

Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

**ՊԻՆԴ ՄԱՐՄՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ
ՆԵՐԱԾՈՒԹՅՈՒՆ**

ԵՐԿՐՈՐԴ ՀՐԱՏԱՐԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

ՄԱՍ I

ԵՐԵՎԱՆ

ԵՊՀ ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ

2015

ՀՏԳ 531.259.1
ԳՄԴ 22.37
Կ 530

Հրատարակության է երաշխավորել
ԵՊՀ ֆիզիկայի ֆակուլտետի գիտխորհուրդը

Ուսումնամեթոդական աշխատանքների մատենաշար
պրոֆ. Ա. Կիրակոսյանի ընդհանուր խմբագրությամբ

Գրախոսներ՝ ֆ.մ.գ.դ., պրոֆ. Ա. Մուրադյան,
ֆ.մ.գ.դ., պրոֆ. Ա. Սահակյան

Խմբագիր՝ ակադեմիկոս Է. Մ. Ղազարյան

Ա. Ա. Կիրակոսյան

Կ 530 Պիմդ մարմնի ֆիզիկայի ներածություն / Ա. Կիրակոսյան. – Եր.:
ԵՊՀ հրատ., 2015. Մաս I – 288 էջ:

Գրքում տրված են մախնական տեղեկություններ բյուրեղային ցանցի կա-
ռուցվածքի և դիմամիկայի, բյուրեղային կապի տեսակների, բյուրեղային
ցանցի ջերմային ու դիէլեկտրական հատկությունների մասին:

Նախատեսված է Երևանի պետհամալսարանի ֆիզիկայի և ռադիոֆիզի-
կայի ֆակուլտետների, Արցախի պետհամալսարանի բնագիտական ֆա-
կուլտետի, Հայաստանի ազգային պոլիտեխնիկական համալսարանի կի-
բեմնետիկայի, կիսահաղորդչային սարքերի ֆիզիկայի, նյութաբանության
և հարակից բնագավառներում մասնագիտացող բակալավրների, մագիս-
տրոսների և ասպիրանտների համար:

Գիրքը կարող է օգտակար լինել մակ միմդ մարմնի ֆիզիկական ինքնուրույն
ուսումնասիրել ցանկացող գիտաշխատողների և ճարտարագետների հա-
մար:

ՀՏԳ 531.259.1
ԳՄԴ 22.37

**Նվիրում եմ ծնողներին՝
Ավետիսի և Արմենուհու
հիշատակին**

Գլուխ I. Բյուրեղային կառուցվածքներ

§1. Տեղափոխական համաչափություն	10
§2. Տարրական բջիջ	13
§3. Խորանարդային ցանցեր	15
§4. Վիզներ-Ջեյտցի բջիջ	20
§5. Բրավեի ցանց: Բյուրեղային համակարգեր	23
§6. Կարևոր բյուրեղային կառուցվածքներ	28
§7. Հակադարձ ցանց	37
§8. Հակադարձ ցանցի հատկությունները: Միլերյան ցուցիչներ	43
§9. Հակադարձ ցանցի կառուցումը	47
§10. Դիֆրակցիան բյուրեղային կառուցվածքներում: Կառուցվածքային գործոն	51

Գլուխ II. Կապերի տեսակները բյուրեղներում

§1. Կապի էներգիա	59
§2. Բյուրեղային մարմինների դասակարգումը	61
§3. Վանդերվաալսյան կապի տեսությունը	69
§4. Մոլեկուլային բյուրեղի կապի էներգիայի հաշվարկը	75
§5. Իոնային կապի տեսությունը	80
§6. Կովալենտ կապի տեսությունը	85
§7. Մետաղական կապի տեսությունը	94

Գլուխ III. Բյուրեղական ցանցի դինամիկան

§1. Ներդաշնակ մոտավորություն	100
§2. Տատանումները և ալիքները պարզ միաչափ ցանցում	102
§3. Ամենամոտ հարևանների մոտավորությունը	110
§4. Տատանումները և ալիքները բարդ (բազիսով) միաչափ ցանցում	113
§5. Դիսպերսային առնչությունների ուսումնասիրումը	117
§6. Եռաչափ բարդ ցանցի տատանումները	124
§7. Սահմանային պայմանների ուսումնասիրումը	136
§8. Տատանումների բաշխումը սպեկտրում: Վիճակների խտության ֆունկցիա	141

Գլուխ IV. Բյուրեղական ցանցի ջերմային հատկությունները

§1. Պինդ մարմնի ջերմունակության դասական տեսությունը	154
§2. Պինդ մարմնի ջերմունակության քվանտային տեսությունը	160
§3. Պինդ մարմնի ջերմունակության Այնշտայնի տեսությունը	167
§4. Պինդ մարմնի ջերմունակության Դեբայի տեսությունը	171
§5. Ներքին էներգիայի և ջերմունակության վարքը ջերմաստիճանային տարբեր տիրույթներում	178
§6. Դեբայի տեսության քննարկումը	182
§7. Բյուրեղային ցանցի ջերմային տատանումները: Հալման չափանիշ	191
§8. Դեբայ-Ուոլերի գործոն	198
§9. Տատանումների աններդաշնակությամբ պայմանավորված երևույթներ բյուրեղներում: Մի-Գրյունայզենի հավասարումը	203
§10. Տատանումների աններդաշնակության ազդեցությունը ջերմադինամիկական մեծությունների վրա	208
§11. Տատանումների աններդաշնակության ազդեցությունը ցանցի ջերմունակության վրա	212

Գլուխ V. Մեկուսիչների էլեկտրական հատկությունները

§1. Էլեկտրական դաշտը մեկուսիչներում: Դիէլեկտրական թափանցելիություն	216
§2. Ապարեռացնող դաշտ: Ապարեռացման գործակից	219
§3. Տեղային դաշտ: Լորենցի դաշտ	223
§4. Բևեռացվելիության տեսությունը	226
§5. Օպտիկական տատանումներն իոնային բյուրեղներում	235
§6. Էլեկտրամագնիսական ալիքի փոխազդեցությունը ցանցային տատանումների հետ	243
§7. Դիէլեկտրական ռելաքսացիա	247
§8. Պիրոէլեկտրականություն	251
§9. Պիեզոէլեկտրականություն	254
§10. Մեզոնետաէլեկտրականություն	258
§11. Մեզոնետաէլեկտրականության երևութաբանական տեսությունը	261
Հավելված 1. Ֆիզիկական հաստատումների աղյուսակ	268
Հավելված 2. Մաթեմատիկական լրացումներ	269
Հավելված 3. Մադելունգի հաստատումի հաշվարկման մեթոդները	273
Գրականություն	286

ՆԱԽԱԲԱՆ

Ընթերցողի ուշադրությանը ներկայացվող սույն դասագիրքը Երևանի պետական համալսարանի ֆիզիկայի ֆակուլտետի ուսանողներին կարդացվող «Պինդ մարմնի ֆիզիկայի ներածություն» ընդհանուր դասընթացի դասախոսությունների վերամշակված և ընդլայնված շարադրանքն է:

Պինդ մարմնի ֆիզիկան ժամանակակից ֆիզիկայի կարևորագույն բաժիններից 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 կիրառության ոլորտները: Ստեղծվել են պինդմարմնային լազերների նոր տեսակներ, էապես կերպարանափոխվել է կիսահաղորդչային միկրոէլեկտրոնիկան, որտեղ լայնորեն կիրառվում են ցածր չափայնությամբ էլեկտրոնային համակարգեր պարունակող տարբեր կառուցվածքներ: Ներկայում հաջողությամբ կիրառվում են հազվագյուտ հողային մետաղների հիման վրա սինթեզված բյուրեղներ, մագնիսական կիսահաղորդիչներ, ամորֆ մետաղներ և կիսահաղորդիչներ, բարձրջերմաստիճանային գերհաղորդիչներ և այլ նյութեր:

Դասագրքում շարադրված են պինդ մարմնի ֆիզիկայի հիմնական բաժինները: Գրքի առաջին մասում ուսումնասիրված են բյուրեղային կառուցվածքները, պինդ մարմիններում կապի տեսակները և բյուրեղային ցանցի ֆիզիկական հատկությունները: Մանրամասն դիտարկված են ցանցի դինամիկան, ինչպես նաև ջերմային և դիէլեկտրական հատկությունները:

Գրքի երկրորդ մասում համգամանորեն շարադրված են դասական էլեկտրոնային տեսությունը (Պ. Դրուդե, Հ. Լորենց), էլեկտրոնային գազի քվանտային տեսությունը (Ա. Ջոմերֆելդ), տրված են մախնական տեղեկություններ պինդ բյուրեղային մարմնում էլեկտրոնի էներգիական սպեկտրի գոտիական կառուցվածքի մասին: Առանձին գլուխներ են մվիրված գերհաղորդականության երևույթի, պինդ մարմնի մագնիսական հատկությունների և արատների ուսումնասիրությանը: Տրված են նաև մախնական, ընդհանուր տեղեկություններ ամորֆ պինդ մարմինների և հեղուկ բյուրեղների մասին:

Գրքում ըստ էության քննարկված չեն պինդ մարմնի ֆիզիկայի զարգացման գործում նշանակալի դեր խաղացած բազմաթիվ փորձեր: Այս համագամանքն ամենևին չի նշանակում պինդ մարմնի ֆիզիկայում փորձի և փորձարարական հետազոտությունների դերի թերագնահատում կամ անտեսում: Հեղինակի հիմնական նպատակն է եղել մասամբ լրացնել պինդ մարմնի ֆիզիկային վերաբերող, մայրենի լեզվով ուսումնական գրականության պակասը, տալ պինդ մարմնի ֆիզիկայի տեսական գիտելիքների այն նվազագույնը, որն անհրաժեշտ է ֆիզիկայի և տեխնիկայի տարբեր բնագավառներում մասնագիտացող գիտաշխատողներին և ճարտարագետներին:

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

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

Գրքում օգտագործված գրականության ցանկը բաժանված է երկու մասի: Ընդհանուր գրականության ցանկում ներկայացված են շարադրված բաժինների վերաբերյալ տեղեկություններ պարունակող գրքեր, ինչպես նաև հիմնարար բնույթի հանրահայտ դասագրքեր: Երկրորդ մասում ըստ գլուխների տրված են շարադրված նյութին անմիջականորեն առնչվող դասագրքերն ու մենագրությունները:

Դասագիրքը նախ և առաջ ուսումնական ձեռնարկ է, ուստի նրանում, որպես կանոն, չկան առանձին բնագրերի և սկզբնաղբյուրների հղումներ:

Գրքում, բացի առանձին դեպքերից, օգտագործված է ֆիզիկական միավորների գաուսյան (CGSE) համակարգը: Նկարները և աղյուսակները համարակալված են աճող հերթականությամբ, իսկ բանաձևերը՝ պարագրաֆի շրջանակներում: Պարագրաֆները և բանաձևերը հղելիս նշվում է գլուխը (օրինակ՝ II.7, III.5.14):

Այս դասագիրքը նախատեսված է որպես ուսումնական ձեռնարկ Երևանի պետական համալսարանի ֆիզիկայի և ռադիոֆիզիկայի ֆակուլտետների, Արցախի պետական համալսարանի բնագիտական ֆակուլտետի, ինչպես նաև Հայաստանի ազգային պոլիտեխնիկական համալսարանի հա-

մասպատասխան մասնագիտացումների ուսանողների համար: Այն կարող է օգտակար լինել նաև պինդ մարմնի ֆիզիկայի, կիսահաղորդիչների և կիսահաղորդչային սարքերի ֆիզիկայի, մագնիսականության, գերհաղորդակա-
նության, նյութաբանության, տեսական քիմիայի, քիմիական ֆիզիկայի և հարակից այլ մասնագիտությունների մագիստրոսների և ասպիրանտների համար: Որպես տեղեկատու ձեռնարկ՝ այն կարող են օգտագործել դասա-
խոսներն ու գիտաշխատողները:

Դասագրքի երկրորդ հրատարակության մեջ կատարվել են որոշ փո-
փոխություններ. մասնավորապես, որոշ ծավալուն պարագրաֆներ տրոհվել
են առանձին պարագրաֆների կամ մասամբ շարադրվել են որպես հավել-
ված, փոխվել են որոշ նկարներ, ինչպես նաև ուղղվել են գրքի առաջին հրա-
տարակության մեջ հայտնաբերված թերությունները և վրիպակները:

Խորին շնորհակալություն են հայտնում գրքի խմբագիր, ակադեմիկոս Է.
Ղազարյանին՝ մշտական աջակցության և օգտակար խորհուրդների համար:
Երախտապարտ են իմ գործընկերներ Ա. Ասատրյանին, Ա. Վարդանյանին,
Է. Աբովյանին, Կ. Քեչեչյանին, Ա. Մանասեյանին, Վ. Մուղնեցյանին, Մ.
Բարսեղյանին, Մ. Երանոսյանին, Ա. Ղազարյանին, Շ. Գասպարյանին, Լ.
Վարդանյանին, Լ. Լևոնյանին, Ա. Մելիքսեթյանին և Լ. Պետրոսյանին՝
քննարկումների ընթացքում արած արժեքավոր դիտողությունների համար:

Գիրքը վերահրատարակության նախապատրաստելիս մեծապես օգնել
են Ա. Հարությունյանը և Ն. Հովակիմյանը, որոնց հայտնում են իմ խորին
շնորհակալությունը:

Երախտագիտությամբ կընդունեմ գրքի բովանդակության, նյութի շարա-
դրման և ներկայացման վերաբերյալ բոլոր դիտողություններն ու խորհուրդ-
ները:

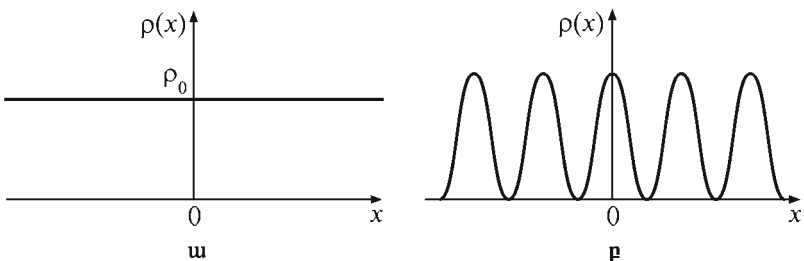
Հեղինակ

ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐ

§1. Տեղափոխական համաչափություն

Մարմինների համաչափության հատկությունները պայմանավորված են նրանցում մասնիկների (ատոմներ, իոններ, մոլեկուլներ) տարածական դասավորությամբ: Շարժվող մասնիկները մարմնում չունեն որոշված տեղեր, ուստի նրանց դիրքերը տրվում են $\rho(x, y, z)$ ֆունկցիայի միջոցով, որը հավանականության խտության իմաստ ունի. հավանականությունն այն բանի, որ մասնիկն $\mathbf{r}(x, y, z)$ կետն ընդգրկող dV ծավալում է, հավասար է $\rho(\mathbf{r})dV$ -ի: Մասնիկների տարածական բաշխման համաչափության հատկությունները որոշվում են կոորդինատների այն ձևափոխություններով (տեղափոխություններ, պտույտներ, անդրադարձումներ), որոնք անփոփոխ են թողնում $\rho(x, y, z)$ ֆունկցիան: Մարմնի համաչափության ձևափոխությունների բազմությունը ներկայացնում է մարմնի համաչափության խումբը:

Ամենաբարձր համաչափությամբ օժտված են իզոտրոպ մարմինները, որոնց հատկությունները բոլոր ուղղություններով մույնն են, օրինակ՝ գազերը, հեղուկները, ամորֆ պինդ մարմինները: Իզոտրոպ մարմնում յուրաքանչյուր մասնիկի բոլոր դիրքերը տարածության մեջ հավասարապես հնարավոր են, այսինքն՝ $\rho(x, y, z) = \rho_2 = \text{const}$ (նկ. 1. ա): Ընդհակառակը, պինդ միաբյուրեղային մարմիններում և հեղուկ բյուրեղներում, որոնց հատկությունները կախված են ուղղությունից, հավանականության խտության ֆունկցիան ունի խիստ արտահայտված մաքսիմումներ, որոնց տարածական դասավորությունն օժտված է համաչափությամբ (նկ. 1. բ):



Նկ. 1. Հավանականության խտության ֆունկցիան
ա. իզոտրոպ մարմնում, բ. միաբյուրեղում (միաչափ դեպք)

Այսպիսով՝ բյուրեղային վիճակին բնորոշ է մասնիկների բաշխումը տա-
րածության մեջ կանոնավոր համաչափ կառուցվածքի ձևով, որը կոչվում է
տարածական կամ բյուրեղային ցանց: Այն առաջին հերթին բնութագրվում է
տարածական պարբերականությամբ կամ տեղափոխական համաչափու-
թյամբ: Վերջինս նշանակում է, որ յուրաքանչյուր բյուրեղի համար գոյություն
ունեն միևնույն հարթությանը չպատկանող $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ վեկտորներ, որոնցով
բյուրեղը որպես ամբողջություն տեղափոխելիս համընկնում է ինքն իր հետ:
Տարածական ցանցի միևնույն ձևով դասավորված կետերը, որոնք այս տե-
ղափոխության արդյունքում համընկնում են իրար հետ, կոչվում են բյուրե-
ղային ցանցի հանգույցներ: Քանի որ բյուրեղի տեղափոխությունը $\mathbf{a}_k$ -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 երկա-
րությամբ վեկտորները:

Եթե կոորդինատների սկզբնակետը համընկնում է որևէ հանգույցի հետ,
ապա կամայական հանգույցի դիրք կարելի է ներկայացնել $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$
հիմնական վեկտորների գծային համակցության տեսքով՝

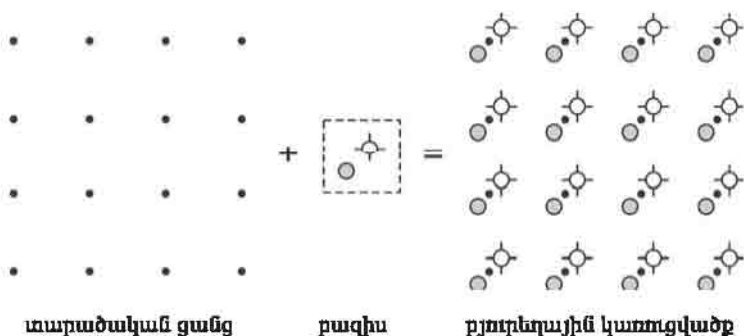
$$\mathbf{l} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (1.1)$$

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

Տեղափոխական պարբերականությամբ օժտված է միայն իդեալական,
այսինքն՝ տարածականորեն անսահմանափակ և արատներից զերծ բյուրե-
ղը: Սահմանափակ բյուրեղի համար տեղափոխման ձևափոխությունը հա-
մաչափության ձևափոխություն չէ, քանի որ «տեղափոխված» բյուրեղն այլևս
չի համընկնում նախնական բյուրեղի հետ: Եթե որևէ ուղղությամբ բյուրեղի
տեղափոխության չափը շատ փոքր է այդ ուղղությամբ բյուրեղի չափերից,
ապա տեղափոխության հետևանքով ծավալից հեռացած մասնիկների թիվը
շատ փոքր է մարմնի ծավալում մասնիկների թվից, ուստի իրական բյուրեղ-
ների հատկությունները կարելի է ուսումնասիրել՝ օգտվելով անսահմանա-
փակ բյուրեղային տարածության հասկացությունից, որի համար տեղափո-
խությունները համաչափության ձևափոխություններ են:

Նման մոտեցումը կարելի է հիմնավորել մառ հետևյալ քանակական գնահատմամբ: Մակրոսկոպական չափերով մմուշի սահմանային շերտի մասնիկների ներդրումը մմուշի որևէ ադիտիվ մեծությամբ, օրինակ՝ ներքին էներգիայի մեջ, համեմատական է $N_s/N \sim L^2/L^3 \sim 1/L \sim N^{-1/3}$ -ին, որտեղ L -ը մմուշի զծային չափն է, $N \sim L^3$ -ը՝ մմուշում մասնիկների թիվը, իսկ N_s -ը մասնիկների թիվն է մմուշի սահմանային շերտում: Մակրոսկոպական մմուշում $N = \nu N_A$, որտեղ $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ մոլ⁻¹ մեծությամբ Ավոգադրոյի հաստատումն է, ν -ն՝ մոլերի թիվը: $\nu \sim 1$ մոլ նյութի համար $N_s/N \sim 10^{-8}$, ուստի մմուշի սահմանային շերտի գոյությամբ պայմանավորված ներդրումը կարելի է անտեսել:

Տարածական ցանցը մաթեմատիկական հասկացություն է. բյուրեղային 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 մույնական են ինչպես կազմությամբ, այնպես էլ տեղադրությամբ և դիրքորոշմամբ (ճկ. 2):



Ճկ. 2. Բյուրեղային կառուցվածքի առաջացումը տարածական ցանցի և բազիսի համադրումից

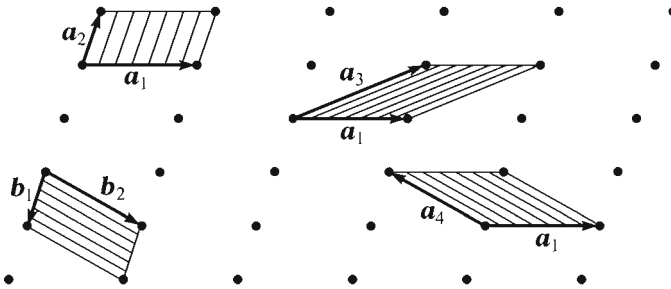
Մետաղների և իներտ տարրերի բյուրեղներում բազիսը կազմված է ընդամենը մեկ մասնիկից, սակայն հայտնի են բազմաթիվ բյուրեղներ, որոնց բազիսը պարունակում է հազարավոր մասնիկներ: s մասնիկից կազմված բազիսը տրվում է

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{a}_1 x_j + \mathbf{a}_2 y_j + \mathbf{a}_3 z_j, \quad j = 1, 2, \dots, s \quad (1.2)$$

վեկտորների հավաքածուով, որով որոշվում են ցանցի հանգույցի նկատմամբ մասնիկների դիրքերը: Մովորաբար բազիսը կազմող մասնիկները ցանցի տվյալ կետի նկատմամբ տեղադրում են այնպես, որ $0 \leq |x_j|, |y_j|, |z_j| < 1$:

§2. Տարրական բջիջ

Տեղափոխության հիմնական վեկտորներով կառուցված զուգահեռանիստը կոչվում է տարրական բջիջ: Տարրական բջջի ընտրությունը միարժեք չէ, քանի որ միարժեք չէ տարածական ցանցի հիմնական վեկտորների ընտրությունը: Դեռ ավելին՝ դրանք կարելի է ընտրել բազմաթիվ ձևերով (նկ. 3):



Նկ. 3. Երկչափ ցանցում տարրական բջջի ընտրության տարբերակներ

Վերջին պնդումն ապացուցենք մաթեմատիկորեն:

Դիցուք՝ $\mathbf{a}_1$ -ը, $\mathbf{a}_2$ -ը և $\mathbf{a}_3$ -ը հիմնական վեկտորներ են: Դրանց փոխարեն ներմուծենք նոր վեկտորներ՝

$$\mathbf{a}'_i = \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{a}_k, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.1)$$

որտեղ α_{ik} -երն 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 (2.1) բանաձևով՝

$$\mathbf{a}_i = \sum_k \beta_{ik} \mathbf{a}'_k, \quad (2.2)$$

որտեղ β_{ik} գործակիցները նույնպես ամբողջ թվեր են: (2.1) և (2.2) բանաձևերից հետևում է, որ

$$\mathbf{a}_i = \sum_{kl} \beta_{ik} \alpha_{kl} \mathbf{a}_l \quad \text{և} \quad \sum_k \beta_{ik} \alpha_{kl} = \delta_{il} = \begin{cases} 1, & i = l, \\ 0, & i \neq l, \end{cases} \quad (2.3)$$

որտեղ δ_{il} -ը Կրոնեկերի սիմվոլն է: (2.3) առնչության համաձայն $\|\alpha_{ik}\|$ և $\|\beta_{ik}\|$ մատրիցներն իրար հակադարձ են, հետևաբար՝ $\|\beta_{ik}\|$ մատրիցի որոշիչը՝

$$\det \beta_{ik} = (\det \alpha_{ik})^{-1} : \quad (2.4)$$

Քանի որ α_{ik} և β_{ik} գործակիցներն ամբողջ թվեր են, ապա $\mathbf{a}_i$ վեկտորների հիմնական լինելու անհրաժեշտ և բավարար պայմանը, (2.4) բանաձևի համաձայն, հետևյալն է՝

$$\det \alpha_{ik} = \pm 1 : \quad (2.5)$$

Երկչափ բյուրեղային ցանցում տարրական բջջի ընտրության տարբեր դեպքեր պատկերված են նկ. 3-ում:

