարամետր, որը որոշվում է փորձից:

Նկատի ունենալով γ պարամետրի (8.13) սահմանումը, (8.9) արտահայտությունից ճնշման համար կստանանք՝

$$P = -\left(\frac{\partial E_0}{\partial V}\right)_T + \frac{1}{V} \sum_{q,j} \left(-\frac{V}{\omega_j} \frac{d\omega_j}{dV}\right) \frac{\hbar \omega_j(q)}{e^{\hbar \omega_j(q)/k_B T} - 1} = -\left(\frac{\partial E_0}{\partial V}\right)_T + \frac{\gamma}{V} (U - E_0), \quad (8.15)$$

որն իրենից ներկայացնում է պինդ մարմնի վիճակի հավասարումը (Գ.Մի, է.Գրյունայզեն): Հավասարման երկրորդ անդամը համեմատական է $U - E_0$ ջերմային էներգիային և ջերմաստիճանի աճման հետ մեծանում է:

Վիճակի (8.15) հավասարման օգնությամբ կարելի է կապ հաստատել պինդ մարմինը բնութագրող տարրեր մեծությունների միջև: Դրա համար օգտվենք P, V, T պարամետրերի միջև կապից բխող հայտնի թերմոդինամիկական առնչությունից՝

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_P \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T = -1 : \quad (8.16)$$

Նկատի ունենալով ջերմային ծավալային ընդարձակման α գործակցի և իզոթերմական սեղմելիության β_T գործակցի սահմանումները՝

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P, \quad \beta_T \equiv \beta = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T, \quad (8.17)$$

ինչպես նաև վիճակի (8.15) հավասարումից հետևող

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{\gamma}{V} \cdot \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \gamma \frac{C_V}{V} \quad (8.18)$$

կապը, (8.16)-(8.18) բանաձևերից կստանանք՝

$$\alpha = \gamma \frac{\beta C_V}{V} \quad (8.19)$$

առնչությունը, որը հայտնի է որպես Գրյունայզենի հավասարում: Այն կարելի է օգտագործել γ պարամետրը հաշվելու համար, քանի որ մնացած բոլոր բնութագրերը՝ α -ն, β -ն և C_V -ն, փորձում անմիջականորեն չափվող մեծություններ են: γ պարամետրի արժեքները որոշ տարրերի համար

Աղյուսակ IV.3

Տարր	γ	$\alpha, 10^{-5} \text{ K}^{-1}$
Si	0.44	1.245 (280-330K)
Ge	0.72	1.776 (280-330K)
Cu	2.00	6.00 (300-1000K)
Au	3.0	4.5 (300-1000K)
Na	1.14	21.3 (273-373K)
Al	2.34	8.7 (300-1000K)

ստացված են Աղյուսակ IV.3-ում (փակագծերում նշված է ջերմաստիճանի փոփոխման սիրույթը):

Համաձայն Գրյունայզենի հավասարման, ջերմային ընդարձակումը լրիվ պայմանավորված է աննեղաշնակությամբ՝ $\alpha = 0$, եթե $\gamma = 0$, այսինքն, երբ $\omega_j(q)$ հաճախությունները կախված չեն պինդ մարմնի ծավալից, ինչը տեղի ունի ներ-

դաշնակ մոտավորության շրջանակներում:

Սեղմելիության (8.17) սահմանումից և վիճակի (8.15) հավասարումից կարելի է ստանալ սեղմելիության հակադարձ մեծության (ծավալային սեղմման մոդուլի) արևահայտությունը՝

$$\frac{1}{\beta} = V \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial V^2} \right)_T + \frac{\gamma(\gamma+1)}{V} (U - E_0) - \frac{\gamma^2 C_V T}{V} : \quad (8.20)$$

Համաձայն (8.15), (8.19) և (8.20) բանաձևերի, Գրյունայզենի հաստատունի ներմուծումը հնարավորություն է ընձեռում վիճակի հավասարումը և նրա հետ կապված α և β բութթագրերն արտահայտել ջերմային հասկությունները նկարագրող մեծությունների՝ ներքին էներգիայի և ջերմունակության միջոցով, օգտագործելով նրանց տեսական հաշվարկների արդյունքները:

Դերայի տեսության շրջանակներում վիճակի հավասարումը և սեղմելիությունը ստացվում են ներքին էներգիայի (4.23) և ջերմունակության (4.24) բանաձևերի օգնությամբ՝

$$P = - \left(\frac{\partial E_0}{\partial V} \right)_T + \gamma \frac{3Nk_B \theta_D}{V} D_E \left(\frac{\theta_D}{T} \right), \quad (8.21)$$

$$\frac{1}{\beta} = V \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial V^2} \right)_T + \frac{\gamma(\gamma+1)}{V} 3Nk_B \theta_D D_E \left(\frac{\theta_D}{T} \right) - \gamma^2 \frac{3Nk_B T}{V} D \left(\frac{\theta_D}{T} \right): \quad (8.22)$$

Այժմ պարզենք զրոյական ստատանումների էներգիայի կախումը համակարգի ծավալից: Նկատի ունենալով (2.7) արտահայտությունը և ըստ մոդերի գումարից անցնելով ինտեգրալի, կստանանք՝

$$\begin{aligned} E_0 &= \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \sum_q \hbar \omega_j(q) = \Phi_0 + \frac{9N\hbar^{\omega p}}{2\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \omega^3 d\omega = \\ &= \Phi_0 + \frac{9}{8} N\hbar \omega_D = \Phi_0 + \frac{9}{8} Nk_B \theta_D: \end{aligned} \quad (8.23)$$

Ածանցելով (8.23) արտահայտությունն ըստ ծավալի և նկատի ունենալով (8.13) սահմանումը, կստանանք

$$\left(\frac{\partial E_0}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial V} \right)_T - \gamma \frac{9Nk_B \theta_D}{8V}, \quad (8.24)$$

$$\left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial V^2} \right)_T = \left(\frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial V^2} \right)_T + \gamma(\gamma+1) \frac{9Nk_B \theta_D}{8V^2}, \quad (8.25)$$

որոնց համաձայն զրոյական ստատանումներով պայմանավորված ներդրումները ծավալից կախված են $V^{-(\gamma+1)}$ օրենքով: Ջերմաստիճանը բարձրացնելիս ջերմային ընդարձակման հետևանքով այս ներդրումները փոքրանում են, նվազում են նաև (8.24) և (8.25) արտահայտությունների առա-

չին անդամները:

$$\text{Երբ } T = 0\text{K}, D_E(\theta_D/T) = D(\theta_D/T) = 0 \text{ և}$$

$$\frac{1}{\beta_0} = V \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial V^2} \right)_{T=0} : \quad (8.26)$$

Մյուս կողմից, երբ $T \rightarrow 0\text{K}$, $C_V \sim T^3$, ուստի, համաձայն Գրյունայզենի (8.19) հավասարման

$$\alpha \sim C_V \sim T^3 : \quad (8.27)$$

U_0 պատենցիալ էներգիան նվազագույնն է $T = 0\text{K}$ -ում և քանի որ $\alpha \rightarrow 0$, երբ $T \rightarrow 0$, ապա (8.25) բանաձևի I գումարելին շատ քույլ ջերմաստիճանային կախում կունենա: Հետևաբար, $1/\beta$ մեծության ջերմաստիճանային կախումը $T \ll \theta_D$ տիրույթում պայմանավորված կլինի (8.22) արտահայտության II և III գումարելիներով: Օգտվելով (4.34) և (4.35) բանաձևերից, հեշտությամբ կստանանք սեղմելիության ջերմաստիճանային կախումն արտահայտող բանաձևը $T \ll \theta_D$ տիրույթում՝

$$\frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta_0} - \frac{9\pi^4 \gamma(\gamma - 1) N k_B \theta_D}{5V} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^4 : \quad (8.28)$$

Բարձր՝ $T > \theta_D$ ջերմաստիճաններում ջերմունակությունը ձգտում է հաստատուն արժեքի, ուստի ջերմային ընդարձակման գործակիցը կունենա վերջավոր հաստատուն արժեք՝ $\alpha = \text{const}$: Արդյունքում ջերմաստիճանի փոփոխման հետ (8.22) բանաձևում կփոփոխվի $1/\beta$ մեծության և՛ առաջին, և՛ երկրորդ գումարելին: Ջերմային ընդարձակման հետևանքով իրարից հեռացող աստմների փոխազդեցության էներգիան կփոքրանա, հետևաբար, կփոքրանա I գումարելու ներդրումը $1/\beta$ -ում: Մյուս կողմից, ներքին էներգիայով պայմանավորված II և III անդամների գումարը ջերմաստիճանի բարձրացման հետ մեծանում է ($\sim T$ -ին): Առաջին գործոնը բերում է բյուրեղի սեղմելիության մեծացմանը (ցանցի «փափկեցմանը»), իսկ երկրորդը՝ սեղմելիության փոքրացմանը (ցանցի «կոշտացմանը»): Փորձից հետևում է, որ գերակշռում է առաջին գործոնը, և ջերմաստիճանը բարձրացնելիս ցանցի սեղմելիությունն աճում է:

Աններդաշնակությամբ է պայմանավորված նաև պինդ մարմնի՝ հաստատուն ճնշման դեպքում (C_p) և հաստատուն ծավալի դեպքում (C_v) ունեցած ջերմունակությունների տարբերությունը:

C_p և C_v ջերմունակությունները կապված են հետևյալ ընդհանուր քերմոդինամիկական առնչությամբ՝

$$C_p - C_v = TV \frac{\alpha^2}{\beta} : \quad (8.29)$$

Օգտվելով Գրյունայզենի (8.19) հավասարումից, (8.29) արտահայտության փոխարեն կունենանք՝

$$\frac{C_p - C_v}{C_v} = \gamma \cdot \alpha \cdot T : \quad (8.30)$$

Ցածր՝ $T \ll \theta_D$ ջերմաստիճաններում $\gamma \alpha T \sim T^4 \rightarrow 0$, և C_p և C_v ջերմունակությունները գործնականորեն իրարից չեն տարբերվում: Այդ տարբերությունը փոքր է անգամ բարձր ջերմաստիճաններում, ինչը հետևանք է ջերմային ընդարձակման գործակցի համեմատաբար փոքր արժեքի (տես Աղյուսակ IV.3): Իրոք, եթե $T \sim 1000\text{K}$, $\alpha \sim 10^{-5} \text{K}^{-1}$, ապա $\gamma \alpha T \approx 0,02$, այսինքն՝ C_p -ն C_v -ից տարբերվում է մի քանի տոկոսով: Ակնհայտ է, որ $\gamma = 0$ դեպքում (ներդաշնակ մոտավորություն) $C_p = C_v$: Պինդ մարմնի առաձգական հաստատունների ջերմաստիճանային կախումը նույնպես հետևանք է ուժային հաստատունների՝ աններդաշնակության հետևանքով ծավալից ունեցած կախման, ուստի $\alpha = 0$ դեպքում վերանում է նաև առաձգական հաստատունների կախումը ջերմաստիճանից:

Շարադրված տեսությունը մասնակիորեն է նկարագրում աններդաշնակությամբ պայմանավորված երևույթները, քանի որ պոտենցիալ էներգիայի Φ_a աններդաշնակ մասը հաշվի է առնվում ոչ անմիջականորեն, այլ միայն պոտենցիալ էներգիայի II կարգի ածանցյալների՝ ծավալից ունեցած կախման միջոցով: Այս պատճառով տեսությունը տալիս է ցանցի՝ ծավալից կախված հատկությունների կիսաքանակական նկարագրությունը:

Այժմ պարզենք աններդաշնակության ազդեցությունը ցանցային ջերմունակության վրա:

Համաձայն ջերմունակության քվանտային տեսության, բարձր ջերմաստիճաններում պինդ մարմնի ջերմունակությունը ձգտում է $3R$ սահմանային արժեքին, մնալով միշտ նրանից վոքր (սեւ (2.29) բանաձևը): Սակայն վտրծում, նշված տիրույթում ջերմունակությունը գերազանցում է $3R$ դասական արժեքը, ընդ որում, ջերմաստիճանը բարձրացնելիս շեղումը դասական արժեքից աճում է գծային օրենքով:

Աններդաշնակության ազդեցությունն առավելագույնս արտահայտվում է համեմատաբար մեծ շեղումների դեպքում, այսինքն՝ բարձր ջերմաստիճաններում (սեւ (6.22) բանաձևը), ուստի հաշվարկները կատարելիս կարող ենք օգտվել դասական վիճակագրությունից:

Ցանցի վիճակագրական ինտեգրալը (սեւ (1.5) բանաձևը)՝

$$\begin{aligned} Z &= \int \cdots \int \exp \{ -\beta E(p_1, \dots, p_N; u_1, \dots, u_N) \} dp_1 \cdots dp_N du_1 \cdots du_N = \\ &= \int \cdots \int \exp \{ -\beta [H_0(p_1, \dots, p_N; u_1, \dots, u_N) + \\ &\quad + \Phi_a(u_1, u_2, \dots, u_N)] \} dp_1 \cdots dp_N du_1 \cdots du_N, \end{aligned} \quad (8.31)$$

որտեղ ցանցի $H_0(p_1, \dots, p_N; u_1, \dots, u_N)$ էներգիան ներդաշնակ մտավորությամբ p_i իմպուլսների և u_i շեղումների քառակուսային ֆունկցիա է, իսկ պոտենցիալ էներգիայի $\Phi_a(u_1, \dots, u_N)$ աններդաշնակ մասը տրվում է (8.1) արտահայտությամբ, $\beta = 1/k_B T$:

(8.31) արտահայտությունը վերածենք շարքի, համարելով Φ_a մեծությունը փոքր գրգռում H_0 էներգիայի նկատմամբ և սահմանափակվենք վերլուծության քառակուսային անդամներով՝

$$\begin{aligned} Z &= \int \cdots \int \exp(-\beta H_0) \left[1 - \beta \Phi_a + \frac{1}{2} \beta^2 \Phi_a^2 + \cdots \right] dp_1 \cdots dp_N du_1 \cdots du_N = \\ &= Z_0 \left[1 - \beta \langle \Phi_a \rangle_h + \frac{1}{2} \beta^2 \langle \Phi_a^2 \rangle_h + \cdots \right], \end{aligned} \quad (8.32)$$

որտեղ ներդաշնակ ցանցի Z_0 վիճակագրական ինտեգրալը տրվում է (1.10) բանաձևով, իսկ ըստ ներդաշնակ մտավորության $\langle \cdots \rangle_h$ միջինները տրվում են

$$\begin{aligned}\langle \Phi_a^k \rangle_h &= \frac{1}{Z_0} \int \cdots \int \exp(-\beta H_0) \Phi_a^k(u_1, \dots, u_N) dp_1 \cdots dp_N du_1 \cdots du_N = \\ &= \frac{\int \cdots \int \exp(-\beta \Phi_2) \Phi_a^k(u_1, \dots, u_N) du_1 \cdots du_N}{\int \cdots \int \exp(-\beta \Phi_2) du_1 \cdots du_N}\end{aligned}\quad (8.33)$$

արտահայտությամբ, որտեղ $k = 1, 2, \dots$, իսկ Φ_2 մեծությունը պոտենցիալ էներգիայի ներդաշնակ մասն է (III.5.3 բանաձև):

Օգտվելով համակարգի ազատ էներգիայի և վիճակագրական ինտեգրալի միջև կապից և նկատի ունենալով (8.32) առնչությունը, ցանցի ազատ էներգիայի համար կստանանք՝

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln Z_0 - k_B T \ln \left[1 - \beta \langle \Phi_a \rangle_h + \frac{1}{2} \beta^2 \langle \Phi_a^2 \rangle_h + \cdots \right]: \quad (8.34)$$

Վերլուծենք այն շարքի ըստ Φ_a փոքր պարամետրի: Օգտվելով $x \ll 1$ դեպքում հայտնի

$$\ln(1-x) \approx -x - \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} + \dots$$

արտահայտությունից, ազատ էներգիայի համար կստանանք՝

$$F = F_h + \langle \Phi_a \rangle_h + \frac{1}{2k_B T} [\langle \Phi_a \rangle_h^2 - \langle \Phi_a^2 \rangle_h] + \dots, \quad (8.35)$$

որտեղ F_h -ը ազատ էներգիան է ներդաշնակ մոտավորությամբ:

Հետագա պարզեցումների նպատակով կսահմանափակվենք աններդաշնակության $n = 3$ և $n = 4$ անդամներով, այսինքն, կենթադրենք, որ

$$\Phi_a \approx \Phi_3 + \Phi_4: \quad (8.36)$$

Քանի որ միջինացումը, համաձայն (8.33) սահմանման, կատարվում է ըստ u , շեղումների համաչափ $\exp(-\beta \Phi_2)$ ֆունկցիայով, ապա շեղումների կենսո աստիճաններ պարունակող անդամների միջինները հավասարվում են զրոյի՝

$$\langle \Phi_3 \rangle_h \sim \langle u^3 \rangle_h = 0, \quad \langle \Phi_3 \cdot \Phi_4 \rangle_h \sim \langle u^7 \rangle_h = 0, \quad (8.37)$$

իսկ շեղման գույգ աստիճաններով անդամների միջինները թվային գործակցի ճշտությամբ կարող ենք գրել (6.22) բանաձևի օգնությամբ՝

$$\langle \Phi_4 \rangle_h \sim AN \langle u_i^2 \rangle^2 \approx AN \left(\frac{k_B T}{m \omega^2} \right)^2, \quad (8.38)$$

$$\langle \Phi_3^2 \rangle_h \sim B^2 N \langle u_i^2 \rangle^6 \approx B^2 N \left(\frac{k_B T}{m \omega^2} \right)^3, \quad (8.39)$$

որտեղ B գործակիցն արտահայտվում է պոտենցիալ էներգիայի III կարգի, իսկ A -ն՝ IV կարգի ածանցյալների միջոցով:

(8.35)-(8.39) արտահայտություններից ջերմունակության համար կստանանք՝

$$C_V = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V \approx 3Nk_B + 2Nk_B \cdot k_B T \left[\frac{B^2}{(m\omega^2)^3} - \frac{A}{2(m\omega^2)^2} \right]: \quad (8.40)$$

Ջերմունակության՝ աններդաշնակությամբ պայմանավորված մասում Φ_3 անդամի ներդրումը միշտ դրական է ($\sim B^2$), իսկ Φ_4 անդամի ներդրումը՝ անդրոշ, կախված A գործակցի նշանից:

Դժվար չէ համոզվել, որ (8.40) արտահայտության մեջ փակագծերում գրված գումարելիները նույն կարգի մեծություններ են, իսկ աններդաշնակությամբ պայմանավորված ուղղումը շատ փոքր է ջերմունակության $3Nk_B$ դասական արժեքից: Իրոք, ըստ մեծության կարգի

$$B \sim \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial u_i^3} \right)_0 \sim \frac{\Phi}{a^3}, \quad A \sim \left(\frac{\partial^4 \Phi}{\partial u_i^4} \right)_0 \sim \frac{\Phi}{a^4}, \quad m\omega^2 \sim \frac{\Phi}{a^2},$$

որտեղ a պարամետրը ցանցի հաստատունն է, հետևաբար

$$\frac{B^2}{(m\omega^2)^3} \sim \frac{\Phi^2 a^{-6}}{\Phi^3 a^{-6}} \sim \frac{1}{\Phi}, \quad \frac{A}{2(m\omega^2)^2} \sim \frac{\Phi a^{-4}}{\Phi^2 a^{-4}} \sim \frac{1}{\Phi}.$$

իսկ ջերմունակության ուղղումը՝

$$\Delta C_V \sim Nk_B \cdot \frac{k_B T}{\Phi} \approx Nk_B \cdot \frac{k_B T}{m\omega^2} \cdot \frac{1}{a^2} \approx Nk_B \cdot \frac{\langle u^2 \rangle}{a^2}, \quad (8.41)$$

համեմատական է ներդաշնակ տեսության $\langle u^2 \rangle / a^2$ փոքր պարամետրին:

ՄԵԿՈՒՍԻՉՆԵՐԻ ԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

§1. Էլեկտրական դաշտը մեկուսիչներում: Դիէլեկտրական բաժանցելիություն

Մեկուսիչների (կամ դիէլեկտրիկների) ամենահիմնական հատկությունը նրանց անհաղորդիչ լինելու փաստն է, այն, որ նրանցում հաստատուն էլեկտրական հոսանք գոյություն չի կարող ունենալ: Հետևաբար, ի տարբերություն հաղորդիչների, հաստատուն էլեկտրական դաշտի լարվածությունը մեկուսիչում տարբեր է գրոյից:

Ընդունված է մեկուսիչ համարել այն նյութերը, որոնց տեսակարար դիմադրությունը 10^{10} Օհմ-սմ-ից մեծ է, ինչը գերազանցում է մետաղների տեսակարար դիմադրությունն առնվազն 10^{14} անգամ:

Էլեկտրաստատիկ երևույթների բազմազանությունը մեկուսիչներում նկարագրվում է Մաքսվելի միկրոսկոպական հավասարումներով՝

$$\operatorname{div} \mathbf{e} = 4\pi\rho', \quad (1.1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{e} = 0, \quad (1.2)$$

որտեղ «միկրոսկոպական» էլեկտրաստատիկ $\mathbf{e}$ դաշտը պայմանավորված է լրիվ «միկրոսկոպական» լիցքի ρ' խտությամբ: Իրական ֆիզիկական խնդիրներում հնարավոր չէ սույ առանձին լիցքերի բաշխումը, քանի որ նյութի մակրոսկոպական ծավալներում պարունակվում են հսկայական թվով լիցքեր, որոնցից յուրաքանչյուրը ջերմային զրոգման կամ զրոյական տատանումների հետևանքով ավել կաս սկսկաս չափով շարժունակ է:

Բարեբախտաբար, մակրոսկոպական խնդիրներում, որպիսիք են գործնականում հանդիպող բոլոր խնդիրները, չի պահանջվում գտնել դաշտը նմուշի ցանկացած կետում, որը շատ արագ, կետից կետ փոփոխվում է: Միանգամայն բավարար է իմանալ էլեկտրական դաշտի միջին լարվածությունը $I \approx 10^{-2} \div 10^{-3}$ սմ գծային չափերով տիրույթներում: Այսպիսի

տիրույթներում պարունակվող աստմների թիվը՝ $N_i \sim l^3/a^3 \geq 10^{15}$ է ($a^3 \sim 10^{-24}$ սմ³ աստմի ծավալն է), հետևաբար՝ միկրոսկոպական էլեկտրական դաշտի լարվածության շեղումները լրիվ կմիջինացվեն:

Այսպիսով, մենք գործ կունենանք էլեկտրաստատիկ դաշտի լիցքի խտության ըստ «ֆիզիկոսներն անվերջ վտրք» $\Delta V \sim l^3$ ծավալի միջինացված մեծությունների հետ: Միջինացման արդյունքում էլեկտրական դաշտի լարվածության միջին արժեքի՝ $E = \langle e \rangle$ -ի համար, որը դաշտի մակրոսկոպական բնութագիր է, (1.1) և (1.2) հավասարումներից ստացվում են

$$\operatorname{div} E = 4\pi\rho - 4\pi P, \quad (1.3)$$

$$\operatorname{rot} E = 0 \quad (1.4)$$

հավասարումները, որտեղ

$$\rho = \sum_i N_i \langle e_i \rangle + \rho_0, \quad (1.5)$$

N_i -ն i տեսակի մոլեկուլների թիվն է միավոր ծավալում, $\langle e_i \rangle$ -ն՝ նրանց միջին լիցքը, ρ_0 -ն՝ լրացուցիչ (ազատ) լիցքի խտությունը: P -ն միջավայրի բևեռացման վեկտորն է, այսինքն՝ միջավայրի միավոր ծավալի էլեկտրական կամ դիպոլային մոմենտը՝

$$P = \sum_i N_i \langle p_i \rangle, \quad (1.6)$$

որտեղ $\langle p_i \rangle$ -ն i տեսակի մոլեկուլի միջին դիպոլային մոմենտն է: Քանի որ, որպես կանոն, մոլեկուլներն էլեկտրաչեզոք են, ապա $\langle e_i \rangle = 0$, և լիցքի լրիվ խտությունը՝ $\rho(r) = \rho_0(r)$:

(1.3) հավասարումը կարելի է ներկայացնել նաև

$$\operatorname{div} D = 4\pi\rho \quad (1.7)$$

տեսքով, որտեղ

$$D = E + 4\pi P \quad (1.8)$$

մեծությունը էլեկտրական ինդուկցիայի վեկտորն է:

Արտաքին դաշտի բացակայության դեպքում նյութի միջին բևեռացումը՝ $P = 0$ (այս պնդումը չի վերաբերվում պիրոէլեկտրիկներին, որոնք օժտված են $P \neq 0$ դիպոլային մոմենտով. տես §8): $P(E)$ ֆունկցիան

կարելի է վերլուծել շարքի ըստ E -ի կենսա աստիճանների (E -ի գույգ աստիճանների բացակայությունը հետևանք է $P \rightarrow -P$ հատկության, երբ $E \rightarrow -E$), այսինքն՝

$$P(E) = \chi E + bE^3 + \Lambda : \quad (1.9)$$

Ինչպես ցույց են տալիս փորձերը, լաբորատոր պայմաններում հասանելի էլեկտրական դաշտերի համար (1.9) վերլուծության մեջ մեծ ճշտությամբ կարելի է սահմանափակվել ըստ դաշտի գծային անդամով, քանի որ փորձում ստացվող դաշտերը շատ փոքր են ներատոմական էլեկտրական դաշտերից՝ $|E| \ll E_0 \sim 10^8 \div 10^9$ Վ/սմ: (1.9) արտահայտության II գումարելին սովորաբար հաշվի է առնվում ոչ գծային օպտիկայի խնդիրներում, երբ օգտագործվում են $E \sim 10^5 \div 10^6$ Վ/սմ լարվածությամբ լազերային դաշտեր:

Իգոտորոպ միջավայրերում բևեռացման վեկտորը զուգահեռ է E վեկտորին, և համեմատականության գործակիցը կախված չէ նրա ուղղությունից՝

$$P = \chi E , \quad (1.10)$$

որտեղ χ մեծությունը կոչվում է միջավայրի դիէլեկտրական ընկալունակություն: Այս դեպքում, համաձայն (1.8) սահմանման

$$D = E + 4\pi P = E(1 + 4\pi\chi) \equiv \varepsilon E , \quad (1.11)$$

որտեղ

$$\varepsilon = 1 + 4\pi\chi \quad (1.12)$$

մեծությունը նյութի դիէլեկտրական թափանցելիությունն է (դիէլեկտրական հաստատունը): Եթե միջավայրը ոչ միայն իզոտրոպ է, այլ նաև համասեռ, ապա դիէլեկտրական հաստատունը կախված չէ կոորդինատներից:

Եթե միջավայրն անիզոտրոպ է, ապա կապը D և E , ինչպես նաև P և E վեկտորների միջև ունի տենզորական բնույթ՝

$$D_i = \varepsilon_{ik} E_k , \quad P_i = \chi_{ik} E_k , \quad (1.13)$$

որտեղ ε_{ik} -ն և χ_{ik} -ն II կարգի համաչափ տենզորներ են (կրկնվող ցուցիչներով կատարվում է գումարում): Վերջիններս կապված են

$$\varepsilon_{ij} = \delta_{ij} + 4\pi\chi_{ij} \quad (1.14)$$

աունյությամբ, որսւել δ_{ij} -ն Կրոնեկերի խորհրդանիշն է:

§2. Ապարենոացնող դաշտ: Ապարենոացման գործակից

Նշանակենք E_0 -ով նմուշից դուրս գտնվող լիցքերի կողմից ստեղծված էլեկտրական դաշտի լարվածությունը: Նմուշի առկայությամբ դաշտի լարվածություն մեջ ներդրում է տալիս ինչպես E_0 արտաքին դաշտը, այնպես էլ նմուշի բևեռացման հետևանքով առաջացած դաշտը:

Պարզենք բևեռացման ներդրումը մակրոսկոպական դաշտի լարվածության մեջ: Դրա համար անհրաժեշտ է գտնել նմուշի բոլոր դիպոլների կողմից ստեղծված էլեկտրական դաշտը: Քանի որ նմուշի միավոր ծավալի դիպոլային մոմենտը $\mathbf{P}$ է, ապա dV ծավալն օժտված կլինի $\mathbf{P}dV$ դիպոլային մոմենտով: Համաձայն էլեկտրաստատիկայից հայտնի բանաձևի, նմուշի դիպոլային մոմենտով ստեղծված դաշտի պոտենցիալը՝

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int dV \cdot \mathbf{P} \cdot \text{grad} \frac{1}{r}, \quad (2.1)$$

որսւել ինտեգրումը կատարվում է ըստ նմուշի ծավալի:

Ձևավորենք ընդհանուրապ արտահայտությունը՝

$$\mathbf{P} \cdot \text{grad} \frac{1}{r} = \text{div} \frac{\mathbf{P}}{r} - \frac{1}{r} \text{div} \mathbf{P} : \quad (2.2)$$

Տեղադրելով այն (2.1) ինտեգրալում և օգտվելով Գաուսի թեորեմից, կստանանք՝

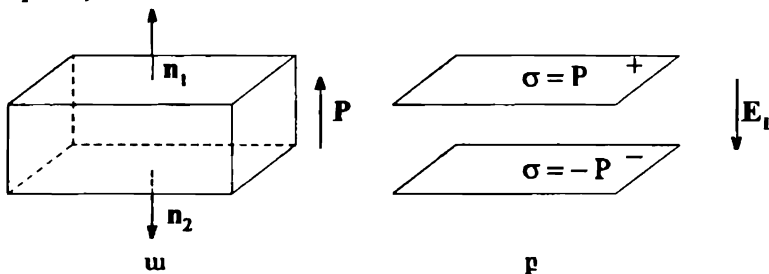
$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}) &= \int dV \left\{ \text{div} \frac{\mathbf{P}}{r} - \frac{1}{r} \text{div} \mathbf{P} \right\} = \\ &= \int \frac{\mathbf{n} dS \cdot \mathbf{P}}{r} - \int \frac{\text{div} \mathbf{P}}{r} dV = \int dS \frac{\mathbf{P}_n}{r} - \int \frac{\text{div} \mathbf{P}}{r} dV, \end{aligned} \quad (2.3)$$

որտեղ $\mathbf{P}_n$ մեծությունը $\mathbf{P}$ վեկտորի պրոյեկցիան է նմուշի մակերևույթի $\mathbf{n}$ նորմալի վրա, իսկ ինտեգրումն առաջին գումարելիում կատարվում է ըստ նմուշի մակերևույթի:

Համեմատելով (2.3) բանաձևը սյուսենցիալի ընդհանուր արտահայտության հետ, կստանանք, որ $\sigma = \mathbf{n} \cdot \mathbf{P}$ մեծությունը լիցքի մակերևութային խտությունն է, իսկ $\rho = -\text{div} \mathbf{P}$ մեծությունը՝ լիցքի ծավալային խտությունը:

Եթե նմուշը բևեռացված է համասեռ՝ $P = \text{const}$, ապա $\rho = -\text{div } P = 0$:

Դիտարկենք համասեռ բևեռացված դիէլեկտրական քիթեղ: Համաձայն վերը նշված արդյունքի, բևեռացմամբ ստեղծված դաշտը քիթեղի ցանկացած կետում հավասար է քիթեղի մակերևույթների վրա ծագած $\sigma = n \cdot P$ խտության փոքրիկ ստեղծած էլեկտրական դաշտին (նկ. V.1, n_1 և n_2 միավոր վեկտորները քիթեղի վերին և ստորին մակերևույթների նորմալներն են):



Նկ. V.1

Լիցքավորված մակերևույթների միջև ստեղծված դաշտը՝

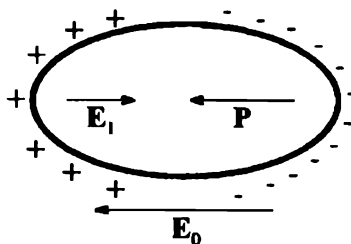
$$E_1 = -4\pi |\sigma| = -4\pi P : \quad (2.4)$$

Այսպիսով, քիթեղի ներսում լրիվ մակրոսկոպական դաշտը՝

$$E = E_0 + E_1 = E_0 - 4\pi P \cdot n_1 : \quad (2.5)$$

Ինչպես հետևում է (2.5) բանաձևից, բևեռացմամբ պայմանավորված E_1 դաշտը նմուշի ներսում ուղղված է արտաքին E_0 դաշտին հակառակ, ուստի այն կոչվում է ապաբևեռացնող:

Ապաբևեռացնող դաշտի մեծությունը կախված է նմուշի ձևից: Դիտարկենք էլիպսարդի տեսք ունեցող դիէլեկտրական նմուշ: Նմուշի ձևի ընտրությունը պայմանավորված է այն հանգամանքով, որ էլիպսարդի կիսաառանցքների հարաբերությունների տարբեր սահմանային դեպքերում կարելի է հեշտությամբ ստանալ գնդի, ձողի և սկավառակի ձև ունեցող նմուշների համար համապա-



Նկ. V.2

տասխան արտահայտություններ:

Կարևոր է նաև այն հանգամանքը, որ նշված ձևերն ունեցող մոտշնե-
րում համասեռ բևեռացումը բերում է ապաբևեռացման համասեռ դաշտի
(նկ. V.2):

Եթե ուղղանկյուն կոորդինատային համակարգի առանցքներն ուղ-
ղենք էլիպսարդի զլիսավոր առանցքներով, ապա ապաբևեռացման դաշտի
բաղադրիչների համար կունենանք՝

$$E_{1x} = -4\pi n_x P_x, \quad E_{1y} = -4\pi n_y P_y, \quad E_{1z} = -4\pi n_z P_z, \quad (2.6)$$

որտեղ n_x, n_y, n_z դրական մեծություններն ապաբևեռացման գործակից-
ներն են, որոնց արժեքները կախված են էլիպսարդի զլիսավոր կիսա-
առանցքների մեծությունների հարաբերությունից և որոնց գտնարը՝

$$n_x + n_y + n_z = : \quad (2.7)$$

Պատման էլիպսարդների համար ապաբևեռացման գործակիցներն
արտահայտվում են տարրական ֆունկցիաներով:

Նշանակենք a, b, c -ով էլիպսարդի կիսաառանցքների երկարություն-
ները: Չզված պատման էլիպսարդի համար ($a > b = c$)

$$n_x = \frac{1-\eta^2}{2\eta^3} \left(\ln \frac{1+\eta}{1-\eta} - 2\eta \right), \quad (2.8)$$

$$n_y = n_z = \frac{1}{2}(1-n_x), \quad (2.9)$$

որտեղ $\eta = (1-b^2/a^2)^{1/2}$ մեծությունը էլիպսարդի էքսցենտրիսիտետն է:

Գնդաձև մոտշի համար (2.7) առնչությունից և զնդի համաչափությու-
նից հետևում է, որ $n_x = n_y = n_z = 1/3$: Եթե էլիպսարդը քիչ է տարբերվում
զնդից՝ $b \rightarrow a$, $\eta \rightarrow 0$, ապա

$$n_x = \frac{1}{3} - \frac{2}{15}\eta^2, \quad n_y = n_z = \frac{1}{3} + \frac{1}{15}\eta^2: \quad (2.10)$$

Սեղմված էլիպսարդի համար ($a = b > c$)

$$n_z = \frac{1+\xi^2}{\xi^3} (\xi - \arctg \xi), \quad n_x = n_y = \frac{1}{2}(1-n_z), \quad (2.11)$$

որտեղ $\xi = \left[(a/c)^2 - 1 \right]^{1/2}$: Եթե $c \rightarrow a$, ապա

$$n_z = \frac{1}{3} + \frac{2}{15} \xi^2, \quad n_x = n_y = \frac{1}{3} - \frac{1}{15} \xi^2 : \quad (2.12)$$

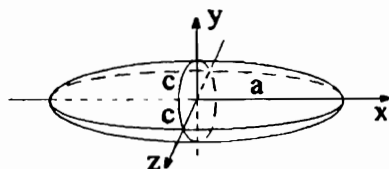
Եթե մնուշն ունի զլանի տեսք ($b/a \rightarrow 0$, $\rightarrow 1$, նկ. V.3, ա) ապա (2.8) բանաձևից կստանանք՝

$$n_x = (1 - \eta) \left[\ln \frac{2}{1 - \eta} - 2 \right] \rightarrow 0, \quad n_y = n_z = \frac{1}{2} : \quad (2.13)$$

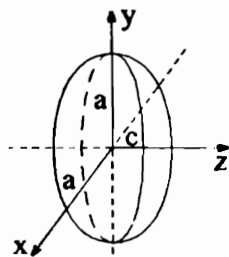
Եթե մնուշն ունի սկավառակի տեսք ($\xi \approx a/c \rightarrow \infty$, նկ. V.3, բ), ապա (2.11) բանաձևից կստանանք՝

$$n_z = 1 - \frac{\pi}{2\xi}, \quad n_x = n_y = \frac{\pi}{4\xi} \rightarrow 0 : \quad (2.14)$$

Ինչպես հետևում է ապաբևեռացման գործակիցների համար ստացված սահմանային (2.13) արտահայտություններից, ապաբևեռացնող դաշտը կարելի է փոքրացնել մինչև զրո, օգտագործելով բարակ և երկար մնուշներ:



ա



բ

Նկ. V.3

Երբեմն, եթե մնուշը թիթեղի տեսք ունի, ապաբևեռացնող դաշտի փոքրացման համար կարճ միացնում են թիթեղի հանդիպակաց նիստերին մտեցված մետաղե էլեկտրոդները:

Եթե E_0 համասեռ դաշտն ուղղված է էլիպսարդածն մնուշի զլխավոր առանցքով, ապա

$$E = E_0 + E_1 = E_0 - 4\pi nP : \quad (2.15)$$

Համաձայն (1.10) արտահայտության

$$P = \chi E = \chi (E_0 - 4\pi nP) , \quad (2.16)$$

որտեղից

$$P = \frac{\chi}{1 + 4\pi n\chi} E_0 : \quad (2.17)$$

Այսպիսով, տրված E_0 արտաքին դաշտում բևեռացման մեծությունը կախված է մնուշի ձևից՝ n մեծությունից: Եթե $4\pi n\chi \ll 1$, ապա ապաբևեռացմող դաշտի դերը կարելի է անտեսել: Սակայն եթե $\chi \gg (4\pi n)^{-1}$, ապա

$$P = \frac{E_0}{\frac{1}{\chi} + 4\pi n} \approx \frac{1}{4\pi n} E_0 , \quad (2.18)$$

այսինքն՝ բևեռացման մեծությունը հիմնականում որոշվում է մնուշի ձևով:

§3. Տեղային դաշտ: Լորենցի դաշտ

Դիցուք՝ մնուշը գտնվում է E_0 արտաքին էլեկտրաստատիկ դաշտում: Նմուշի բևեռացման հետևանքով առաջացած էլեկտրական դաշտի հաշվառումով մակրոսկոպական դաշտի համար ստացանք $E = E_0 + E_1$ արտահայտությունը: Այժմ պարզենք, թե ինչպիսին է դաշտը որևէ մոլեկուլի (դիպոլի) գտնվելու կետում, այսինքն՝ ինչպիսի՞ դաշտ է անմիջականորեն ազդում այդ դիպոլի վրա: Քանի որ դիպոլը գտնվում է որոշակի կետում, օրինակ՝ ցանցի համգույցում, ապա նրա վրա ազդող դաշտը կտարբերվի մակրոսկոպական դաշտից, որը ստացվում է «ֆիզիկորեն անվերջ փոքր» ծավալով միջինացման արդյունքում: Այդ դաշտը, որը կոչվում է տեղային (E_{loc}) (օգտագործվում են նաև «գործող», «ներքին» կամ «արդյունաբար» անվանումները), վերջին հաշվով որոշում է մոլեկուլի բևեռացման աստիճանը: Եթե մոլեկուլների միջև միջին հեռավորությունը զգալիորեն գերազանցում է նրանց չափերը՝ $\bar{r} \gg a$, ինչը տեղի ունի նոսր գազերում, ապա

$E_{loc} \cong E \approx E_0$, այսինքն՝ տեղային դաշտը կարելի է նույնացնել մակրոսկոպական դաշտի հետ:

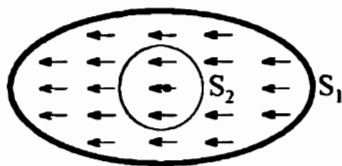
Այլ է իրադրությունը կոնդենսացված միջավայրերում (խիտ գազեր, հեղուկներ, պինդ մարմիններ): Իրոք, սրված մոլեկուլի վրա ազդող դաշտն էապես կախված է մյուս մոլեկուլների էլեկտրական դաշտերից, ուստի անհրաժեշտ է հաշվի առնել դիպոլների էլեկտրաստատիկ փոխազդեցությունը: Այս փոխազդեցության հաշվառման հանրահայտ մեթոդն առաջարկվել է Հ.Լորենցի կողմից:

Ընտրենք որևէ մոլեկուլ և հաշվենք նրա վրա ազդող դաշտը: Այն արտաքին E_0 դաշտի և մոտիկ բոլոր մոլեկուլների դիպոլային մոմենտների կողմից ստեղծված դաշտերի գումարն է՝

$$E_{loc} = E_0 + \sum_i E_i^{dip} = E_0 + \sum_i \frac{3(p_i r_i) r_i - p_i r_i^2}{r_i^5}, \quad (3.1)$$

որտեղ p_i -ն i -րդ հանգույցում գտնվող դիպոլային մոմենտն է:

Ընդունելով այդ մոլեկուլը որպես կենտրոն, նրան մոտվի շրջապատենք գնդաձևությամբ, որի R շառավիղը շատ ավելի մեծ է, քան մոլեկուլների միջև հեռավորությունը, սակայն շատ փոքր է մակրոսկոպական հեռավորությունների համեմատությամբ («ֆիզիկորեն անվերջ փոքր» գնդաձև): Այն դիպոլները, որոնք գտնվում են գնդաձևի կենտրոնից $R \geq 10a$ (a -ն ցանցի հաստատունն է) հեռավորությունների վրա, տալիս են գործնականում անընդհատ փոփոխվող ներդրում, որը կարելի է, համաձայն (2.3) բանաձևի, ներկայացնել երկու մակերևութային ինտեգրալների տեսքով՝ արտաքին (S_1) և ներքին (S_2) մակերևույթներով (Լիսլսարդի ներսում $\text{div } P = 0$): I մակերևութային ինտեգրալը տալիս է E_1 ապաբևեռացման դաշտը: II ինտեգրալը տալիս է R շառավղով գնդաձևի S_2 մակերևույթի վրա եղած լիցքով ստեղծված E_2 դաշտը (Լորենցի դաշտ): Ստանանք նրա արտահայտությունը:



Նկ. V.4

Գնդի մակերևույթի dS տարրի σdS լիցքի ստեղծած դաշտը գնդի կենտրոնում՝

$$dE_s = \frac{\sigma dS}{R^2} = \sigma \cdot \sin \theta d\theta d\varphi = P \cdot \cos \theta \cdot \sin \theta d\theta d\varphi \quad (3.2)$$