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

$$v_0 = (\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) = \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix} \equiv \det a_{im} \quad (2.6)$$

բանաձևով, որտեղ (2.6) որոշիչի տարրերը հիմնական վեկտորների բաղադրիչներն են՝ գրված որևէ դեկարտյան կոորդինատային համակարգում:

Դժվար չէ համոզվել, որ հիմնական վեկտորների բազմության երեք կամայական վեկտորներով կառուցված տարրական բջիջների ծավալներն իրար հավասար են: Իրոք, (2.1), (2.5) և (2.6) բանաձևերի համաձայն՝

$$v'_0 = \det a'_{im} = \det \alpha_{il} \det a_{im} = \det a_{im} = v_0 : \quad (2.7)$$

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

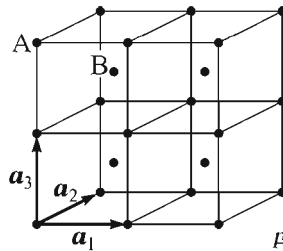
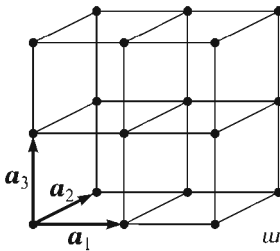
§3. Խորանարդային ցանցեր

3.1. Պարզ խորանարդային (ՊԽ) ցանց

Այս ցանցի տարրական բջիջը խորանարդ է, որը կազմված է մեծությամբ հավասար և իրար հետ ուղիղ անկյուն կազմող հիմնական վեկտորներից՝ $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = |\mathbf{a}_3| = a$ (նկ. 4. ա): Ցանցի յուրաքանչյուր հանգույց պատկանում է ութ խորանարդի, ուստի ամեն մի խորանարդի բաժին է ընկնում $1/8$ հանգույց: Բազմապատկելով այն խորանարդի զագաթների թվով (8)՝ կստանանք, որ տարրական բջջին բաժին է ընկնում մեկ հանգույց, հետևաբար՝ խորանարդային ցանցը պարզ ցանց է:

Պարզ խորանարդային ցանցում «տարրական բջիջ» և «տարրական խորանարդ» հասկացությունները նույնական են:

Տարրական բջջի ծավալը՝ $v_0 = a^3$:



Նկ. 4. ա. Պարզ խորանարդային ցանց,
բ. Ծավալակենտրոն խորանարդային ցանց

3.2. Ծավալակենտրոն խորանարդային (ԾԿԽ) ցանց

Այս ցանցը կարելի է ստանալ նկ. 4. ա-ում պատկերված խորանարդային կառուցվածքից, եթե յուրաքանչյուր խորանարդի կենտրոնում ավելացվի մեկ հանգույց (նկ. 4. բ):

Առաջին հայացքից այս ցանցը թվում է բարդ, քանի որ յուրաքանչյուր խորանարդ պարունակում է երկու հանգույց՝ մեկը 8 զագաթների ներդրումն է, մյուսը՝ կենտրոնում դրվածը: Խորանարդի զագաթները (A) որոշվում են

$$\mathbf{l}_A = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 \quad (3.1),$$

տեղափոխության վեկտորներով, կենտրոնները (B)՝

$$\mathbf{l}_B = \left(l_1 + \frac{1}{2}\right) \mathbf{a}_1 + \left(l_2 + \frac{1}{2}\right) \mathbf{a}_2 + \left(l_3 + \frac{1}{2}\right) \mathbf{a}_3 \quad (3.2)$$

տեղափոխության վեկտորներով, իսկ l_1 -ը, l_2 -ը և l_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են:

Յույց տանք, որ կարելի է ընտրել նոր հիմնական վեկտորներ այնպես, որ խորանարդի և՛ գագաթները, և՛ կենտրոնները որոշվեն միևնույն տեղափոխության վեկտորով: Նոր հիմնական վեկտորներն ընտրենք հետևյալ կերպ՝

$$\mathbf{c}_1 = \frac{1}{2}(-\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3), \mathbf{c}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3), \mathbf{c}_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3): \quad (3.3)$$

(3.3) բանաձևերից $\mathbf{a}_i$ վեկտորներն արտահայտելով $\mathbf{c}_i$ վեկտորների ($i=1,2,3$) միջոցով՝

$$\mathbf{a}_1 = \mathbf{c}_2 + \mathbf{c}_3, \quad \mathbf{a}_2 = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_3, \quad \mathbf{a}_3 = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2, \quad (3.4)$$

և դրանք տեղադրելով (3.1) և (3.2) բանաձևերում՝ կստանանք՝

$$\mathbf{l}_A = (l_2 + l_3) \mathbf{c}_1 + (l_3 + l_1) \mathbf{c}_2 + (l_1 + l_2) \mathbf{c}_3, \quad (3.5)$$

$$\mathbf{l}_B = (l_2 + l_3 + 1) \mathbf{c}_1 + (l_3 + l_1 + 1) \mathbf{c}_2 + (l_1 + l_2 + 1) \mathbf{c}_3: \quad (3.6)$$

Քանի որ l_1 -ը, l_2 -ը և l_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են, ապա (3.5) և (3.6) վեկտորները կարելի է ներկայացնել $\mathbf{l} = n_1 \mathbf{c}_1 + n_2 \mathbf{c}_2 + n_3 \mathbf{c}_3$ վեկտորով, որտեղ n_1 -ը, n_2 -ը և n_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են:

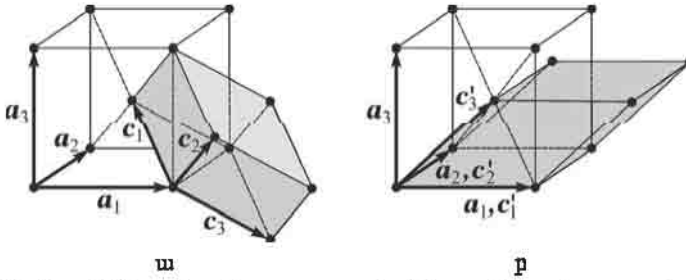
Նոր՝ $\mathbf{c}_1$, $\mathbf{c}_2$ և $\mathbf{c}_3$ վեկտորներով կառուցված գուգահեռանիստին բաժին է ընկնում մեկ հանգույց (նկ. 5. ա):

Եթե $n_1 + n_2 + n_3$ գումարը գույգ է, ապա $\mathbf{l}$ վեկտորը ներկայացնում է խորանարդի A գագաթը՝ $\mathbf{l} = \mathbf{l}_A$, $n_1 + n_2 + n_3 = 2(l_1 + l_2 + l_3)$, իսկ եթե այն կենտ է՝ խորանարդի B կենտրոնը՝ $\mathbf{l} = \mathbf{l}_B$, $n_1 + n_2 + n_3 = 2(l_1 + l_2 + l_3) + 3$:

Հարկ է նշել, որ հիմնական վեկտորներ կարելի է ներմուծել նաև (3.3) բանաձևերից տարբեր այլ առնչություններով: Օրինակ՝

$$\mathbf{c}'_1 = \mathbf{a}_1, \quad \mathbf{c}'_2 = \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{c}'_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3) \quad (3.8)$$

հիմնական վեկտորներով կառուցված գուգահեռանիստին նույնպես բաժին է ընկնում մեկ հանգույց (նկ. 5. բ):



Նկ. 5. Շախարակենտրոն ցանց. ա. տարրական խորանարդը և տարրական բջիջը, բ. հիմնական վեկտորների ընտրության մեկ այլ տարբերակ

Նկ. 5-ում պատկերված են տարրական խորանարդը և տարրական բջիջը հիմնական վեկտորների (3.3) և (3.8) բանաձևերով ներկայացված դեպքերում:

Համոզվենք, որ (3.3) և (3.8) բանաձևերով որոշվող հիմնական վեկտորների միջև կապերն ունեն ամբողջ α_{ik} և β_{ik} գործակիցներ, որոնցից կազմված մատրիցների որոշիչները հավասար են 1-ի:

Եթե (3.3) և (3.8) բանաձևերից արտաքսենք a_1 , a_2 և a_3 վեկտորները, կստանանք՝

$$c'_1 = c_2 + c_3, \quad c'_2 = c_1 + c_3, \quad c'_3 = c_1 + c_2 + c_3 : \quad (3.9)$$

(3.9) արտահայտությունները ներկայացնելով (2.1) տեսքով՝ ձևափոխության α_{ik} գործակիցների և $\|\alpha_{ik}\|$ մատրիցի որոշիչի համար կստանանք՝

$$\begin{aligned} \alpha_{11} &= 0, & \alpha_{12} &= 1, & \alpha_{13} &= 1, \\ \alpha_{21} &= 1, & \alpha_{22} &= 0, & \alpha_{23} &= 1, \\ \alpha_{31} &= 1, & \alpha_{32} &= 1, & \alpha_{33} &= 1, \end{aligned} \quad \det \alpha_{ik} = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 1 : \quad (3.10)$$

Եթե c_1 , c_2 և c_3 վեկտորներն արտահայտենք c'_1 , c'_2 և c'_3 վեկտորներով՝

$$c_1 = -c'_1 + c'_3, \quad c_2 = -c'_2 + c'_3, \quad c_3 = c'_1 + c'_2 - c'_3, \quad (3.11)$$

ապա (2.2) բանաձևում ձևափոխության β_{ik} գործակիցների և $\|\beta_{ik}\|$ մատրիցի որոշիչի համար կստանանք՝

$$\begin{aligned} \beta_{11} &= -1, & \beta_{12} &= 0, & \beta_{13} &= 1, \\ \beta_{21} &= 0, & \beta_{22} &= -1, & \beta_{23} &= 1, \\ \beta_{31} &= 1, & \beta_{32} &= 1, & \beta_{33} &= -1, \end{aligned} \quad \det \beta_{ik} = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = 1: \quad (3.12)$$

Որոշենք (3.3) և (3.8) բանաձևերով տրվող հիմնական վեկտորներով կառուցված տարրական բջիջների ծավալները: (2.6) բանաձևի համաձայն՝

$$v_0 = (\mathbf{c}_1[\mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3]) = \begin{vmatrix} c_{1x} & c_{1y} & c_{1z} \\ c_{2x} & c_{2y} & c_{2z} \\ c_{3x} & c_{3y} & c_{3z} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2}: \quad (3.13)$$

Նույն ձևով կատանանք, որ

$$\mathbf{v}'_0 = (\mathbf{c}'_1[\mathbf{c}'_2, \mathbf{c}'_3]) = \begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2} = v_0: \quad (3.14)$$

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

3.3. Նիստակենտրոն խորանարդային (ՆԿՆ) ցանց

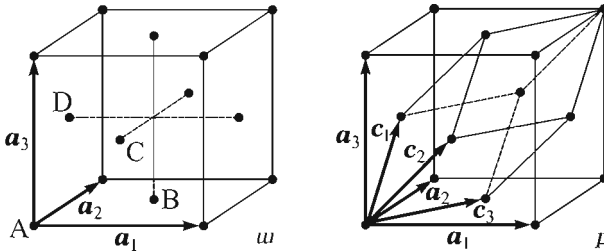
Այս ցանցն ստանալու համար պարզ խորանարդային ցանցի յուրաքանչյուր միստի կենտրոնում տեղադրենք մեկ հանգույց: Ցանցի տարրական խորանարդը պարունակում է 4 հանգույց ($6 \times 1/2 = 3$ հանգույց՝ ի հաշիվ միստերի և $8 \times 1/8 = 1$ հանգույց՝ ի հաշիվ գագաթների) և ունի a^3 ծավալ (նկ. 6. ա):

Նշանակենք $\mathbf{l}_A$ -ով, $\mathbf{l}_B$ -ով, $\mathbf{l}_C$ -ով և $\mathbf{l}_D$ -ով համապատասխանաբար խորանարդի գագաթներում և միստերի կենտրոններում տեղադրված հանգույցների դիրքերը որոշող վեկտորները՝

$$\begin{aligned}
\mathbf{l}_A &= l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3, \\
\mathbf{l}_B &= \left(l_1 + \frac{1}{2}\right) \mathbf{a}_1 + \left(l_2 + \frac{1}{2}\right) \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 = \mathbf{l}_A + \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2}{2}, \\
\mathbf{l}_C &= \left(l_1 + \frac{1}{2}\right) \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + \left(l_3 + \frac{1}{2}\right) \mathbf{a}_3 = \mathbf{l}_A + \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3}{2}, \\
\mathbf{l}_D &= l_1 \mathbf{a}_1 + \left(l_2 + \frac{1}{2}\right) \mathbf{a}_2 + \left(l_3 + \frac{1}{2}\right) \mathbf{a}_3 = \mathbf{l}_A + \frac{\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3}{2}.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Այժմ ներմուծենք նոր հիմնական վեկտորներ, որոնք $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ վեկտորների հետ կապված են հետևյալ կերպ՝ (նկ. 6. ք)

$$\mathbf{c}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3), \quad \mathbf{c}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1), \quad \mathbf{c}_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2): \tag{3.16}$$



Նկ. 6. Նխատակենորոն ցանց.
ա. տարրական խորանարդը, բ. տարրական բջիջը

Դժվար չէ համոզվել, որ $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3$ հիմնական վեկտորներով արտահայտված $\mathbf{l}_A, \mathbf{l}_B, \mathbf{l}_C$ և $\mathbf{l}_D$ վեկտորները կարելի է ներկայացնել միասնական տեսքով՝

$$\mathbf{l} = n_1 \mathbf{c}_1 + n_2 \mathbf{c}_2 + n_3 \mathbf{c}_3, \tag{3.17}$$

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

Ներմուծենք $(n_i, n_k) n_j$ նշանակումը, որտեղ փակագծերում գրված թվերն ունեն նույն զույգությունը, իսկ փակագծերից դուրս գրվածները՝ հակառակ զույգությունը: Այդ դեպքում (3.17) բանաձևը ներկայացնում է $\mathbf{l}_A$ վեկտորը, եթե (n_1, n_2, n_3) , $\mathbf{l}_B$ վեկտորը, եթե $(n_1, n_2) n_3$, $\mathbf{l}_C$ վեկտորը, եթե $(n_1, n_3) n_2$, և $\mathbf{l}_D$ վեկտորը, եթե $(n_2, n_3) n_1$:

Օգտվելով (3.16) բանաձևերից՝ հաշվենք նոր հիմնական վեկտորներով կազմված տարրական բջջի ծավալը.

$$v'_0 = (c_1[c_2, c_3]) = \frac{a^3}{8} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4}, \quad (3.18)$$

որը չորս անգամ փոքր է տարրական խորանարդի ծավալից:

Այսպիսով՝ տարրական բջջին բաժին է ընկնում մեկ հանգույց, հետևաբար՝ նիստակենտրոն խորանարդային ցանցը պարզ ցանց է:

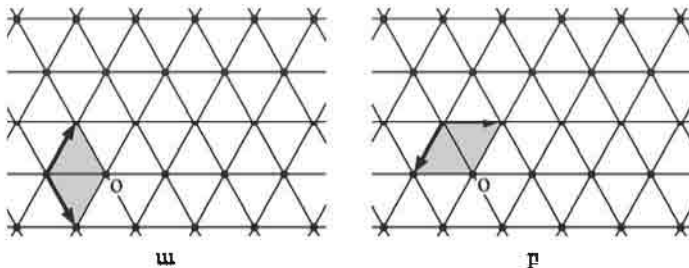
Պարզ և բարդ ցանցերի միջև առաջին հայացքից ձևական թվացող տարբերությունն իրականում հանգեցնում է բյուրեղների ֆիզիկական հատկությունների էական որակական տարբերությունների: Մասնավորապես, բարդ ցանցի տատանումների սպեկտրն ունի օպտիկական ճյուղեր, որոնցից գուրկ է պարզ ցանցի տատանումների սպեկտրը (տես գլուխ III):

§4. Վիզներ-Ջեյտցի բջիջ

Բացի տեղափոխական համաչափությունից՝ տարածական ցանցն օժտված է համաչափության մաս ալ տարրերով, որոնց կիրառման դեպքում ցանցը համընկնում է ինքն իր հետ: Դրանց թվին են պատկանում համաչափության առանցքների շուրջ պտույտները և համաչափության հարթություններում անդրադարձումները: Բոլոր պտույտների և անդրադարձումների համախումբը կազմում է տարածական ցանցի կետային ձևափոխությունների խումբը:

Տարրական բջիջն իր մեջ պարունակում է բյուրեղի տեղափոխական համաչափության բոլոր տարրերը: Ունենալով տարրական բջիջ՝ կարելի է տարածության մեջ նրա կրկնությամբ կառուցել ամբողջ բյուրեղը, սակայն որպես երկրաչափական մարմին այն օժտված չէ ցանցի կետային ձևափոխությունների խմբին պատկանող համաչափության տարրերով:

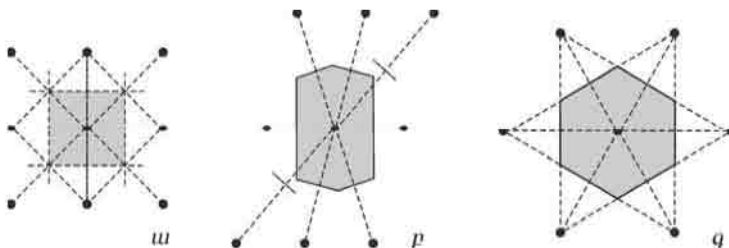
Օրինակ՝ նկ. 7-ում պատկերված երկչափ վեցանկյուն (հեքսագոնալ) ցանցն ունի 6-րդ կարգի համաչափության առանցք, այսինքն՝ ցանցը որևէ հանգույցով անցնող և հարթությանն ուղղահայաց առանցքի շուրջը 60° -ով պտտելիս համընկնում է իր հետ, իսկ այդ ցանցի տարրական բջիջը (ընդգծված շեղանկյունը) չունի այդպիսի առանցք:



Նկ. 7. Երկչափ վեցանկյուն ցանց. ա. միջև պատույթը, բ. O կետով անցնող առանցքի շուրջը 60° -ով պտտելուց հետո

Մակայն պարզ ցանցում միշտ կարելի է ընտրել այնպիսի տարրական բջիջ, որն իր մեջ պարունակի ցանցի համաչափության առանցքների և հարթությունների մասին ամբողջ տեղեկատվությունը: 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 մույն գործողությունը կատարենք մնացած հարևան հանգույցների հետ: Ստացված հարթությունների համախումբը որպես կենտրոն ընտրված հանգույցի շուրջը կառանձնացնի տարածության որոշակի տիրույթ, որը կոչվում է համաչափ բջիջ կամ Վիզներ-Ջեյտցի բջիջ:

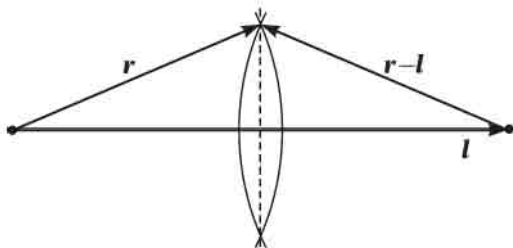
Ըստ կառուցման՝ Վիզներ-Ջեյտցի բջիջն այն բոլոր կետերի համախումբն է, որոնք ավելի մոտ են ընտրված կենտրոն-հանգույցին, քան մնացած հանգույցներին: Նկ. 8-ում պատկերված են մի քանի երկչափ ցանցերի Վիզներ-Ջեյտցի բջիջները:



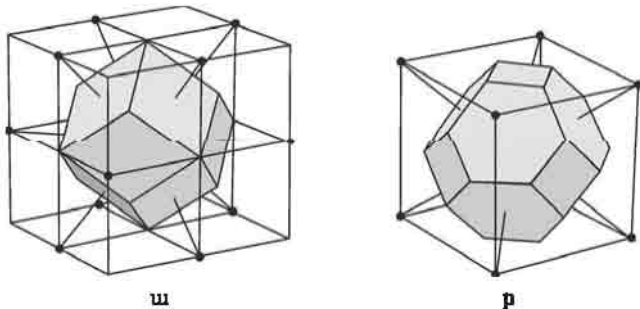
Նկ. 8. Մի քանի երկչափ ցանցերի Վիզներ-Ջեյտցի բջիջները. ա. քառակուսային ցանց, բ. շեղանկյուն ցանց, գ. վեցանկյուն ցանց

Ի տարբերություն ցանցի տարրական բջջի՝ Վիգներ-Ջեյտցի բջիջը եռաչափ ցանցում ընդհանուր դեպքում զուգահեռանիստ չէ, այլ բազմանիստ, որի կենտրոնում հանգույցն է։ Սակայն ամենակարևորն այն է, որ Վիգներ-Ջեյտցի բջիջը որպես երկրաչափական մարմին օժտված է ցանցի կետային ձևափոխությունների խմբի համաչափության բոլոր տարրերով։

Վիգներ-Ջեյտցի բջջի յուրաքանչյուր նիստի հարթություն որոշվում է $|\mathbf{r}| = |\mathbf{r} - \mathbf{l}|$ հավասարումով, որտեղ $\mathbf{r}$ -ը նիստի հարթության որևէ կետի շառավիղ-վեկտորն է բջջի կենտրոնի նկատմամբ, $\mathbf{l}$ -ը՝ մոտակա հանգույցի դիրքը որոշող վեկտորը (նկ. 9)։ Տրված հավասարումից հետևում է, որ նիստի հարթությունը որոշվում է երկու հարևան կետերում տեղադրված կենտրոններով և հավասար շառավիղներով գնդերի հատումով։



Նկ. 9. Վիգներ-Ջեյտցի բջջի մի նիստի կառուցումը



Նկ. 10. ա. Նիստակենտրոն, բ. ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցերի Վիգներ-Ջեյտցի բջիջները

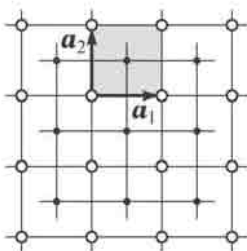
Նկ. 10. ա-ում պատկերված է նիստակենտրոն խորանարդային ցանցի Վիգներ-Ջեյտցի բջիջը, որն իրենից ներկայացնում է շեղանկյուն տասներկուսանիստ (դոդեկաէդր), իսկ նկ. 10. բ-ում՝ ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցինը, որը տասնչորսանիստ է («ժառված ութանիստ»)։

§5. Բրավեի ցանց: Բյուրեղային համակարգեր

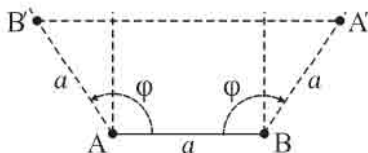
Բրավեի ցանց անվանում են բյուրեղի բոլոր իրար համարժեք հանգույցների համախումբը, որը տրվում է (1.1) արտահայտությամբ: Պարզ ցանցի Բրավեի ցանցը հենց նրա տարածական ցանցն է: Բարդ ցանցը բաղկացած է իրար մեջ ներդրված Բրավեի ցանցերից, ընդ որում՝ բոլոր ցանցերը, որոնցից բաղկացած է բարդ ցանցը, երկրաչափորեն մույնական են (նկ. 11):

Բրավեի ցանցերի դասակարգումը կատարվում է ըստ կետային խմբի համաչափության տարրերի, ուստի ուսումնասիրենք Բրավեի ցանցերի համաչափության բոլոր հմարավոր տեսակները:

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



Նկ. 11. Բարդ ցանցը որպես երկու պարզ ցանցերի համադրում



Նկ. 12. Բրավեի ցանցի պատկան համաչափության առանցքների որոշումը

Դիցուք՝ A-ն Բրավեի ցանցի որևէ հանգույց է, որով անցնում է նկ. 12-ի հարթությանն ուղղահայաց համաչափության առանցք: Եթե B-ն մույնպես ցանցի հանգույց է, որն A հանգույցից հեռու է տեղափոխման որևէ վեկտորի չափով, ապա նրանով մույնպես կանցնի համաչափության առանցք:

Ցանցը ϕ անկյունով պտտենք A հանգույցով անցնող առանցքի շուրջը: B կետը կգրավի նոր՝ B' դիրք: Նման ձևով պտույտը B հանգույցով անցնող առանցքի շուրջը կբերի A հանգույցի նոր՝ A' դիրքի (նկ. 12): Ըստ ենթադրության՝ A' և B' հանգույցները պատկանում են Բրավեի մույն ցանցին,

հետևաբար՝ դրանք կարելի է համընկեցնել զուգահեռ տեղափոխությամբ: Նկ. 12-ից հետևում է, որ

$$B'A' = ap = AB + 2a \sin\left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right), \quad (5.1)$$

որտեղ p -ն ամբողջ թիվ է: (5.1) արտահայտությունից հետևում է, որ

$$2 \cos \varphi = 1 - p: \quad (5.2)$$

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

Եթե φ անկյունը ներկայացնենք

$$\varphi = \frac{2\pi}{n} \quad (5.3)$$

տեսքով, ապա n -ի համար կստանանք հետևյալ արժեքները՝ $n = 6, 4, 3, 2$: Այսպիսով՝ Բրավեի ցանցն ունի միայն 2-րդ, 3-րդ, 4-րդ և 6-րդ կարգի համաչափության (պտտական) առանցքներ:

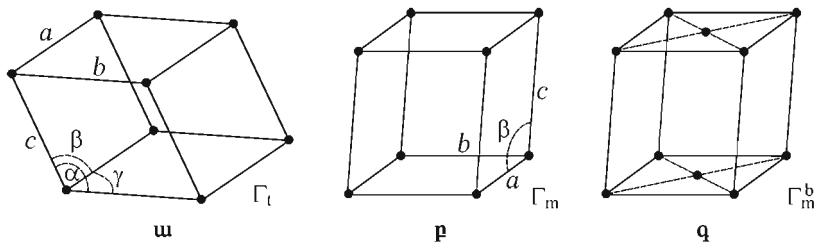
Այժմ ուսումնասիրենք Բրավեի համաչափության հնարավոր տեսակները պտույտների և անդրադարձումների նկատմամբ: Համաչափության այս տեսակների համախումբը կրում է բյուրեղային համակարգ (սինգոնիա) անվանումը: Բյուրեղային համակարգը որոշակի առանցքների և համաչափության հարթությունների համախումբ է, այսինքն՝ կետային խմբերից մեկն է: Բրավեի ցանցի յուրաքանչյուր հանգույց նրա համաչափության (ինվերսիայի) կենտրոնն է: Եթե համաչափության կենտրոնը Բրավեի ցանցի համաչափության միակ տարրն է (տեղափոխություններից բացի), տարբերում են համաչափության հետևյալ համակարգերը.