և ուղղված է dS տարրը գնդի կենտրոնին միացնող ուղղով: Նրա պրոյեկցիան մակրոսկոպական դաշտի ուղղության վրա հավասար է $dE_s \cdot \cos \theta = P \cdot \cos^2 \theta \cdot \sin \theta d\theta d\varphi$: Գնդի մակերևույթով բաշխված լիցքի դաշտը գնդի կենտրոնում՝

$$E_2 = P \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \cos^2 \theta \cdot \sin \theta d\theta d\varphi = 2\pi P \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{4\pi}{3} P, \quad (3.3)$$

այսինքն՝ այն համասեռ է և ունի բևեռացման վեկտորի ուղղությունը:

Վերջապես, գնդի ներսում գտնվող դիպոլների կողմից ստեղծված E_3 դաշտն ուղղակիորեն կախված է բյուրեղի ատոմական կառուցվածքից: Հաշվենք այն, ենթադրելով, որ բյուրեղն օժտված է խորանարդային համաչափությամբ: Դիցուք՝ բոլոր դիպոլներն ուղղված են z առանցքով և ունեն p մեծություն: Այդ դեպքում գնդի կենտրոնում նրանց ստեղծած դաշտի z բաղադրիչը՝

$$E_{3z} = p \cdot \sum_i \frac{3z_i^2 - r_i^2}{r_i^5} = p \cdot \sum_i \frac{2z_i^2 - x_i^2 - y_i^2}{r_i^5}; \quad (3.4)$$

Գումարը սարվում է ըստ գնդում գտնվող բոլոր դիպոլների, բացի նրանից, որի գտնվելու կետում դաշտը հաշվվում է: Խնդրի համաչափությունից (գնդաձև նմուշ և խորանարդային համաչափություն) բխում է, որ

$$\sum_i \frac{z_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{x_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{y_i^2}{r_i^5}, \quad (3.5)$$

հետևաբար՝ $E_{3z} = 0$: Նույն ձևով կստանանք, որ $E_{3x} = E_{3y} = 0$, այսինքն՝

$$E_3 = 0: \quad (3.6)$$

Այսպիսով, կատարված մոտավորությունների շրջանակներում աեղաչին դաշտի համար կստանանք հետևյալ վերջնական արտահայտությունը՝

$$E_{loc} = E_0 + E_1 + E_2 + E_3 = E + \frac{4\pi}{3} P, \quad (3.7)$$

այսինքն՝ հավասար է արտաքին լիցքերի կողմից ստեղծված դաշտին և էապես ստորերվում է մակրոսկոպական $E = E_0 - 4\pi P/3$ դաշտից:

Օգտագործելով P և E վեկտորների միջև

$$P = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi} E \quad (3.8)$$

կապը, (3.7) արսահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$E_{loc} = \left(1 + \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{\varepsilon - 1}{4\pi} \right) E = \frac{\varepsilon + 2}{3} E \quad (3.9)$$

տեսքով: Քանի որ $\varepsilon \geq 1$, ապա $|E_{loc}| \geq |E|$:

§4. Բևեռացվելիության աեսությունը

Էլեկտրական դաշտում գտնվող ատոմը (մոլեկուլը) դաշտի ազդեցության տակ ձեռք է բերում զրոյից տարբեր դիպոլային մոմենտ: Բնական է ենթադրել, որ այն համեմատական է մոլեկուլի վրա անմիջականորեն ազդող աեղային դաշտի լարվածությանը՝

$$\langle p \rangle = \alpha \cdot E_{loc}, \quad (4.1)$$

որտեղ α -ն բևեռացվելիության գործակիցն է: Նկատի ունենալով բևեռացման P վեկտորի (1.6) սահմանումը, (4.1) առնչությունից կստանանք՝

$$P = N \langle p \rangle = N \alpha \cdot E_{loc} = N \alpha \left(E + \frac{4\pi}{3} P \right), \quad (4.2)$$

որտեղ N -ը դիպոլների (մոլեկուլների) խսությունն է: Մյուս կողմից, օգտագործելով P և E վեկտորների միջև (1.10) կապը, (4.2) հավասարումից կստանանք՝

$$\chi = \frac{N \alpha}{1 - \frac{4\pi}{3} N \alpha} : \quad (4.3)$$

Այս առնչությունը կապ է հաստատում նմուշի մակրոսկոպական χ և միկրոսկոպական α բնութագրերի միջև: Եթե նմուշը տարբեր նյութերի խառնուրդ է, ապա (4.3) առնչությունում $N \alpha$ արտադրյալի վոխարեն հարկ

է գրել $\sum_j N_j \alpha_j$, որտեղ α_j -ն j տեսակի մոլեկուլի բնեղացվելությունն է, N_j -ն՝ այդպիսի մոլեկուլների թիվը միավոր ծավալում: (1.12) և (4.3) արտահայտություններից դիէլեկտրական թափանցելիության համար կստանանք՝

$$\varepsilon = \frac{1 + \frac{8\pi}{3} \sum_j N_j \alpha_j}{1 - \frac{4\pi}{3} \sum_j N_j \alpha_j} \quad (4.4)$$

բանաձևը: Ինչպես հետևում է (4.4) բանաձևից, երբ $\sum_j N_j \alpha_j = 3/4\pi$, $\varepsilon \rightarrow \infty$ («բնեղացման աղետ»): Սա նշանակում է վերջավոր բնեղացում զրոյական արտաքին դաշտում:

(4.3) և (1.12) բանաձևերի օգնությամբ բնեղացվելությունը կարելի է արտահայտել դիէլեկտրական թափանցելիության միջոցով՝

$$\alpha = \frac{3}{4\pi N} \cdot \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} : \quad (4.5)$$

Ստացված արտահայտությունը հայտնի է որպես Կլաուզիուս-Մոստափի հավասարում: Քանի որ $N = (\rho/\mu) N_A$, որտեղ ρ -ն նյութի խտությունն է, իսկ μ -ն՝ մոլային զանգվածը, ապա (4.5) հավասարումից հետևում է, որ $(\varepsilon - 1)/(\varepsilon + 2)$ մեծությունը համեմատական է նյութի խտությանը:

Այժմ արտահայտենք բնեղացվելությունը նյութի միկրոսկոպական բնութագրերի միջոցով:

Հայտնի է ատոմների (մոլեկուլների) համակարգի բնեղացման առաջացման երկու մեխանիզմ՝

ա) *ատոմական բնեղացվելիություն*, երբ տեղային էլեկտրական դաշտի ազդեցության տակ փոխվում է մոլեկուլում լիցքի բաշխումը, որի արդյունքում մոլեկուլը ձեռք է բերում զրոյից տարբեր դիպոլային մոմենտ ,

բ) *կոորմոդոշումային բնեղացում*, երբ տեղային էլեկտրական դաշտի ազդեցության տակ մոլեկուլների քառասյանքեն կոորմոդոշված հաստատուն դիպոլային մոմենտները ձեռք են բերում որոշակի ուղղորդվածություն:

Ծանոթանանք ատոմային բևեռացվելիության պարզագույն տեսությանը, օգտվելով առաձգականորեն կապված էլեկտրոնների մոդելից:

Հավասարակշռության դիրքից շեղված էլեկտրոնի վրա ազդում է քվազիառաձգական

$$F = -m\omega_0^2 r \quad (4.6)$$

ուժը, որտեղ m -ը էլեկտրոնի զանգվածն է, ω_0 -ն՝ սեփական հաճախությունը, r -ը՝ շեղումը հավասարակշռության դիրքից: F ուժի և դաշտի կողմից էլեկտրոնի վրա ազդող $-eE$ ուժի գումարը հավասարեցնելով զրոյի, կստանանք՝

$$r = \frac{-e}{m\omega_0^2} E, \quad (4.7)$$

հետևաբար, էլեկտրոնի r շեղումով պայմանավորված դիպոլային մոմենտը՝

$$p = -er = \frac{e^2}{m\omega_0^2} E \equiv \alpha_1 E, \quad (4.8)$$

իսկ բևեռացվելիությունը՝

$$\alpha_1 = \frac{e^2}{m\omega_0^2}: \quad (4.9)$$

Եթե ատոմը պարունակում է Z էլեկտրոն, որոնցից յուրաքանչյուրի համար քվազիառաձգական ուժը հավասար է $-m\omega_j^2 r$, ապա ատոմի՝ էլեկտրոններով պայմանավորված ստատիկ բևեռացվելիությունը՝

$$\alpha_e = \frac{e^2}{m} \sum_j \frac{f_j}{\omega_j^2}, \quad \sum_j f_j = Z, \quad (4.10)$$

որտեղ f_j մեծություններն այսպես կոչված «տատանակային ուժերն» են: Եթե արտաքին դաշտը (հետևաբար՝ և տեղայինը) ժամանակից կախված փոխվում է ω հաճախությամբ, ապա դինամիկ բևեռացվելիության համար ստացվում է

$$\alpha_e(\omega) = \frac{e^2}{m} \sum_j \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2} \quad (4.11)$$

բանաձևը: Ատոմներում որոշ ω , հաճախություններ պատկանում են սպեկտրի օպտիկական տիրույթին (օրինակ՝ մանուշակագույն ալիքների համար $\omega \approx 5 \cdot 10^{15}$ ռադ-վ⁻¹), ուստի երև. $\omega \ll \omega_j$, ապա կարելի է օգտվել ստատիկ բևեռացվելիության համար ստացված (4.10) բանաձևից: Գնահատենք α_e ստատիկ բևեռացվելիությունը՝

$$\alpha_e \sim \alpha_1 \sim \frac{e^2}{m\omega_0^2} \sim \frac{10^{-19}}{10^{-27} \cdot 10^{31}} \text{ սմ}^3 \approx 10^{-23} \text{ սմ}^3,$$

այսինքն՝ այն ատոմի ծավալի կարգի մեծություն է:

Այժմ պարզենք, թե ինչպես է մոլեկուլների ջերմային շարժումն ազդում դաշտի կողմից մակածված դիպոլային մոմենտի մեծության վրա:

ω_0 հաճախությամբ եռաչափ մերդաշնակ տատանակի պոտենցիալ էներգիան z առանցքով ուղղված էլեկտրական դաշտում՝

$$\Phi(x, y, z) = \frac{m\omega_0^2(x^2 + y^2 + z^2)}{2} - eEz : \quad (4.12)$$

Ենթադրելով, որ դիպոլների (տատանակների) համակարգը կարելի է նկարագրել դասական վիճակագրությամբ, մեկ մասնիկին բաժին ընկնող միջին դիպոլային մոմենտի համար կստանանք՝

$$\langle p \rangle = \langle p_z \rangle = e \frac{\int_{-\infty}^{\infty} z \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \left(\frac{m\omega_0^2}{2} z^2 - ezE \right) \right\} dz}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \left(\frac{m\omega_0^2}{2} z^2 - ezE \right) \right\} dz} : \quad (4.13)$$

Ստացված արտահայտությունը հարմար է ներկայացնել

$$\langle p \rangle = -e \frac{\partial}{\partial \nu} \ln \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma z^2 + \nu z} dz$$

տեսքով, որտեղ

$$\nu \equiv eE/k_B T, \quad \gamma = m\omega_0^2/2k_B T : \quad (4.14)$$

Ներկայացնելով ենթադրադիմական արտահայտությունը Պուասոնի ինտեգրալի տեսքով (Հավելված 2), կստանանք՝

$$\langle p \rangle = -e \frac{\partial}{\partial v} \ln \left[e^{-\frac{v^2}{4\gamma}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \right] = \frac{ev}{2\gamma} = \frac{e^2 E}{m\omega_0^2}, \quad (4.15)$$

ինչը նույնությամբ համընկնում է (4.8) արտահայտության հետ:

Այսպիսով, ատոմական բևեռացվելիության համար ստացված (4.9), հետևաբար՝ նաև (4.10) առնչությունը ճիշտ է նաև ջերմային շարժման հաշվառման դեպքում:

Այժմ ծանոթանանք կողմնորոշումային բևեռացման տեսության հետ:

Դիցուք՝ նյութը կազմող մոլեկուլներն ունեն p_0 դիպոլային մոմենտ, որը կարող է կողմնորոշված լինել ցանկացած ուղղությամբ: Եթե արտաքին էլեկտրական դաշտը բացակայում է, ապա ջերմային շարժման հետևանքով դիպոլային մոմենտներն ունեն պատահական ուղղություններ, այնպես որ համակարգի արդյունաբար դիպոլային մոմենտը հավասար է զրոյի:

Եթե կիրառված է էլեկտրական դաշտ, ապա դիպոլները ձգտում են կողմնորոշվել դաշտի ուղղությամբ, բանի որ այն համապատասխանում է վտերագույն էներգիայով վիճակին: Արդյունքում համակարգի միջին դիպոլային մոմենտը դառնում է զրոյից տարբեր: Հաշվենք այն:

Էլեկտրական դաշտում p_0 դիպոլային մոմենտը ձևաք է բերում

$$U = -p_0 \cdot E = -p_0 E \cos \theta \quad (4.16)$$

պոտենցիալ էներգիա, որտեղ θ -ն p_0 դիպոլի կազմած անկյունն է դաշտի ուղղության հետ: Մեկ մոլեկուլին բաժին ընկնող միջին դիպոլային մոմենտի համար կստանանք՝

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{\int d\Omega \cdot p_0 \cos \theta \cdot \exp(-U/k_B T)}{\int d\Omega \cdot \exp(-U/k_B T)} = \\ &= p_0 \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \cos \theta \cdot \exp\left(\frac{p_0 E}{k_B T} \cos \theta\right)}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \cdot \exp\left(\frac{p_0 E}{k_B T} \cos \theta\right)}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

որտեղ $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ - մարմնային անկյունն է: (4.17) արտահայտու-

քյունը կարելի է ներկայացնել

$$\langle p \rangle = p_0 \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_0^\pi e^{\beta \cos \theta} \sin \theta d\theta \quad (4.18)$$

տեսքով, որտեղ

$$\beta = p_0 E / k_B T : \quad (4.19)$$

Ենթադրաբխմական իմտեգրալը՝

$$\int_0^\pi e^{\beta \cos \theta} \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 e^{\beta x} dx = \frac{e^\beta - e^{-\beta}}{\beta} = \frac{2}{\beta} \operatorname{sh} \beta ,$$

հետևաբար՝

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ \ln \frac{2}{\beta} \operatorname{sh} \beta \right\} = \operatorname{cth} \beta - \frac{1}{\beta} \equiv L(\beta) ,$$

որտեղ

$$L(\beta) = \operatorname{cth} \beta - \frac{1}{\beta} \quad (4.20)$$

արտահայտությունը Լանժըվենի ֆունկցիան է: Այսպիսով, E էլեկտրական դաշտի կողմնորոշիչ ազդեցության շնորհիվ մեկ մոլեկուլին բաժին ընկնող միջին դիպոլային մոմենտը՝

$$\langle p \rangle = p_0 \cdot L \left(\frac{p_0 E}{k_B T} \right) : \quad (4.21)$$

Ուսումնասիրենք ստացված արտահայտությունը սարբեր սահմանային դեպքերում:

Եթե $\beta = p_0 E / k_B T \ll 1$ («թույլ» դաշտեր, «բարձր» ջերմաստիճաններ), ապա, օգտվելով Լանժըվենի ֆունկցիայի

$$L(\beta) = \frac{\beta}{3} - \frac{\beta^3}{45} + \dots \quad (4.22)$$

վերլուծությունից, միջին դիպոլային մոմենտի համար կստանանք՝

$$\langle p \rangle \approx \frac{p_0^2 E}{3k_B T} \equiv \alpha_2 E , \quad (4.23)$$

ուստի կողմնորոշումային բևեռացվելությունը՝

$$\alpha_2 \approx \frac{p_0^2}{3k_B T} : \quad (4.24)$$

Սենյակային ջերմաստիճաններում, երբ $k_B T \approx 4 \cdot 10^{-14}$ էրգ, $p_0 \sim ea \sim 10^{-10} \cdot 10^{-8} \text{ CGSE}_q \cdot \text{սմ} = 10^{-18} \text{ CGSE}_p$ ^{*)}, անգամ $E \approx 10^4$ Վ/սմ կարգի դաշտերում $p_0 E / k_B T \leq 10^{-3}$, իսկ $\alpha_2 \approx 10^{-23} \text{ սմ}^3$, որը նույն կարգի մեծություն է, ինչ որ էլեկտրոնային բևեռացվելիությունը:

Երև $\beta = p_0 E / k_B T \gg 1$ («ուժեղ» դաշտեր, «ցածր» ջերմաստիճաններ), ապա, նկատի ունենալով, որ

$$I(\beta) \approx 1 - \frac{1}{\beta} + O(e^{-2\beta}) . \quad (4.25)$$

միջին դիպոլային մոմենտի համար կստանանք՝

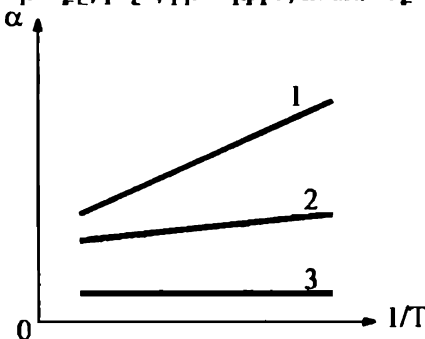
$$\langle p \rangle \approx p_0 : \quad (4.26)$$

Սա նշանակում է, որ դիպոլային մոմենտը հասել է հսգեցման, այսինքն, այն ընդունում է հնարավոր ամենամեծ արժեքը, ինչն, իր հերթին, հետևանք է դաշտի կողմնորոշիչ ազդեցության, որը «ճնշում» է թույլ ջերմային շարժումը: Ընդհանուր դեպքում, երբ բևեռացվելիության երկու մեխանիզմներն էլ գործում են, ընդհանուր բևեռացվելիությունը արվում է

$$\alpha \approx \alpha_1 + \alpha_2 = \alpha_e + \frac{p_0^2}{3k_B T} \quad (4.27)$$

արտահայտությամբ, որը հայտնի է որպես Լանժվեն-Դերայի բանաձև:

Փորձում, տարբեր ջերմաստիճանային կախվածություններ ունենալու հետևանքով, էլեկտրոնային և կողմնորոշումային բևեռացվելիությունները հեշտությամբ գաատվում են իրարից: Նկ. V.5-ում պատկերված է բևեռացվելիության կախումը $1/T$ մեծությունից,



Նկ. V.5

^{*)} $10^{-18} \text{ CGSE}_q \cdot \text{սմ}$ մեծությունը կոչվում է դերայ և ծառայում է որպես դիպոլային մոմենտի չափման միավոր

բևեռային ($p_0 \neq 0, 1$ և 2 ուղիղներ) և ոչ բևեռային ($p_0 = 0, 3$ ուղիղ) մոլեկուլներից բաղկացած համակարգերի համար:

Ատոմային (էլեկտրոնային) բևեռացվելիությունն ուսումնասիրելիս մենք ենթադրել ենք, որ ատոմի (մոլեկուլի) միջուկը մնում է անշարժ: Սակայն իրականում էլեկտրական դաշտի ազդեցության տակ տեղաշարժվում են նաև միջուկները: Այս երևույթը հարկ է հաշվի առնել հատկապես իոնային բյուրեղներում: Մյուս սահմանային դեպքը, երբ ատոմային բևեռացվելիությունը հաշվելիս իոնների տեղաշարժը հաշվի է առնվում, իսկ էլեկտրոնային թաղանթի դեֆորմացիան (էլեկտրոնային բևեռացվելիությունը) անտեսվում է, հայտնի է որպես «կոշտ» իոնների մոտավորություն:

Ստանանք շեղումային բևեռացվելիության արտահայտությունը «կոշտ» իոնների մոտավորությամբ:

Դիցուք՝ իոնային բյուրեղի տարրական բջիջը բաղկացած է Ze և $-Ze$ լիցքերով երկու իոններից: Եթե իոնները «կոշտ» են, ապա տարրական բջջի դիպոլային մոմենտը՝

$$p = Ze \cdot u_+ - Ze \cdot u_- \equiv Ze(u_+ - u_-) \equiv Ze \cdot s, \quad (4.28)$$

որտեղ u_+ -ը (u_- -ը) դրական (բացասական) իոնի շեղումն է հավասարակշռության դիրքից,

$$s = u_+ - u_- : \quad (4.29)$$

Եթե բյուրեղի դեֆորմացիան տարածության մեջ փոփոխվում է դանդաղ, ապա դրական և բացասական իոնների շեղումների համար կարող ենք գրել հետևյալ շարժման հավասարումները՝

$$m_+ \cdot \ddot{u}_+ = -\kappa(u_+ - u_-) + ZeE_{loc}, \quad (4.30)$$

$$m_- \cdot \ddot{u}_- = -\kappa(u_- - u_+) - ZeE_{loc}, \quad (4.31)$$

որտեղ κ -ն քվազիառածգական ուժի գործակիցն է: Անցնելով s մեծությանը, (4.30) և (4.31) հավասարումներից կստանանք՝

$$\ddot{s} = \frac{Ze}{M} E_{loc} - \frac{\kappa}{M} s, \quad (4.32)$$

որտեղ $M = m_+ m_- / (m_+ + m_-)$ մեծությունը բջջի բերված զանգվածն է:

Եթե տեղային դաշտը ժամանակից կախված փոփոխվում է $E_{loc} =$

$= E_0 e^{-i\omega t}$ օրենքով, ապա (4.32) հավասարման լուծումը կարվի $s = s_0 e^{-i\omega t}$ տեսքով, որտեղ

$$s_0 = \frac{ZeE_0}{M(\omega_i^2 - \omega^2)} \quad (4.33)$$

$$\omega_i^2 = \frac{\kappa}{M} : \quad (4.34)$$

Հետևաբար՝ շեղումային բևեռացման համար (4.28) և (4.33) բանաձևերից կստանանք՝

$$\alpha_i = \frac{Ze}{M(\omega_i^2 - \omega^2)} : \quad (4.35)$$

Այս բանաձևից հետևում է, որ շեղումային բևեռացվելիությունը մոյն տեսքն ունի, ինչ որ էլեկտրոնային բևեռացվելիությունը: Սակայն ռեզոնանսային ω , հաճախությունը համապատասխանում է ցանցի բնութագրական տատանումների հաճախությանը (տես III.1), այսինքն, այն ω_D պարամետրի կարգի մեծություն է, որը էլեկտրոնային ω , հաճախություններից փոքր է մոտ $10^2 \div 10^3$ անգամ: Հետևաբար, շեղումային բևեռացվելիությունը էապես կախված կլինի արտաքին դաշտի ω հաճախությունից սպեկտրի ինֆրակարմիր և օպտիկական սիրույթներում: Մյուս կողմից, քանի որ իոնային M զանգվածը մոտ 10^4 անգամ զերազանցում է էլեկտրոնայինը, ապա α , և α_e գործակիցները կարող են լինել մոյն կարգի մեծություններ, ինչը վկայում է «կոշտ» իոնների մոտավորության սահմանափակ լինելու փաստը:

§5. Օպտիկական տատանումները իոնային բյուրեղներում

Օպտիկական տատանումներն առանձնահատուկ դեր են խաղում իոնային բյուրեղներում, քանի որ իոնների շարժման հետևանքով ծագում են զգալի դիպոլային մոմենտներ:

Ուսումնասիրենք օպտիկական տատանումները խորանարդային կա-

առցվածքով խոնային բյուրեղներում երկարալիքային սահմանում, երբ խոն-
նների շարժումը բոլոր բյիչնեկում համաժամանակային (սինքրոն) է, ինչը
բույլ է տալիս դիսարկև խոնների շարժումը միայն մեկ բաշում: Այսուհետև
կենթադրենք, որ էլեկտրական դաշտի առկայությամբ խոնը ձևոք է բերում
ինչպես էլեկտրոնային, այնպես էլ շեղումային բևտագվելություն (այսպես
կոչված դեֆորմացվող խոնների մոտավորություն): Այս դեպքում բևտա-
ման վեկտորի համար, ի տարբերություն (4.28) արտահայտության, կարող
ենք գրել

$$\begin{aligned} P &= N_0 (Ze u_+ + \alpha_+ E_{loc}) + N_0 (-Ze u_- + \alpha_- E_{loc}) = \\ &= N_0 [Ze(u_+ - u_-) + (\alpha_+ + \alpha_-) E_{loc}], \end{aligned} \quad (5.1)$$

որտեղ N_0 -ն միավոր ծավալում բյիչների թիվն է, $\alpha_{\pm}$ -ը՝ դրական և բացա-
սական խոնների բևտագվելությունները: (5.1) բանաձևում առաջին գո-
մարելին պայմանավորված է խոնների շեղումներով, իսկ երկրորդը՝ արտա-
քին դաշտում խոնների ձևոք բերած դիպոլային մոմենտներով: Այսպես
կոչված «կոշտ» խոնների մոտավորության շրջանակներում $\alpha_+ = \alpha_- = 0$:

Անցնելով E_{loc} տեղային դաշտից մակրոսկոպական E դաշտին, (3.7),
(5.1) և (4.32) բանաձևերից կստանանք՝

$$P = \frac{N_0}{1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha} [Ze(u_+ - u_-) + \alpha E], \quad (5.2)$$

$$M \ddot{s} = -M \omega_0^2 s + \frac{Ze}{1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha} E, \quad (5.3)$$

որտեղ կատարված են հետևյալ նշանակումները՝

$$\omega_0^2 = \frac{\kappa}{M} - \frac{4\pi}{3M} \cdot \frac{N_0 Z^2 e^2}{1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha}, \quad (5.4)$$

$$\alpha = \alpha_+ + \alpha_- \quad (5.5)$$

Հետագա հաշվարկները հեշտացնելու նպատակով մացնենք s վեկտորից
հաստատուն գործակցով տարբերվող մի նոր մեծություն՝

$$w = (M N_0)^{1/2} s, \quad (5.6)$$

և (5.3) և (5.2) հավասարումները ներկայացնենք հետևյալ տեսքով՝

$$\ddot{w} = -\omega_0^2 w + \frac{N_0 Z e}{(M N_0)^{1/2} \left(1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha\right)} E, \quad (5.7)$$

$$P = \frac{N_0 Z e}{(M N_0)^{1/2} \left(1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha\right)} w + \frac{N_0 \alpha}{1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha} E : \quad (5.8)$$

(5.7) և (5.8) հավասարումները ստացվեցին միկրոսկոպական եղանակով, սակայն դրանք կարելի է գրել նաև երևութաբանորեն, հիմնվելով զուտ ֆիզիկական դասադրությունների վրա:

Իրոք, շարժման

$$\ddot{w} = b_{11} w + b_{12} E \quad (5.9)$$

հավասարումն արտահայտում է այն փաստը, որ իոնի արագացումը ($\ddot{w} \sim \ddot{s}$) պայմանավորված է ինչպես քվադրադական ուժով ($-b_{11} w$), այնպես էլ էլեկտրական դաշտի կողմից ազդող $b_{12} E$ ուժով, իսկ

$$P = b_{21} w + b_{22} E \quad (5.10)$$

հավասարման համաձայն, միավոր ծավալի դիպոլային մոմենտը պայմանավորված է ինչպես իոնների շեղումով հավասարակշռության դիրքից ($b_{21} w$), այնպես էլ իոնների բևեռացվելությամբ ($b_{22} E$):

Անհրաժեշտ է նշել, որ շարժման հավասարումներում հաշվի չի առնված նաև Լորենցի ուժը, որով մագնիսական դաշտն ազդում է շարժվող իոնի վրա, քանի որ բյուրեղական ցանցի պարամետրերի բնութագրական արժեքների համար (ցանցի հաստատունը՝ $a \sim 10^{-8}$ սմ, $\omega_D \sim 10^{13}$ ռադ·վ⁻¹) մագնիսական և էլեկտրական դաշտերի կողմից իոնի վրա ազդող ուժերի հարաբերությունը՝

$$\left| \frac{f_L}{f_E} \right| \sim \frac{v}{c} \sim \frac{a \cdot \omega_D}{c} \simeq 10^{-5} : \quad (5.11)$$

Վերը գրված հավասարումներում առկա P և E վեկտորները որոշվում են Մաքսվելի հավասարումներից՝

$$\operatorname{div} D = \operatorname{div}(E + 4\pi P) = 0, \quad (5.12)$$

$$\operatorname{div} H = 0, \quad (5.13)$$

$$\operatorname{rot} E = -\frac{1}{c} \dot{H}, \quad (5.14)$$

$$\operatorname{rot} H = \frac{1}{c} (\dot{E} + 4\pi \dot{P}), \quad (5.15)$$

որոնցում արված են հետևյալ ենթադրությունները.

ա) խոնային բյուրեղները մեկտալիչներ են՝ նրանցում ազատ լիցքի խտությունը զրո է (տես (5.12) հավասարումը),

բ) խոնային բյուրեղները օժտված չեն մագնիսական հատկություններով՝ համակարգի մագնիսական մոմենտը զրո է (տես (5.13) հավասարումը):

(5.9), (5.10) կամ որ նույնն է (5.7), (5.8) և (5.12)-(5.15) հավասարումների համակարգի լուծումները կփնտրենք

$$\begin{aligned} w &= w_0 e^{i(kr - \omega t)}, \quad P = P_0 e^{i(kr - \omega t)}, \\ E &= E_0 e^{i(kr - \omega t)}, \quad H = H_0 e^{i(kr - \omega t)} \end{aligned} \quad (5.16)$$

տեսքով: Տեղադրելով (5.16) լուծումները նշված համակարգում, կստանանք՝

$$-\omega^2 w = b_{11} w + b_{12} E, \quad (5.17)$$

$$P = b_{21} w + b_{22} E, \quad (5.18)$$

$$k(E + 4\pi P) = 0, \quad (5.19)$$

$$kH = 0, \quad (5.20)$$

$$k \times E = \frac{\omega}{c} H, \quad (5.21)$$

$$k \times H = -\frac{\omega}{c} (E + 4\pi P): \quad (5.22)$$

Տեղադրելով (5.17) հավասարումից որոշված

$$w = \frac{b_{12}}{-\omega^2 - b_{11}} E \quad (5.23)$$

արտահայտությունը (5.18) հավասարման մեջ, կստանանք՝

$$P = \left(\frac{b_{12}}{-\omega^2 - b_{11}} + b_{22} \right) E \quad (5.24)$$

($b_{12} = b_{21}$, ինչը հետևում է (5.7)-(5.10) հավասարումներից):

Նկատի ունենալով կապը D և E վեկտորների միջև՝

$$D(\omega) = E(\omega) + 4\pi P(\omega) = \varepsilon(\omega) E(\omega), \quad (5.25)$$

ինչպես նաև (5.24) ամուրթյունը, $\varepsilon(\omega)$ դիէլեկտրական ֆունկցիայի համար կստանանք՝

$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi b_{22} - \frac{4\pi b_{12}^2}{b_{11} + \omega^2} : \quad (5.26)$$

Եթե այս բանաձևում սևեղադրենք b_{11} , b_{12} և b_{22} զործակիցների արտահայտությունները, որոնք հեշտությամբ ստացվում են (5.7)-(5.10) հավասարումներից, ապա կստանանք $\varepsilon(\omega)$ ֆունկցիայի միկրոսկոպական արտահայտությունը: Սակայն ավելի նպաստակահարմար է այն արտահայտել փորձում հեշտությամբ չափվող բնութագրերի միջոցով:

Այսպես, երբ $\omega \rightarrow \infty$

$$\varepsilon(\infty) = 1 + 4\pi b_{22} \quad (5.27)$$

մեծությունը բարձրհաճախային (օպտիկական) դիէլեկտրիկական հաստատունն է, որը ստացվում է բեկման ցուցչից $\omega \gg \omega_0$ հաճախությամբ էլեկտրամագնիսական ալիքների համար: Մյուս կողմից, երբ $\omega \rightarrow 0$

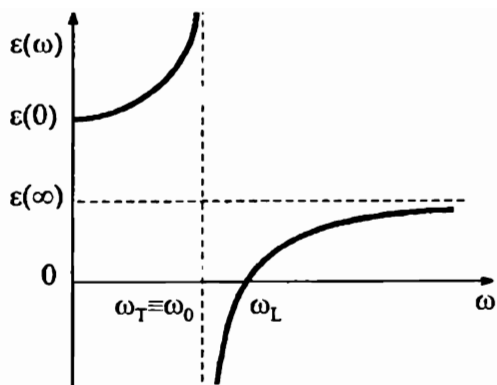
$$\varepsilon(0) = 1 + 4\pi b_{22} - \frac{4\pi b_{12}^2}{b_{11}} = \varepsilon(\infty) - \frac{4\pi b_{12}^2}{b_{11}}, \quad (5.28)$$

$$4\pi b_{12}^2 = b_{11} [\varepsilon(\infty) - \varepsilon(0)] = -\omega_0^2 [\varepsilon(\infty) - \varepsilon(0)],$$

որտեղ $\varepsilon(0)$ մեծությունը ստատիկ դիէլեկտրական հաստատունն է: (5.27) և (5.28) բանաձևերի օգնությամբ դիէլեկտրական թափանցելիության (5.26) բանաձևը կրճատվի հետևյալ տեսքով՝

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)}{1 - (\omega/\omega_0)^2} : \quad (5.29)$$

$\varepsilon(\omega)$ ֆունկցիայի զրաֆիկը պատկերված է նկ. V.6-ում:



Նկ. V.6

$\varepsilon(0)$ և $\varepsilon(\infty)$ հաստատունների արժեքները մի քանի խոնային բյուրեղների համար տրված են Աղյուսակ V.1-ում:

Աղյուսակ V.1

	$\varepsilon(0)$	$\varepsilon(\infty)$	$\omega_T (10^{13} \text{ սադ} \cdot \text{վ}^{-1})$	$\omega_L (10^{13} \text{ սադ} \cdot \text{վ}^{-1})$
LiF	8,9	1,9	5,8	12
LiCl	12,0	2,7	3,6	7,5
NaCl	5,9	2,25	3,1	5,0
NaBr	6,4	2,6	2,5	3,9
KF	5,5	1,5	3,6	6,1
KCl	4,85	2,1	2,7	4,0
RbF	6,5	1,9	2,9	5,4
RbI	5,5	2,6	1,4	1,9
CsCl	7,2	2,6	1,9	3,1
AgCl	12,3	4,0	1,9	3,4
AgBr	13,1	4,6	1,5	2,5
MgO	9,8	2,95	7,5	14

Համաձայն (5.19) և (5.25) հավասարումների,

$$(kE) \cdot \varepsilon(\omega) = 0 : \quad (5.30)$$

Ուսումնասիրենք ստացված հավասարումը:

$$I \text{ դեպք.} \quad \varepsilon(\omega) = 0, (kE) \neq 0, \quad (5.31)$$

ինչը համարժեք է նաև

$$D = E + 4\pi P = 0 \quad (5.32)$$

հավասարմանը: Նկատի ունենալով վերջին հավասարումը, (5.22) և (5.20) հավասարումներից կստանանք՝

$$H = 0 : \quad (5.33)$$

Մյուս կողմից, ըստ (5.21) և (5.33) հավասարումների,

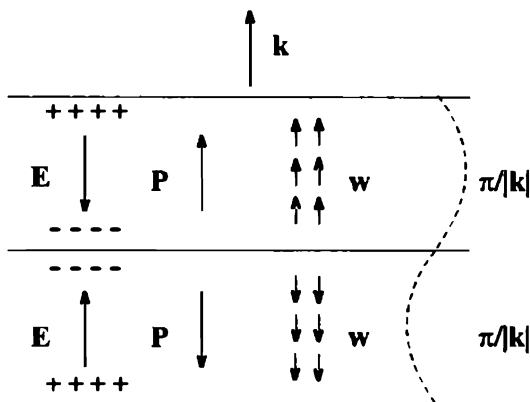
$$k \times E = 0 \quad (5.34)$$

և, քանի որ $E \neq 0$, ապա $E \parallel k$: Եթե E վեկտորն ընտրված է, ապա w , P վեկտորները որոշվում են (5.23) և (5.24) հավասարումներից և ուղղված են նույն ուղղով, ինչ որ E վեկտորը: Այսպիսով, քննարկվող դեպքում բոլոր վեկտորները երկայնական են՝ $w \parallel P \parallel E \parallel k$, $H = 0$, իսկ հաճախությունները որոշվում են (5.31) պայմանից: Նկատի ունենալով

(5.29) հավասարումը, երկայնական տատանումների հաճախության համար կստանանք՝

$$\omega_L = \left[\frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)} \right]^{1/2} \omega_0, \quad (5.35)$$

որը կախված չէ k ալիքային վեկտորի մեծությունից:



Նկ. V.7-ում պատկեր-

Նկ.V.7

ված են երկայնական տատանումների դեպքում k , E , P և w վեկտորները ուղղությունները: Այսպիսի տատանումներն ընդունված է անվանել երկայնական օպտիկական (LO-տատանումներ):

II դեպք.

$$\varepsilon(\omega) \neq 0, (kE) = 0 : \quad (5.36)$$

Քանի որ $E \neq 0$, ապա $k \perp E$, այսինքն, տվյալ դեպքում գործ ունենք լայնական տատանումների հետ: Համաձայն (5.21) հավասարման, k , E և H վեկտորները կազմում են փոխադրահայաց վեկտորների աջակողմյան համակարգ, հետևաբար

$$kE = \frac{\omega}{c} H : \quad (5.37)$$

(5.20) հավասարումը տեղի ունի, քանի որ $k \perp H$, իսկ (5.22) հավասարումը բերվում է

$$kH = \frac{\omega}{c} (E + 4\pi P) \quad (5.38)$$

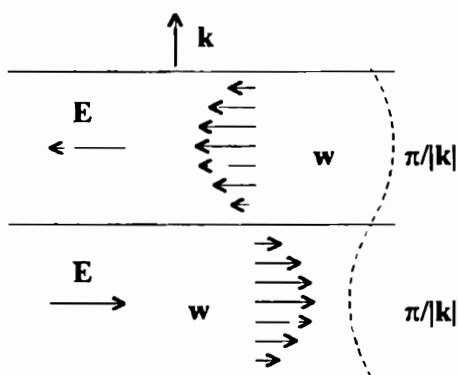
տեսքի: (5.37), (5.38) և (5.25) հավասարումներից հետևում է, որ

$$\frac{k^2 c^2}{\omega^2} E = \varepsilon(\omega) E$$

կամ

$$\frac{k^2 c^2}{\omega^2} = \varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} : \quad (5.39)$$

(5.39) առնչությունից որոշված հաճախությունները կախված են ալիքային k վեկտորի մեծությունից: Յուրաքանչյուր k վեկտորի համար կա երկու անկախ լուծում, որոնք համապատասխանում են E լարվածության երկու



Նկ. V.8

հնարավոր և k վեկտորին ուղղահայաց ընտրություններին: Այսպիսով, այս դեպքում բոլոր լուծումները փոխադրահայաց են k , $(w \parallel P \parallel E)$, H : Նկ. V.8-ում պատկերված են w , P , E և k վեկտորները լայնական օպտիկական տատանումների դեպքում (ՏՕ-տատանումներ): Ինչպես հետևում է (5.9) հավասարումից, լայնական տատանումների դեպքում

քում ($b_{11} = -\omega_0^2$)

$$\ddot{w}_t = -\omega_0^2 w_t ,$$

որսւող w_t վեկտորը w վեկտորի բաղադրիչն է k ալիքային վեկտորի ուղ-
ղությամբ՝ շեղման լայնական բաղադրիչը, հետևաբար՝ լայնական տատա-
նումների հաճախությունը՝ $\omega_T = \omega_0$:

(5.35) արտահայտությունը, գրված

$$\omega_L^2 = \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)} \omega_T^2$$

տեսքով, հայտնի է որպես Լիդեյն-Սաքս-Թեյլերի բանաձև և տեղի ունի նաև
ոչ խորանարդային բյուրեղների համար: Քանի որ $\varepsilon(0) > \varepsilon(\infty)$, ապա միշտ
 $\omega_L > \omega_T$: Ֆիզիկոսներն սա հետևանք է այն բանի, որ լայնական տատանում-
ների ժամանակ վերադարձնող ուժը քվադրատաձգական ուժն է, իսկ եր-
կայնական տատանումների դեպքում ծագում է լրացուցիչ վերադարձնող
ուժ, պայմանավորված էլեկտրական դաշտով:

§6*. Էլեկտրամագնիսական ալիքի փոխազդեցությունը ցանցային տատանումների հետ

Այժմ ավելի հանգամանորեն ուսումնասիրենք էլեկտրամագնիսական
ալիքի և ցանցի օպտիկական տատանումների փոխազդեցության հետևան-
քով համակարգում տեղի ունեցող ֆիզիկական երևույթները:

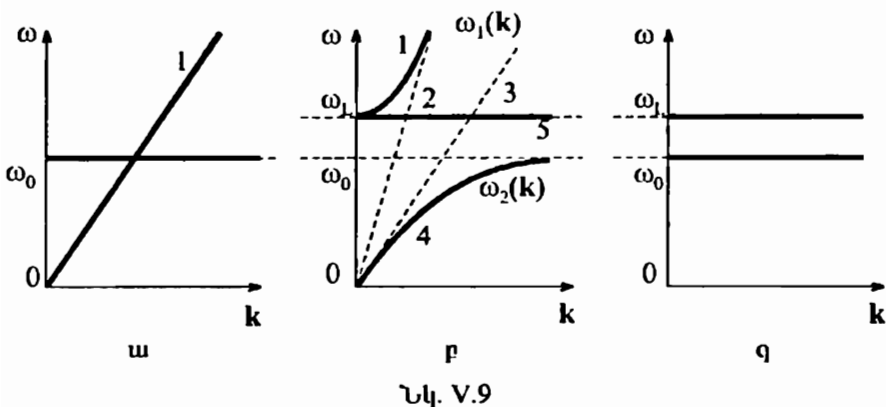
Նախ ենթադրենք, որ ցանցի օպտիկական տատանումները չեն փոխ-
ազդում էլեկտրամագնիսական տատանումների հետ՝ $e = 0$: Այս դեպքում
Մաքսվելի հավասարումները բերվում են վակուումում էլեկտրամագնիսա-
կան ալիքների հավասարմանը, որից ստացվում է լուսային ալիքի դիսպեր-
սիոն հավասարումը՝

$$\omega = c \cdot k , \quad (6.1)$$

իսկ շարժման (5.17) հավասարումից՝ ցանցի օպտիկական ճյուղի տատա-
նումների դիսպերսիոն հավասարումը՝ ($ka \ll 1$ դեպքում)

$$\omega = \omega_0 : \quad (6.2)$$

(6.1) և (6.2) հավասարումները պատկերված են նկ. V.9, ա-ում: Նրանց համալստալիսանող կորերը հասվում են: Հատման կետում սարքեր բնույթի՝