1. *Եռաթեք (տրիկլինային) համակարգ* (նկ. 13. ա)

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

2. *Միաթեք (մոնոկլինային) համակարգ* (նկ. 13. բ, գ)

Այս համակարգի համաչափությունն ունի կամայական հիմքով ուղիղ զուգահեռանիստը ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$): Բրավեի ցանցն իրականացվում է երկու եղանակով.



Նկ. 13. ա. Եռաթեք, բ, գ. միաթեք համակարգերին պատկանող ցանցերը

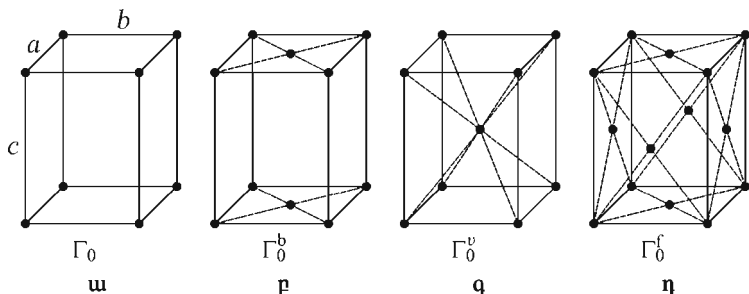
ա. Բրավեի պարզ միաթեք ցանց (Γ_m), որի հանգույցները տեղադրված են ուղղանկյուն միատերի զագաթներում,

բ. միստակենտրոն միաթեք ցանց (Γ_m^b), որի հանգույցները տեղադրված են մաս զուգահեռանիստի (ab) հանդիպակաց ուղղանկյուն միատերի կենտրոններում:

3. Ուղղանկյուն (ռոմբական) համակարգ (նկ. 14)

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

Այս համակարգին են պատկանում չորս տիպի Բրավեի ցանցեր.



Նկ. 14. Ուղղանկյուն համակարգին պատկանող ցանցերը

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

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

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

դ) միատակենտրոն ցանց (Γ_0^f), որի հանգույցները տեղադրված են զուգահեռանիստի գագաթներում և բոլոր միատերի կենտրոններում:

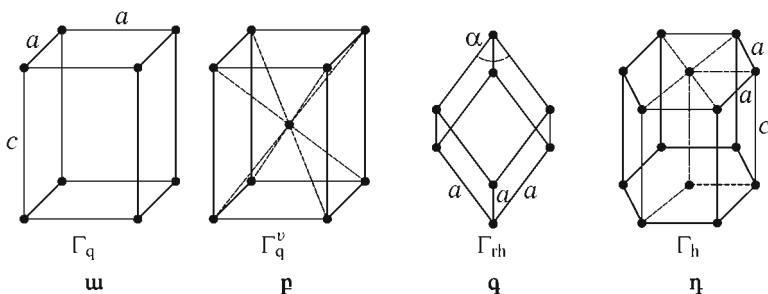
4. **Քառանկյուն (տետրագոնալ) համակարգ** (նկ. 15. ա, բ)

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

Բրավեի ցանցն իրականացվում է երկու ձևով.

ա. պարզ քառանկյուն ցանց (Γ_q), երբ հանգույցները տեղադրված են զուգահեռանիստի գագաթներում,

բ. ծավալակենտրոն ցանց (Γ_q^v), երբ հանգույցները տեղադրված են նաև զուգահեռանիստի կենտրոնում:



Նկ. 15. ա, բ. Քառանկյուն, գ, դ. եռանկյուն համակարգերին պատկանող ցանցերը

5. **Եռանկյուն (ռոմբոէդրական կամ տրիգոնալ) համակարգ** (նկ. 15. գ, դ)

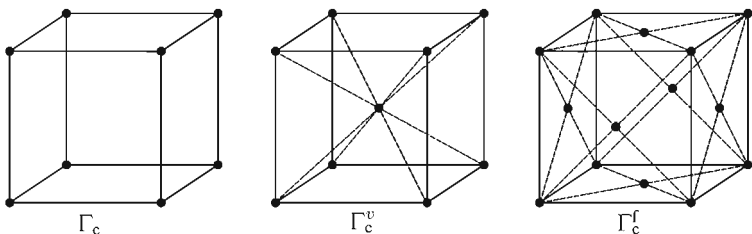
Բնորոշվում է շեղանկյունանիստի (տարածական անկյունագծի ուղղությամբ ձգված կամ սեղմված խորանարդի) համաչափությամբ ($a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$): Բրավեի ցանցը (Γ_{rh}) իրականացվում է միակ ձևով՝ հանգույցները տեղադրվում են շեղանկյունանիստի գագաթներում:

6. **Վեցանկյուն (հեքսագոնալ) համակարգ** (նկ. 15. դ)

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:

7. Խորանարդային համակարգ (նկ. 16)

Այս համակարգը բնորոշվում է խորանարդի համաչափությամբ և ունի երեք տիպի Բրավեի ցանցեր՝ պարզ (Γ_c), ծավալակենտրոն (Γ_c^v) և նիստակենտրոն (Γ_c^f) :



Նկ. 16. Խորանարդային համակարգին պատկանող ցանցերը

Այսպիսով՝ գոյություն ունեն յոթ տարբեր կետային խմբեր, որոնք կարող է ունենալ Բրավեի ցանցը: Նկատի ունենալով յուրաքանչյուր բյուրեղային համակարգում Բրավեի հնարավոր ցանցերի թիվը (1 եռաթեք, 2 միաթեք, 4 ուղղանկյուն, 2 քառանկյուն, 1 եռանկյուն, 1 վեցանկյուն և 3 խորանարդային), կստանանք Բրավեի ցանցերի լրիվ թիվը՝ 14: Բրավեի ցանցերը կազմում են համաչափության լրիվ տարածական խումբ, որը պարունակում է տարածական ցանցի ինչպես կետային, այնպես էլ տեղափոխական համաչափության բոլոր տարրերը:

Ուսումնասիրված 7 բյուրեղային համակարգերը և Բրավեի 14 ցանցերը համապատասխանում են այն դեպքին, երբ ցանցի բազիսն օժտված է առավելագույն՝ զնդային համաչափությամբ (Բրավեի ցանցի հանգույցներում տեղադրված են գնդեր): Կամայական բյուրեղային կառուցվածքի համաչափության խումբը կախված է ինչպես բազիսի, այնպես էլ Բրավեի ցանցի համաչափությունից: Համաձայն Ե. Ֆյոդորովի՝ գոյություն ունեն բազիսով ցանցերի 230 տարբեր համաչափության խմբեր՝ 230 տարածական խմբեր, որոնք բաշխված են 32 բյուրեղագրական կետային խմբերի (դասերի) միջև: 32 բյուրեղագրական կետային խմբերը կարելի է ստանալ 7 բյուրեղային համակարգերից՝ քննարկելով Բրավեի ցանցի համաչափության նվազեցման բոլոր հնարավոր եղանակները: Աղյուսակ 1-ում ներկայացված են Բրավեի ցանցերի և բյուրեղային կառուցվածքների բյուրեղագրական կետային և տարածական խմբերը:

**Բրավեի ցանցերի և բյուրեղային կառուցվածքների
կետային և տարածական խմբերը**

	Բրավեի ցանց (գնդային համաչափությամբ բազիս)	Բյուրեղային կառուցվածք (կամայական համաչափությամբ բազիս)
Կետային խմբերի թիվը	7 բյուրեղային համակարգեր	32 բյուրեղագրական կետային խմբեր
Տարածական խմբերի թիվը	14 Բրավեի ցանցեր	230 բյուրեղագրական տարածական խմբեր

Բյուրեղագրական կետային խումբը, որը բյուրեղի համաչափության առանցքների և հարթությունների համախումբն է և կապված չէ տեղափոխությունների հետ, որոշում է բյուրեղում ֆիզիկական համարժեք ուղղությունները և դրանով իսկ անհիգուտրոպ հոծ միջավայրի մակրոսկոպական համաչափությունը: Այս համաչափությամբ որոշվում են այնպիսի ֆիզիկական երևույթներ, ինչպիսիք են, օրինակ, լույսի տարածումը բյուրեղում, բյուրեղի ջերմային ընդարձակումը, ինչպես նաև բյուրեղների այլ ֆիզիկական հատկությունները:

§6. Կարևոր բյուրեղային կառուցվածքներ

Ծանոթանանք մի քանի տարածված բյուրեղային կառուցվածքների, որոնք մեծ հետաքրքրություն են ներկայացնում ինչպես փորձարարական, այնպես էլ տեսական հետազոտությունների տեսանկյունից:

6.1. Պարզագույն բյուրեղային կառուցվածքների՝ *պարզ, ծավալակենտրոն և նիստակենտրոն խորանարդային* ցանցերի հետ ծանոթացել ենք §3-ում: Հարկ է ավելացնել, որ նորմալ պայմաններում միատարր նյութերից պարզ խորանարդային կառուցվածք ունի միայն ալֆա-պղնին (α-Քո) բյուրեղը: Ծավալակենտրոն և նիստակենտրոն խորանարդային կառուցվածքով միատարր բյուրեղները ներկայացված են համապատասխանաբար Աղյուսակ 2-ում և Աղյուսակ 3-ում:

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

Աղյուսակ 2.

Ծեփեր կառուցվածքով միատարր բյուրեղներ

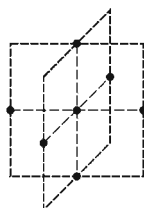
Տարր	a , Å	Տարր	a , Å	Տարր	a , Å
Ba	5,02	Li	3,49 (78 Կ)	Ta	3,31
Cr	2,88	Mo	3,15	V	3,02
Cs	6,05 (78 Կ)	Na	4,23	W	3,16
K	5,23 (5 Կ)	Nb	3,30	Fe	2,87

Աղյուսակ 3.

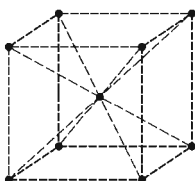
Նեփեր կառուցվածքով միատարր բյուրեղներ

Տարր	a , Å	Տարր	a , Å	Տարր	a , Å
Ar	5,26 (4,2 Կ)	Ir	3,84	Pt	3,92
Ag	4,09	Kr	5,72 (58 Կ)	δ-Pu	4,64
Al	4,05	La	5,30	Rh	3,80
Au	4,08	Ne	4,43 (4,2 Կ)	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

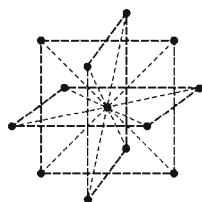
Բյուրեղային ցանցի կարևոր բնութագիր է կոորդինացիոն թիվը՝ տվյալ հանգույցին ամենամոտ հարևանների (հանգույցների) թիվը, որը սովորաբար նշանակում են z -ով: Պարզ ցանցում z -ը միևնույնն է ցանցի բոլոր հանգույցների համար: Պարզ խորանարդային ցանցում $z = 6$, և կոորդինացիոն խմբի ատոմների հեռավորությունը տվյալ հանգույցից՝ $d = a$, որտեղ a -ն ցանցի հաստատունն է (խորանարդի կողը): Ծավալակենտրոն ցանցում $z = 8$, $d = a\sqrt{3}/2$, իսկ նիստակենտրոն ցանցում՝ $z = 12$, $d = a\sqrt{2}/2$ (նկ. 17):



$z = 6$



$z = 8$

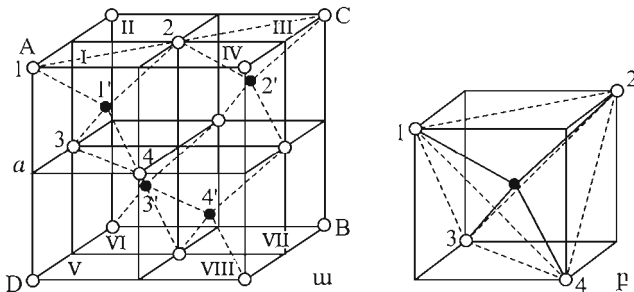


$z = 12$

Նկ. 17. Խորանարդային պարզ, ծավալակենտրոն և նիստակենտրոն ցանցերի կոորդինացիոն թվերը

6.2. Ալմաստի կառուցվածք

Ալմաստի ցանցը կարելի է ներկայացնել որպես իրար նկատմամբ խորանարդի տարածական անկյունագծի մեկ քառորդի չափով շեղված երկու միաստակենտրոն խորանարդային ցանցերի վերադրման արդյունք (նկ. 18):



Նկ. 18. ա. Ալմաստի կառուցվածք, բ. կապերի քառանիստ դասավորությունը

Իրոք, եթե լուսավոր գնդիկներով միաստակենտրոն ցանցը AB անկյունագծով տեղաշարժենք $AB/4$ -ով, ապա 1 ատոմը կգտնվի $1'$ ատոմի տեղը, 2 ատոմը՝ $2'$ -ի, 3-ը՝ $3'$ -ի և 4-ը՝ $4'$ -ի տեղը: Քանի որ միաստակենտրոն խորանարդային ցանցը Բրավեի տիպի ցանց է, ապա ալմաստի ցանցում կարելի է ընտրել տարրական բջիջ, որը պարունակում է երկու ատոմ (բազիսը կազմող ատոմների կոորդինատներն են՝ 000 և $a/4, a/4, a/4$): Յուրաքանչյուր ատոմ ունի 4 ամենամոտ հարևաններ ($z = 4$) կապերի քառանիստային դասավորությամբ (նկ. 18. բ.):

Նկ. 18. ա-ում պատկերված խորանարդային բջիջը բաղկացած է 18 ատոմներից, որոնց դասավորությունը պատկերացնելու համար միաստակենտրոն խորանարդը բաժանված է ութ միատեսակ խորանարդների (նկ. 18. ա, I-VIII):

Ատոմներ դնելով I, III (վերին շերտ) և VI, VIII (ներքին շերտ) խորանարդների կենտրոններում՝ կստանանք նկ. 18. բ-ում պատկերված քառանիստը պարունակող չորս խորանարդները, իսկ I և III խորանարդների տակ տեղադրելով V և VII «զատարկ» խորանարդները՝ կստանանք նկ. 18 ա.-ում պատկերված ալմաստի կառուցվածքը: Հաշվենք խորանարդում հանգույցների թիվը՝ $8 \times (1/8) + 6 \times (1/2) + 4 = 8$: Նկ. 18. ա-ում պատկերված խորանարդն օժտված չէ խորանարդի համաչափության բոլոր տարրերով: Օրինակ՝ ուղ-

դածիզ առանցքի շուրջը 90°-ով պտտելիս հանգույցներն իրար հետ չեն համընկնում: Այսուհանդերձ, իր մակրոսկոպական հատկություններով ավաստի բյուրեղն օժտված է խորանարդային համաչափությամբ: Ավաստի կառուցվածքով բյուրեղացող տարրերը ներկայացված են Աղյուսակ 4-ում:

Աղյուսակ 4.
Ավաստի կառուցվածքով միատարր բյուրեղներ

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

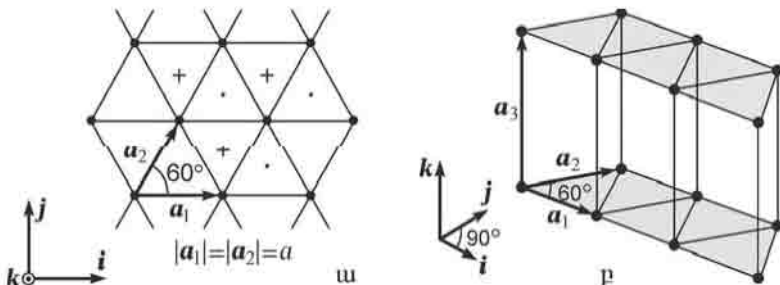
6.3. Վեցանկյուն խիտ դարսվածքով կառուցվածք

Վեցանկյուն խիտ դարսվածքով (ՎԽԴ) կառուցվածքի հիմքում ընկած է Բրավեի պարզ վեցանկյուն ցանցը, որն ստացվում է հարթ (երկչափ) եռանկյունային ցանցերն իրար վրա դարսելու միջոցով: Դարսման ուղղությունն անվանում են *c*-առանցք: Հիմնական վեկտորների եռյակը հետևյալն է՝ (նկ.19. ա)

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\mathbf{j}, \quad \mathbf{a}_3 = c\mathbf{k}, \quad (6.1)$$

որտեղ $\mathbf{i}$ -ն, $\mathbf{j}$ -ն և $\mathbf{k}$ -ն միավոր վեկտորներ են ուղղանկյուն կոորդինատային համակարգում: $\mathbf{a}_1$ և $\mathbf{a}_2$ վեկտորները ծնում են եռանկյուն ցանց *xy* հարթությամբ մեջ, իսկ $\mathbf{a}_3$ -ը «դարսում» է ցանցը ցանցի վրա *c* հեռավորությամբ:

Վեցանկյուն խիտ դարսվածքը կազմված է երկու պարզ վեցանկյուն ցանցերից, որոնք իրար նկատմամբ տեղաշարժված են $\mathbf{d} \equiv (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/3 + \mathbf{a}_3/2$ վեկտորով (նկ. 20): Նման կառուցվածք կարելի է ստեղծել *a* տրամագծով կոշտ գնդերի խիտ դարսվածքի օգնությամբ հետևյալ ձևով. գնդերի առաջին շերտը դարսվում է եռանկյուն խիտ դարսվածքով, երկրորդ շերտի գնդերը դարսվում են առաջին շերտի գնդերով կազմված եռանկյունների կենտրոններում (նկ. 19. ա, փոքր կետերը): Երկրորդ շերտն առաջին շերտի նկատմամբ շեղվում է $|\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2|/3 = a/\sqrt{3}$ չափով:



Նկ. 19. Վեցանկյուն պարզ ցանց.
ա. հիմքի հարթությունը, բ. տարրական բջիջը

Երրորդ շերտը կազմում են՝ գնդերը տեղադրելով երկրորդ շերտի փոսիկների մեջ այնպես, որ դրանք լինեն հենց առաջին շերտի գնդերի կենտրոնների վրա: Գործող շերտը դարձվում է երկրորդ շերտի նման և այլն: Այս ձևով ստացվում է վեցանկյուն խիտ դարավածքով ցանց $|a_3| = c$ -ի խիստ որոշակի արժեքով՝

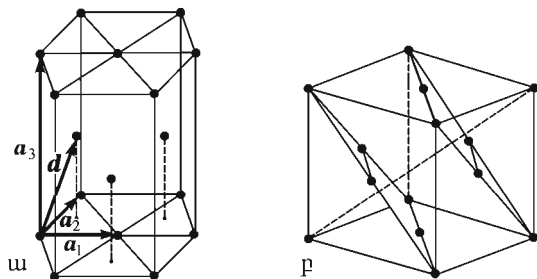
$$c = \sqrt{\frac{8}{3}} a \approx 1,633a : \quad (6.2)$$

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

Ինչպես և ավաատի ցանցը, վեցանկյուն խիտ դարավածքով ցանցը Բրավեի ցանց չէ, քանի որ c -առանցքով շերտից շերտ անցնելիս փոխվում է հանգույցի շրջապատի կողմնորոշումը:

Հնարավոր են կոշտ գնդերի խիտ դարավածքի բազմաթիվ այլ եղանակներ: Օրինակ, եթե գնդերի III շերտը դասավորենք այնպես, որ գնդերը տեղակայվեն Լ՝ I, Լ՝ II շերտերում «չօգտագործված» փոսիկների վրա ընկած փոսիկներում, որոնց նկ. 19. ա-ում համապատասխանում են + նշանները, ապա IV շերտը կտեղադրվի III շերտի փոսիկներում միշտ I շերտի գնդերի վրա, V շերտը՝ II շերտի վրա և այլն: Այս կերպ ստացված ցանցը Բրավեի միատակենտրոն ցանց է խորանարդի տարածական անկյունագծով՝ ուղղահայաց դարձան շերտերին (նկ. 20. բ): Շերտերի հաջորդականությունը վեցանկյուն խիտ դարավածքում կարելի է պատկերել հետևյալ կերպ՝ ABABABAB..., իսկ միատակենտրոն խորանարդային ցանցի դեպքում՝ ABCABCABC...: Հայտնի են խիտ դարավածքով նաև այլ տեսակի կա-

ռուցվածքներ: Օրինակ՝ որոշ հազվագյուտ հողային մետաղներ ունեն ABACABACABAC... տիպի կառուցվածք: Վեցանկյուն խիտ դարսվածքի համար կոորդինացիոն թիվը՝ $z=12$: Աղյուսակ 5-ում ներկայացված են վեցանկյուն խիտ դարսվածքով միատարր բյուրեղները:



Նկ. 20. ա. Վեցանկյուն խիտ դարսվածք, բ. Բրավեի միատակենտրոն ցանց

Աղյուսակ 5.
Վեցանկյուն խիտ դարսվածքով միատարր բյուրեղներ

Տարր	a , Å	c	c/a	Տարր	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 (2ψ)	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

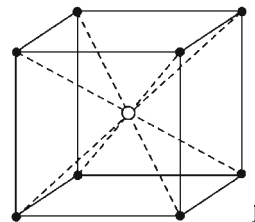
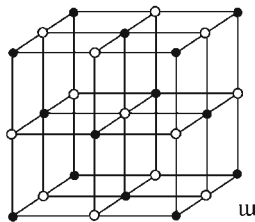
6.4 Նատրիումի քլորիդի կառուցվածք

Բազիսով ցանց հարկավոր է օգտագործել մաս այնպիսի բյուրեղային կառուցվածքներ նկարագրելիս, որոնցում ատոմները (իոնները) միայն Բրավեի ցանցի հանգույցներում են, 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 այնպես, որ տվյալ իոնի ամենամոտ հարևանները մյուս տեսակի 6 իոններն են (նկ. 21): Առանձին-առանձին նատրիումի և քլորի իոնները կազմում են միատակենտրոն խորանարդային ցանցեր, որոնք իրար նկատմամբ շեղված են խորանարդի տարածական անկյունագծի կեսի չափով: Այսպիսի կառուցվածքը կարելի է նկարագրել որպես Բրավեի միատակենտրոն ցանց՝ բազիսով, որը կազմված է (000) կետում տեղադրված նատրիումի իոնից և $(i + j + k)a/2$ կետում տեղադրված քլորի իոնից:

Աղյուսակ 6-ում ներկայացված են նատրիումի քլորիդի կառուցվածքով որոշ բյուրեղներ:

Աղյուսակ 6.
Նատրիումի քլորիդի կառուցվածքով բյուրեղներ

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



Նկ. 21. ա. Նատրիումի քլորիդի կառուցվածք,
բ. ցեզիումի քլորիդի կառուցվածք

6.5. Ցեզիումի քլորիդի կառուցվածք

Բաղկացած է ցեզիումի և քլորի իոններից, որոնք տեղադրված են խորանարդի գագաթներում և կենտրոնում, այնպես, որ ամեն մի իոն ունի ութ ամենամոտ հարևաններ՝ հակառակ ուղղության լիցքով (նկ. 21. բ): Այս կառուցվածքը կարելի է նկարագրել որպես Բրավեի պարզ խորանարդային ցանց՝ բազիսով, որը բաղկացած է (000) կետում տեղադրված ցեզիումի և $(i + j + k)a/2$ կետում տեղադրված քլորի իոններից:

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

Աղյուսակ 7.