մեխանիկական և էլեկտրամագնիսական տատանումների հաճախությունները համընկնում են, այդ պատճառով անգամ քույլ փոխազդեցության առկայությամբ կոլիսովի ռեզոնանս, որն էապես կազդի համակարգում ընթացող ինչպես էլեկտրական, այնպես էլ մեխանիկական պրոցեսների վրա: Իրոք, փոխազդեցության հաշվառմամբ ($e \neq 0$) (5.39) հավասարումից ստացվում են դիսպերսիոն հավասարման երկու ճյուղեր՝

$$\omega_1^2(k) = \frac{1}{2} \left(\omega_L^2 + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon(\infty)} \right) \left[1 + \left[1 - \frac{4k^2 c^2 \omega_L^2}{\left(\omega_L^2 + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon(\infty)} \right)^2 \varepsilon(0)} \right]^{1/2} \right], \quad (6.3)$$

$$\omega_2^2(k) = \frac{1}{2} \left(\omega_L^2 + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon(\infty)} \right) \left[1 - \left[1 - \frac{4k^2 c^2 \omega_L^2}{\left(\omega_L^2 + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon(\infty)} \right)^2 \varepsilon(0)} \right]^{1/2} \right]: \quad (6.4)$$

Ուսումնասիրենք ստացված արտահայտությունները երկարալիքային մոտավորության շրջանակներում ($ka \ll 1$) սալբեր սահմանային դեպքերում: Փոքր՝

$$k \ll \frac{\omega_L}{c} \sqrt{\varepsilon(0)}$$

ալիքային թվերի համար (6.3) և (6.4) հավասարումներից կստանանք՝

$$\omega_1(k) \simeq \omega_L + \frac{k^2 c^2}{2\omega_L^2 \varepsilon(\infty)}, \quad (\text{նկ. V.9, ք, կոր 1}), \quad (6.5)$$

$$\omega_2(k) \simeq \frac{c}{\sqrt{\varepsilon(0)}} k, \quad (\text{նկ. V.9, ք, կոր 3}) \quad (6.6)$$

(6.6) բանաձևը էլեկտրամագնիսական ալիքի դիսպերսիոն հավասարումն է $\varepsilon(0)$ ստատիկ դիէլեկտրական թափանցելիությամբ միջավայրում: Սա նշանակում է, որ տվյալ դեպքում միջավայրը հասցնում է «համակերպվել» էլեկտրամագնիսական դաշտին և փոքրացնում է միայն ալիքի տարածման արագությունը՝ $c \rightarrow c/\sqrt{\varepsilon(0)}$ (նկ. V.9, ք, կոր 3):

Երբ

$$k \gg \frac{\omega_L}{c} \sqrt{\varepsilon(0)},$$

(6.3) և (6.4) հավասարումներից ստանում ենք՝

$$\omega_1(k) = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon(\infty)}} k, \quad (\text{նկ. V.9, ք, կոր 2}), \quad (6.7)$$

$$\omega_2(k) \simeq \omega_0 : \quad (6.8)$$

(6.7) բանաձևը էլեկտրամագնիսական ալիքի դիսպերսիոն հավասարումն է $\varepsilon(\infty)$ դիէլեկտրական թափանցելիությամբ միջավայրում: Այսպիսով, մենք՝ $\omega \gg \omega_L$ հաճախությամբ էլեկտրամագնիսական ալիքները չեն կարող ցանցը դնել շարժման մեջ նրա իներտության հետևանքով, և արդյունքում ցանցը չի խանգարում էլեկտրամագնիսական ալիքների տարածմանը:

Մեխանիկական և էլեկտրամագնիսական տատանումների փոխազդեցության հետևանքով հաճախությունների սպեկտրում առաջանում է արգել-

ված տիրույթ: Իրոք, համաձայն $\varepsilon(\omega)$ ֆունկցիայի համար ստացված

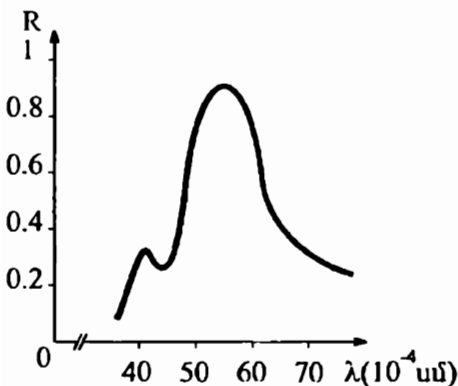
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \quad (6.9)$$

արտահայտության (տես նաև նկ. V.5), $\Delta\omega = \omega_L - \omega_T$ տիրույթին պատկանող հաճախությունների համար $\varepsilon(\omega) < 0$, և համաձայն (5.39) բանաձևի,

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon(\omega)} = i \frac{\omega}{c} \sqrt{|\varepsilon(\omega)|} \equiv i|k| \quad (6.10)$$

ալիքային քիվը կեղծ է, ուստի ալիքը մարում է $\exp(ikx) = \exp(-|k|x)$ օրենքով: Այսինքն՝ ալիքը չի կարող անցնել բյուրեղով, որի հաստությունը x ուղղությամբ ավելի մեծ է, քան $|k|^{-1}$ մեծությունը: Այլ կերպ ասած, $\Delta\omega$ տիրույթին պատկանող հաճախություններով էլեկտրամագնիսական ալիքներն անդրադառնում են բյուրեղի մակերևութային շերտից:

Այս երևույթն ընկած է «մնացորդային ճառագայթների» (Reststrahlen) մեթոդի հիմքում, որի միջոցով ստացվում է գործնականորեն համասեռ ինֆրակարմիր ճառագայթում, երբ նախապես անհամասեռ փունջը բազմիցս անդրադառնում է բյուրեղական շերտերից, այնպես որ փնջում մնում է միայն ամենաուժեղ անդրադարձած հաճախությունների մի նեղ շերտ:



Նկ. V.10

Նկ. V.10-ում պատկերված է NaCl բյուրեղի անդրադարձման գործակցի՝ փորձում ստացված կախումը ալիքի երկարությունից սենյակային ջերմաստիճաններում:

Տեսականորեն անդրադարձման գործակիցը փնջի ուղղահայաց անկման դեպքում որոշվում է

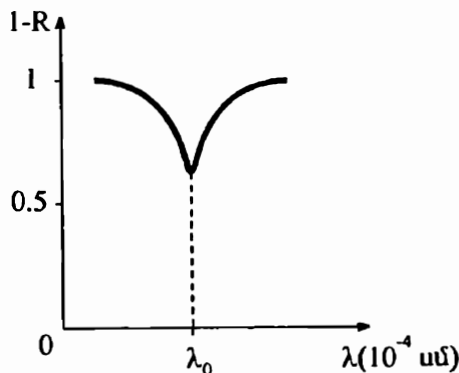
$$R = \left| \frac{n-1}{n+1} \right|^2 \quad (6.11)$$

բանաձևով, որտեղ $n = \sqrt{\varepsilon(\omega)}$

մեծությունը միջավայրի բեկման ցուցիչն է:

Երբ ω -ն փոփոխվում է $(0, \omega_T)$ տիրույթում, ապա, համաձայն (6.9) բանաձևի, բեկման ցուցիչն աճում է $\sqrt{\varepsilon(0)}$ արժեքից մինչև ∞ ($\omega = \omega_T$): Արգելված տիրույթում $\omega_T \leq \omega \leq \omega_L$ n -ը կեղծ է, և $R = 1$, այսինքն՝ տեղի ունի լրիվ անդրադարձում: $\omega > \omega_L$ տիրույթում անդրադարձման գործակիցը նվազում է և ի վերջո ձգտում $[\sqrt{\varepsilon(\infty)} - 1]^2 / [\sqrt{\varepsilon(\infty)} + 1]^2$ սահմանային արժեքին:

Այսպիսով, (6.9) դիսպերսիոն հավասարումը որակապես բացատրում է ընտրողական անդրադարձման երևույթը, սակայն քանակական համապատասխանությունը փորձի և տեսության միջև հեռու է բավարար լինելուց: Մասնավորապես, նշված (ω_T, ω_L) արգելված տիրույթում անդրադարձումը երբեք իդեալական չէ, այսինքն՝ միշտ $R < 1$: Այս անհամապատասխանությունը պայմանավորված է ուսումնասիրված տեսության մոտավոր բնույթով, քանի որ նրանում օգտագործված շարժման հավասարման մեջ հաշվի են առնված շեղման վեկտորի միայն զծային անդամները, ինչը անբավարար է հատկապես $\omega \sim \omega_T$ հաճախության մոտակայքում: Վերջին հաշվով հենց ոչ զծային անդամներով է պայմանավորված $\omega \sim \omega_T$ տիրույթում փորձում դիտվող ուժեղ կլանումը:



Նկ. V.11

Նկ. V.11-ում պատկերված է NaCl-ի բարակ ($d = 0,17 \mu$ հաստությամբ) քիթեղի բացթողման կորը՝ $(1 - R)$ մեծության կախումն ալիքի երկարությունից, երբ ճառագայթումն ընկնում է քիթեղին ուղղահայաց ուղղությամբ: Փորձում $0,1 - 1 \mu$ հաստությամբ քիթեղներում բացթողման մինիմումի հաճախությունը գործնականորեն կախված չէ քիթեղի հաստությունից և հավասար է ω_T -ին ($\lambda_T = \lambda_0 \approx 61 \mu$):

Այժմ քննարկենք այն սահմանային դեպքը, երբ էլեկտրամագնիսական ալիքի արագությունը՝ $c \rightarrow \infty$, այսինքն, երբ արհամարհվում է ալիքի «ուշացումը»: Ֆիզիկոսներն սա նշանակում է, որ լույսի կողմից ցանցի հաստատունն անցնելու ժամանակը՝ $\Delta t \sim a/c$ շատ փոքր է տատանման $T = 2\pi/\omega_0$ պարբերությունից: Այս դեպքում, երբ $k \neq 0$, (5.39) հավասարումից հետևում է $\omega = \omega_0 \equiv \omega_T$ կապը, որը համընկնում է էլեկտրամագնիսական դաշտի հետ չփոխազդող օպտիկական տատանումների (5.41) դիսպերսիոն հավասարման հետ: Եթե $\omega \neq \omega_0$, ապա (5.39) հավասարումը տեղի ունի միայն $k = 0$ արժեքի համար:

Երկայնական ալիքները կախված չեն «ուշացումից», նրանք քվադրատատիկ են: Նկ. V.9, գ-ում պատկերված է $c \rightarrow \infty$ դեպքը: Նկ. V.9, բ և գ կորերի տարբերությունն ի հայտ է գալիս այնպիսի ալիքային թվերի համար, որոնց դեպքում

$$ak \leq a \frac{\omega_0}{c} \sim \frac{v}{c} \sim 10^{-5}, \quad (6.12)$$

որտեղ v -ն բյուրեղում ձայնի տարածման արագությունն է: Գնահատումից բխում է, որ ուշացման ազդեցությունը բյուրեղի տատանումների սպեկտրի վրա ի հայտ է գալիս միայն k ալիքային թվի արժեքների շատ փոքր՝ $k \sim \omega_0/c \leq 10^3 \text{ սմ}^{-1}$ տիրույթում: Այսպիսով, բոլոր այն խնդիրներում, որոնցում գործ ունենք երկարալիքային տատանումների հետ, որոնք բավարարում են (6.12) պայմանին, ուշացումը կարելի է անտեսել, և լայնական օպտիկական տատանումներին վերագրել ω_T , իսկ երկայնական տատանումներին՝ ω_L հաճախություն:

§7. Դիէլեկտրական ռելաքսացիա

Կողմնորոշումային բևեռացվելության համար ստացված արտահայտություններում ենթադրվում է, որ առանց արտաքին դաշտի դիպոլային մոմենտը կարող է կողմնորոշված լինել ցանկացած ուղղությամբ: Այս ենթադրությունը կարող է իրականանալ ոչ խիտ զազերում, երբ մասնիկների միջև փոխազդեցությունը գործնականում ոչ մի դեր չի խաղում:

Սակայն կոնդենսացված միջավայրերում և, մասնավորապես, պինդ մարմնում, դիպոլային մոմենտի՝ իր կողմնորոշումը փոխելու ունակությունն էապես կախված է ինչպես մոլեկուլի ձևից, այնպես էլ նրան շրջապատող մասնիկների հետ փոխազդեցությունից: Որքան մոլեկուլի ձևը մոտ է գնդա՝ յինին, և որքան փոքր է նրա դիպոլային մոմենտը, այնքան ավելի հեշտությամբ և արագ մոլեկուլը կարող է փոխել իր կողմնորոշումն արտաքին դաշտի մեծությունը կամ ուղղությունը փոփոխելիս: Այնպիսի ոչ համաչափ մոլեկուլներ, ինչպիսիք են HCl -ը կամ H_2O -ն, պինդ ֆազում ունեն մի քանի կայուն կողմնորոշման ուղղություններ, և մեկից մյուսին են անցնում համեմատաբար դանդաղ: Այսպիսի անցման միջին ժամանակն ընդունված է անվանել ուլաքսացիայի ժամանակ, իսկ նրա հակադարձ մեծությունը՝ ռելաքսացիայի հաճախություն:

Եթե արտաքին դաշտի հաճախությունը մեծ է ռելաքսացիայի հաճախությունից, ապա համակարգում տեղի ունեցող փոփոխությունները դաշտի փոփոխությունից ետ են մնում:

Կողմնորոշումային պրոցեսների համար ռելաքսացիայի հաճախությունը էապես կախված է ջերմաստիճանից և փոփոխվում է լայն տիրույթում:

Հնդուկներում ռելաքսացիայի ժամանակամիջոցը (τ) կապված է մածուցիկության η գործակցի հետ

$$\tau = \frac{4\pi\eta a^3}{k_B T} \quad (7.1)$$

մոտավոր արտահայտությամբ, որտեղ a -ն գնդաձև մոլեկուլի շառավիղն է: Սենյակային ջերմաստիճաններում, ջրի համար ($\eta = 10^{-2}$ պուազ, $a \approx 10^{-8}$ սմ) $\tau \approx 10^{-11}$ վ, ինչը համընկնում է փորձի հետ:

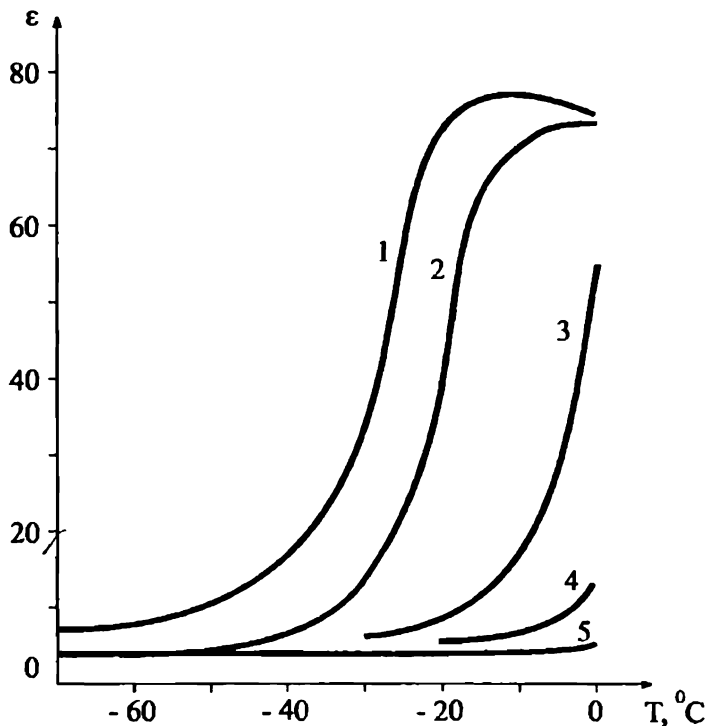
Նկ. V.12-ում սլատկերված է սառույցի դիէլեկտրական թափանցելիության ջերմաստիճանային կախումը տարբեր հաճախությունների համար (կորերին համապատասխանում են հետևյալ հաճախությունները՝ 1 - 300Հց, 2 - 1կՀց, 3 - 5կՀց, 4 - 20կՀց, 5 - 60կՀց):

Համաձայն Պ.Դեբայի, կողմնորոշումային բևեռացվելիության հաճախային կախումն արտաքին $E_0 \exp(-i\omega t)$ դաշտի ω հաճախությունից

տրվում է հետևյալ բանաձևով՝

$$\alpha(\omega) = \frac{\alpha_0}{1 - i\omega\tau}, \quad (7.2)$$

որտեղ α_0 -ն ստատիկ կողմնորոշումային բեռագվելիությունն է:



Նկ. V.12

Այժմ ստանանք դիէլեկտրական թափանցելիության արտահայտությունը ձեւաբացիւմ պրոցեսների հաշվառմամբ:

Եթե բեռագվելիությունը պայմանավորված է և էլեկտրոնային (ատոմային), և կողմնորոշումային բեռագվելիությամբ, ապա, նկատի ունենալով (7.2) արտահայտությունը, բեռագման վեկտորի մեծության համար կարող ենք գրել՝

$$P = P_e + P_d = \left(\chi_1 + \frac{\chi_2}{1 - i\omega\tau} \right) E, \quad (7.3)$$

որտեղ χ_1 -ը էլեկտրոնային, իսկ χ_2 -ը կողմնորոշումային բևեռացվելիությամբ պայմանավորված ստատիկ ընկալունակություններն են: I գումարելու մեջ $i\omega\tau$ անդամի բացակայությունը ֆիզիկորեն նշանակում է, որ էլեկտրոնային բևեռացվելիությամբ պայմանավորված բևեռացումը դաշտի փոփոխության հետ համաժամանակ է փոփոխվում, ինչը հետևանք է էլեկտրոնների փոքր իներտության: (7.3) բանաձևում E լարվածության գործակիցը կոմպլեքս ընկալունակությունն է, որը տեղադրելով (1.12) արտահայտության մեջ, կստանանք՝

$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi\chi_1 + \frac{4\pi\chi_2}{1 - i\omega\tau} : \quad (7.4)$$

χ_1 և χ_2 մեծություններն արտահայտենք $\varepsilon(\omega)$ դիէլեկտրական թափանցելիության սահմանային (փորձում չափվող) արժեքների միջոցով:

Երբ $\omega = 0$, ստատիկ դիէլեկտրական թափանցելիությունը՝

$$\varepsilon_s \equiv \varepsilon(0) = 1 + 4\pi(\chi_1 + \chi_2) , \quad (7.5)$$

իսկ երբ $\omega \gg 1/\tau$ (ձևականորեն $\omega \rightarrow \infty$)

$$\varepsilon(\infty) \equiv \varepsilon_\infty \equiv n^2 = 1 + 4\pi\chi_1 , \quad (7.6)$$

որտեղ n -ը նյութի բեկման ցուցիչն է: (7.4), (7.5) և (7.6) առնչությունների համաձայն,

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 - i\omega\tau} \equiv \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 : \quad (7.7)$$

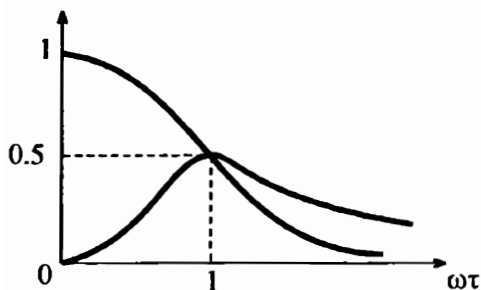
(7.7) բանաձևից դիէլեկտրական թափանցելիության իրական (ε_1) և կեղծ (ε_2) մասերի համար կստանանք՝

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + (\omega\tau)^2} , \quad (7.8)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + (\omega\tau)^2} \omega\tau : \quad (7.9)$$

Նկ. V.13-ում պատկերված են $\varepsilon_1(\omega)$ և $\varepsilon_2(\omega)$ ֆունկցիաները: Համաձայն (7.8) և (7.9) բանաձևերի, ցածրհաճախային՝ $\omega\tau \ll 1$ և բարձրհաճախային՝ $\omega\tau \gg 1$ տիրույթներում $\varepsilon_2(\omega) \approx 0$, այսինքն՝ $\varepsilon(\omega)$ ֆունկցիան իրական է:

Հայանի է, որ երբ $\varepsilon_2(\omega) \neq 0$, ապա միջավայրում առկա են էներգիական կորուստներ: Իրոք, ըստ Ջոուլ-Լենցի օրենքի, միավոր ժամանակում,



Նկ. V.13

միավոր ծավալում անջատված էներգիան (երբ դաշտը փոփոխվում է $e^{-i\omega t}$ օրենքով)՝

$$Q = \sigma \cdot \overline{E^2} = \frac{1}{2} \sigma \cdot E_0^2, \quad (7.10)$$

որտեղ միջավայրի σ հաղորդականությունը կապված է ε_2 -ի հետ հետևյալ առնչությամբ՝

$$\sigma = \frac{\omega \varepsilon_2(\omega)}{4\pi}; \quad (7.11)$$

(7.10) և (7.11) բանաձևերից էներգիական կորուստների համար կստանանք՝

$$Q = \frac{\omega \varepsilon_2(\omega)}{8\pi} E_0^2; \quad (7.12)$$

Միջավայրի հաղորդականությամբ պայմանավորված կորուստների (7.12) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել նաև

$$Q = \frac{\omega \varepsilon_1(\omega)}{8\pi} E_0^2 \operatorname{tg} \delta \quad (7.13)$$

տեսքով, որտեղ

$$\operatorname{tg} \delta = \varepsilon_2 / \varepsilon_1, \quad (7.14)$$

իսկ δ մեծությունը կոչվում է կորուստների անկյուն:

Ինչպես հետևում է (7.8) և (7.9) բանաձևերից, $\varepsilon_1(\omega)$ և $\varepsilon_2(\omega)$ մեծություններն իրարից անկախ չեն՝ $\varepsilon_2(\omega) = [\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_\infty] \cdot \omega \tau$:

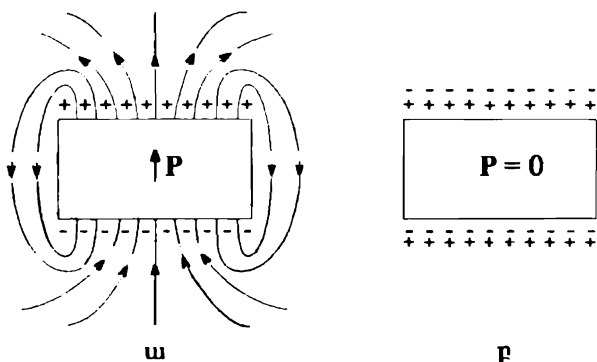
Ընդհանուր դեպքում, անկախ $\varepsilon_1(\omega)$ և $\varepsilon_2(\omega)$ ֆունկցիաների տեսքից, եթե հայտնի է $\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_\infty$ կամ $\varepsilon_2(\omega)$ ֆունկցիաներից որևէ մեկը հաճախությունների $[0, \infty]$ տիրույթում, ապա մյուսը կարելի է որոշել այսպես կոչված դիսպերսիոն առնչությունների միջոցով (Հ.Կրամերս, Ռ.Կրոնիգ):

§8. Պիրոէլեկտրականություն

Անիզոտրոպ դիէլեկտրական միջավայրում, ինչպիսին է միաբյուրեղը, ինդուկցիայի և էլեկտրական դաշտի լարվածության վեկտորների միջև կապն ավելի բարդ է և չի բերվում նրանց միջև համեմատականության, ինչն արտահայտված է (1.13) առնչությամբ: Ամենաընդհանուր դեպքում այդ կապն արտահայտվում է

$$D_i = D_{0i} + \varepsilon_{ik} E_k \quad (8.1)$$

հավասարումով, որտեղ D_0 -ն հաստատուն (E -ից չկախված) վեկտոր է, իսկ ε_{ik} մեծությունների համախումբը կազմում է դիէլեկտրական թափանցելիության տենզորը (կրկնվող k ցուցիչով կատարվում է գումարում $k = 1, 2, 3$): D_0 ազատ անդամը կարող է զրոյից տարբեր լինել միայն որոշակի համաչափությամբ օժտված բյուրեղներում: Եթե $D_0 \neq 0$, ապա դիէլեկտրական նմուշն ինքնաբերաբար բևեռացված է, այսինքն՝ արտաքին դաշտի բացակայության պայմաններում այն ունի զրոյից տարբեր բևեռացում (նկ. V.14): Այսպիսի բյուրեղները կոչվում են պիրոէլեկտրիկներ: Գործնականում ինքնաբերական բևեռացումը միշտ շատ փոքր է (ներմուկտոլային դաշտերի համեմատությամբ), բանի որ ներքին էլեկտրական դաշտի ազդեցության տակ նմուշում առաջանում է քույլ էլեկտրական հոսանք: Այն զրոյից տարբեր է այնքան ժամանակ, քանի դեռ մակերևույթի վրա առաջացող ազատ լիցքերը լրիվ չեն համակշռել բևեռային լիցքերը և ներ-



Նկ. V.14

քին դաշտը չեն դարձրել զրո: Նույն ձևով են գործում մաս օդից դիէլեկտրիկի մակերևութին անցնող իոնները (նկ. V.14, բ):

Սակայն եթե բյուրեղի ջերմաստիճանը արագ փոխենք ΔT -ով, ապա ինքնաբերական P_0 բևեռացումը կփոխվի ΔP_0 -ով, և մնուշի մակերևութին կառաջանա

$$\sigma = \Delta P_0 = p_m \cdot \Delta T \equiv \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_X \Delta T \quad (8.2)$$

խտությամբ մակերևութային լիցք. p_m գործակիցը պիրոէլեկտրական հաստատունն է, իսկ X -ով նշանակված է այն բնութագրերի համախառնը, որոնք մնուշի ջերմաստիճանը փոփոխելիս պահվում են հաստատուն: Տուրմալինի բյուրեղի համար 20°C -ում $p_m \approx 1,3 \text{ CGSE}/\mu\text{m}^2\cdot^\circ\text{C}$: Ինչպես ցույց են տալիս փորձերը, p_m գործակցի ջերմաստիճանային կախումը մոտ է բյուրեղի ջերմունակության և ջերմային ընդարձակման գործակիցների ջերմաստիճանային կախումներին:

Պիրոէլեկտրական երևույթը պայմանավորված է որոշ բարդ բյուրեղական կառուցվածքներում էլեկտրական լիցքերի ոչ համաչափ բաշխումով: Անգամ արտաքին ազդակների բացակայությամբ դրական և բացասական լիցքերի «ծանրության կենտրոնները» չեն համընկնում, այսինքն՝ բյուրեղն ինքնաբերաբար բևեռանում է:

Ինքնաբերական բևեռացման ջերմաստիճանային կախումը պայմանավորված է երկու պատճառով: Նախ, ջերմաստիճանի փոփոխության հետ ազատ բյուրեղը փոփոխում է իր ծավալը, հեռևապես և մնուշի միավոր ծավալին բաժին ընկնող դիպոլային մոմենտը: Երկրորդ, եթե անգամ մնուշը սեղմված է, այսինքն՝ ջերմաստիճանի փոփոխությունը չի ուղեկցվում դեֆորմացիայով, ապա մնուշը կրում է ներքին, կառուցվածքային փոփոխություններ:

Պիրոէլեկտրական նյութերում բևեռացման մեծությունը գծայնորեն է կախված ներքին դաշտի լարվածությունից՝

$$P_0 = \alpha \cdot E, \quad (8.3)$$

որտեղ α գործակիցը կախված չէ E -ից (ի տարբերություն սեգնետաէլեկտրիկների, որոնցում $\alpha = \alpha(E)$), տես §10):

Քանի որ բյուրեղի համաչափության բոլոր ձևափոխությունների դեպքում նրա բոլոր հատկությունները պետք է մնան անփոփոխ, ապա ակնհայտ է, որ պիրոէլեկտրական կարող է լինել միայն այն բյուրեղը, որում գոյություն ունի համաչափության բոլոր ձևափոխությունների ժամանակ անփոփոխ մնացող ուղղություն, որով և ուղղված է P_0 վեկտորը: Մասնավորապես, պիրոէլեկտրական չեն կարող լինել համաչափության կենտրոն ունեցող բյուրեղները:

Պիրոէլեկտրական նյութերի համար բնորոշ է ֆազային անցումների բացակայությունը և ինքնաբերական բևեռացման առկայությունը նրանց գոյության ջերմաստիճանային ամբողջ տիրույթում:

Պիրոէլեկտրական երևույթի հակադարձ երևույթը, երբ էլեկտրական դաշտի ազդեցության տակ փոխվում է բյուրեղի ջերմաստիճանը, հայտնի է «էլեկտրակալորական երևույթ» անվամբ: Էլեկտրակալորական երևույթը նկարագրվում է

$$\Delta T = q \Delta E \equiv \left(\frac{\partial T}{\partial E} \right)_x \Delta E \quad (8.4)$$

հավասարումով, որտեղ q մեծությունը էլեկտրակալորական երևույթի գործակիցն է: Այն կապված է պիրոէլեկտրական p_m հաստատունի հետ

$$q = -p_m \frac{T}{C} \quad (8.5)$$

առնչությամբ, որտեղ C -ն բյուրեղի տեսակարար ջերմունակությունն է:

§9. Պիեզոէլեկտրականություն

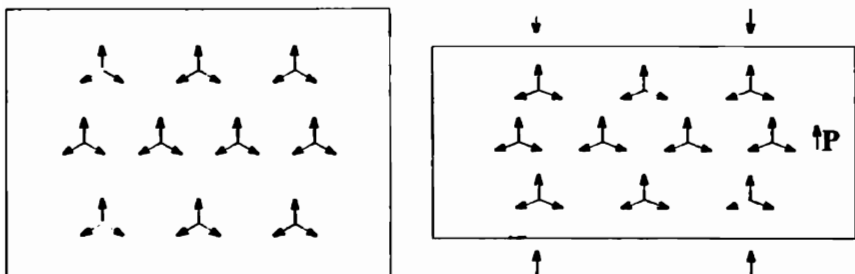
Ինչպես հայտնի է, արտաքին էլեկտրական դաշտում գտնվող բյուրեղում առաջանում են ներքին մեխանիկական լարումներ, որոնց ազդեցությամբ նմուշի ծավալը փոփոխվում է: Ծավալի փոփոխությունը համեմատական է էլեկտրական դաշտի լարվածության քառակուսուն՝ $\Delta V \sim E^2$: Այս երևույթը հայտնի է էլեկտրաստրիկցիա անունով և տեղի ունի բոլոր բյուրեղային և ոչ բյուրեղային պինդ մարմիններում:

Սակայն որոշ բյուրեղներում էլեկտրական դաշտի ազդեցությամբ ծագող ներքին լարումները գծայնորեն են կախված դաշտի լարվածությունից: Նույն բյուրեղներում դիտվում է նաև հակառակ երևույթը, երբ մեխանիկական լարման ազդեցությամբ բյուրեղը ձեռք է բերում բևեռացում: Այս երևույթը հայտնի է պիեզոէլեկտրական անոմոլ և հայանաբերվել է Ժ. և Պ.Կյուրիների կողմից 1880թ. քվարցի բյուրեղներում: Պիեզոէլեկտրական հատկությամբ օժտված բյուրեղները կոչվում են պիեզոէլեկտրիկներ (նկ. V.15)

Եթե պիեզոէլեկտրիկի որոշակի ձևով կտրված քիթեղը ենթարկենք մեխանիկական լարման (ձգում, սեղմում կամ սահք), ապա նրա մակերևույթներին կծագեն էլեկտրական լիցքեր, որոնք պայմանավորված են քիթեղի բևեռացմամբ: Երևույթի ֆիզիկական էությունը բացատրվում է մեխանիկական լարումների ազդեցության տակ լիցքերի շեղման հետևանքով բյուրեղի ատոմական բջջի բևեռացման ծագմամբ կամ փոփոխությամբ (այսպես կոչված ուղիղ պիեզոէրևույթ):

Եթե քիթեղը տեղադրենք էլեկտրական դաշտում, ապա դաշտի ազդեցության տակ տարրական բջջում տեղի կունենա լիցքերի առեղաշարժ և, որպես հետևանք, նրանց միջև միջին հեռավորությունների փոփոխություն, այսինքն՝ դեֆորմացիա (հակադարձ պիեզոէրևույթ):

Պիեզոէլեկտրականության գոյության անհրաժեշտ պայմանը բյուրեղի համաչափության կենտրոնի բացակայությունն է:



Նկ. V.15

Հարկ է իրարից տարբերել բնական պիեզոէրևույթը, որը ի հայտ է գալիս որոշ միաբյուրեղներում (քվարց, տուրմալին, ցինկի խաբուսակ և այլն) և

արհեստական պիեզոէլեկտրոստրիկ, որը ստեղծվում է որոշ նյութերում (մալ և ոչ բյուրեղային) պիեզոէլեկտրական սեքստորա, այսինքն՝ բևեռացման անիզոտրոպիա ստեղծելու միջոցով: Վերջինս իրականացվում է էլեկտրական դաշտի կամ մեխանիկական հասուկ մշակման ճանապարհով: Արհեստական պիեզոէլեկտրական նյութերում (էլեկտրեոսներ, պիեզոխեցիներ) պիեզոէլեկտրական հատկություններն արտահայտված են առավել ցայառուն ձևով:

Պիեզոէլեկտրիկների պիեզոէլեկտրական հատկություններն արտահայտվում են մեխանիկական լարումների σ_{ik} տենզորի կամ դեֆորմացիայի u_{ik} տենզորի տարրերի և, մյուս կողմից, բևեռացման P (կամ D) և էլեկտրական դաշտի լարվածության E վեկտորի բաղադրիչների միջև գծային կապերով:

Պիեզոէլեկտրականության երևութաբանական տեսությունը հիմնվում է համակարգի թերմոդինամիկական վիճակի՝ արսաքին բաղադրիչ (մեխանիկական լարումներ, էլեկտրական դաշտեր) և ջերմաստիճանից կախված փոփոխությունների մասին սլասկերացումների վրա: Ընդամեն, պիեզոէլեկտրիկ հավասարումները ստացվում են բյուրեղի հավասարակշռության, այսինքն՝ համապատասխան թերմոդինամիկական պոտենցիալների մինիմումի պայմանից:

Եթե որպես անկախ փոփոխականներ ընտրենք ջերմաստիճանը, շեղման տենզորի u_{ik} և էլեկտրական դաշտի լարվածության վեկտորի E_i , բաղադրիչները, ապա միավոր ծավալում պարունակվող նյութի քանակի ազատ էներգիայի դիֆերենցիալի համար կարող ենք գրել՝

$$dF = -SdT + \sigma_{ik} du_{ik} - \frac{1}{4\pi} D_i dE_i, \quad (9.1)$$

որտեղ S -ը էնտրոպիայի խտությունն է (կրկնվող ցուցիչներով ենթադրվում է գումարում, $i, k = 1, 2, 3$):

Երբեմն նպատակահարմար է որպես անկախ փոփոխականներ ընտրել լարման տենզորի σ_{ik} բաղադրիչները: Արա համար (9.1) առնչությունն արտագրենք հետևյալ տեսքով՝

$$d(F - u_{ik} \sigma_{ik}) = -SdT - u_{ik} d\sigma_{ik} - \frac{1}{4\pi} D_i dE_i: \quad (9.2)$$

Փակագծերում գրված

$$\Phi = F - u_{ik} \sigma_{ik} \quad (9.3)$$

մեծությունը թերմոդինամիկական (կամ Գիրսի) պոտենցիալն է, որի փոփոխականներն են (T, σ_{ik}, E_i) մեծությունները, թվով 10 (T , 6 հատ σ_{ik} և 3 հատ E_i): (9.2) և (9.3) արտահայտությունների համաձայն

$$d\Phi = -SdT - u_{ik} d\sigma_{ik} - \frac{1}{4\pi} D_i dE_i : \quad (9.4)$$

(9.4) հավասարումից ինդուկցիայի վեկտորի D_i և դեֆորմացիայի տենզորի u_{ik} բաղադրիչները կարող են արտահայտվել թերմոդինամիկական $\Phi(T, \sigma_{ik}, E_i)$ պոտենցիալի միջոցով՝

$$D_i = -4\pi \left(\frac{\partial \Phi}{\partial E_i} \right)_{T, \sigma_{ik}}, \quad (9.5)$$

$$u_{ik} = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ik}} \right)_{T, E} : \quad (9.6)$$

Օգտվենք միավոր ծավալում պարունակվող զանգվածի թերմոդինամիկական պոտենցիալի հայտնի արտահայտությունից՝

$$\Phi = \Phi_0 - \frac{1}{2} \mu_{iklm} \sigma_{ik} \sigma_{lm} - \frac{1}{8\pi} \varepsilon_{ik} E_i E_k - \frac{1}{4\pi} E_i D_{0i} - d_{i,kl} E_i \sigma_{kl}, \quad (9.7)$$

որտեղ Φ_0 -ն համապատասխանում է $\sigma_{ik} = 0$, $E_i = 0$ վիճակին, μ_{iklm} -ը առաձգական հաստատունների տենզորն է, իսկ $d_{i,kl}$ -ը պիեզոէլեկտրական հաստատունների տենզորն է, որը համաչափ է ըստ k և l ցուցիչների՝

$$d_{i,kl} = d_{i,lk} : \quad (9.8)$$

Վերջին հասկությունը հետևանք է լարումների տենզորի $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$ համաչափության հատկության:

(9.5)-(9.7) արտահայտություններից ստացվում են պիեզոէլեկտրականության տեսության հիմնական հավասարումները՝

$$D_i = D_{0i} + \varepsilon_{ik} E_{ik} + 4\pi d_{i,kl} \sigma_{kl}, \quad (9.9)$$

$$u_{ik} = \mu_{iklm} \sigma_{lm} + d_{l,ik} E_l : \quad (9.10)$$

(9.9) հավասարումը տալիս է լարման տենզորի տրված արժեքների համար ինդուկցիայի վեկտորի բաղադրիչների կախումը էլեկտրական դաշտի լարվածությունից, իսկ (9.10)-ը՝ դեֆորմացիայի տենզորի բաղադրիչների կախումը լարման տենզորի բաղադրիչներից տրված E դաշտում: (9.9) հավասարման երրորդ անդամը պիեզոէլեկտրության հետևանքով առաջացած բևեռացումն է (բազմապատկած 4π -ով):

$$P_i = d_{i,kl} \sigma_{kl} : \quad (9.11)$$

(9.10) հավասարման երկրորդ գումարելին էլեկտրական դաշտով պայմանավորված ներդրումն է դեֆորմացիայի տենզորում, այսինքն՝ այն նկարագրում է հակադարձ պիեզոէլեկտրական երևույթը: Այսպիսով, և՛ ուղիղ, և՛ հակադարձ պիեզոէլեկտրական երևույթները բնութագրվում են միևնույն $d_{i,kl}$ տենզորի միջոցով:

Եթե որոշակի պայմաններում դեֆորմացիան տեղի է ունենում տրված ինդուկցիայի դեպքում, կամ դիտարկվում է ինդուկցիայի վեկտորի բաղադրիչների կախումը էլեկտրական դաշտի լարվածությունից տրված դեֆորմացիայի դեպքում, ապա նշված մեծությունների միջև կապերում ε_{ik} և μ_{iklm} գործակիցների փոխարեն հանդես են գալիս նոր գործակիցներ, որոնք սակայն կարող են արտահայտվել ε_{ik} , μ_{iklm} և $d_{i,kl}$ գործակիցների միջոցով:

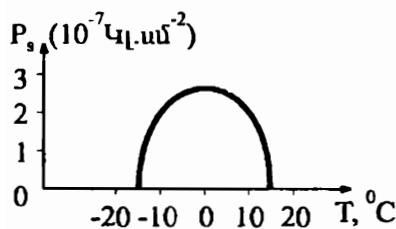
Պիեզոէլեկտրական նմուշում էլեկտրական դաշտը, ինչպես նաև լարումների դաշտը, որոշվում է էլեկտրաստատիկայի և առաձգականության տեսության

$$\operatorname{div} D = 0, \quad \operatorname{rot} E = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0 \quad (9.12)$$

հիմնական հավասարումների համատեղ լուծումից՝ (9.9) և (9.10) «նյութական» հավասարումների և համապատասխան եզրային պայմանների օգնությամբ:

§10*. Սեզնետալեկտրականություն

Որոշ դիէլեկտրական բյուրեղներ, որոնք դեֆորմացված չեն, ջերմաստիճանը փոփոխելիս որոշակի ջերմաստիճանում, որն ընդունված է անվանել Կյուրիի ջերմաստիճան՝ T_c , անցնում են նոր վիճակի, որը բնութագրվում է զրոյից տարբեր ինքնաբերական բևեռացման ի հայտ գալով: Այսինքն, T_c ջերմաստիճանում նմուշը $P_s = 0$ չբևեռացված, այսպես կոչված «պարալեկտրական», վիճակից անցնում է $P_s \neq 0$ պիրոէլեկտրական վիճակի: Այդպիսի բյուրեղները կոչվում են սեզնետալեկտրիկներ:^{*)} Սեզնետալեկտրիկների մեծ մասի մոտ պիրոէլեկտրական վիճակն իրականանում է $T < T_c$ տիրույթում (Աղյուսակ V.2): Սակայն հայտնի են նաև այնպիսի սեզնետալեկտրիկներ, որոնք կարող են գտնվել պիրոէլեկտրական վիճակում ջերմաստիճանների միայն որոշակի տիրույթում, որից դուրս, ինչպես ցածր, այնպես էլ բարձր ջերմաստիճաններում նրանք անցնում են պարալեկտրական վիճակի (օրինակ՝ սեզնետյան աղը, նկ. V.16):



Նկ. V.16

Եթե պարալեկտրական վիճակից պիրոէլեկտրականին անցնելիս ինքնաբերական բևեռացումը փոխվում է բոլորով (նկ. V.17), ապա գործ ունենք առաջին կարգի ֆազային անցման հետ: Իսկ եթե նշված անցման ժամանակ այն փոփոխվում է անընդհատ ձևով, ապա անցումը երկրորդ կարգի է: Որոշ սեզնետալեկտրիկներ

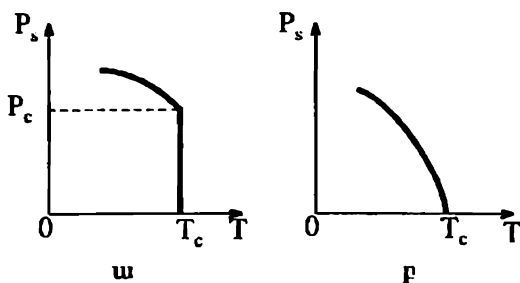
չունեն Կյուրիի ջերմաստիճան, քանի որ ջերմաստիճանը բարձրացնելիս նրանք հալվում են, ընդհուպ մինչև հալման ջերմաստիճանը մնալով սեզնետալեկտրիկ:

^{*)} Արտասահմանյան գրականության մեջ ընդունված է ֆեռոէլեկտրիկներ (ֆեռոէլեկտրականություն) անվանումը, ինչը պայմանավորված է ֆեռոմագնիսական նյութերում ինքնաբերական մագնիսացման երևույթի հետ առկա նմանությամբ:

Բյուրեղ	T_c , K	P , մկԿ/սմ ²
Կալիումի դիփիդրոֆոսֆատ (KH_2PO_4)	123	4,75
Կալիումի դիդեյտերիումֆոսֆատ (KD_2PO_4)	213	4,83
Ռութիլիումի դիփիդրոֆոսֆատ (RbH_2PO_4)	147	5,6
Ռութիլիումի դիդեյտերիումֆոսֆատ (RbD_2PO_4)	218	—
Բարիումի տիտանատ ($BaTiO_3$)	393	26,0
Կապարի տիտանատ ($PbTiO_3$)	763	> 50
Կադմիումի տիտանատ ($CdTiO_3$)	55	—
Կալիումի նիոբատ ($KNbO_3$)	708	30,0
Սեզոնետյան աղ ($NaKC_4H_4O_6 \cdot 4D_2O$)	297 (max) 255 (min)	0,25

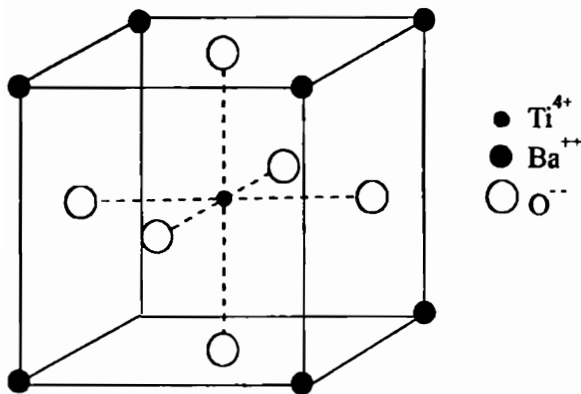
Սեզոնետալեկտրական նյութերը կարելի է բաժանել երկու հիմնական խմբի՝ ա) կարգավորմամբ բնորոշվող և բ) շեղմամբ բնորոշվող:

Առաջին խմբի նմուշներում անցումը պայմանավորված է խոնների կարգավորմամբ, իսկ երկրորդ խմբի նմուշներում՝ միմյանց նկատմամբ խոնային ենթացանցների շեղմամբ:



Նկ. V.17

Սեգնետաէլեկտրիկների առաջին խմբին են պատկանում ջրածնային կապով բյուրեղները, որոնցում $P_s \neq 0$ բևեռացումը կապված է ջրածնի իոնների տեղաշարժերի հետ: Եթե այս խմբի որոշ նյութերում ջրածնի իոնը՝ պրոտոնը, փոխարինվի դեյտերիումով (ծանր ջրածնով), ապա Կյուրիի ջերմաստիճանը մեծանում է մոտ 2 անգամ (օրինակ՝ KH_2PO_4 -ի համար $T_c \approx 123\text{K}$, իսկ KD_2PO_4 -ի համար՝ $T_c \approx 213\text{K}$, Ալյուսակ V.2): Այսպիսի զգալի իզոտոպական շեղումը սովորաբար կապում են ջրածնի իոնի՝ մի քանի հավասարակշռական դիրքերի միջև քվանտային թունելային անցման հնարավորության հետ:

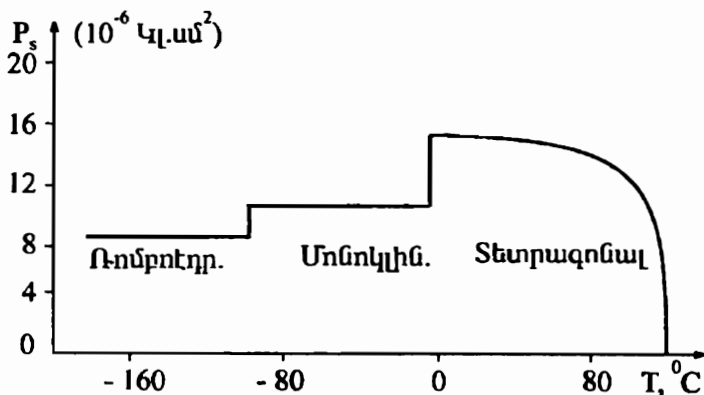
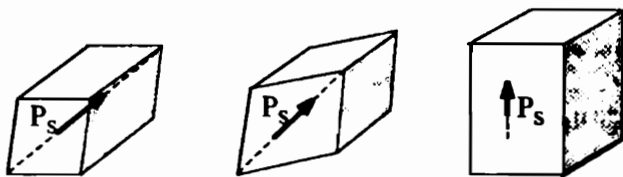


Նկ. V.18

Սեգնետաէլեկտրիկների երկրորդ խմբին են պատկանում պերովսկիտի (CaTiO_3) տիպի կառուցվածքով իոնային բյուրեղները (Նկ.V.18): Այդ խմբին պատկանող բարիումի տիտանատի (BaTiO_3) բյուրեղն ունի խորանարդային կառուցվածք: Խորանարդի զազաթներում գտնը-

վում են բարիումի Ba^{++} իոնները, նիստերի կենտրոններում՝ քթվածնի O^{--} իոնները, իսկ խորանարդի կենտրոնում՝ տիտանի Ti^{4+} իոնը: Երբ $T < T_c$, այս խորանարդային կառուցվածքը որոշ չափով դեֆորմացվում է՝ Ba^{++} և Ti^{4+} իոնները տեղաշարժվում են O^{--} իոնների նկատմամբ, արդյունքում տարրական բջիջը ձեռք է բերում դիպոլային մոմենտ: Եթե շարունակենք ցածրացնել ջերմաստիճանը, ապա 0°C -ին և ապա -90°C -ին մոտ ջերմաստիճաններում BaTiO_3 բյուրեղը կրում է կառուցվածքային փոփոխություններ, տեսրագոնալ կառուցվածքից անցնելով նախ մոնոկլինային, ապա՝ ռոմբոէդրական կառուցվածքի, որոնց հսմապատասխանում են ինքնաբերական բևեռացման վեկտորի տարբեր ուղղություններ (Նկ. V.19):

Ծանոթանանք սեղնետալիկտրականության երևութաբանական տեսությանը, որը ֆազային անցումների տեսության կոնկրետ կիրառության մի օրինակ է:



Նկ. V.19

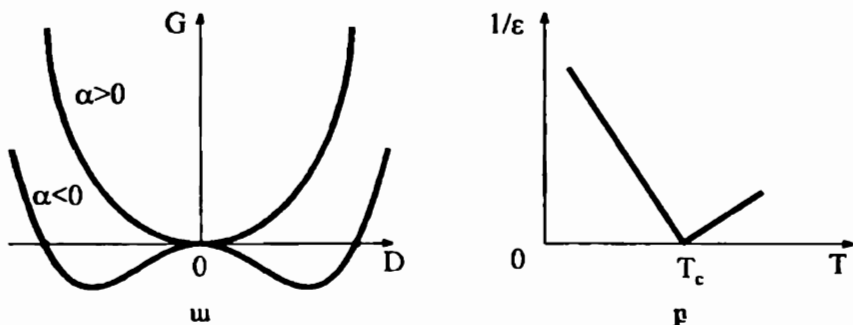
Օգտվենք Գիբսի G պոտենցիալի արտահայտությունից, որը, ի տարբերություն (9.3) բանաձևով տրվող $\Phi(T, \sigma_{ik}, E_i)$ թերմոդինամիկական պոտենցիալի, կախված է T, σ_{ik} և D_i անկախ փոփոխականներից՝

$$dG = -SdT - u_{ik}d\sigma_{ik} + \frac{1}{4\pi} E_i dD_i : \quad (10.1)$$

Պարզության համար կենթադրենք, որ $D_i = D$ ինդուկցիան մղված է այն բյուրեղագրական առանցքով, որով մղվում է ինքնաբերական բևեռացումը և կիրառվող էլեկտրական դաշտը: Կենթադրենք նաև, որ մեխանիկական լարումները բացակայում են, և չբևեռացված ֆազը կենտրոնահամաչափ է: Արված ենթադրությունների շրջանակներում Գիբսի թերմոդինամիկական պոտենցիալը կարելի է ներկայացնել բազմանդամի տեսքով՝

$$G(D, T, \sigma) \cong \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\alpha}{2} D^2 + \frac{\gamma}{4} D^4 + \frac{\delta}{6} D^6 \right) \quad (10.2)$$

և հաշվարկվում է պարաէլեկտրական վիճակում ունեցած արժեքից: α , γ և δ գործակիցներն ընդհանուր դեպքում ջերմաստիճանից կախված մեծություններ են, ընդ որում անհրաժեշտ է, որ $\delta > 0$, որպեսզի ապահովվի համակարգի վիճակի կայունությունը, երբ $D \rightarrow \infty$: (10.2) արտահայտության մեջ D -ի կենտ աստիճաններով անդամների բացակայությունն ապահովում է G պոտենցիալի անփոփոխությունը $D \rightarrow -D$ ձևափոխության նկատմամբ:



Նկ. V.20

Սկզբում ուսումնասիրենք II կարգի ֆազային անցումները՝ $\gamma > 0$:

Եթե $\alpha > 0$, ապա G պոտենցիալն ունի միակ մինիմում $D = 0$ կետում, սակայն եթե $\alpha < 0$, ապա այն ընդունում է նվազագույն արժեք D -ի՝ զրոյից տարբեր արժեքների համար (նկ. V.20, ա): Եթե $\alpha(T)$ գործակիցը, անընդհատ փոփոխվելով, ընդունում է (T_c -ում) զրոյական արժեք, ապա գործունեք II կարգի ֆազային անցումների հետ: Անցման T_c կետի շրջակայքում $\alpha(T)$ գործակիցը ներկայացնենք

$$\alpha = \beta(T - T_c) \quad (10.3)$$

տեսքով, որտեղ β -ն դրական հաստատուն է:

Կապը լարվածության և ինդուկցիայի միջև, (10.1) և (10.2) առնչությունների համաձայն, տրվում է

$$E = 4\pi \left(\frac{\partial G}{\partial D} \right)_T = \alpha(T) \cdot D + \gamma D^3 + \delta D^5 \quad (10.4)$$

հավասարումով:

Եթե $T \geq T_c$, ապա փոքր D -երի համար, արհամարհելով γD^3 և δD^5 անդամները, (10.4) հավասարումից կստանանք՝

$$D = \frac{E}{\alpha(T)} = \frac{E}{\beta(T - T_c)} \equiv \varepsilon E, \quad \varepsilon = \frac{1}{\beta(T - T_c)} : \quad (10.5)$$

Մասնավորապես, եթե $E = 0$, ապա $D = 0$ և, հետևաբար, մոլային բևեռացումը՝ $P = 0$ (նկ. V.17, ք):

Եթե $T \leq T_c$ և $E = 0$, ապա, նկատի ունենալով D -ի փոքր լինելու համ-
գամանքը, (10.4) հավասարումից կստանանք՝

$$D_0 \approx \left(-\frac{\alpha}{\gamma} \right)^{1/2} = \left(\frac{\beta}{\gamma} \right)^{1/2} \cdot (T_c - T)^{1/2} : \quad (10.6)$$

(10.6) արտահայտությունից հետևում է, որ այս դեպքում մոլային օժտված է

$$P_s = \frac{1}{4\pi} D_0 = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\beta}{\gamma} \right)^{1/2} \cdot (T_c - T)^{1/2} \quad (10.7)$$

ինքնաբերական բևեռացմամբ:

Քանի որ D և E մեծությունների միջև (10.4) հավասարումով տրված կախումն ունի ոչ գծային բնույթ, ապա անհրաժեշտ է օգտվել դիֆերենցիալ դիֆերենցիալ թափանցելիության սահմանումից՝

$$\varepsilon = \frac{dD}{dE}, \quad (10.8)$$

որը $D(E)$ գծային ֆունկցիայի դեպքում համընկնում է (1.11) սահմանման հետ: Այսպիսով, $E \rightarrow 0$ դեպքում (10.4), (10.6) և (10.8) առնչություններից պիրոէլեկտրական վիճակում գտնվող սեզնետաէլեկտրիկի դիֆերենցիալ թափանցելիության համար կստանանք՝

$$\varepsilon = \left(\frac{dD}{dE} \right)_{E=0} \equiv \frac{1}{-\beta(T_c - T) + 3\gamma D_0^2} = \frac{1}{2\beta(T_c - T)} \quad (10.9)$$

արտահայտությունը, որտեղ հաշվի չի առնված $D_0^4 \sim (T_c - T)^2$ կարգի անդամը:

Ինչպես հետևում է (10.5) և (10.9) առնչություններից, դիէլեկտրական քափանցելիության հսկադարձ մեծությունը սլիքտէլեկտրական վիճակում երկու անգամ մեծ է, քան պարաէլեկտրական վիճակում (նկ. V.20, ք):

Նմուշի էնտրոպիան պարաէլեկտրական և սլիքտէլեկտրական ֆազերում ($E = 0$ դեպքում) ընդունում է հետևյալ արժեքները՝

$$S = \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\gamma} (T - T_c), \text{ երբ } T < T_c \quad \text{և} \quad S = 0, \text{ երբ } T > T_c: \quad (10.10)$$

Այսպիսով, էնտրոպիան, որպես ջերմաստիճանի ֆունկցիա, անընդհատ է $T = T_c$ կետում, ի տարբերություն ջերմունակության (քննարկվող դեպքում՝ հաստատուն $\sigma_{ik} = 0$ լարման համար), որը $T = T_c$ կետում ունի

$$\Delta C = \left(T \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{T \leq T_c} - \left(T \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{T \geq T_c} = \frac{\beta^2 T_c}{2\gamma} \quad (10.11)$$

վերջավոր թռիչք:

Այժմ անցնենք I կարգի ֆազային անցումների ուսումնասիրությանը սեզնետաէլեկտրական բյուրեղներում, երբ (10.2) արտահայտության մեջ γ գործակիցը բացասական է՝ $\gamma < 0$:

Այս դեպքում G պոտենցիալը կարող է ունենալ միևնույն նվազագույն արժեքը ինչպես $D = 0$, այնպես էլ $D = \pm D_s$ արժեքների դեպքում: Նորից կենթադրենք, որ $\alpha(T)$ գործակիցը կարելի է ներկայացնել

$$\alpha = \beta(T - T_0) \quad (10.12)$$

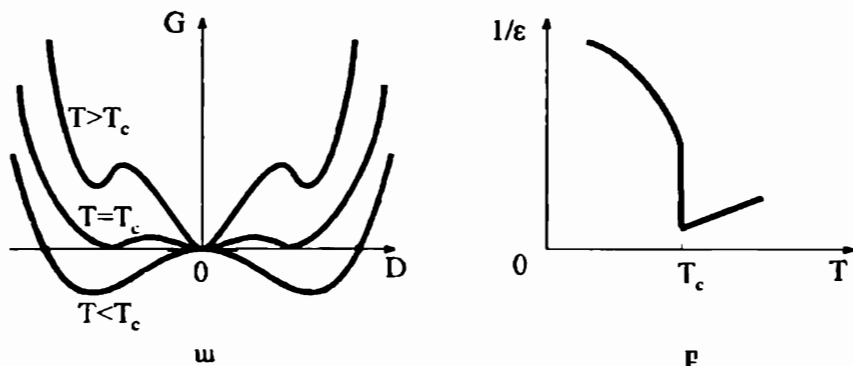
տեսքով, որտեղ T_0 -ն կոչվում է Կյուրի-Վեյսի ջերմաստիճան և հավասար չէ անցման T_c ջերմաստիճանին: Նշանակելով $\gamma' = -\gamma > 0$, (10.2) առնչությունից կստանանք՝

$$G = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{\beta(T - T_0)}{2} D^2 - \frac{\gamma'}{4} D^4 + \frac{\delta}{6} D^6 \right], \quad (10.13)$$

որից բխում է վիճակի դիէլեկտրական հավասարումը՝

$$E = 4\pi \left(\frac{\partial G}{\partial D} \right)_T = \beta(T - T_0)D - \gamma' D^3 + \delta D^5 : \quad (10.14)$$

G պոտենցիալի՝ D ինդուկցիայից կախման կորերը տարբեր ջերմաստիճաններում պատկերված են նկ. V.21, ա-ում: Ակնհայտ է, որ I կարգի ֆա-



Նկ. V.21

զային անցում ($E = 0$ դաշտում) տեղի է ունենում, երբ G -ն և նրա I կարգի ածանցյալը միաժամանակ դառնում են զրո, այսինքն, երբ

$$\frac{1}{2} \beta(T - T_0) - \frac{\gamma'}{4} D_0^2 + \frac{\delta}{6} D_0^4 = 0, \quad (10.15)$$

$$\beta(T - T_0) - \gamma' D_0^2 + \delta D_0^4 = 0 \quad (10.16)$$

հավասարումները բավարարվում են միաժամանակ:

(10.15) և (10.16) հավասարումներից անմիջապես հետևում է կապը T_0 և T_c ջերմաստիճանների միջև՝

$$T_c = T_0 + \frac{3}{16} \frac{\gamma'^2}{\beta\delta} : \quad (10.17)$$

Տեղադրելով (10.15) հավասարման մեջ $T = T_c$, և օգտվելով (10.17) առնչությու-
նից, ինքնաբերական բևեռացման համար կստանանք հետևյալ արտա-
հայտությունը՝

$$P_s = \frac{1}{4\pi} D_0, \quad \text{որտեղ} \quad D_0^2 = \frac{3\gamma'}{4\delta}, \quad \text{երբ } T = T_c : \quad (10.18)$$

Հակադարձ դիէլեկտրական թափանցելիության համար $E = 0$ դեպքում (10.14) հավասարումից կստանանք՝

$$\varepsilon^{-1} = \left(\frac{\partial E}{\partial D} \right)_{E=0} = \beta(T - T_0) - 3\gamma' D_0^2 + 5\delta D_0^4 : \quad (10.19)$$

Երբ $T > T_c$, $D_0 = 0$ և

$$\varepsilon^{-1} = \beta(T - T_0) \quad (10.20)$$

(նկ. V.21, ք):

Երբ $T \leq T_c$, $D_0(T)$ ֆունկցիան որոշելու համար անհրաժեշտ է լուծել (10.15) հավասարումը: Կատարենք նշանակում՝

$$\xi = T_c - T, \quad \xi \rightarrow 0. \quad (10.21)$$

ξ -ի զծային անդամների հաշվառումով (10.15) հավասարումից կստանանք՝

$$D_0^2 \simeq D_0^2(T_c) + \frac{2\beta}{\gamma'} \xi : \quad (10.22)$$

Տեղադրելով ստացված արտահայտությունը (10.19) առնչության մեջ և նկատի ունենալով (10.17) բանաձևը, հակադարձ դիէլեկտրական թափանցելիության համար կստանանք՝

$$\frac{1}{\varepsilon} = \frac{3\gamma'^2}{4\delta} + 8\beta\xi = \frac{3\gamma'^2}{4\delta} + 8\beta(T_c - T), \quad T \rightarrow T_c^-, \quad (10.23)$$

որտեղ T_c^- (T_c^+)-ը նշանակում է, որ $T \rightarrow T_c$ -ին, մնալով նրանից փոքր (մեծ):

Պարաէլեկտրական ֆազում ε^{-1} -ի համար ստացված (10.20) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$\frac{1}{\varepsilon} = \frac{3\gamma'^2}{16\delta} + \beta(T - T_c), \quad T \rightarrow T_c^+ \quad (10.24)$$

տեսքով, որից հետևում է, որ $T = T_c$ կետում

$$\left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{T \rightarrow T_c^+} \equiv \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)^+ = \frac{3}{16} \cdot \frac{\gamma'^2}{\delta} : \quad (10.25)$$

Ըստ (10.23) արտահայտության, երբ $T = T_c$

$$\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)_{T \rightarrow T_c^-} \equiv \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^- = \frac{3}{4} \cdot \frac{\gamma'^2}{\delta} = 4 \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^+ : \quad (10.26)$$

Այսպիսով, հակադարձ դիէլեկտրական թափանցելիությունը T_c կետում ունի վերջավոր թռիչք, իսկ նրան T_c անցման կետում ձախից ($T \rightarrow T_c^-$) և աջից ($T \rightarrow T_c^+$) տարված շոշափողներն ընդունում են

$$\frac{d}{dT} \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^- = -8\beta, \quad \frac{d}{dT} \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^+ = \beta \quad (10.27)$$

արժեքները (նկ. V.21, բ):

Սեզնետաէլեկտրիկի բևեռացման թռիչքաձև փոփոխությունը T_c կետում բերում է էնտրոպիայի թռիչքաձև փոփոխության՝

$$\Delta S = -\beta D_0^2/2, \quad (10.28)$$

հետևաբար, անցման թաքնված ջերմությունը՝

$$T_c \Delta S = \frac{1}{2} T_c \beta D_s^2 : \quad (10.29)$$

Ինչպես հետևում է ստացված արդյունքներից, անկախ ֆազային անցման կարգից, սեզնետաէլեկտրիկի դիէլեկտրական թափանցելիությունը անցման T_c կետին մոտենալիս շատ արագ աճում է: Համաձայն բազմաթիվ փորձերի, այն կարող է ընդունել մինչև 10^5 կարգի արժեքներ: Դիէլեկտրական թափանցելիության այսպիսի վարքը հիշեցնում է «բևեռացման աղետը» (տես (4.4) բանաձևը): Մյուս կողմից, համաձայն Լիդեն-Սաքս-Թելերի

$$\frac{\omega_T^2}{\omega_L^2} = \frac{\varepsilon(\infty)}{\varepsilon(0)} \quad (10.30)$$

բանաձևի, եթե ստատիկ դիէլեկտրական թափանցելիությունը ձգտում է անսահմանության (յուրականում՝ ընդունում է մեծ արժեքներ), ապա լայնական օպտիկական տատանումների հաճախությունը՝ $\omega_T \rightarrow 0$ (ընդունում է շատ փոքր արժեքներ): Եթե $\omega_T \approx 0$, ապա տվյալ բյուրեղական կառուցվածքը դառնում է անկայուն, և նրանում տեղի են ունենում կառուցվածքային փոփոխություններ: Սա նշանակում է, որ $T < T_c$ դեպքում բյուրեղն ինքնաբերաբար և անընդհատ դեֆորմացվում է, որի հետևանքով էլ առաջանում է