Ցեզիումի քլորիդի կառուցվածքով բյուրեղներ

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

Ցեզիումի քլորիդի և նատրիումի քլորիդի կառուցվածքներում բջջի գումարային լիցքը, ինչպես նաև երկբևեռային մոմենտը զրո են: Իոնների ջերմային շարժման հետևանքով ակնթարթային երկբևեռային մոմենտը դառնում է զրոյից տարբեր, որը հանգեցնում է իոնային բյուրեղներում հաղորդականության էլեկտրոնների ցրման:

6.6. Յինկի խաբուսակի կառուցվածք

Այս կառուցվածքը երկրաչափորեն համընկնում է ալմաստի կառուցվածքի հետ: Մի նիստակենտրոն ցանցի հանգույցներում ցինկի (**Zn**) ատոմներն են, իսկ մյուսի հանգույցներում՝ ծծմբի (**S**) (նկ. 18. ա): Յուրաքանչյուր ատոմ ունի այլ տեսակի 4 ամենամոտ հարևան ատոմներ, որոնք տեղադրված են քառանիստի գագաթներում (նկ. 18. բ): Աղյուսակ 8-ում տրված է ցինկի խաբուսակի կառուցվածքով մի քանի բյուրեղ:

Հայտնի է ցինկի խաբուսակի դիտարկված խորանարդային կառուցվածքի, ինչպես նաև ալմաստի կառուցվածքի վեցանկյունային 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 վեցանկյուն կառուցվածքում՝ ABABABAB... հաջորդականությամբ: Աղյուսակ 9-ում ներկայացված է ցինկի խաբուսակի վեցանկյուն կառուցվածքով մի քանի միացություն: Ինչպես երևում է Աղյուսակ 8-ից և Աղյուսակ 9-ից, միևնույն միացությունը կարող է ունենալ և՛ խորանարդային, և՛ վեցանկյուն կառուցվածք: Օրինակ՝ **ZnS**-ի խորանարդային կառուցվածքը 1300 Կ-ից բարձր ջերմաստիճաններում փոխակերպվում է **ZnS**-ի վեցանկյուն կառուցվածքի: Այս երևույթը հայտնի է որպես բազմաձևություն (պոլիմորֆիզմ):

Աղյուսակ 8.
*Յինկի խաբուսակի
կառուցվածքով բյուրեղներ*

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 9.
*Յինկի խաբուսակի վեցանկյուն
կառուցվածքով բյուրեղներ*

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
C (ալմաստ)	2,52	4,12
CdS	4,13	6,75
CdSe	4,30	7,02

§7. Հակադարձ ցանց

Բյուրեղային 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 ատոմը գտնելու հավանականությունը և այլն:

Եթե $f(\mathbf{r})$ -ն այդպիսի մի ֆունկցիա է, ապա պարբերականության պայմանը մաթեմատիկորեն կտրվի հետևյալ առնչությամբ՝

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = f(\mathbf{r}), \quad (7.1)$$

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

Նպատակահարմար է նախ քննարկել միաչափ բյուրեղի դեպքը, երբ բյուրեղի ֆիզիկական բնութագրերը փոփոխվում են միայն մեկ ուղղությամբ: Այս դեպքում (7.1) առնչության փոխարեն տեղի ունի

$$f(x + l) = f(x) \quad (7.2)$$

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

Ինչպես հայտնի է, կամայական պարբերական ֆունկցիա կարելի է վերածել Ֆուրիեի շարքի՝

$$f(x) = \sum_g A_g e^{igx}, \quad (7.3)$$

որտեղ g մեծության արժեքները որոշվում են (7.2) պայմանից՝

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

այսինքն՝

$$e^{igl} = 1 \quad \text{կամ} \quad e^{igal_1} = 1: \quad (7.4)$$

Քանի որ l_1 -ը կամայական ամբողջ թիվ է, ապա (7.4) պայմանը տեղի կունենա միայն այն դեպքում, երբ

$$g = \frac{2\pi}{a} m \equiv g_1 m, \quad (7.5)$$

որտեղ m -ը կամայական ամբողջ թիվ է: $g = g_1 m$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) մեծությունները կազմում են միաչափ ցանցի հակադարձ երկարությունների բազմությունը:

Ֆուրիե-վերլուծության A_g գործակիցները որոշելու համար (7.3) շարքի աջ և ձախ մասերը բազմապատկենք $\exp(-ig'x)$ արտադրիչով և ինտեգրենք ըստ x -ի՝ $(0 - L_x)$ տիրույթով՝

$$\int_0^{L_x} f(x) e^{-ig'x} dx = \sum_g A_g \int_0^{L_x} e^{ix(g-g')} dx, \quad (7.6)$$

g' -ը միաչափ հակադարձ ցանցի կամայական երկարություն է, $L_x = aN_x$ -ը՝ միաչափ ցանցի երկարությունը, N_x -ը՝ տարրական բջիջների թիվը:

Ձևափոխենք (7.6) հավասարման ձախ մասը՝ նկատի ունենալով (7.2) և (7.5) արտահայտությունները.

$$\begin{aligned} \int_0^{L_x} f(x) e^{-ig'x} dx &= \sum_{m=0}^{N_x-1} \int_{ma}^{(m+1)a} f(x) e^{-ig'x} dx = \\ &= \sum_{m=0}^{N_x-1} \int_0^a f(x' + ma) e^{-ig'(x'+ma)} dx' = \\ &= \sum_{m=0}^{N_x-1} e^{-ig'ma} \int_0^a f(x') e^{-ig'x'} dx' = N_x \int_0^a f(x) e^{-ig'x} dx: \end{aligned} \quad (7.7)$$

(7.6) հավասարման աջ կողմում գրված ինտեգրալը՝

$$I_{gg'} \equiv \int_0^{L_x} e^{ix(g-g')} dx = L_x, \quad \text{եթե } g = g', \quad (7.8)$$

և

$$I_{gg'} = \frac{e^{iL_x(g-g')} - 1}{i(g-g')} = \frac{e^{iN_x a(g-g')} - 1}{i(g-g')} = 0, \quad \text{եթե } g \neq g', \quad (7.9)$$

քանի որ (7.4) պայմանի համաձայն՝ կոտորակի համարիչը զրո է: (7.8) և (7.9) արտահայտությունները կարելի է միավորել՝

$$I_{gg'} = L_x \delta_{gg'}, \quad (7.10)$$

որտեղ $\delta_{gg'}$ -ը Կրոնեկերի սիմվոլն է: (7.6), (7.7) և (7.10) արտահայտություններից կստանանք՝

$$A_g = \frac{1}{L_x} \int_0^{L_x} f(x) e^{-igx} dx = \frac{N_x}{L_x} \int_0^a f(x) e^{-igx} dx = \frac{1}{a} \int_0^a f(x) e^{-igx} dx : \quad (7.11)$$

Այժմ անցնենք ընդհանուր դեպքի ուսումնասիրությանը: $f(\mathbf{r})$ եռաչափ պարբերական ֆունկցիան ներկայացնենք Ֆուրիեի եռակի շարքի տեսքով՝

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} A_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} : \quad (7.12)$$

(7.1) և (7.12) առնչություններից բխում է, որ տեղափոխության կամայական $\mathbf{l}$ վեկտորի համար

$$e^{i\mathbf{g}\mathbf{l}} = 1, \quad (7.13)$$

որը համարժեք է հետևյալ պայմանին՝

$$\mathbf{g}\mathbf{l} = 2\pi \times \text{ամբողջ թիվ} : \quad (7.14)$$

Հարմարության համար նշանակելով $\mathbf{g} = 2\pi\mathbf{b}$ և (7.14) պայմանում տեղադրելով (1.1) արտահայտությունը՝ կստանանք՝

$$\mathbf{g}\mathbf{l} = 2\pi(\mathbf{b}\mathbf{a}_1n_1 + \mathbf{b}\mathbf{a}_2n_2 + \mathbf{b}\mathbf{a}_3n_3) = 2\pi \times \text{ամբողջ թիվ} : \quad (7.15)$$

Քանի որ n_1 -ը, n_2 -ը և n_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են, ապա (7.15) պայմանը տեղի կունենա միայն այն դեպքում, երբ

$$\mathbf{b}\mathbf{a}_1 = l_1, \quad \mathbf{b}\mathbf{a}_2 = l_2, \quad \mathbf{b}\mathbf{a}_3 = l_3, \quad (7.16)$$

որտեղ l_1 -ը, l_2 -ը և l_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են: Ստացված 3 հավասարումներից որոշվում է $\mathbf{b}$ անհայտ վեկտորը: Ներկայացնենք այն մեկ հարթության չպատկանող $[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]$, $[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]$ և $[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]$ երեք վեկտորների գծային համակցության տեսքով՝

$$\mathbf{b} = \alpha[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3] + \beta[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1] + \gamma[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2], \quad (7.17)$$

որտեղ α -ն, β -ն և γ -ն անհայտ գործակիցներ են:

(7.17) արտահայտությունը սկալյար ձևով բազմապատկենք $\mathbf{a}_1$ -ով: Նկատի ունենալով (7.16) հավասարումներից առաջինը, ինչպես նաև այն, որ $\mathbf{a}_1$ վեկտորն ուղղահայաց է $[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]$ և $[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]$ վեկտորներին, կստանանք.

$$\mathbf{b} \mathbf{a}_1 = \alpha(\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) = l_1 \quad \text{և} \quad \alpha = \frac{l_1}{v_0}, \quad (7.18)$$

որտեղ v_0 -ն տարրական բջջի ծավալն է: (7.17) արտահայտությունը բազմապատկելով $\mathbf{a}_2$ -ով և ապա $\mathbf{a}_3$ -ով՝ մույն ձևով կորոշենք β և γ գործակիցները՝

$$\beta = \frac{l_2}{v_0}, \quad \gamma = \frac{l_3}{v_0}: \quad (7.19)$$

Այսպիսով՝ (7.17) արտահայտությունը կընդունի հետևյալ տեսքը՝

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 l_1 + \mathbf{b}_2 l_2 + \mathbf{b}_3 l_3, \quad (7.20)$$

որտեղ

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{v_0}[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3], \quad \mathbf{b}_2 = \frac{1}{v_0}[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1], \quad \mathbf{b}_3 = \frac{1}{v_0}[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]: \quad (7.21)$$

Քանի որ $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ և $\mathbf{a}_3$ վեկտորները մեկ հարթության մեջ չեն, ապա մույնը կարելի է ասել նաև $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ և $\mathbf{b}_3$ վեկտորների մասին: (7.20) արտահայտության համաձայն՝

$$\mathbf{g} = 2\pi\mathbf{b} = 2\pi\mathbf{b}_1 l_1 + 2\pi\mathbf{b}_2 l_2 + 2\pi\mathbf{b}_3 l_3: \quad (7.22)$$

$\mathbf{g}$ վեկտորները կազմում են ցանց, որի տարրական բջիջը կառուցված է $\mathbf{g}_1 = 2\pi\mathbf{b}_1$, $\mathbf{g}_2 = 2\pi\mathbf{b}_2$, $\mathbf{g}_3 = 2\pi\mathbf{b}_3$ հիմնական վեկտորներով: Այս ցանցն ընդունված է անվանել հակադարձ՝ նախնական ուղիղ ($\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ հիմնական վեկտորներով) ցանցի նկատմամբ: Ակնհայտ է, որ հակադարձ ցանցը միաբժեքորեն որոշվում է $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ և $\mathbf{a}_3$ վեկտորներով, այսինքն՝ տալով ուղիղ ցանցը, միաժամանակ տրվում է նաև հակադարձ ցանցը: «Հակադարձ» անվանումը պայմանավորված է այն հանգամանքով, որ $\mathbf{g}$ վեկտորն ունի հակադարձ երկարության չափայնություն:

Հակադարձ ցանցը Բրավեի ցանց է, քանի որ այն տրվում է (7.22) բանաձևով, հետևաբար՝ կարելի է կառուցել նրա հակադարձ ցանցը, որը համընկնում է ուղիղ ցանցի հետ:

Դժվար չէ նկատել, որ $\mathbf{g}_j (j = 1, 2, 3)$ վեկտորները բավարարում են

$$\mathbf{a}_i \mathbf{g}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (7.23)$$

առնչությանը, այսինքն՝ $\mathbf{g}_1$ վեկտորն ուղղահայաց է $\mathbf{a}_2$ և $\mathbf{a}_3$, $\mathbf{g}_2$ -ը՝ $\mathbf{a}_1$ և $\mathbf{a}_3$, իսկ $\mathbf{g}_3$ -ը՝ $\mathbf{a}_1$ և $\mathbf{a}_2$ վեկտորներին:

Հաշվենք հակադարձ ցանցի տարրական բջիջի ծավալը՝

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= (\mathbf{g}_1 [\mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]) = (2\pi)^3 (\mathbf{b}_1 [\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3]) = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{v_0^3} ([\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3] [[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1], [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]]) = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{v_0^3} [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3] \{ \mathbf{a}_1 ([\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1] \mathbf{a}_2) - \mathbf{a}_2 ([\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1] \mathbf{a}_1) \} = \frac{(2\pi)^3}{v_0} : \end{aligned} \quad (7.24)$$

Ուղիղ և հակադարձ ցանցերի տարրական բջիջների ծավալների միջև (7.24) կապն ստանալիս օգտվել ենք վեկտորական հանրահաշվի $[\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]] = = \mathbf{B}(\mathbf{A}\mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A}\mathbf{B})$ բանաձևից:

(7.12) ֆուրիե-վերլուծության $A_{\mathbf{g}}$ անհայտ գործակիցները որոշվում են նույն եղանակով, ինչ որ միաչափ դեպքում: Արդյունքում ստացվում է (7.11) արտահայտության եռաչափ ընդհանրացումը՝

$$A_{\mathbf{g}} = \frac{1}{V} \int_V f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{v_0} \int_{v_0} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (7.25)$$

որն արտաձեռիս օգտվել ենք

$$I_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} \equiv \int_V e^{i\mathbf{r}(\mathbf{g}-\mathbf{g}')} d\mathbf{r} = V \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} \quad (7.26)$$

առնչությունից, որը (7.10) բանաձևի եռաչափ ընդհանրացումն է:

Այսպեսով (7.26) առնչությունը:

Քանի որ

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} - \mathbf{g}' = 2\pi(n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3) \quad (7.27)$$

վեկտորը պատկանում է հակադարձ ցանցին, ապա $\exp(i\mathbf{G}\mathbf{r})$ ֆունկցիան պարբերական է ըստ $\mathbf{r}$ -ի, հետևաբար՝ (7.26) բանաձևում բյուրեղի V ծավալով ինտեգրալը կարելի է ներկայացնել որպես ինտեգրալ մեկ տարրական

բջջի v_0 ծավալով՝ բազմապատկած բյուրեղում տարրական բջիջների N քվով՝

$$I_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} = N \int_{v_0} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = N \int_{v_0} e^{i2\pi(n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3)\mathbf{r}} d\mathbf{r} : \quad (7.28)$$

(7.28) ինտեգրալում անցնենք ինտեգրման նոր փոփոխականների՝

$$\xi = \mathbf{r}\mathbf{b}_1, \quad \eta = \mathbf{r}\mathbf{b}_2, \quad \zeta = \mathbf{r}\mathbf{b}_3 : \quad (7.29)$$

Նկատի ունենալով (7.23) առնչությունը՝ հեշտ է համոզվել, որ

$$\mathbf{r} = \xi\mathbf{a}_1 + \eta\mathbf{a}_2 + \zeta\mathbf{a}_3 : \quad (7.30)$$

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

$$I_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} = N \int_0^1 d\xi \int_0^1 d\eta \int_0^1 d\zeta e^{i2\pi(n_1\xi + n_2\eta + n_3\zeta)} J\left(\frac{x, y, z}{\xi, \eta, \zeta}\right), \quad (7.31)$$

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

$$J\left(\frac{x, y, z}{\xi, \eta, \zeta}\right) \equiv \frac{D(x, y, z)}{D(\xi, \eta, \zeta)} = \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix} = (\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) = v_0, \quad (7.32)$$

այսինքն՝ հավասար է ուղիղ ցանցի տարրական բջջի ծավալին:

Այսպիսով՝ (7.28) – (7.32) արտահայտություններից բխում է, որ

$$I_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} = N v_0 \int_0^1 d\xi e^{i2\pi n_1 \xi} \int_0^1 d\eta e^{i2\pi n_2 \eta} \int_0^1 d\zeta e^{i2\pi n_3 \zeta} = V \delta_{n_1, 0} \delta_{n_2, 0} \delta_{n_3, 0}$$

և զրոյից տարբեր է միայն $n_1 = n_2 = n_3 = 0$ դեպքում, այսինքն, երբ $\mathbf{G} = 0$, որը, (7.27) արտահայտության համաձայն, համարժեք է $\mathbf{g} = \mathbf{g}'$ հավասարությանը:

§8. Հակադարձ ցանցի հատկությունները: Միլերյան ցուցիչներ

Ծանոթանանք հակադարձ ցանցի որոշ հատկություններին:

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

(7.23) առնչությունից հետևում է, որ հակադարձ ցանցի կամայական $\mathbf{g} = h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3$ վեկտորի և ուղիղ ցանցի $\mathbf{l} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ վեկտորի սկալյար արտադրյալը՝

$$\mathbf{gl} = 2\pi(hn_1 + kn_2 + ln_3) = 2\pi M, \quad (8.1)$$

որտեղ M -ն ամբողջ թիվ է: Մյուս կողմից՝

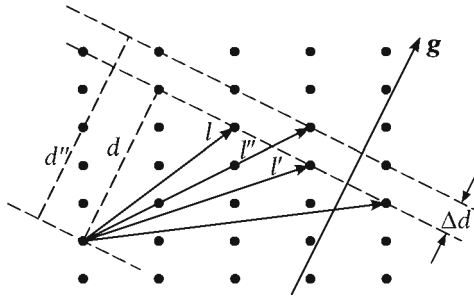
$$\mathbf{gl} = |\mathbf{g}| |\mathbf{l}| \cos(\hat{\mathbf{gl}}) = |\mathbf{g}| d, \quad (8.2)$$

որտեղ $d = |\mathbf{l}| \cos(\hat{\mathbf{gl}})$ մեծությունը $\mathbf{l}$ վեկտորի պրոյեկցիան է $\mathbf{g}$ վեկտորի ուղղության վրա: (8.1) և (8.2) արտահայտություններից հետևում է, որ

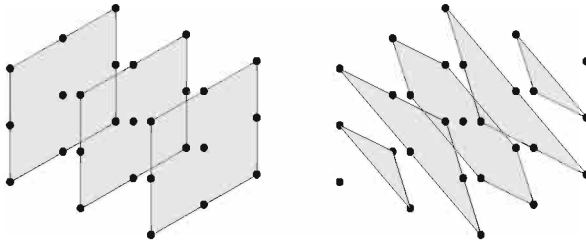
$$d = \frac{2\pi M}{|\mathbf{g}|}: \quad (8.3)$$

Ապացուցենք, որ մույն d պրոյեկցիան ունեն ուղիղ ցանցի անվերջ թվով վեկտորներ: Եթե ընտրենք $\mathbf{l}' = (n_1 - ml)\mathbf{a}_1 + (n_2 - ml)\mathbf{a}_2 + [n_3 + m(n_1 + n_2)]\mathbf{a}_3$, որտեղ m -ն ամբողջ թիվ է, որպես ուղիղ ցանցի վեկտոր, ապա կհամոզվենք, որ $\mathbf{gl}' = \mathbf{gl} = 2\pi M$: Նշանակում է՝ $\mathbf{l}'$ -ը $\mathbf{g}$ -ի ուղղությամբ ունի մույն պրոյեկցիան, ինչ որ $\mathbf{l}$ -ը, ուստի այն որոշում է $\mathbf{g}$ -ին ուղղահայաց և կոորդինատների սկզբնակետից d հեռավորությամբ հարթության մի կետ: Հետևաբար, եթե այդ հարթության վրա կա ցանցի որևէ կետ, ապա կան մասնավորապես անթիվ բազմությամբ կետեր ($\mathbf{l}'$ վեկտորներ, $m = \pm 1, \pm 2, \pm \dots$): Այսպիսով՝ կառուցեցինք ցանցի ատոմային հարթություններից մեկը:

Ատոմային հարթությունների ընտանիք կոչվում է իրար զուգահեռ և իրարից հավասարահեռ ատոմային հարթությունների բազմությունը, որը պարունակում է Բրավեի եռաչափ ցանցի բոլոր հանգույցները: Ակնհայտ է, որ Բրավեի ցանցը կարելի է բաժանել ատոմային հարթությունների ընտանիքների տարբեր ձևերով (նկ. 23):



Նկ. 22. $\mathbf{g}$ վեկտորին ուղղահայաց հարթությունների ընտանիքը



Նկ. 23. Բրավեի ցանցի ներկայացումն ատոմային հարթությունների ընտանիքների տեսքով

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

(8.1) և (8.2) առնչությունների համաձայն, եթե h, k, l թվերը չունեն ընդհանուր բաժանարար, ապա միշտ կարելի է ընտրել ուղիղ ցանցի մի այնպիսի $\mathbf{l}''$ վեկտոր, որ

$$\mathbf{gl}'' = 2\pi(M+1): \quad (8.4)$$

Սա նշանակում է, որ $\mathbf{l}''$ վեկտորով հանգույցը պատկանում է կոորդինատների սկզբնակետից

$$d'' = \frac{2\pi(M+1)}{|\mathbf{g}|} \quad (8.5)$$

հեռավորությամբ հարթությանը, որի հեռավորությունն ամենամոտ հարթությունից (նկ. 22)՝

$$\Delta d = d'' - d = \frac{2\pi}{|\mathbf{g}|}: \quad (8.6)$$

1. և 2. հատկություններից հետևում է, որ ցանցի ատտմային հարթությունները կարելի է բնութագրել՝ տալով նրանց ուղղահայաց, հակադարձ ցանցին պատկանող $\mathbf{g}$ վեկտորները: Ատտմային հարթությունների նշումը հակադարձ ցանցի վեկտորների միջոցով համարժեք է բյուրեղագրության մեջ հայտնի միլերյան ցուցիչների օգտագործմանը:

Իրոք, եթե $\mathbf{g}$ վեկտորն ուղղահայաց է որևէ ատտմային հարթության, ապա այդ հարթության բոլոր հանգույցների համար տեղի ունի (8.1) պայմանը: Եթե դիտարկենք այդ հարթության $n_2 = n_3 = 0$ կետը, որը պատկանում է x_1 առանցքին, ապա (8.1) առնչությունից կստանանք, որ $n_1 = M/h$, այսինքն՝ այդ հարթությունն x_1 առանցքից հատում է

$$d_1 = n_1 a_1 = \frac{M}{h} a_1 \quad (8.7)$$

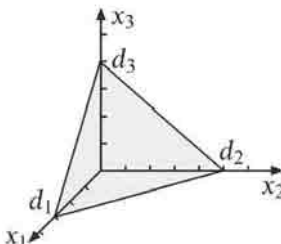
երկարությամբ մի հատված: Նույն ձևով կարելի է համոզվել, որ այն x_2 և x_3 առանցքներից հատում է համապատասխանաբար

$$d_2 = n_2 a_2 = \frac{M}{k} a_2 \quad \text{և} \quad d_3 = n_3 a_3 = \frac{M}{l} a_3 \quad (8.8)$$