բևեռացված վիճակ:

Մինչև այժմ քննարկումների ընթացքում ենթադրվել է, որ մմուշը, որի հետ գործ ունենք, համասեռ է և անվերջ մեծ: Իրական բյուրեղներին անցնելիս հարկավոր է նկատի ունենալ ինչպես մմուշի սահմանների, այնպես էլ նրանում տարբեր տիպի արատների առկայությունը:

Եթե մմուշն օժտված է զրոյից տարբեր բևեռացմամբ, ապա նրանից դուրս գոյություն ունի էլեկտրական ապաբևեռացնող դաշտ, որն օժտված է որոշակի էներգիայով: Էներգիական տեսակետից նպատակահարմար է, որ մմուշում առաջանան առանձին սիթույթներ (դոմեններ), որոնց բևեռացման վեկտորների գումարը լինի զրոյին մոտ, քանի որ այդ դեպքում ապաբևեռացնող դաշտը գործնականում կբացակայի: Դոմենների չափերը կախված են մմուշի չափերից, ինչպես նաև ջերմաստիճանից և $10^{-4} \div 1$ սմ կարգի են: Տարբեր բևեռացմամբ դոմեններ միմյանցից բաժանված են այսպես կոչված դոմենային պատերով, որոնց հաստությունը մի քանի ցանցի հաստատունի կարգի է, և որոնք օժտված են էներգիայով: Նմուշը տվյալ պայմաններում դադարում է տրոփել մոր դոմենների, եթե տրոփման հետևանքով ապաբևեռացման դաշտի էներգիայի փոքրացումը դառնում է մոր դոմենային պատ ստեղծելու համար անհրաժեշտ էներգիայի կարգի: (Դոմենների առաջացման, նրանց չափերի որոշման, դոմենային պատերի շարժման, հիստերեզիսի և նման այլ հարցեր ավելի հանգամանորեն շարադրված են գրքի II մասում, մագնիսականությանը նվիրված բաժնում):

Հավելված 1. ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ՄԵԾՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱՂՅՈՒՍԱԿ
(ըստ Rev. Mod. Phys. 41, 375 (1969) հոդվածի)

Մեծություն	Նշանակում	Թվային արժեք և միավոր (CGSE)
Էլեկտրոնի հանգստի զանգված	m	$9,10956 \cdot 10^{-28}$ գ
Տարրական լիցք	e	$4,80325 \cdot 10^{-10}$ CGSE _q
Պրոտոնի հանգստի զանգված	M_p	$1,67261 \cdot 10^{-24}$ գ
Լույսի արագություն	c	$2,997925 \cdot 10^{10}$ սմ/վ
Պլանկի հաստատուն	h $\hbar = h/2\pi$	$6,62620 \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ $1,05459 \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ
Ավոգադրոյի թիվ	N_A	$6,02217 \cdot 10^{23}$ մոլ ⁻¹
Բոլցմանի հաստատուն	k_B	$1,3806 \cdot 10^{-16}$ էրգ/աստ
Պրոտոնի և էլեկտրոնի զանգվածների հարաբերությունը	M_p/m	1836,11
Նուրբ կառուցվածքի հաստատուն	$\alpha = e^2/\hbar c$	$7,2973 \cdot 10^{-3}$
Բորի շառավիղ	$a_B = \hbar^2/me^2$	$0,52918 \cdot 10^{-8}$ սմ
Ռիդբերգի հաստատուն	$Ry = me^4/2\hbar^2$	13,6058 (ԷՎ)
Բորի մագնետոն	$\mu = e\hbar/2mc$	$0,92741 \cdot 10^{-20}$ էրգ/Գս
Էլեկտրոնի դասական շառավիղ	$r_e = e^2/mc^2$	$2,81794 \cdot 10^{-13}$ սմ
Էլեկտրոնի կոմպտոնյան ալիքի երկարությունը	$\lambda_e = \hbar/mc$	$3,86159 \cdot 10^{-11}$ սմ
1 էլեկտրոն-Վոլտ	1 էՎ	$1,60219 \cdot 10^{-12}$ էրգ $2,41797 \cdot 10^{14}$ Հգ $8,06546 \cdot 10^3$ սմ ⁻¹ $1,16048 \cdot 10^4$ K

I. Ինտեգրալների հաշվարկ Պուասոնի ինտեգրալի միջոցով

ա) Դասընթացում հանդիպող մի շարք ինտեգրալներ կարելի է հեշտությամբ հաշվել, գիտենալով Պուասոնի ինտեգրալը՝

$$I_0(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx, \quad \alpha > 0, \quad (2.1)$$

որը α պարամետրի ֆունկցիա է: $I_0(\alpha)$ ինտեգրալը կարելի է հաշվել հետևյալ պարզ ձևով: Գրենք $I_0(\alpha)$ ինտեգրալի քառակուսու արտահայտությունը՝

$$I_0^2(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha y^2} dy = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(x^2+y^2)} dx dy : \quad (2.2)$$

(2.2) կրկնակի ինտեգրալում (x, y) փոփոխականներից անցնելով (ρ, φ) կոորդինատներին՝

$$x = \rho \cos \varphi, \quad y = \rho \sin \varphi, \quad dx dy = \rho d\rho d\varphi,$$

կստանանք՝

$$I_0^2(\alpha) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho d\rho e^{-\alpha \rho^2} = \pi \int_0^{\infty} dt e^{-\alpha t} = \frac{\pi}{\alpha},$$

այսինքն՝

$$I_0(\alpha) = \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{1/2} \quad (\alpha > 0) \quad (2.3)$$

(2.1) արտահայտության մեջ ընդհանուր ֆունկցիան զույգ է, ուստի

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} I_0(\alpha) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (2.4)$$

բ) Հաշվենք հետևյալ ինտեգրալը՝

$$I_{2n}(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = 2 \int_0^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx, \quad (n = 0, 1, 2, \dots): \quad (2.5)$$

Եթե $e^{-\alpha x^2}$ ֆունկցիան ածանցենք ըստ α պարամետրի, ապա կստանանք $e^{-\alpha x^2}$ ֆունկցիան՝ բազմապատկած $(-x^2)$ գործակցով: n անգամ ածանցելուց հետո կստանանք $(-1)^n x^{2n} e^{-\alpha x^2}$, այսինքն՝

$$\begin{aligned} I_{2n}(\alpha) &= \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \\ &= (-1)^n \frac{d^n I_0(\alpha)}{d\alpha^n} = (-1)^n \cdot \pi^{1/2} \frac{d^n}{d\alpha^n} (\alpha^{-1/2}) = \frac{(2n-1)!!}{(2\alpha)^n} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Կենտ ցուցչի դեպքում զրոյից տարրեր է հետևյալ ինտեգրալը՝

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{2n+1}(\alpha) &= \int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx = (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \int_0^{\infty} x e^{-\alpha x^2} dx = \\ &= \frac{1}{2} (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \int_0^{\infty} e^{-\alpha t} dt = \frac{1}{2} (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \frac{1}{\alpha} = \frac{n!}{2\alpha^{n+1}}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

(2.5) և (2.7) ինտեգրալները կարելի է ներկայացնել մեկ բանաձևով՝

$$\tilde{I}_k(\alpha) = \int_0^{\infty} x^k e^{-\alpha x^2} dx, \quad (k=0,1,2,\dots) \quad (2.8)$$

որը $t = \alpha x^2$ փոփոխականի փոխարինումից հետո արտահայտվում է Էյլերի Γ -ֆունկցիայի միջոցով՝

$$\tilde{I}_k(\alpha) = \frac{1}{2\alpha^{(k+1)/2}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right) \quad (2.9)$$

Մասնավորապես, $k=0$ դեպքում $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ և

$$\tilde{I}_0(\alpha) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} : \quad (2.10)$$

զ) Հաշվենք հետևյալ ինտեգրալը՝

$$I_0(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 + \beta x} dx, \quad \alpha > 0, \quad \beta - \text{ն կամայական մեծություն է:} \quad (2.11)$$

Ընդհանրապես կարելի է ցուցաբերել, որ $I_0(\alpha, \beta)$ ֆունկցիան α և β նկատմամբ հանդիմանաբար է պարբերական: Ընդհանրապես կարելի է ցուցաբերել, որ $I_0(\alpha, \beta)$ ֆունկցիան α և β նկատմամբ հանդիմանաբար է պարբերական:

$$\begin{aligned}
 I_0(\alpha, \beta) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha \left(x - \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 + \frac{\beta^2}{4\alpha}} dx = \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha y^2} dy = \\
 &= \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) I_0(\alpha) = \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} :
 \end{aligned}
 \tag{2.12}$$

$I_0(\alpha, \beta)$ ինտեգրալի օգնությամբ կարելի է հաշվել նաև

$$I_k(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 + \beta x} \cdot x^k dx, \quad (k = 1, 2, \dots) \tag{2.13}$$

ինտեգրալը: Այսպես՝

$$\begin{aligned}
 I_k(\alpha, \beta) &= \frac{d^k}{d\beta^k} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 + \beta x} dx = \frac{d^k I_0(\alpha, \beta)}{d\beta^k} = \\
 &= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \cdot \frac{d^k}{d\beta^k} \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) :
 \end{aligned}
 \tag{2.14}$$

II. Ֆուրյե-գործակցի II.5.20 արտահայտության ստացումը

Լիցքի բաշխման $\rho^\varepsilon(R)$ ֆունկցիայի ֆուրյե-վերլուծության գործակիցները, համաձայն I.5.25 բանաձևի, սրվում են

$$\rho_g^\varepsilon = \frac{1}{v_0} \int \rho^\varepsilon(R) e^{-igR} dR \tag{2.15}$$

ինտեգրալով: II.5.14, II.5.19 բանաձևերի համաձայն,

$$\rho^\varepsilon(R) = \sum_l e \cdot \varepsilon^3 \cdot \pi^{-3/2} \exp[-\varepsilon^2(R-l)^2] - \frac{e}{v_0} : \tag{2.16}$$

Տեղադրելով (2.16) բաշխումը (2.15) արտահայտության մեջ, կստանանք՝

$$\rho_g^\varepsilon = \frac{e\varepsilon^3}{v_0\pi^{3/2}} I_g^\varepsilon - \frac{e}{v_0} \delta_{g,0}, \tag{2.17}$$

որտեղ

$$I_g^\varepsilon = \sum_l \int_{v_0} e^{-igR - \varepsilon^2(R-l)^2} dR : \quad (2.18)$$

Ձևափոխենք (2.18) ինտեգրալը, նկատի ունենալով, որ $\exp(igl) = 1$, ինչպես նաև ըստ տարրական բջջի v_0 ծավալով ինտեգրումից անցնենք ըստ բյուրեղի $V (\rightarrow \infty)$ ծավալով ինտեգրալի՝

$$\begin{aligned} I_g^\varepsilon &= \sum_l \int_{v_0} e^{-ig(R-l) - \varepsilon^2(R-l)^2} dR = \\ &= \int_{V(\rightarrow\infty)} e^{-igR - \varepsilon^2 R^2} dR = \int_{V(\rightarrow\infty)} e^{-\varepsilon^2 \left(R + i \frac{g}{2\varepsilon^2}\right)^2 - \frac{g^2}{4\varepsilon^2}} dR = \\ &= e^{-\frac{g^2}{4\varepsilon^2}} \int_{V(\rightarrow\infty)} e^{-\varepsilon^2 R^2} dR = 4\pi e^{-\frac{g^2}{4\varepsilon^2}} \int_0^\infty r^2 e^{-\varepsilon^2 r^2} dr = \\ &= 4\pi e^{-\frac{g^2}{4\varepsilon^2}} \left[-\frac{d^2}{d\varepsilon^2} \frac{1}{2} I_0(\varepsilon^2) \right] = \pi^{3/2} \varepsilon^{-3} e^{-\frac{g^2}{4\varepsilon^2}} : \end{aligned} \quad (2.19)$$

(2.19) և (2.17) արտահայտություններից կստանանք II.5.20 առնչությունը՝

$$\rho_g^\varepsilon = \frac{e}{v_0} \left(e^{-g^2/4\varepsilon^2} - \delta_{g,0} \right) : \quad (2.20)$$

III. Ցանցային գումարների հաշվում

Ստանանք ըստ ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հանգույցների որոշ գումարների համար արտահայտություններ:

Դիտարկենք

$$\rho(r) = \sum_l \delta(r-l) \quad (2.21)$$

պարբերական ֆունկցիան, որի միջոցով կարելի է տալ ցանցում զանգվածի, լիցքի կամ այլ մեծությունների բաշխումը: Ներկայացնենք (2.21) ֆունկցիան Ֆուրյեի շարքի տեսքով (I.5.12)՝

$$\rho(r) = \sum_g \rho_g e^{igr} , \quad (2.22)$$

որտեղ, ըստ I.5.12 բանաձևի, ֆուրյե-գործակիցը՝

$$\begin{aligned}\rho_g &= \frac{1}{V} \int_V \rho(r) e^{-ig r} = \frac{1}{V} \sum_l \int_V \delta(r-l) e^{-ig r} dr = \\ &= \frac{1}{V} \sum_l e^{-ig l} = \frac{N}{V} = \frac{1}{v_0}.\end{aligned}\quad (2.23)$$

(2.21)-(2.23) բանաձևերից հետևում է ուղիղ և հակադարձ ցանցերով գումարների միջև նշանավոր կապը՝

$$\sum_l \delta(r-l) = \frac{1}{v_0} \sum_g e^{ig r} : \quad (2.24)$$

Այժմ բազմապատկենք (2.24) առնչությունը $e^{-ik r}$ արտադրիչով և ինտեգրենք ըստ բյուրեղի ծավալի՝

$$\sum_g \int e^{ir(g-k)} dr = v_0 \sum_l \int e^{-ik r} \delta(r-l) dr = v_0 \sum_l e^{-ik l} : \quad (2.25)$$

Նկատի ունենալով I.5.26 առնչությունը, կստանանք՝

$$\sum_g \delta_{g,k} = \frac{v_0}{V} \sum_l e^{-ik l} = \frac{1}{N} \sum_l e^{-ik l} : \quad (2.26)$$

Ձախ մասում գրված գումարը հավասար է 0-ի, եթե $k \neq g$ և հավասար է 1-ի, եթե $k = g$, որտեղ g -ն հակադարձ ցանցի կամայական վեկտոր է: Այսպիսով,

$$\frac{1}{N} \sum_l e^{-ik l} \equiv \frac{1}{N} \sum_l e^{ik l} = \delta_{k,g} : \quad (2.27)$$

(2.27) առնչությունը կարելի է ստանալ նաև ուղղակի հաշվարկի միջոցով: Ըստ l վեկտորի գումարը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\sum_l e^{-ik l} = \sum_{l_1, l_2, l_3} e^{-i k_1 l_1 - i k_2 l_2 - i k_3 l_3} : \quad (2.28)$$

k վեկտորը փոփոխվում է հակադարձ տարածության մեջ, ուստի, օգտվելով III.6.7 բանաձևից, կստանանք՝

$$k a_1 = \frac{2\pi p_1}{N_1}, \quad k a_2 = \frac{2\pi p_2}{N_2}, \quad k a_3 = \frac{2\pi p_3}{N_3}, \quad (2.29)$$

որտեղ p_1, p_2, p_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են:

(2.28) գումարը երեք մույնատիպ գումարների արտադրյալ է: Հաշվենք դրանցից մեկը՝

$$\sum_{-N_1/2 \leq l < N_1/2} e^{-il \frac{2\pi p_1}{N_1}} = \frac{e^{i\pi p_1} - e^{-i\pi p_1}}{1 - e^{-i \frac{2\pi p_1}{N_1}}} = \frac{\sin \pi p_1}{\sin \frac{\pi p_1}{N_1}} e^{i \frac{\pi p_1}{N_1}} =$$

$$= \begin{cases} 0, & \text{եթե } p_1 \neq 0 \\ N_1, & \text{եթե } p_1 = 0 \end{cases} \equiv N_1 \cdot \delta_{p_1,0} :$$

Հետևաբար՝

$$\sum_l e^{-ikl} = N_1 N_2 N_3 \cdot \delta_{p_1,0} \delta_{p_2,0} \delta_{p_3,0} = N \cdot \delta_{k,0} :$$

Եթե $k \rightarrow k - g$, ապա

$$\sum_l e^{-i(k-g)l} = \sum_l e^{-ikl} = N \cdot \delta_{k-g,0} \equiv N \cdot \delta_{k,g} :$$

ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

Ընդհանուր գրականություն

1. Ч.Киттель. Введение в физику твердого тела. М., Наука, 1978.
2. Дж.Займан. Принципы теории твердого тела. М., Мир, 1974.
3. Н.Ашкрофт, Н.Мермин. Физика твердого тела (тт. I, II). М., Мир, 1979.
4. А.И.Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.
5. Дж.Блейкмор. Физика твердого тела. М., Мир, 1988.
6. Ч.Киттель. Элементарная теория твердого тела. М., Наука, 1978.
7. Ч.Уерт, Р.Томсон. Физика твердого тела. М., Мир, 1966.
8. Дж.Най. Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц. М., ИЛ, 1970.
9. Задачи по физике твердого тела, под. ред. Г.Дж.Голдсмида, М., Наука, 1976.
10. В.М.Варикаш, Ю.М.Хачатрян. Избранные задачи по физике твердого тела. Минск, Вышэйш. школа, 1969.
11. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика, ч. I, М., Наука, 1976.
12. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., ФМЛ, 1963.
13. Р.Кубо. Статистическая механика. М., Мир, 1967.
14. Таблицы физических величин. Справочник, под ред. акад. И.К.Кикоина. М., Атомиздат, 1976.

Ի գլխի գրականություն

1. М.П.Шаскольская. Очерки о свойствах кристаллов. М., Наука, 1978.
2. Е.Е.Флинт. Начала кристаллографии. М., Высш. школа, 1961.
3. Р.Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М., ИЛ, 1950.

4. Պ.Հ.Բեգիրզանյան, Ռենտգենյան հետազոտությունների ֆիզիկական հիմունքները, Երևան, ԵՊՀ հրատ., 1977.

II գլխի գրականություն

1. Дж.Гиршфельдер, Ч.Кертисс, Р.Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. М., ИЛ, 1961.
2. В.Хабердитц. Строение материи и химическая связь. М., Мир, 1974.
3. Дж.Слэтер. Диэлектрики, полупроводники, металлы. М., Мир, 1969.
4. П.П.Павинский. Введение в теорию твердого тела. Изд. Ленинградского университета, 1979.
5. Г.Лейбфрид. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М., ФМЛ, 1963.
6. А.А.Левин. Введение в квантовую химию твердого тела. М., Химия, 1974.
7. Дж.Маррел, С.Кеттл, Дж.Теддер. Химическая связь. М., Мир, 1980.

III գլխի գրականություն

1. Л.Бриллюэн, М.Пароди. Распространение волн в периодических структурах. М., ИЛ, 1959.
2. М.Борн, Х.Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. М., ИЛ, 1958.
3. Р.Пайерлс. Квантовая теория твердых тел. М., ИЛ, 1956.
4. А.Мараудин, Э.Монтротт, Дж.Вейсс. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. М., Мир, 1965.
5. А.М.Косевич. Физическая механика реальных кристаллов. Киев, Наукова думка, 1981.
6. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Механика. М., Наука, 1988.

IV գլխի գրականություն

1. Г.Лейбфрид. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М., ФМЛ, 1963.
2. Дж.Слэтер. Диэлектрики, полупроводники, металлы. М., Мир, 1969.
3. Л.Жирифалько. Статистическая физика твердого тела. М., Мир, 1975.
4. Г.Лейбфрид, В.Людвиг. Теория ангармонических эффектов в кристаллах. М., ИЛ, 1963.
5. Р.Пайерлс. Квантовая теория твердых тел. М., ИЛ, 1956.
6. Ю.Б.Румер, М.Ш.Рывкин. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. М., Наука, 1972.
7. В.Н.Жарков, В.А.Калинин. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М., Наука, 1968.

V գլխի գրականություն

1. Дж.Джексон. Классическая электродинамика. М., Мир, 1965.
2. А.Зоммерфельд. Электродинамика. М., ИЛ, 1958.
3. М.Борн, Х.Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. М., ИЛ, 1958.
4. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.
5. Г.Фрелих. Теория диэлектриков. М., ИЛ, 1960.
6. В.Браун. Диэлектрики. М., ИЛ, 1961.
7. М.Лайнс, А.Гласс. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. М., Мир, 1981.
8. И.С.Желудев. Физика кристаллических диэлектриков. М., Наука, 1968.
9. Ф.Иона, Д.Ширане. Сегнетоэлектрические кристаллы. М., Мир, 1965.
10. Г.А.Смоленский, Н.Н.Крайник. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М., Наука, 1968.

Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

**ՊԻՆԴ ՄԱՐՄՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ՆԵՐԱԾՈՒԹՅՈՒՆ
ՄԱՍ I**

Խմբագիր՝ ակադեմիկոս Է.Մ.Ղազարյան

Հանձնված է շարվածքի 20.01.98 թ.: Ստորագրված է տպագրության
10.03.98 թ.: Գրաչափը՝ 60x84 1/16: Թուղթը՝ օֆսեթ: Տառատեսակը՝ «Գրքի
սովորական»: Տպագրական մամուլ՝ 18.25:

«ՀԱՅԻՆՖՈ» գործակալություն:
Երևան, Իսահակյան 28, հեռ. 52-64-16, 52-85-30