երկարություններով հատվածներ (նկ. 24.): (8.7) և (8.8) արտահայտություններից հետևում է, որ

$$\frac{d_1}{a_1} : \frac{d_2}{a_2} : \frac{d_3}{a_3} = \frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l}, \quad (8.9)$$

այսինքն՝ տվյալ ատտմային հարթության՝ կոորդինատային 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:

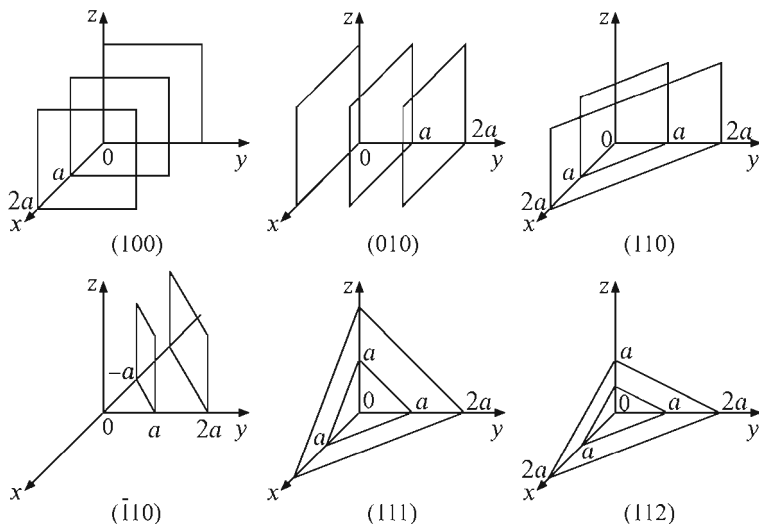


Նկ. 24. Ատտմային հարթության հատումները կոորդինատային առանցքների հետ

Այսպիսով՝ որևէ ատոմային հարթության միլերյան ցուցիչները հակադարձ ցանցի ամենափոքր վեկտորի կոորդինատներն են, որն ուղղահայաց է տվյալ հարթությանը, այսինքն՝ h, k, l ցուցիչներով հարթությունն ուղղահայաց է հակադարձ ցանցի $\mathbf{g} = h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3$ վեկտորին:

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

Նման նշումներ օգտագործվում են նաև ուղիղ ցանցում ուղղությունների համար, սակայն միլերյան ցուցիչների հետ (որոնք որոշում են ուղղություն հակադարձ ցանցում) չշփոթելու համար օգտվում են բառակուսի փակագծերից: Օրինակ՝ խորանարդի տարածական անկյունագծի ուղղությունն է $[111]$: Ընդհանուր դեպքում $\mathbf{l} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ վեկտորն ընտրված կոորդինատային համակարգում ունի $[n_1n_2n_3]$ ուղղությունը:

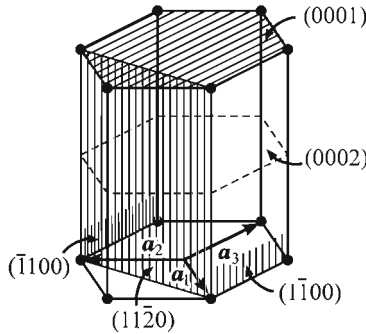


Նկ. 25. Ատոմային հարթությունների տարբեր ընտանիքներ

Ատոմային հարթությունների բոլոր ընտանիքները, որոնք համարժեք են բյուրեղի 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 համարժեք 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. 25-ում պատկերված են խորանարդային կառուցվածքով բյուրեղի մի քանի ատոմային հարթությունների ընտանիքներ:

Վեցանկյուն բյուրեղային ցանցում ատոմային հարթությունները բնութագրելու համար երեքի փոխարեն օգտագործում են չորս թիվ՝ $(hki\bar{l})$, որտեղ $i = -(h+k)$, որոնցից առաջին երեքը համապատասխանում են վեցանիստի հիմքի հարթության մեջ ընկած և իրար հետ 120° անկյուն կազմող $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ և $\mathbf{a}_3$ վեկտորներով ուղղված առանցքներից կտրած հատվածներին ($|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = |\mathbf{a}_3| = a$), իսկ չորրորդը՝ l -ը, համապատասխանում է c -առանցքի վրա կտրված հատվածին՝ արտահայտված c ուղղությամբ ցանցի հաստատունով (նկ. 26): $(hki\bar{l})$ նշանակումը հայտնի է «Միլեր-Բրավեի ցուցիչներ» անվանմամբ:



Նկ. 26. Ատոմային հարթությունների ցուցչավորումը վեցանկյունային ցանցում

§9. Հակադարձ ցանցի կառուցումը

Կառուցենք մի քանի բյուրեղային ցանցերի հակադարձ ցանցերը:

1. Պարզ խորանարդային ցանց

Այս ցանցի հիմնական վեկտորները տրվում են

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_2 = a\mathbf{j}, \quad \mathbf{a}_3 = a\mathbf{k} \quad (9.1)$$

արտահայտություններով, որտեղ $\mathbf{i}$ -ն, $\mathbf{j}$ -ն, $\mathbf{k}$ -ն միավոր վեկտորներ են:

(7.21) բանաձևերի համաձայն՝

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_1 &= 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{(\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3])} = \frac{2\pi a^2[\mathbf{j}, \mathbf{k}]}{a^3} = \frac{2\pi}{a} \mathbf{i}, \\ \mathbf{g}_2 &= \frac{2\pi}{a} \mathbf{j}, \quad \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{a} \mathbf{k}, \end{aligned} \quad (9.2)$$

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՝

$$\pm \frac{1}{2} \mathbf{g}_1 = \pm \frac{\pi}{a} \mathbf{i}, \quad \pm \frac{1}{2} \mathbf{g}_2 = \pm \frac{\pi}{a} \mathbf{j}, \quad \pm \frac{1}{2} \mathbf{g}_3 = \pm \frac{\pi}{a} \mathbf{k} : \quad (9.3)$$

Այս վեց հարթությունները $2\pi/a$ կողով խորանարդի նիստերն են, իսկ խորանարդի (Բրիլյուենի առաջին զոնայի) ծավալը $(2\pi/a)^3$ է:

2. Ծավալակենտրոն խորանարդային ցանց

Այս ցանցի հիմնական վեկտորները տրվում են (3.3) բանաձևերով: Նկատի ունենալով նաև (9.1) առնչությունները՝ կստանանք.

$$\mathbf{c}_1 = \frac{a}{2}(-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{c}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{c}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}), \quad (9.4)$$

ուստի հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորները՝

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{k} + \mathbf{i}), \quad \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i} + \mathbf{j}) : \quad (9.5)$$

(3.16) և (9.1) բանաձևերի համաձայն՝ (9.4) արտահայտությունները որոշում են նիստակենտրոն ցանցի տարրական բջիջը: Այսպիսով՝ ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը նիստակենտրոն խորանարդային ցանցն է:

Հակադարձ ցանցի կամայական վեկտոր տրվում է հետևյալ ձևով՝

$$\mathbf{g} = h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{a}[(k+l)\mathbf{i} + (h+l)\mathbf{j} + (h+k)\mathbf{k}] : \quad (9.6)$$

Չբոյից տարբեր և ամենակարճ վեկտորներն են՝

$$\frac{2\pi}{a}(\pm \mathbf{j} \pm \mathbf{k}), \quad \frac{2\pi}{a}(\pm \mathbf{k} \pm \mathbf{i}), \quad \frac{2\pi}{a}(\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{j}), \quad (9.7)$$

ընդամենը 12 հատ: Ուղիղ ցանցի տարրական բջջի ծավալը $a^3/2$ է, հակադարձ ցանցի տարրական բջջինը, (7.24) բանաձևի համաձայն, $2(2\pi/a)^3$:

Բրիլյուենի առաջին զոնան սահմանափակված է տասներկու հարթություներով, որոնք ուղղահայաց են (9.7) վեկտորներին, և իրենից ներկայացնում է կանոնավոր շեղանկյունային տասներկուսանիստ (տես նկ. 11. ա): Նիստերի կենտրոնները որոշվում են հետևյալ վեկտորներով՝

$$\frac{\pi}{a}(\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{j}), \quad \frac{\pi}{a}(\pm \mathbf{j} \pm \mathbf{k}), \quad \frac{\pi}{a}(\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{k}): \quad (9.8)$$

3. Նիստակենտրոն խորանարդային ցանց

Այս ցանցի հիմնական վեկտորները տրվում են հետևյալ արտահայտություներով (տես 3.16)՝

$$\mathbf{c}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{c}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{i}), \quad \mathbf{c}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j}), \quad (9.9)$$

ուստի հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների համար (7.21) բանաձևերից կստանանք

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}) \quad (9.10)$$

արտահայտություները, որոնք տեսքով համընկնում են ծավալակենտրոն ցանցի հիմնական վեկտորների հետ: Այսպիսով՝ նիստակենտրոն խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը ծավալակենտրոն ցանցն է, որի տարրական բջջի ծավալը $4(2\pi/a)^3$ է: (9.10) բանաձևերի համաձայն՝ հակադարձ ցանցի վեկտորները տրվում են

$$\mathbf{g} = \frac{2\pi}{a}[(-h + k + l)\mathbf{i} + (h - k + l)\mathbf{j} + (h + k - l)\mathbf{k}] \quad (9.11)$$

բանաձևով, որտեղ h -ը, k -ն և l -ը կամայական ամբողջ թվեր են: Ջրոյից տարբեր ամենափոքր վեկտորներն են հետևյալ ութ վեկտորները՝

$$\frac{2\pi}{a}(\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{j} \pm \mathbf{k}): \quad (9.12)$$

Քրիյունենի առաջին զոնան առաջանում է (9.12) վեկտորներին ուղղահայաց ութ հարթություններով կազմված ութանիստի զագաթները

$$\frac{2\pi}{a}(\pm 2\mathbf{i}), \frac{2\pi}{a}(\pm 2\mathbf{j}), \frac{2\pi}{a}(\pm 2\mathbf{k}) \quad (9.13)$$

վեկտորներին ուղղահայաց և նրանց կիսող վեց հարթություններով հատելիս: Արդյունքում ստացվում է «հատված ութանիստ», որն իրենից ներկայացնում է տասնչորսանիստ (տես նկ. 10. բ):

4. Վեցանկյուն ցանց

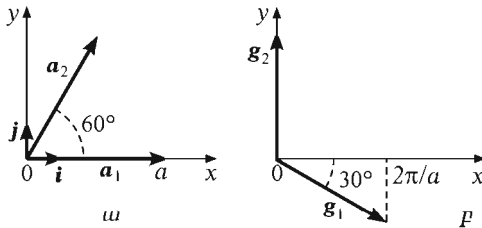
Այս ցանցի հիմնական վեկտորները տրվում են (6.1) արտահայտություներով՝

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\mathbf{j}, \quad \mathbf{a}_3 = c\mathbf{k}, \quad (9.14)$$

ուստի հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների համար (7.21) և (7.22) բանաձևերից կստանանք՝

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(\mathbf{i} - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{j}\right), \quad \mathbf{g}_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}\mathbf{j}, \quad \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{c}\mathbf{k}: \quad (9.15)$$

Դժվար չէ համոզվել, որ $|\mathbf{g}_1| = |\mathbf{g}_2| = 4\pi/a\sqrt{3}$, այսինքն՝ պարզ վեցանկյունային ցանցի հակադարձ ցանցը նույնպես պարզ վեցանկյունային կառուցվածք է, որի $\mathbf{g}_1$ և $\mathbf{g}_2$ հիմնական վեկտորները 30° -ով պտտված են $\mathbf{k}$ ուղղության շուրջը (նկ. 27.):



Նկ. 27. ա. Ուղիղ և բ. հակադարձ վեցանկյուն ցանցերի հիմնական վեկտորները xy հարթության մեջ

Հակադարձ ցանցի տարրական բջջի ծավալը՝

$$\Omega_0 = (\mathbf{g}_1[\mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]) = \frac{2(2\pi)^3}{\sqrt{3}ca^2}: \quad (9.16)$$

§10. Դիֆրակցիան բյուրեղային կառուցվածքներում: Կառուցվածքային գործոն

Բյուրեղների կառուցվածքային ուսումնասիրություններում օգտագործվում է ալիքների դիֆրակցիայի երևույթը, որը դրսևորվում է առավել ցայտուն, երբ ընկնող ալիքի երկարությունը միջատոմային հեռավորությունների կարգի է: Սկզբունքորեն կառուցվածքային հետազոտություններում կարելի է օգտագործել կամայական տեսակի ճառագայթում՝ ֆոտոնների, նեյտրոնների, էլեկտրոնների և այլ մասնիկների հոսքեր:

Դը Բրոյլի վարկածի համաձայն՝ p իմպուլսով մասնիկին վերագրվում է

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (10.1)$$

երկարությամբ ալիք, $h = 6,63 \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ մեծությունը Պլանկի հաստատունն է: Եթե ճառագայթումն m զանգվածով ոչ ռելյատիվիստական մասնիկների հոսք է, ապա Դը Բրոյլի ալիքի երկարությունը՝

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon}} \quad (10.2)$$

որտեղ ε -ն մասնիկի կինետիկ էներգիան է: Էլեկտրոնների համար (10.2) արտահայտությունից ստացվում է հետևյալ գնահատականը՝

$$\lambda \approx \frac{12}{\varepsilon^{1/2}} \quad (10.3)$$

որտեղ λ -ն չափվում է անգստրեմով, իսկ էներգիան՝ էլեկտրոն-վոլտով: Ցանցի հաստատունի կարգի ալիքի երկարություններ ստացվում են $\varepsilon \sim 100$ էՎ կարգի էներգիաների համար: Քանի որ էլեկտրոններն ուժեղ փոխազդում են նյութի հետ, ապա բյուրեղի մեջ խորը թափանցել չեն կարող: Ուստի էլեկտրոնների դիֆրակցիայի մեթոդով հիմնականում ուսումնասիրում են բարակ թաղանթները, ինչպես նաև զանգվածեղ մոլուցների մակերևութային շերտերը:

Նեյտրոնների Դը Բրոյլի ալիքի երկարության համար (10.2) արտահայտությունից ստացվում է հետևյալ գնահատականը՝

$$\lambda \approx \frac{0,28}{\varepsilon^{1/2}} \quad (10.4)$$

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

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

Նեյտրոնն ունի մագնիսական մոմենտ, ուստի նեյտրոնային փնջերի միջոցով հաջողությամբ ուսումնասիրում են մագնիսական բյուրեղների կառուցվածքը:

Էլեկտրամագնիսական ճառագայթման ալիքի երկարության կախումն էներգիայից ևս արտահայտվում է (10.1) բանաձևով, որտեղ $p = \hbar\omega/c = \varepsilon/c$, ($\hbar = h/2\pi = 1,05 \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ)

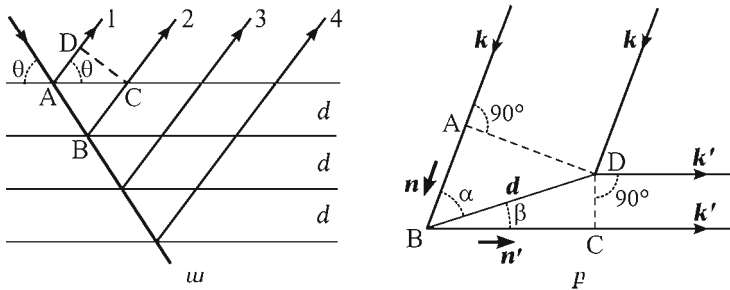
$$\lambda \approx \frac{12,4}{\varepsilon}, \quad (10.5)$$

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

Ռենտգենյան ճառագայթման լայն կիրառությունը նյութի կառուցվածքային հետազոտություններում պայմանավորված է նյութի հետ նրա թույլ փոխազդեցությամբ, որի շնորհիվ ռենտգենյան ճառագայթները թափանցում են մմուշի մեջ և տեղեկություններ տալիս նրա բաղադրության և կառուցվածքի մասին: Ի տարբերություն նեյտրոնների՝ ռենտգենյան ճառագայթումը ցրվում է էլեկտրոնների վրա (միջուկների մեծ զանգվածի հետևանքով ցրումը նրանց վրա կարելի է անտեսել)՝ ի հայտ բերելով մմուշում էլեկտրոնների տարածական բաշխման օրինաչափությունները:

Ուսումնասիրենք ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիայի երևույթը բյուրեղային կառուցվածքներում:

Համաձայն Ու. Բրեգի՝ բյուրեղի վրա ընկնող ռենտգենյան ալիքները հայելային ձևով անդրադառնում են իրար զուգահեռ ատոմային հարթություններից, ընդ որում՝ յուրաքանչյուր հարթությունից անդրադառնում է ընկած ճառագայթման չնչին մասը: Որևէ ուղղությամբ դիֆրակտված փունջը հնարավոր է դիտել, եթե այդ ուղղությամբ գնացող և տվյալ ատոմական հարթությունների ընտանիքի յուրաքանչյուր հարթությունից անդրադարձած երկրորդային ալիքներն իրար ուժեղացնում են, այսինքն՝ հարևան հարթություններից անդրադարձած ալիքների ընթացքի տարբերությունը հավասար է ամբողջ թվով ալիքի երկարության (նկ. 28. ա):



Նկ. 28. Ռենտգենյան ալիքների դիֆրակցիան. ա. ըստ Բրեգի, բ. ըստ Լաուեի

Եթե d -ն միջհարթությունային հեռավորությունն է, ապա անդրադարձած 1 և 2 ալիքների ընթացքի տարբերությունը կլինի

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

որտեղ θ -ն ճառագայթի և ատոմային հարթության միջև անկյունն է:

Անդրադարձման ինտերֆերենցային մաքսիմումի անհրաժեշտ պայմանը՝

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (10.6)$$

հավասարումն իրենից ներկայացնում է Բրեգի օրենքը (պայմանը): Այն հետևանք է բյուրեղային ցանցի պարբերականության: (10.6) պայմանի համաձայն՝ բրեգյան անդրադարձում հնարավոր է միայն այն ալիքների համար, որոնց երկարությունը՝ $\lambda \leq 2d$:

Դիֆրակցիայի երևույթի նկարագրությունը կարելի է ներկայացնել նաև Մ. Լաուեի ձևակերպմամբ, որի շրջանակներում հատկապես ցայտունորեն են դրսևորվում հակադարձ ցանցի գաղափարի կարևորությունը և օգտակարությունը:

Համաձայն Լաուեի՝ ցանցի բոլոր հանգույցներում տեղադրված են նույնական օբյեկտներ (ատոմներ, իոններ կամ դրանց խմբեր), որոնք իրենց վրա ընկնող ճառագայթումը ցրում են բոլոր ուղղություններով: Տրված ալիքի երկարության համար ինտերֆերենցային մաքսիմումներ դիտվում են այն ուղղություններով, որոնցով գնացող ալիքներն իրար ուժեղացնում են:

Դիտարկենք երկու ցրող կենտրոններ, որոնք իրար նկատմամբ շեղված են d վեկտորով (նկ. 28. բ): B և D կենտրոնների ցրած ալիքների ընթացքի տարբերությունը՝

$$AB + BC = d \cos \alpha + d \cos \beta = \mathbf{d}(\mathbf{n} - \mathbf{n}'), \quad (10.7)$$

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

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{n}, \quad \mathbf{k}' = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{n}', \quad (10.8)$$

(10.7) և (10.8) առնչություններից կստանանք՝

$$\mathbf{d}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m, \quad m = \pm 1, \pm 2, \pm \dots : \quad (10.9)$$

Եթե ցրող կենտրոնների թիվն անվերջ մեծ է, ապա (10.9) պայմանը պետք է միաժամանակ տեղի ունենա բոլոր $\mathbf{d}$ վեկտորների համար, որոնք պատկանում են Բրավեի ցանցի $\mathbf{l}$ վեկտորների բազմությանը, այսինքն՝

$$\mathbf{l}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m, \quad m = \pm 1, \pm 2, \pm \dots : \quad (10.10)$$

Դժվար չէ տեսնել, որ (10.10) պայմանը մույնաբար համընկնում է հակադարձ ցանցը որոշող (7.14) հավասարման հետ, հետևաբար՝ $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ տարբերությունը պետք է հավասար լինի հակադարձ ցանցի որևէ վեկտորի՝

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{g} : \quad (10.11)$$

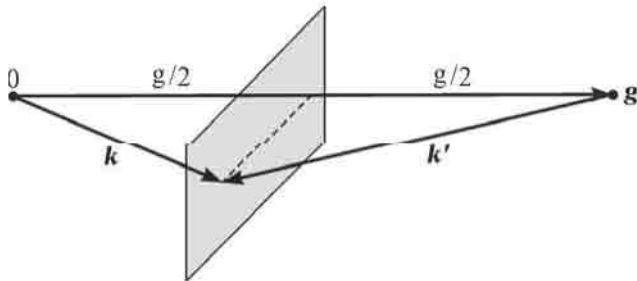
(10.11) առնչությունը, որն անվանում են Լաուեի պայման, կարելի է ներկայացնել նաև այլ տեսքով, եթե նկատի ունենանք, որ $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$.

$$\mathbf{k} - \mathbf{g} = \mathbf{k}' \quad \text{կամ} \quad |\mathbf{k} - \mathbf{g}| = |\mathbf{k}| : \quad (10.12)$$

(10.12) հավասարումը բարձրացնելով քառակուսի՝ կստանանք.

$$k\mathbf{n}_{\mathbf{g}} = \frac{1}{2} \mathbf{g}, \quad (10.13)$$

որտեղ $\mathbf{n}_{\mathbf{g}}$ -ն միավոր վեկտոր է $\mathbf{g}$ -ի ուղղությամբ: (10.13) առնչությունից բխում է, որ $\mathbf{k}$ վեկտորի պրոյեկցիան $\mathbf{g}$ վեկտորի ուղղության վրա $g/2$ է:



Նկ. 29. (10.13) պայմանի երկրաչափական ներկայացումը

Երկրաչափորեն (10.13) պայմանը նշանակում է, որ k վեկտորի ծայրը g վեկտորին ուղղահայաց և այն կիսող հարթության մեջ է (նկ. 29): k -տարածության այդ հարթությունները կոչվում են բրեզյան:

Դիֆրակցիայի Բրեգի (10.6) և Լաուեի (10.11) պայմանների համարժեքությունը կարելի է ցույց տալ՝ օգտվելով հակադարձ ցանցի՝ §8-ում նշված 2-րդ հատկությունից, որի համաձայն՝ հակադարձ ցանցի ամենավոքոր, ոչ զրոյական վեկտորի մեծությունը $2\pi/d$ է, որտեղ d -ն ատոմային հարթությունների միջև հեռավորությունն է: Այս վեկտորին զուգահեռ բոլոր վեկտորներն ունեն $n(2\pi/d)$ երկարություն: Մյուս կողմից, (10.12) հավասարման համաձայն՝

$$g = 2k \sin \theta = \frac{2\pi}{d} n : \quad (10.14)$$

Նկատի ունենալով նաև, որ $k = 2\pi/\lambda$, (10.14) արտահայտությունից կստանանք դիֆրակցիայի Բրեգի (10.6) պայմանը:

Եթե տարրական բջիջն ունի միևնույն ատոմներից բաղկացած բազիս, ապա անհրաժեշտ է հաշվի առնել նաև բազիսի ատոմների (իոնների) վրա ցրված ալիքների ինտերֆերենցը: Եթե բրեզյան մաքսիմումին համապատասխանում է ալիքային վեկտորի $k' - k = K$ փոփոխություն, ապա d_i և d_j կետերում ցրված ալիքների փուլերը կտարբերվեն $\exp[iK(d_i - d_j)]$ արտադրիչով, ուստի ամբողջ բջջի ցրած ալիքների վերադրման հետևանքով առաջացած ալիքի լայնույթը կպարունակի

$$S_K = \sum_{j=1}^s \exp(iK d_j) \quad (10.15)$$

արտադրիչը, որտեղ s -ը բազիսի ատոմների թիվն է: S_K մեծությունը կոչվում է երկրաչափական կառուցվածքային գործոն և ցույց է տալիս, թե բազիսի

ատոմների վրա ցրված ալիքների ինտերֆերենցը որքան է փոքրացնում $\mathbf{K}$ վեկտորով որոշվող բրեզյան մաքսիմումի ուժգնությունը, որը համեմատական է $|S_{\mathbf{K}}|^2$ մեծությանը: Առանձնահատուկ կարևորություն են ներկայացնում այն դեպքերը, երբ $S_{\mathbf{K}} = 0$:

Քննարկենք մի օրինակ: Ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցը կարելի է դիտարկել նաև որպես $\mathbf{ai}, \mathbf{aj}, \mathbf{ak}$ հիմնական վեկտորներով պարզ խորանարդային ցանց, որի հետ կապված է $\mathbf{d}_1 = 0$ և $\mathbf{d}_2 = a(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})/2$ վեկտորներով բազիս: Պարզ խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը նույնպես պարզ խորանարդային է՝ $2\pi/a$ կողով, սակայն տվյալ դեպքում յուրաքանչյուր բրեզյան անդրադարձմանը համապատասխանում է $S_{\mathbf{K}}$ կառուցվածքային գործոն: (10.15) սահմանման համաձայն՝

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_{j=1}^2 \exp(i\mathbf{K}\mathbf{d}_j) = 1 + \exp(i\mathbf{K}\mathbf{d}_2) = 1 + \exp\left[i\frac{a}{2}\mathbf{K}(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})\right]: \quad (10.16)$$

Հակադարձ ցանցի $\mathbf{K}$ վեկտորը, (8.11) արտահայտության համաձայն, ունի հետևյալ տեսքը՝

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}(n_1\mathbf{i} + n_2\mathbf{j} + n_3\mathbf{k}), \quad (10.17)$$

որտեղ n_1 -ը, n_2 -ը և n_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են: (10.16) և (10.17) արտահայտություններից կստանանք՝

$$S_{\mathbf{K}} = 1 + \exp[i\pi(n_1 + n_2 + n_3)] = \begin{cases} 2, & n_1 + n_2 + n_3 = 2m, \\ 0, & n_1 + n_2 + n_3 = 2m + 1, \end{cases} \quad (10.18)$$

($m = 0, 1, 2, \dots$): Նշանակում է՝ այն հանգույցները, որոնց կոօրդինատների գումարը՝ արտահայտված $2\pi/a$ հիմնական միավորով, կենտ է, բրեզյան անդրադարձումներ չեն տալիս: Պարզ խորանարդային հակադարձ ցանցը վերածվում է նիստակենտրոն ցանցի, որը և կստացվեր հենց սկզբից, եթե ծավալակենտրոն ցանցը դիտարկվեր ոչ թե որպես բազիսով ցանց, այլ որպես Բրավեի ցանց:

Եթե բազիսի ատոմները նույնական չեն, ապա երկրաչափական կառուցվածքային գործոնի փոխարեն ներմուծվում է նոր մեծություն՝

$$\tilde{S}_{\mathbf{K}} = \sum_{j=1}^s f_j(\mathbf{K}) \exp(i\mathbf{K}d_j) \quad (10.19)$$

կառուցվածքային գործոնը, որտեղ ցրման ատոմային գործոնը՝ $f_j(\mathbf{K})$ ֆունկցիան, հաշվի է առնում էլեկտրոնների տարածական բաշխումը j -րդ ատոմում:

Եթե ատոմի կենտրոնում մտովի տեղադրված էլեկտրոնի ցրած ռենտգենյան ալիքի լայնույթը որոշակի ուղղությամբ, ատոմի չափերից շատ մեծ հեռավորություններում, նշանակենք $A(t)$ -ով, ապա $\mathbf{r}$ կետում $n(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ էլեկտրոնների ցրած ալիքի լայնույթը մույն ուղղությամբ համեմատական կլինի $n(\mathbf{r})d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r})$ մեծությամբ (տես (10.7), (10.8) և (10.11) արտահայտությունները), որտեղ $n(\mathbf{r})$ -ն էլեկտրոնների խտությունն է ատոմում: j -րդ ատոմի բոլոր էլեկտրոնների ցրած ալիքի լայնույթը՝

$$A_j(t) = A(t) \int n_j(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} d\mathbf{r} : \quad (10.20)$$

Ատոմային գործոնի սահմանման համաձայն՝

$$f_j(\mathbf{K}) = \frac{A_j(t)}{A(t)} = \int n_j(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} d\mathbf{r} , \quad (10.21)$$

որն էլեկտրոնների խտության ֆուրիե-բաղադրիչն է: Եթե ենթադրենք, որ ցանցում տեղադրված ատոմը չի տարբերվում ազատ ատոմից, և նրանում լիցքի բաշխումն օժտված է զնդային համաչափությամբ, ապա (10.21) բանաձևում անկյուններով ինտեգրումից հետո կստանանք՝

$$f_j(\mathbf{K}) = 4\pi \int_0^\infty r^2 n_j(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr , \quad (10.22)$$

որտեղ, (10.13) բանաձևի համաձայն, հակադարձ ցանցի վեկտորի մոդուլը՝

$$K = 2k \sin \theta \equiv \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda} : \quad (10.23)$$

Նկ. 30-ում պատկերված է $f_j(\mathbf{K})$ ատոմային գործոնի վարքը, կախված $\sin \theta / \lambda$ փոփոխականից, նատրիումի ատոմի համար, որի կարգաթիվը՝ $Z = 11$: Եթե $\sin \theta / \lambda \rightarrow 0$ (կամ $\theta \rightarrow 0$, այսինքն՝ ցրումներ չկան, կամ

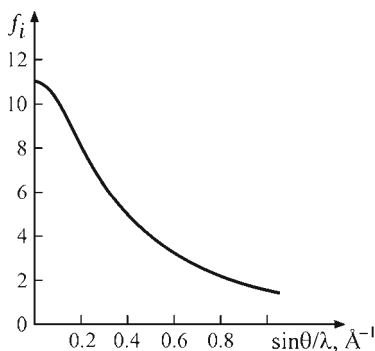
$\lambda \rightarrow \infty$, այսինքն՝ բոլոր էլեկտրոնները տատանվում են միևնույն փուլում), ապա (10.22) և (10.23) բանաձևերից բխում է, որ

$$f_j(\mathbf{K}) = 4\pi \int_0^\infty r^2 n_j(r) dr = Z_j : \quad (10.24)$$

Նույն արդյունքը կստացվի, եթե ենթադրենք, որ ատոմի բոլոր էլեկտրոնները նրա կենտրոնում են, այսինքն՝ (10.21) բանաձևում տեղադրենք

$$n_j(r) = Z_j \delta(\mathbf{r}), \quad (10.25)$$

որտեղ $\delta(\mathbf{r})$ -ը Դիրակի դելտա-ֆունկցիան է:



Նկ. 30. Նատրիումի ատոմային գործոնի գրաֆիկը

Այսպիսով՝ հանգում ենք այն եզրակացության, որ ատոմի վերջավոր չափերով պայմանավորված ինտերֆերենցային երևույթները փոքրացնում են ատոմի՝ որպես ամբողջության ցրման ունակությունը, որն առավել ցայտուն դրսևորվում է ատոմի չափերի կարգի և ավելի փոքր ալիքի երկարությունների համար: Քանի որ դիֆրակտված ճառագայթման ուժգնությունը համեմատական է $|\tilde{S}_{\mathbf{K}}|^2$ մեծությանը, ապա այն զգալի կլինի միայն այն դեպքում, երբ կառուցվածքային գործոնը զրոյից տարբեր է, իսկ ցրման ատոմային գործոնի արժեքը մոտ է տվյալ բյուրեղի համար հնարավոր առավելագույն արժեքին:

ԿԱՊԵՐԻ ՏԵՍԱԿՆԵՐԸ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

§1. Կապի էներգիա

Բյուրեղների դասակարգման վերը դիտարկված սխեմայի հիմքում ընկած են բյուրեղային 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 բյուրեղային համակարգերում էլ կան տարբեր մեխանիկական, էլեկտրական, օպտիկական և այլ հատկություններով բյուրեղներ:

Պինդ մարմինների հատկությունների բազմազանությունը հետևանք է նրանցում իոնների և արժեքական էլեկտրոնների տարածական բաշխման, որն էապես տարբերվում է մեկուսացված ատոմում գոյություն ունեցող բաշխումից:

Կապը պինդ մարմնի մասնիկների միջև հիմնականում պայմանավորված է էլեկտրոնների և դրականապես լիցքավորված միջուկների միջև գործող կուլոնյան փոխազդեցության ուժերով: Կայուն կապի առաջացումը ենթադրում է, որ ցանցի հանգույցներում տատանվող մասնիկների և արժեքական էլեկտրոնների փոխդասավորությանը համապատասխանող էներգիան ավելի փոքր է, քան կամայական այլ փոխդասավորության էներգիան, այդ թվում և այն, որի դեպքում մասնիկներն իրարից անվերջ հեռու են:

Կապի էներգիա են անվանում մարմինն իր բաղադրիչ մասերի (ատոմների, իոնների, մոլեկուլների) բաժանելու համար անհրաժեշտ էներգիան: Այն սահմանվում է որպես մեկուսացված, իրարից անվերջ հեռու մասնիկների համակարգի պոտենցիալ էներգիայի (U_{∞}) և կապված մասնիկների համակարգի պոտենցիալ էներգիայի (U) ու մասնիկների այսպես կոչված «զրոյական» կինետիկ էներգիաների (T_0) տարբերություն՝

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

Եթե մնուշը բաղկացած է M_i զանգվածով N_i իոններից և m զանգվածով N_e ազատ էլեկտրոններից, ապա, օգտվելով անորոշությունների առնչությունից, դրանց զրոյական կիներտիկ 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 իոնի, իսկ L -ը էլեկտրոնի տեղայնացման տիրույթի գծային չափերն են: Եթե ընդունենք, որ $\Delta a \leq a \sim 10^{-8}$ սմ (a -ն ցանցի հաստատունն է), $L \sim 1$ սմ (ազատ էլեկտրոնները կարող են լինել 1 սմ³ ծավալով մնուշի կամայական կետում), $N_e = zN_i \sim N_i$, (ատոմի z արժեքականությունը միավորի կարգի է), և $M_i \sim 10^4 - 10^5 m$, ապա $\gamma \sim 10^{-12} - 10^{-11}$: Այսպիսով՝ իոնների ուժեղ տեղայնացման հետևանքով հիմնական ներդրումը զրոյական տատանումների էներգիայում պայմանավորված է իոններով՝ $T_0 \approx T_{0i}$:

Ջրոյական տատանումները զգալի դեր են խաղում համեմատաբար քեթև տարրերի բյուրեղներում: Մասնավորապես, զրոյական տատանումների, ինչպես նաև ատոմների թույլ փոխազդեցության հետևանքով հեղուկ հելիումը չի բյուրեղանում մթնոլորտային ճնշման տակ անգամ 0 Կ-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 T_0 անդամն անտեսելու հետևանքով առաջացած սխալը չի գերազանցում 1%-ը, ուստի կարելի է ընդունել, որ

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

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

Ընդունված է կապի էներգիան չափել մեկ մասնիկին (ատոմ, մոլեկուլ) բաժին ընկնող էներգիայով՝ արտահայտված էլեկտրոն-վոլտով (էՎ), ինչպես նաև կկալ/մոլ միավորով: Այդ միավորները կապված են հետևյալ կերպ՝ 1էՎ/մասնիկ $\approx 23,05$ կկալ/մոլ $\approx 96,51$ կՋ/մոլ:

§2. Բյուրեղային մարմինների դասակարգումը

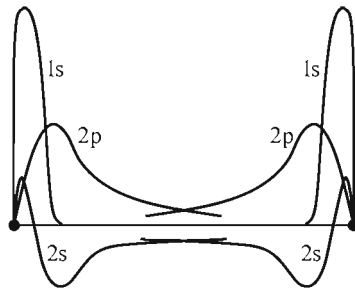
Պինդ բյուրեղային մարմինները, ըստ նրանցում էլեկտրոնների տարածական բաշխման, ընդունված է դասակարգել հետևյալ տեսակների՝ *մոլեկուլային բյուրեղներ, իոնային բյուրեղներ, կովալենտ բյուրեղներ, մետաղներ և ջրածնային կապով բյուրեղներ*:

Համառոտակի ծանոթանանք նշված տեսակների բյուրեղներին բնորոշ ֆիզիկական հատկություններին:

Մոլեկուլային բյուրեղներ

Այս տեսակի բնութագրական ներկայացուցիչներն են իներտ տարրերի (**He, Ne, Ar, Kr, Xe**) բյուրեղները:

Ինչպես հայտնի է, իներտ տարրերի ատոմներն ունեն լրացված (փակ) արտաքին էլեկտրոնային թաղանթ: Ազատ ատոմում էլեկտրոնների տարածական բաշխումն օժտված է գնդային համաչափությամբ, որը գործնականորեն մնում է անփոփոխ, երբ ատոմը բյուրեղում է: Նկ. 31-ում պատկերված է նեոնի ատոմի (էլեկտրոնային փոխդասավորությունը՝ $1s^2 2s^2 2p^6$) շառավղային $r\psi(r)$ ալիքային ֆունկցիան երկու հարևան հանգույցների համար: Ինչպես երևում է գծագրից, և՛ $2p$, և՛ $2s$ վիճակները թույլ չափով են «ծածկվում»:



Նկ. 31. Նեոնի ատոմի շառավղային ալիքային ֆունկցիան երկու հարևան հանգույցների համար

Այս տեսակի բյուրեղների համար հատկանշական է ատոմների խիտ դարսվածքը: Բացի He^3 և He^4 իզոտոպներից՝ բոլոր իներտ տարրերի բյուրեղներն ունեն միատակենտրոն խորանարդային ցանց: Մեկուսիչներ են, ունեն

կապի փոքր էներգիաներ և հալման ցածր ջերմաստիճաններ (Աղյուսակ 10-ում հալման ջերմաստիճանները տրված են 1 մթն. ճնշման դեպքում):

Աղյուսակ 10.

Մոլեկուլային բյուրեղների որոշ բնութագրեր

Բյուրեղ	Ցանցի հաստատուն, Å	Կապի էներգիա, ԷՎ/ատոմ	Հալման ջերմաստիճան, Կ	Բյուրեղային կառուցվածք
Ne	3,13	0,02	24	ՆԿԽ
Ar	3,76	0,08	84	ՆԿԽ
Kr	4,01	0,116	117	ՆԿԽ
Xe	4,35	0,17	161	ՆԿԽ

Ըստ մագնիսական հատկությունների՝ դիամագնիսներ են: Բացի իներտ տարրերի բյուրեղներից՝ այս դասին են պատկանում նաև **H₂**, **O₂**, **N₂**, **HCl**, **HBr**, **Cl₂**, **NH₃**, **CO₂**, **CH₄** և բազմաթիվ օրգանական միացությունների բյուրեղներ:

Իոնային բյուրեղներ

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

Մտաջին խմբի մետաղներն ունեն համեմատաբար փոքր իոնացման պոտենցիալ, որն իրենից ներկայացնում է չեզոք ատոմից էլեկտրոն պոկելու և այն մինչև 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 թույլ կապված արժեքական էլեկտրոնը՝ առաջացնելով կայուն **Cl⁻** իոն: Լրացուցիչ էլեկտրոնի կապի էներգիան (այսպես կոչված «խնամակցության» էներգիան) **Cl⁻** իոնի համար մոտավորապես 3,6 էՎ է, իսկ **Na**-ի իոնացման պոտենցիալը՝ 5,1 էՎ: Այսպիսով՝ **Na**-ի և **Cl**-ի չեզոք ատոմներից չփոխազդող, այսինքն՝ իրարից անվերջ հեռու 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 **NaCl** բյուրեղի ցանցի $a \approx 2,8 \text{ Å}$ հաստատունին հավասար հեռավորությամբ իոնների միջև՝ $-e^2/a \approx -5,1$ էՎ, ապա **Na⁺Cl⁻** մոլեկուլին բաժին ընկնող էներգիա-

յի համար կատանանք ($-5,1+1,5$) էՎ $\approx -3,6$ էՎ: Հետևաբար՝ իրարից անվերջ հեռու չեզոք ատոմների գոյությունն էներգիապես ավելի ձեռնառու է, քան իոնների: Մետաղի ատոմի արժեքական էլեկտրոնը հալոգենի ատոմին անցնելու 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: Բյուրեղը կազմող տարբեր տիպի իոններում լիցքի բաշխումը գործնականորեն չի տարբերվում համապատասխան իներտ տարրի ատոմներում լիցքի բաշխումից, որն օժտված է գնդային համաչափությամբ: Դրական և բացասական իոնների միջև գործող կոլոյնյան ձգողության հետևանքով էլ առաջանում է իոնային բյուրեղը:

Աղյուսակ 11.

Իոնային բյուրեղների որոշ բնութագրեր

Բյուրեղ	Ցանցի հաստատուն, Å	Կապի էներգիա, էՎ/մոլեկուլ	Հալման ջերմաստիճան, Կ	Բյուրեղային կառուցվածք
LiF	2,014	10,5	878	նատրիումի քլորիդի
LiCl	2,570	8,63	886	նատրիումի քլորիդի
NaCl	2,820	7,94	1077	նատրիումի քլորիդի
NaBr	2,989	7,56	1028	նատրիումի քլորիդի
KCl	3,147	7,19	1049	նատրիումի քլորիդի
KJ	3,533	6,50	996	նատրիումի քլորիդի
RbF	2,815	7,88	1068	նատրիումի քլորիդի
RbCl	3,291	6,94	988	նատրիումի քլորիդի
AgCl	4,93	8,9	718	նատրիումի քլորիդի
AgBr	5,78	8,77	707	նատրիումի քլորիդի
MgO	4,211	10,33	3073	նատրիումի քլորիդի
CsCl	4,296	6,62	919	ցեզիումի քլորիդի

Իոնային բյուրեղները հիմնականում միատակենսորոն և ծավալակենտրոն խորանարդային կառուցվածքներ են, որոնց բնորոշ է իոնների խիտ դարսվածքը: Իոնային բյուրեղներն ունեն կապի մեծ էներգիաներ (Աղյուսակ

11-ում բերված են կապի էներգիայի՝ փորձում, սենյակային ջերմաստիճանում ստացված արժեքները և հալման ջերմաստիճանները 1 մթն. ճնշման դեպքում): Ցածր ջերմաստիճաններում լավ մեկուսիչներ են (չնչին էլեկտրոնային հաղորդականություն), բարձր ջերմաստիճաններում օժտված են զգալի իոնային հաղորդականությամբ: Բնութագրվում են նաև ենթակարմիր ճառագայթման ուժեղ կլանումով: Ըստ մագնիսական հատկությունների դիամագնիսներ են:

Կովալենտ բյուրեղներ

Կովալենտ բյուրեղներում կապը չեզոք ատոմների միջև առաջանում է երկու մոտակա ատոմների «ընդհանրացված» էլեկտրոնների միջոցով: Ի տարբերություն իոնային բյուրեղների, որոնցում արժեքական էլեկտրոնները կապված են որոշակի իոնների հետ, և որի հետևանքով երկու իոնների միջև տիրույթում էլեկտրոնային խտությունը փոքր է, կովալենտ կապի դեպքում այն զգալի է: Այսպես, օրինակ, NaCl -ի բյուրեղում էլեկտրոնային խտությունը մոտակա իոնները միացնող գծի երկայնքով նվազում է մինչև $0,1$ էլեկտրոն/ $\text{\AA}^3$ և ավելի փոքր արժեքներ, իսկ ալմաստում, որը կովալենտ բյուրեղների դասի ամենացայտուն ներկայացուցիչն է, այն մեծ է 5 էլեկտրոն/ $\text{\AA}^3$ -ից: Կապն առաջացնող էլեկտրոնային զույգում էլեկտրոնների սպինները հակազուգահեռ 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» (վալենտականություն) հասկացությամբ: Օրինակ՝ ածխածնի (ալմաստի) ատոմի էլեկտրոնային փոխդասավորությունն է $1s^2 2s^2 2p^2$, և $2p^6$ փակ թաղանթ կառուցելու համար անհրաժեշտ է 4 էլեկտրոն, ուստի ածխածնի ատոմում ի հայտ է գալիս այդ պակասը մոտակա չորս հարևանների արժեքական էլեկտրոններով լրացնելու ձգտում:

Կովալենտ կապի մյուս յուրահատկությունը նրա տարածական ուղղորդվածությունն է: Դա է պատճառը, որ ալմաստի կառուցվածքով ցանցում ածխածնի յուրաքանչյուր ատոմ զբաղեցնում է մոտակա չորս հարևաններով կառուցված քառանիստի կենտրոնը (տես նկ. 18. ք):

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

Կովալենտ բյուրեղներն ունեն մեծ ամրություն, կապի մեծ էներգիաներ (Աղյուսակ 12), բայց և փխրուն են: Հաղորդականությունը շատ զգայուն է տարրեր խառնուկների առկայության նկատմամբ և ջերմաստիճանից կախված՝ էապես փոփոխվում է՝ բարձր ջերմաստիճաններում մոտենալով որոշ մետաղների հաղորդականությանը: Ունեն համեմատաբար մեծ դիէլեկտրական թափանցելիություն և բեկման ցուցիչ, թափանցիկ են երկարալիքային ճառագայթման համար, սակայն որոշակի ալիքի երկարությունից սկսած (տեսանելի կամ ենթակարմիր տիրույթում) դառնում են անթափանցիկ: Ըստ մագնիսական հատկությունների՝ դիամագնիսներ են:

Աղյուսակ 12.

Կովալենտ բյուրեղների որոշ բնութագրեր

Բյուրեղ	Ցանցի հաստատուն, Å	Կապի էներգիա, ԷՎ/մոլեկուլ	Հալման ջերմաստիճան, Կ	Բյուրեղային կառուցվածք
C (ալմաստ)	3,7	7,36	4300	ալմաստի
Si	5,43	4,64	1683	ալմաստի
Ge	5,32	3,87	1211	ալմաստի
α-Sn	5,82	3,12	505	քառանկյունային
β-SiC	4,357	12,23	2830	ZnS (սֆալերիտ)
GaSb	6,130	6,03	985	ZnS (սֆալերիտ)
GaAs	5,653	6,73	1511	ZnS (սֆալերիտ)
InSb	6,048	5,59	798	ZnS (սֆալերիտ)

Մետաղներ

Մետաղները բնութագրվում են մեծ էլեկտրա- և ջերմահաղորդականությամբ, լույսի կլանման մեծ գործակցով, մեծ պլաստիկությամբ և կռելիությամբ: 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 ընդունում են 1–5 էՎ/ատոմ արժեքներ: Ալկալիական մետաղներում (**Li, Na, K, Rb, Cs**) դրանք համեմատաբար փոքր են՝ 1 էՎ/ատոմ կարգի, որի հետևանքով նրանց հալման ջերմաստիճանները համեմատաբար ցածր են (Աղյուսակ 13): Այս մետաղների բյուրեղները կարելի է պատկերել որպես տարածական ցանց, որի հանգույցներում

դրական իոններն են, և որն «ընկղմված» է էլեկտրոնային «ծովում»: Անցումային մետաղներում (**Fe, W, Mo** և այլն), որոնց ատոմներում կան ներքին չլրացված էլեկտրոնային թաղանթներ, կապի էներգիան ընդունում է մեծ արժեքներ: Այս հանգամանքը պայմանավորված է մետաղական իոնների չլրացված d-թաղանթների էլեկտրոնների միջև գործող մասամբ կովալենտ կապով, մասամբ էլ վանդերվաալսյան փոխազդեցությամբ:

Աղյուսակ 13.

Մետաղական բյուրեղների որոշ բնութագրեր

Մետաղ	Ցանցի հաստատուն, Å	Կապի էներգիա, էՎ/ատոմ	Հալման ջերմաստիճան, Կ	Բյուրեղային կառուցվածք
Li	3,174	1,65	453	ցեզիումի քլորիդի
Na	4,291	1,13	371	ԾԿԽ
K	5,211	0,941	397	ԾԿԽ
Rb	5,631	0,858	312	ԾԿԽ
Cs	4,296	0,827	302	ԾԿԽ
α - Fe	2,866	4,29	1808	ԾԿԽ
Mo	3,147	6,81	2898	ԾԿԽ
W	3,165	8,66	3683	ԾԿԽ
Ru	2,70	6,615	2583	վեցամկյունային

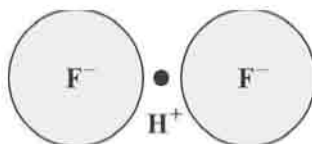
Որպես կանոն, մետաղները բյուրեղանում են՝ առաջացնելով նիստակենտրոն, ծավալակենտրոն խորանարդային, վեցամկյուն և այլ խիտ դարսվածքով կառուցվածքներ: Ըստ մագնիսական հատկությունների՝ լինում են և՛ դիամագնիսներ, և՛ պարամագնիսներ, և՛ ֆեռոմագնիսներ:

Ջրածնային կապով բյուրեղներ

Որոշ բյուրեղային 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 ձգողության զգալի ուժերով կապվել 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: Մահմանային դեպքում ջրածնի ատոմը կորցնում է իր միակ էլեկտրոնը՝ տալով այն երկու ատոմներից որևէ մեկին և վերածվում պրոտոնի, որն էլ առաջացնում է կապն ատոմների միջև: Պրոտոնի փոքր չափերը ($\sim 10^{-13}$ սմ) հնարավորություն չեն տալիս նրան իրար կապելու երկուսից ավելի ատոմ (նկ. 32):



Նկ. 32 Ջրածնային կապի առաջացումը

Ջրածնային կապով են պայմանավորված ջրի և սառույցի յուրահատկությունները, ինչպես նաև որոշ սեզնետալեկտրական բյուրեղների, մասնավորապես՝ կալիումի դիհիդրոֆոսֆատի (KH_2PO_4) և բազմաթիվ օրգանական միացությունների ֆիզիկական հատկությունները:

Պինդ մարմինների վերը նկարագրված դասակարգումը համապատասխանում է այն սահմանային դեպքերին, երբ բյուրեղը կազմող մասնիկների 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 էլեկտրոններն էլ միևնույն միջուկի մոտ են, այսինքն՝ մոլեկուլում կապը դառնում է իոնային՝ առաջանում են իրար ձգող H^+ և H^- իոններ: Քանի 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՛ իոնային, և՛ կովալենտ կապերը: Այդպիսիների թվին են պատկանում $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ միացություններից շատերը, որոնք նկարագրվում են որպես կովալենտ բյուրեղներ, որոնց իոնային մնացորդների մոտ պահպանվել է հավերժության լիցք (Աղյուսակ 14): Հարկ է նշել նաև, որ ատոմների (իոնների) միջև միշտ գործում են ունիվերսալ բնույթի վանդերվաալսյան ուժեր, որոնք իոնային և կո-

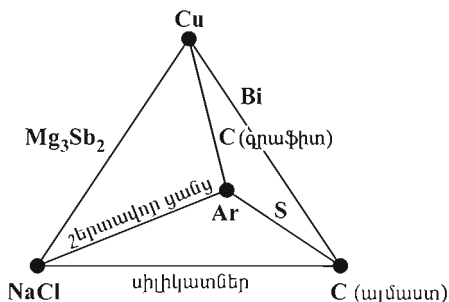
վալենտ փոխազդեցություններից զգալի թույլ լինելու հետևանքով, նրանց հետ միաժամանակ, որպես կանոն, հաշվի չեն առնվում:

Աղյուսակ 14.

Կապի իոնականության աստիճանը (δ)

Բյուրեղ	δ	Տարրերի խմբերը	Բյուրեղ	δ	Տարրերի խմբերը
Si	0,00	A^{IV}	InP	0,44	$A^{IV}B^{IV}$
Ge	0,00	A^{IV}	ZnO	0,62	$A^{II}B^{VI}$
SiC	0,18	$A^{IV}B^{IV}$	CuCl	0,75	A^{IB}^{VII}
GaSb	0,26	$A^{III}B^V$	NaCl	0,94	A^{IB}^{VII}
GaAs	0,32	$A^{III}B^V$	RbF	0,96	A^{IB}^{VII}

Տարրեր տեսակի կապերի միջև անցումները նպատակահարմար է պատկերել Գրինի քառանիստի օգնությամբ, որի չորս գագաթներում «մաքուր» կապերի ներկայացուցիչներն են, իսկ կողմերը խորհրդանշում են անցումներն այդ կապերի միջև (նկ. 33): Օրինակ՝ Bi-ի դեպքում վերադրվում են կովալենտ և մետաղական կապերը: Միջմետաղական Mg_3Sb_2 միացությունը ներկայացնում է անցումը մետաղական կապից իոնայինին: Գրաֆիտի շերտերն ունեն հստակ արտահայտված մետաղական հատկություններ և իրար հետ կապված են վանդերվաալսյան կապով: Սիլիկատները կազմում են բնորոշ անցումային խումբ իոնային և կովալենտ կապերի միջև: Ծծմբի օղակում 8 ատոմները կապված են կովալենտ կապով, իսկ առանձին օղակներն իրար են կապվում վանդերվաալսյան ուժերով:

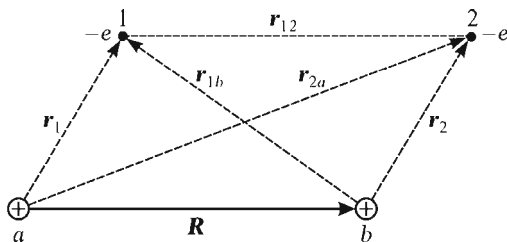


Նկ. 33. Գրինի քառանիստը

§3. Վանդերվաալսյան կապի տեսությունը

Վանդերվաալսյան (ընդունված են մաս «Ֆյուկտուացիոն», «դիսպերսա-
յին», «մոլեկուլային» անվանումները) կապի տեսությունը ջրածնի երկու ա-
տոմների օրինակով ստեղծել են Ֆ. Լոնդոնը և Ռ. Այզենշիցը 1930 թ.:

Դիտարկենք իրարից R հեռավորությամբ ջրածնի երկու ատոմ (նկ. 34):
1-ին էլեկտրոնի դիրքը a միջուկի նկատմամբ որոշվում է $\mathbf{r}_1$, իսկ b միջուկի
նկատմամբ՝ $\mathbf{r}_{1b}$ շառավիղ-վեկտորով, 2-ինը՝ b միջուկի նկատմամբ՝ $\mathbf{r}_2$, իսկ
 a միջուկի նկատմամբ՝ $\mathbf{r}_{2a}$ շառավիղ-վեկտորով: Կոորդինատական z ա-
ռանցքն ուղղված է միջուկները միացնող ուղղով:



Նկ. 34. Երկու պրոտոնից և երկու էլեկտրոնից բաղկացած
համակարգի գծապատկերը

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}}, \quad (3.1)$$

որտեղ Δ_1 և Δ_2 լապլասիաններն ազդում են համապատասխանաբար $\mathbf{r}_1$ և
 $\mathbf{r}_2$ փոփոխականների վրա, e^2/r_{12} անդամն «էլեկտրոն-էլեկտրոն» փոխազ-
դեցության պոտենցիալ էներգիան է, $-e^2/r_{1b}$ -ն՝ «1-ին էլեկտրոն – b միջուկ»,
 $-e^2/r_{2a}$ -ն՝ «2-րդ էլեկտրոն – a միջուկ» փոխազդեցության էներգիաները:

Եթե միջուկներն իրարից շատ հեռու են՝ $R \gg a_0$ ($a_0 = \hbar^2/me^2 = 0,529\text{\AA}$
մեծությունը Բորի շառավիղն է), ապա $r_{12} \sim r_{1b} \sim r_{2a} \sim R$, և (3.1) արտահայ-
տության վերջին չորս անդամների գումարը՝

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \quad (3.2)$$

արտահայտությունը կարելի է դիտել որպես չփոխազդող ատոմների

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} \quad (3.3)$$

համիլտոնիանի գրգռում: r_{12} , r_{1b} և r_{2a} մեծություններն արտահայտելով $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ և $\mathbf{R}$ վեկտորների միջոցով և հաշվի առնելով $r_1, r_2 \ll R$ անհավասարությունները՝ (3.2) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$\hat{H}' = \frac{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}{R^3} - \frac{3(\mathbf{p}_1 \mathbf{R})(\mathbf{p}_2 \mathbf{R})}{R^5} = -\mathbf{p}_2 \mathbf{E}_1 \quad (3.4)$$

տեսքով, որտեղ $\mathbf{p}_1 = -e\mathbf{r}_1$ և $\mathbf{p}_2 = -e\mathbf{r}_2$ վեկտորները a և b ատոմների երկրկետային մոմենտներն են, իսկ

$$\mathbf{E}_1 = \frac{3\mathbf{R}(\mathbf{p}_1 \mathbf{R})}{R^5} - \frac{\mathbf{p}_1}{R^3} \quad (3.5)$$

վեկտորը $\mathbf{p}_1$ երկրկետի ստեղծած էլեկտրական դաշտի լարվածությունն է այն կետում, որտեղ $\mathbf{p}_2$ երկրկետն է: Այսպիսով՝ $\hat{H}'$ անդամը «երկրկետ-երկրկետ» փոխազդեցության համիլտոնիանն է:

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

$$E_1^{(0)} = 2\varepsilon_1^{(0)}, \quad (3.6)$$

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՝

$$E_1^{(1)} = \int \Psi_{11}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{H}' \Psi_{11}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (3.7)$$

որտեղ $\Psi_{11}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ -ը համակարգի հիմնական վիճակի ալիքային ֆունկցիան է զրոյական մոտավորությամբ: Քանի որ $R \gg a_0$, ապա կարելի է հաշվի չառնել էլեկտրոնների մույնականությամբ պայմանավորված փոխանակային փոխազդեցությունը և հիմնական վիճակների ալիքային ֆունկցիան ներկայացնել 1-ին և 2-րդ էլեկտրոնների հիմնական վիճակների ալիքային ֆունկցիաների արտադրյալի տեսքով՝

$$\psi_{11}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2): \quad (3.8)$$

(3.7) և (3.8) բանաձևերից հետևում է, որ էներգիայի ուղղումը $E_1^{(1)} = 0$, քանի որ այն համեմատական է ատոմի երկբևեռային մոմենտի պրոյեկցիաների միջինների արտադրյալին, որոնցից յուրաքանչյուրն ատոմի զնդային համաչափության հետևանքով զրո է՝

$$\langle p_i \rangle = -e\langle x_i \rangle \equiv -e \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(\mathbf{r}_1) x_i \psi_1(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 = 0 \quad (i=1,2,3): \quad (3.9)$$

Գրգռումների տեսության երկրորդ մոտավորությամբ հիմնական վիճակի էներգիայի ուղղումը որոշվում է

$$E_1^{(2)} = \sum_{(n)}' \frac{|H'_{1n}|^2}{E_1^{(0)} - E_{(n)}^{(0)}} \quad (3.10)$$

բանաձևով, որտեղ (n) -ը տվյալ վիճակը բնութագրող քվանտային թվերի լրիվ հավաքածուն է, գումարումը կատարվում է բոլոր վիճակներով՝ բացի հիմնականից, $E_{(n)}^{(0)} = E_{ik}^{(0)}$ -ն երկու գրգռված, չփոխազդող ատոմների համակարգի էներգիան է՝

$$E_{(n)}^{(0)} = \varepsilon_i^{(0)} + \varepsilon_k^{(0)}, \quad (3.11)$$

իսկ

$$\varepsilon_i^{(0)} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{i^2}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (3.12)$$

ջրածնի ատոմի էներգիան է (i) քվանտային վիճակում:

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

$$\begin{aligned} \hat{H}'_{1n} &= \int \psi_{11}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{H}' \psi_{(n)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \frac{e^2}{R^3} \int \psi_{11}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{ik}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \equiv \frac{e^2}{R^3} \langle 1, 1 | \omega | i, k \rangle, \end{aligned} \quad (3.13)$$

որտեղ (3.4) արտահայտության համաձայն՝

$$\omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2, \quad (3.14)$$

իսկ գրգռված վիճակի ալիքային ֆունկցիան՝

$$\Psi_{(n)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_i(\mathbf{r}_1) \psi_k(\mathbf{r}_2): \quad (3.15)$$

Հարկ է նշել, որ (3.13) բանաձևում օգտագործվել է $\omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ օպերատորի մատրիցական տարրի դիրակյան նշանակումը՝

$$\langle 1, 1 | \omega | (ik) \rangle \equiv \int \psi_{11}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{ik}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (3.16)$$

(3.10) արտահայտության էներգիական հայտարարը բացասական է, քանի որ $\varepsilon_i^{(0)} + \varepsilon_k^{(0)} > 2\varepsilon_1^{(0)}$, հետևաբար՝ երկու ատոմների փոխազդեցության էներգիան կարելի է ներկայացնել

$$W(R) \equiv E_1^{(2)} = -\frac{W_0}{R^6} \quad (3.17)$$

տեսքով, որտեղ

$$W_0 = e^4 \sum_{i,k} \frac{|\langle 1, 1 | \omega | i, k \rangle|^2}{|2\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}|}: \quad (3.18)$$

(3.17) արտահայտության համաձայն՝ $R \gg a_0$ հեռավորությամբ չեզոք ատոմների միջև գործում են ձգողության ուժեր՝ $W(R) < 0$:

Այժմ գնահատենք (3.18) բանաձևով սահմանված W_0 հաստատունը: Օգտվելով (3.12) բանաձևից՝ (3.18) արտահայտության հայտարարի համար կարելի է ստանալ հետևյալ գնահատականը.

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

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

$$\left| 2\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)} \right| \approx \frac{me^4}{\hbar^2}: \quad (3.19)$$

Նկատի ունենալով (3.19) գնահատականը, ինչպես նաև օգտվելով (3.8), (3.15), (3.16) արտահայտություններից և Շրոդինգերի հավասարման լուծումների համակարգի լրիվության պայմանից՝

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}_1) \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}_1') = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1'), \quad (3.20)$$

որտեղ $\delta(\mathbf{r}_1)$ -ը Դիրակի դելտա-ֆունկցիան է, W_0 հաստատունը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\begin{aligned} W_0 &\approx \frac{\hbar^2}{m} \sum'_{i,k} |\langle 1,1 | \omega | i,k \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m} \sum'_{i,k} \langle 1,1 | \omega | i,k \rangle \langle 1,1 | \omega | i,k \rangle^* = \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \sum'_{i,k} \langle 1,1 | \omega | i,k \rangle \langle i,k | \omega | 1,1 \rangle^* = \frac{\hbar^2}{m} \langle 1,1 | \omega |^2 | 1,1 \rangle : \end{aligned} \quad (3.21)$$

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

$$\begin{aligned} \langle x_1 \rangle &= \langle x_2 \rangle = \dots = \langle z_2 \rangle = 0, \\ \langle x_1^2 \rangle &= \langle y_1^2 \rangle = \dots = \langle z_2^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle, \end{aligned} \quad (3.22)$$

ապա

$$\langle 1,1 | \omega |^2 | 1,1 \rangle = \langle 1,1 | x_1^2 x_2^2 + y_1^2 y_2^2 + 4z_1^2 z_2^2 | 1,1 \rangle = \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle^2 : \quad (3.23)$$

Օգտվելով ջրածնի ատոմի հիմնական վիճակի ալիքային ֆունկցիայի արտահայտությունից՝

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right), \quad (3.24)$$

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

$$\langle r^2 \rangle \equiv \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^4 dr d\varphi \sin \theta d\theta = 3a_0^2 : \quad (3.25)$$

(3.18) – (3.20) և (3.25) բանաձևերից հետևում է, որ

$$W_0 \approx \frac{\hbar^2}{m} \frac{2}{3} (3a_0^2)^2 = 6e^2 a_0^5 : \quad (3.26)$$

Ավելի ճշգրիտ հաշվարկների համաձայն՝ $W_0 \approx 6,47e^2 a_0^5$:

Անհրաժեշտ է նշել, որ (3.17) արտահայտությամբ տրվող վանդեր-վաալսյան փոխազդեցությունն իր բնույթով քվանտային երևույթ է, քանի որ դասական սահմանում ($\hbar \rightarrow 0$) $W(R) \rightarrow 0$:

Կամայական չեզոք ատոմների վանդերվաալսյան փոխազդեցության W_0 հաստատունն ընդունված է մոտարկել

$$W_0 \approx \frac{3}{2} \frac{I_a I_b}{I_a + I_b} \alpha_a \alpha_b \quad (3.27)$$

բանաձևով, որտեղ $I_a(I_b)$ -ն $a(b)$ ատոմի իոնացման պոտենցիալն է, $\alpha_a(\alpha_b)$ -ն՝ ատոմի բևեռացվելիությունը:

Եթե փոխազդեցության $\hat{H}'$ համիլտոնիանի (3.2) արտահայտությունն ըստ a_0/R պարամետրի շարքի վերածելիս, բացի $(a_0/R)^3$ -ի կարգի անդամներից, պահվեն մակ ավելի բարձր կարգի փոքրերը $((a_0/R)^4, (a_0/R)^5)$, ապա փոխազդեցության էներգիայի համար կատացվի հետևյալ արտահայտությունը՝

$$W = -\frac{W_0}{R^6} - \frac{W_1}{R^8} - \frac{W_2}{R^{10}}, \quad (3.28)$$

որտեղ W_1 -ը «երկրեն-քառաբևեռ», իսկ W_2 -ը՝ «քառաբևեռ-քառաբևեռ» փոխազդեցությունների հաստատուններն են:

Վանդերվաալսյան փոխազդեցության հետևանքով չեզոք ատոմների համախմբից առաջանում է մոլեկուլային բյուրեղ: Ինչպես հետևում է (3.17) բանաձևից, R -ի փոքրացմանը զուգընթաց ձգողական փոխազդեցությունն անվերջ աճում է, որն, ի վերջո, կբերի բյուրեղի անվերջ սեղմման: Սակայն ձգողության ուժերի հետ մեկտեղ բյուրեղում գործում են գործողության փոքր շառավղով և ատոմների միջև հեռավորության փոքրացմանը զուգընթաց չափազանց արագ աճող վանողության 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 լինել միևնույն քվանտային վիճակում: Երբ

ատոմների էլեկտրոնային թաղանթներն սկսում են վերադրվել, մի ատոմի էլեկտրոնները ձգտում են տեղեր զբաղեցնել մյուս ատոմում և հակառակը: Պատվիի 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 վիճակներ անցումներով: Այսպիսով՝ էլեկտրոնային թաղանթների վերադրումն ուղեկցվում է համակարգի լրիվ էներգիայի մեծացումով, որը համապատասխանում է վանդերվալյան 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 հաշվարկները լավագույնս համընկնում են փորձի հետ:

§4. Մոլեկուլային բյուրեղի կապի էներգիայի հաշվարկը

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

Վանդալական փոխազդեցության էներգիան հաճախ ներկայացվում է

$$V(R) = AR^{-m} \quad (4.1)$$

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

$$V(R) = \lambda \exp(-R/\rho) \quad (4.2)$$

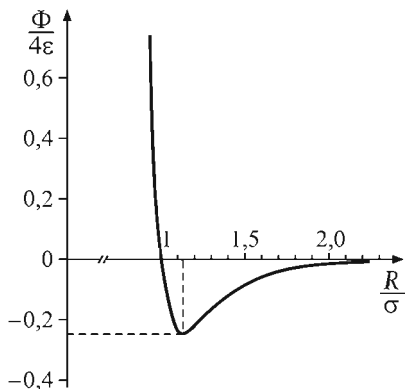
արտահայտությունից, որտեղ ρ -ն փոխազդեցության տիրույթի բնութագրական շառավիղն է:

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

$$\Phi(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right], \quad (4.3)$$

որտեղ ε և σ մեծությունները բնութագրում են ատոմները: (4.3) արտահայտության առաջին անդամը նկարագրում է ատոմների միջև վանդալական

ուժը, իսկ երկրորդը՝ վանդերվաալյան ձգողությունը: ε մեծությունը փոխազդեցության էներգիայի նվազագույն արժեքն է (պոտենցիալային փոսի խորությունը), իսկ σ -ն՝ այն հեռավորությունը, որի դեպքում $\Phi(\sigma) = 0$: (4.3) արտահայտության գրաֆիկը պատկերված է նկ. 35-ում:



Նկ. 35. Երկու չեզոք ատոմների փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիայի գրաֆիկը

Եթե բյուրեղը բաղկացած է N ատոմից, ապա նրա լրիվ պոտենցիալ էներգիան հավասար է բոլոր ատոմների զույգերի փոխազդեցության (4.3) էներգիաների գումարին՝

$$U = \frac{1}{2} N \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \Phi(\mathbf{R}), \quad (4.4)$$

ընդ որում՝ $1/2$ գործակցի շնորհիվ գումարում ատոմների յուրաքանչյուր զույգի փոխազդեցության էներգիան հաշվի է առնվում մեկ անգամ:

(4.4) գումարը հաշվելու համար Բրավեի ցանցի կամայական $\mathbf{R}$ վեկտորի երկարությունը հարմար է արտահայտել ամենամոտ հարևանների միջև R հեռավորության և $\alpha(\mathbf{R})$ չափագուրկ գործակցի միջոցով՝

$$|\mathbf{R}| = R \alpha(\mathbf{R}): \quad (4.5)$$

Սեկ ատոմին բաժին ընկնող պոտենցիալ էներգիան՝

$$u(R) = \frac{U}{N} = 2\varepsilon \left[\sum_{\mathbf{R} \neq 0} \left(\frac{\sigma}{|\mathbf{R}|} \right)^{12} - \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \left(\frac{\sigma}{|\mathbf{R}|} \right)^6 \right] = 2\varepsilon \left[A_{12} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - A_6 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right], \quad (4.6)$$

որտեղ

$$A_n = \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \frac{1}{\alpha^n(\mathbf{R})} : \quad (4.7)$$

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

$$A_n = z_I + \sum_{\mathbf{R} \neq 0, I} \frac{1}{\alpha^n(\mathbf{R})}, \quad (4.8)$$

որտեղ z_I մեծությունն ատոմների թիվն է I կոորդինացիոն խմբում, իսկ գումարումը կատարվում է II և հաջորդ բոլոր կոորդինացիոն խմբերով: Երբ $n \rightarrow \infty$, $A_n \rightarrow z_I$, իսկ երբ n -ը նվազում է, A_n գործակիցն աճում է, քանի որ, բացի I կոորդինացիոն խմբից, գումարի մեջ ներդրում են ունենում նաև մյուս կոորդինացիոն խմբերը: Հարկավոր է նաև նշել, որ (4.8) գումարը տարամիտում է, երբ $n \leq 3$:

Ստորև, նկատի ունենալով այն հանգամանքը, որ, բացի հելիումից, բոլոր իներտ տարրերի բյուրեղներն ունեն միատակենտրոն խորանարդային ցանց, հետագա հաշվարկները կկատարենք ալյուսի ցանցի համար:

Խորանարդային միատակենտրոն կառուցվածքում $z_I = 12$, $z_{II} = 6$, $\alpha = \sqrt{2}$, ուստի II կոորդինացիոն խմբի ներդրումը կլինի

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

իսկ III կոորդինացիոն խմբինը՝ ($z_{III} = 12$, $\alpha = \sqrt{2}$)

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

որոնց օգնությամբ կստանանք՝ $A_{12} = 12,09668$: Ճշգրիտ հաշվարկների համաձայն՝ $A_{12} = 12,13188$, $A_6 = 14,445392$: Ինչպես հետևում է բերված թվային տվյալներից, $n = 12$ դեպքում շարքի գումարը 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՝ նաև մեկ ատոմին բաժին ընկնող, պոտենցիալ էներգիան ամենափոքրն է, ուստի

$$\left(\frac{du}{dR}\right)_{R=R_0} = 0, \quad (4.9)$$

որտեղից (4.6) արտահայտության օգնությամբ հեշտությամբ ստացվում են ամենամոտ հարևանների միջև հավասարակշռական հեռավորության՝

$$R_0 = \sigma \left(\frac{2A_{12}}{A_6} \right)^{1/6} \approx 1,09\sigma \quad (4.10)$$

և պոտենցիալ էներգիայի՝

$$u_0 \equiv u(R_0) = -\frac{A_6^2}{2A_{12}} \varepsilon \approx -8,6\varepsilon \quad (4.11)$$

արտահայտությունները:

Տեսությունը փորձով ստուգելու համար նպատակահարմար է հաշվարկել նաև փորձնականորեն հեշտությամբ չափվող պարամետրեր, որոնցից են, օրինակ, առաձգականության իզոթերմային (B_T) և ադիաբատային (B_S) ծավալային մոդուլները: Երբ $T = 0$ Կ, B_T և B_S գործակիցները համընկնում են, ուստի, օգտվելով նաև ջերմադինամիկայի հիմնական հավասարումից հետևող $dU = -PdV$ առնչությունից, որտեղ P -ն ճնշումն է, V -ն՝ համակարգի ծավալը, կստանանք՝

$$B_0 = -V \frac{dP}{dV} = V \frac{d^2U}{dV^2} = v \frac{d^2u}{dv^2}, \quad (4.12)$$

որտեղ $v = V/N$ մեծությունը մեկ ատոմին բաժին ընկնող ծավալն է: Արտահայտենք այն միջմասնիկային R հեռավորության միջոցով: Եթե միատկենտրոն ցանցի տարրական խորանարդի կողը նշանակենք a -ով, ապա $v = a^3/4 = R^3/\sqrt{2}$, քանի որ $a = \sqrt{2}R$: Նկատի ունենալով ըստ v -ի և ըստ R -ի ածանցյալների միջև

$$\frac{d}{dv} = \frac{d}{dR} \cdot \frac{dR}{dv} = \frac{\sqrt{2}}{3R^2} \frac{d}{dR} \quad (4.13)$$

կապը, ինչպես նաև (4.9) պայմանը՝ առաձգականության ծավալային մոդուլի համար $T = 0$ Կ-ում կստանանք հետևյալ արտահայտությունը՝

$$B_0 = \frac{\sqrt{2}}{9R_0} \left(\frac{d^2 u}{dR^2} \right)_{R=R_0} = \frac{4\varepsilon}{\sigma^3} A_{12} \left(\frac{A_6}{A_{12}} \right)^{5/2} \approx \frac{75\varepsilon}{\sigma^3} : \quad (4.14)$$

Աղյուսակ 15-ում բերված են σ և ε բնութագրերով իներտ տարրերի բյուրեղների R_0 , u_0 և B_0 պարամետրերի տեսական և փորձում ստացված արժեքները:

Աղյուսակ 15.
Իներտ տարրերի բյուրեղների պարամետրերը

			R_0 , Å		– u_0 , էՎ/ատոմ		B_0 , Պա	
	σ , Å	ε , էՎ	տես.	փորձ.	տես.	փորձ.	տես.	փորձ.
Ne	2,74	0,0031	2,99	3,13	0,027	0,02	0,181	0,11
Ar	3,40	0,0104	3,71	3,75	0,089	0,08	0,318	0,27
Kr	3,65	0,0140	3,98	3,99	0,120	0,11	0,346	0,35
Xe	3,98	0,0200	4,34	4,33	0,172	0,17	0,381	0,36

Ինչպես երևում 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: Այս հանգամանքը պայմանավորված է ատոմների զրոյական տատանումների ε_{0i} կինետիկ էներգիայի առկայությամբ, որը տեսական հաշվարկներում անտեսված է:

Այս էներգիան այնքան ավելի մեծ է, որքան փոքր է մեկ ատոմին բաժին ընկնող ծավալը՝

$$\varepsilon_{0i} \sim \frac{\hbar^2}{M_i (\Delta a)^2} \sim \frac{\hbar^2}{M_i R_0^2} \sim \frac{\hbar^2}{M_i v^{2/3}}, \quad (4.15)$$

հետևաբար՝ այն գործում է որպես արդյունաբար վանողության «ուժ», որը մեծացնում է մոտակա հարևանների միջև հեռավորությունը: Համաձայն (4.15) բանաձևի՝ կապի էներգիայի մեջ զրոյական տատանումների ներդրման հաշվառումը հանգեցնում է նրա փոքրացման, քանի որ ε_{0i} մեծությամբ դրական է և «խաբխում» է կապը, որն առավել զգալի է դառնում փոքր զանգվածների դեպքում:

Ինչ վերաբերում է B_0 գործակցին, ապա դրա տեսականորեն հաշվարկված արժեքների համընկնումը փորձի հետ լավ է քսենոնի և կրիպտոնի դեպքում, սակայն արգոնի դեպքում տեսական արժեքը գերազանցում է փորձնականը 20%-ով, իսկ նեոնի դեպքում՝ 60%-ով: Այսպիսի զգալի շեղումները հետևանք են B_0 գործակցի՝ σ պարամետրից ուժեղ կախման (տես (4.14) բանաձևը):

§5. Խոնային կապի տեսությունը

Կապն իոնային բյուրեղներում պայմանավորված է իոնների էլեկտրաստատիկ (կուլոնյան) փոխազդեցությամբ: Բյուրեղային կառուցվածք առաջանում է շնորհիվ այն բանի, որ տարանուն իոնների միջև գործող ձգողության ուժերը գերազանցում են նույնանուն իոնների միջև գործող վանողության ուժերը: Փոքր հեռավորություններում իոնների միջև ծագում է նաև ոչ կուլոնյան բնույթի վանողական փոխազդեցություն, որին համապատասխանող էներգիան սովորաբար ներկայացնում են (4.1) կամ (4.2) բանաձևերով: Կարելի է ենթադրել, որ իոնային բյուրեղի դեպքում (4.1) արտահայտության մեջ $m < 12$, քանի որ լրացուցիչ էլեկտրոնի առկայության հետևանքով էլեկտրոնային խտությունը բացասական իոնի մակերևույթի մոտ ավելի փոքր է, քան համապատասխան իներտ տարրի ատոմի մոտ: Օրինակ՝ Cl իոնը և Ar-ի ատոմն ունեն 18 էլեկտրոն, իսկ նրանց ծավալների հարաբերությունը 1,2 է:

Հետագա հաշվարկներում կապի էներգիան որոշելիս կօգտագործենք վանողական փոխազդեցության էներգիայի՝ Բոռնի և Մայերի առաջարկած (4.2) արտահայտությունը: Նշենք, որ իոնների միջև գործում է նաև վանդերվալսյան փոխազդեցությունը, սակայն այն զգալիորեն թույլ է կուլոնյանից, և դրա ներդրումը կապի էներգիայում կազմում է կուլոնյան փոխազդեցության էներգիայի ընդամենը 1 – 2 %-ը:

Այժմ հաշվենք իոնային բյուրեղի իոնների փոխազդեցության էներգիան: Եթե i և j իոնների փոխազդեցության էներգիան նշանակենք U_{ij} -ով, ապա որևէ իոնի փոխազդեցության էներգիան մնացած իոնների հետ՝

$$U_i = \sum_{i \neq j} U_{ij} : \quad (5.1)$$

Ենթադրենք, որ U_{ij} -ն կարելի է ներկայացնել վանդոլորթյան ուժերի (4.2) պոտենցիալ էներգիայի և կուլոնյան պոտենցիալ էներգիայի գումարի տեսքով՝

$$U_{ij} = \lambda \exp\left(-\frac{R_{ij}}{\rho}\right) \pm \frac{e^2}{R_{ij}}, \quad (5.2)$$

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: Արհամարհելով մակերևութային երևույթները՝ $2N$ իոններից բաղկացած բյուրեղի էներգիայի համար կստանանք՝

$$U = \frac{1}{2} 2NU_i = NU_i, \quad (5.3)$$

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

Վանդոլակալ փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան հեռավորությունը մեծացնելիս նվազում է էքսպոնենցիալ օրենքով (տես (5.2) բանաձևը), ուստի լրիվ էներգիան հաշվելիս կարելի է սահմանափակվել միայն ամենամոտ հարևանների վանդոլակալ փոխազդեցության ներդրումով: (5.1)–(5.3) արտահայտություններից լրիվ էներգիայի համար ստանում ենք՝

$$U = N \left(z\lambda \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) - A \frac{e^2}{R} \right), \quad (5.4)$$

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

$$A = \sum_{R \neq 0} \frac{(\pm 1)}{\alpha(R)} \quad (5.5)$$

մեծությունն անվանում են Մադելունգի հաստատուն, իսկ $\alpha(\mathbf{R})$ անչափ գործակիցը տրվում է (4.5) արտահայտությամբ: Մադելունգի հաստատունը իոնային բյուրեղի կարևորագույն բնութագիրն է և կախված է միայն բյուրեղային կառուցվածքի տեսակից (Աղյուսակ 16): Ինչպես հետևում է Աղյուսակ 16-ում բերված տվյալներից, կոորդինացիոն թվի մեծացմանը զուգըն-

բաց A հաստատունն աճում է, այսինքն՝ որքան մեծ է հակառակ նշանի լիցքով հարևանների թիվը, այնքան բացարձակ արժեքով մեծ է ցանցի իոնների էլեկտրաստատիկ փոխազդեցության (Մադելունգի) էներգիան:

Աղյուսակ 16.

Մադելունգի հաստատունի արժեքները

Բյուրեղային կառուցվածք	CsCl-ի կառուցվածք	NaCl-ի կառուցվածք	ZnS (սֆալերիտ)	ZnS (վյուրցիտ)
A	1,7626	1,7476	1,6381	1,6413
z	8	6	4	6

Մեկ իոնային զույգին (մոլեկուլին) բաժին ընկնող էներգիան՝

$$u(R) = \frac{U}{N} = z\lambda \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) - A \frac{e^2}{R} : \quad (5.6)$$

Հավասարակշռության վիճակում

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

որտեղից հետևում է

$$R_0^2 \exp\left(-\frac{R_0}{\rho}\right) = \frac{\rho A e^2}{z\lambda} \quad (5.7)$$

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

$$u(R_0) = -\frac{Ae^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right) \quad (5.8)$$

արտահայտությամբ: ρ մեծությունը կարելի է գնահատել՝ փորձում չափելով առաձգականության ծավալային մոդուլը, որը $T = 0$ Կ ջերմաստիճանում տրվում է (4.12) բանաձևով: Նկատի ունենալով, որ NaCl-ի կառուցվածքով ցանցի համար մեկ իոնային զույգին բաժին ընկնող ծավալը՝ $v = 2R^3$, (4.6), (4.7) և (4.12) բանաձևերից կատանանք՝

$$B_0 = \frac{Ae^2}{18R_0^4} \left(\frac{R_0}{\rho} - 2\right) : \quad (5.9)$$

Չափումների համաձայն՝ KCl -ի համար $B_0 = 1,97 \cdot 10^{10}$ Պա, $R_0 = 3,14 \cdot 10^{-8}$ սմ, $A \approx 1,75$, հետևաբար՝

$$\frac{R_0}{\rho} = \frac{18B_0R_0^4}{Ae^2} + 2 \approx 10,4, \quad (5.10)$$

այսինքն՝ վանդակաձև փոխազդեցությունն ի հայտ է գալիս $\rho \approx 0,3 \text{ \AA}$ շառավղով տիրույթում: Օգտվելով (5.10) և (5.8) արտահայտություններից՝ կապի էներգիայի համար կատանանք՝

$$u(R_0) = -\frac{Ae^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0} \right) = -7,26 \text{ էՎ}, \quad (5.11)$$

որը բավականաչափ մոտ է փորձում ստացված $u_0 = -7,397 \text{ էՎ}$ արժեքին:

Վանդակաձև փոխազդեցության λ հաստատունի համար (5.7) և (5.10) արտահայտություններից $z = 6$ դեպքում ստացվում է

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

գնահատականը:

Եթե կապի էներգիայի հաշվարկը կատարվի (4.1) բանաձևի համաձայն, ապա (5.11) արտահայտության փոխարեն կատանանք՝

$$u(R_0) = -\frac{Ae^2}{R_0} \left(1 - \frac{1}{m} \right), \quad (5.12)$$

որը հավասարեցնելով $u(R_0) \approx -7,26 \text{ էՎ}$ -ի՝ կորոշենք m -ը

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

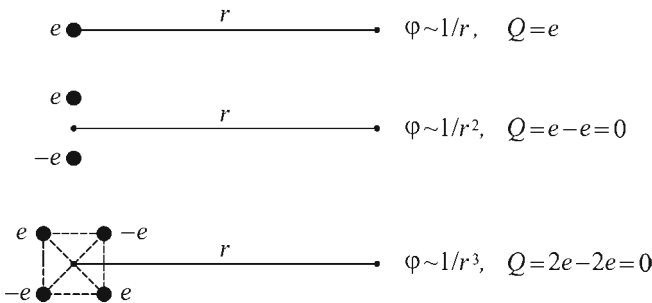
Ինչպես և սպասվում էր որակական դատողություններից, $m < 12$: Ստացված արդյունքների համաձայն՝ Մադելունգի էներգիան՝ $-Ae^2/R_0$ անդամը, կազմում է (5.8) բանաձևով տրվող կապի էներգիայի հիմնական՝ մոտավորապես 0,9 մասը, ուստի կարևոր է Մադելունգի հաստատունի ճշգրիտ արժեքն իմանալը:

Իոնային ցանցի էլեկտրաստատիկ էներգիան հաշվելու համար անհրաժեշտ է որոշել որևէ իոնի տեղում մյուս բոլոր իոնների ստեղծած պոտենցիա-

լը: Հաշվարկների ընթացքում ծագում է վատ զուգամիտող շարքի գումարը որոշելու խնդիր: Օրինակ՝ NaCl -ի կառուցվածքով ցանցի համար, (5.5) բանաձևի համաձայն, Մադելունգի հաստատումը ներկայացվում է

$$A = \frac{6}{\sqrt{1}} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{\sqrt{4}} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \frac{24}{\sqrt{6}} + \frac{12}{\sqrt{8}} - \frac{24}{\sqrt{9}} + \dots \quad (5.13)$$

շարքով, որի գումարը հնարավոր չէ հաշվել անմիջական գումարման միջոցով: (5.13) շարքի գումարը գտնելու համար անհրաժեշտ է լավացնել նրա զուգամիտությունը: Դրան կարելի է հասնել՝ վերախմբավորելով շարքի անդամները, որը համապատասխանում է առանձին խոններից էլեկտրաչեզոք խմբեր կազմելուն, որոնց պոտենցիալները հեռավորությունից կախված շատ ավելի արագ են նվազում, քան լիցքավորված համակարգի պոտենցիալը (նկ. 36): Մասնավորապես, բյուրեղը կարելի է տրոհել էլեկտրաչեզոք, խորանարդային համաչափությամբ բաշխված լիցքով խորանարդների և հեշտությամբ հաշվել ոչ մեծ թվով խոններ պարունակող յուրաքանչյուր խորանարդի էներգիան: Բյուրեղի էլեկտրաստատիկ էներգիան այդ խորանարդների էներգիաների և դրանց փոխազդեցության էներգիաների գումարն է: Վերջինները նվազում են հակադարձ համեմատական հեռավորության հինգերորդ աստիճանին, և դրանց գումարը տրվում է արագ զուգամիտող շարքի տեսքով, որը $V \rightarrow \infty$ սահմանում կախված չէ գումարման եղանակից:



Նկ. 36. Էլեկտրաստատիկ փոխազդեցության պոտենցիալի վարքը լիցքերի տարբեր համակարգերում

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

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

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

Մադելունգի հաստատունը կարելի է հաշվել կամայական ճշտությամբ (տես Հավելված 3), սակայն գործնականում կարելի է սահմանափակվել 10^{-3} -ի ճշտությամբ, քանի որ բյուրեղի լրիվ էներգիայի արտահայտության մեջ ներդրում են ունեն մաս այլ՝ ոչ կուլոնյան բնույթի փոխազդեցություններ, որոնք հաշվվում են զգալի փոքր ճշտությամբ, քան Մադելունգի էներգիան, և որոնք փոփոխվում են մի նյութից մյուսին անցնելիս:

§6. Կովալենտ կապի տեսությունը

Վանդերվալսյան 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՝ արժեքական) 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 կովալենտ կապի տեսության հիմնական նպատակը ոչ թե փորձում դիտվող և տեսության տված արդյունքների համեմատությունն է, այլ որոշակի պայմաններում երկու չեզոք ատոմների միջև կապում և բավականաչափ ամուր կապի առաջացման բացատրությունը, որը հնարավոր է միայն քվանտային տեսության շրջանակներում:

Ջրածնի մոլեկուլում (H_2) ջրածնի ատոմների միջև կապում կապի առաջանալը քվանտային տեսության շրջանակներում առաջինը բացատրել են Վ. Հայտլերը և Ֆ. Լոնդոնը 1927 թ.:

Ջրածնի երկու ատոմներից կազմված համակարգի համիլտոնիանը ներկայացնենք (տես §3)

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

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

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

իսկ ալիքային ֆունկցիան՝

$$\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2): \quad (6.3)$$

(6.2) և (6.3) արտահայտությունները նկարագրում են համակարգի հիմնական վիճակը. $\varepsilon_1^{(0)}$ -ն ջրածնի ատոմի հիմնական վիճակի էներգիան է, $\psi_a(\mathbf{r}_1)$ -ը՝ ալիքային ֆունկցիան: $\hat{H}'$ անդամը նկարագրում է ջրածնի երկու ատոմների փոխազդեցությունը և տրվում է (3.2) բանաձևով: Հետագա հաշվարկներում ենթադրվում է, որ այդ փոխազդեցությունը թույլ է, և կարելի է օգտվել զրգռումների տեսության մեթոդներից: Այս ենթադրությունն ակնհայտորեն խախտվում է, երբ ջրածնի ատոմների միջև հեռավորությունը դառնում է Բորի շառավղի կարգի և ավելի փոքր՝ $R \leq a_0$, ուստի ստորև ներկայացված արդյունքներն ունեն հիմնականում որակական արժեք:

Երկու փոխազդող ատոմներից բաղկացած համակարգի էներգիան զրգռումների 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՝

$$W = \int \psi_0^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{H}' \psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2: \quad (6.5)$$

$E_1^{(0)}$ էներգիայով հիմնական վիճակը կրկնակի այլասերված է, քանի որ կան այդ նույն էներգիայով երկու տարբեր վիճակներ, որոնք նկարագրվում են $\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)$ և $\psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)$ ալիքային ֆունկցիաներով: Շրջողինգերի հավասարման գծայնության հետևանքով այդ ալիքային ֆունկցիաների

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \alpha \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \beta \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1) \quad (6.6)$$

գծային համակցությունը, որտեղ α -ն և β -ն հաստատուն գործակիցներ են, մույնպես բավարարում է Շրյոդինգերի հավասարմանը:

Համաձայն տարրական մասնիկների մույնականության սկզբունքի՝ էլեկտրոնների փոխատեղությունը՝ $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2 \rightarrow \mathbf{r}_1$, չի ազդում հավանականության խտության վրա, այսինքն՝

$$|\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 = |\psi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2, \quad (6.7)$$

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՝

$$\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1), \quad (6.8)$$

որը համաչափ է ըստ էլեկտրոնների փոխատեղության՝

$$\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_S(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (6.9)$$

և

$$\psi_{AS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1), \quad (6.10)$$

որը հակահամաչափ է՝

$$\psi_{AS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi_{AS}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1): \quad (6.11)$$

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

Երկու էլեկտրոններից 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 լրիվ ալիքային ֆունկցիան՝ $\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1; \mathbf{r}_2\sigma_2)$ -ը, պետք է ընտրել այնպես, որ այն բավարարի Պաուլիի սկզբունքից հետևող հակահամաչափության հատկությանը՝

$$\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1; \mathbf{r}_2\sigma_2) = -\Phi(\mathbf{r}_2\sigma_2; \mathbf{r}_1\sigma_1): \quad (6.14)$$

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

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

Հաշվարկենք (6.5) բանաձևով տրվող փոխազդեցության էներգիան՝ օգտագործելով նորմավորված ալիքային ֆունկցիաները՝

$$\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}} [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)], \quad (6.15)$$

$$\psi_{AS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1-S^2)}} [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)], \quad (6.16)$$

որտեղ

$$\begin{aligned} \psi_a(\mathbf{r}_1) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp\left(-\frac{r_1}{a_0}\right), & \psi_a(\mathbf{r}_2) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp\left(-\frac{r_{2a}}{a_0}\right), \\ \psi_b(\mathbf{r}_2) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp\left(-\frac{r_2}{a_0}\right), & \psi_b(\mathbf{r}_1) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp\left(-\frac{r_{1b}}{a_0}\right), \end{aligned} \quad (6.17)$$

իսկ

$$S = \int \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_1)d\mathbf{r}_1 \quad (6.18)$$

մեծությունը «ծածկման» ինտեգրալն է: Ինչպես երևում է նկ. 34-ից, (6.17) բանաձևերում առկա $r_{2a} \equiv |\mathbf{r}_{2a}|$ և $r_{1b} \equiv |\mathbf{r}_{1b}|$ մեծություններն արտահայտվում են $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ փոփոխականների և R պարամետրի միջոցով՝

$$\mathbf{r}_{2a} = \mathbf{r}_2 + \mathbf{R}, \quad \mathbf{r}_{1b} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}: \quad (6.19)$$

Միեզրկետ վիճակում համակարգի էներգիան՝

$$E_S = 2\varepsilon_1^{(0)} + W_S, \quad (6.20)$$

որտեղ (6.5) բանաձևի համաձայն՝

$$\begin{aligned} W_S &= \int \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H' \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \frac{1}{2(1+S^2)} \int \{ \psi_a^2(\mathbf{r}_1) H' \psi_b^2(\mathbf{r}_2) + \psi_a^2(\mathbf{r}_2) H' \psi_b^2(\mathbf{r}_1) + \\ &\quad + \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) H' \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) + \\ &\quad + \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) H' \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) \} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 : \end{aligned} \quad (6.21)$$

(6.21) արտահայտության II և IV գումարելիներում կատարելով ինտեգրման փոփոխականների վերանշանակում՝ $\mathbf{r}_1 \rightarrow -\mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}_2 \rightarrow -\mathbf{r}_1$, կստանանք՝

$$\begin{aligned} W_S &= \frac{1}{1+S^2} \int \{ \psi_a^2(\mathbf{r}_1) H' \psi_b^2(\mathbf{r}_2) + \\ &\quad + \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) H' \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) \} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \equiv \frac{Q+A}{1+S^2} : \end{aligned} \quad (6.22)$$

Նույն ձևով տրիպլետ վիճակում փոխազդեցության էներգիայի համար կստանանք

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

արտահայտությունը: (6.22) և (6.23) բանաձևերում Q -ով նշանակված է հետևյալ ինտեգրալը (տես նաև (3.2) արտահայտությունը)՝

$$\begin{aligned} Q &= \int \psi_a^2(\mathbf{r}_1) H' \psi_b^2(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \int \psi_a^2(\mathbf{r}_1) \left(\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \right) \psi_b^2(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \frac{e^2}{R} + \int \psi_a^2(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_b^2(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 - \int \psi_a^2(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{r_{1b}} d\mathbf{r}_1 - \int \psi_b^2(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{2a}} d\mathbf{r}_2 : \end{aligned} \quad (6.24)$$

I գումարելին a և b միջուկների փոխազդեցության կուլոնյան էներգիան է, II գումարելին՝ երկու էլեկտրոնների, III գումարելին՝ b միջուկի և 1-ին էլեկտրոնի (որը ստեղծում է լիցքի $\rho_a(\mathbf{r}_1) = -e\psi_a^2(\mathbf{r}_1)$ խտություն) և IV գումարելին՝ a միջուկի և 2-րդ էլեկտրոնի ($\rho_b(\mathbf{r}_2) = -e\psi_b^2(\mathbf{r}_2)$) 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: (6.24) ինտեգրալում տեղադրելով (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 էներգիան՝

$$\begin{aligned} A &= \int \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) H' \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \int \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) \left(\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \right) \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \frac{e^2}{R} S^2 + \int \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 - \\ &\quad - S \int \psi_a(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{r_{1b}} \psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 - S \int \psi_b(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{2a}} \psi_a(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 : \end{aligned} \quad (6.26)$$

(6.26) արտահայտության III և IV գումարելիները հավասար են:

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

Փոխանակային էներգիայի հաշվարկը կապված է զգալի մաթեմատիկական դժվարությունների հետ: Այն տրվում է հետևյալ արտահայտությամբ՝

$$A = \frac{e^2}{R} \left\{ S^2 \left[1 + \frac{6}{5} \left(C + \ln \frac{R}{a_0} \right) \right] - \right. \\ \left. - \frac{R}{a_0} \exp \left(-\frac{2R}{a_0} \right) \left[\frac{11}{8} + \frac{103}{20} \frac{R}{a_0} + \frac{49}{15} \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 + \frac{11}{15} \left(\frac{R}{a_0} \right)^3 \right] - \right. \\ \left. - \frac{6M}{5} \left[ME_1 \left(\frac{4R}{a_0} \right) - 2SE_1 \left(\frac{2R}{a_0} \right) \right] \right\}, \quad (6.27)$$

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 -ն էյլերի հաստատունն է ($C \approx 0,57722$), իսկ

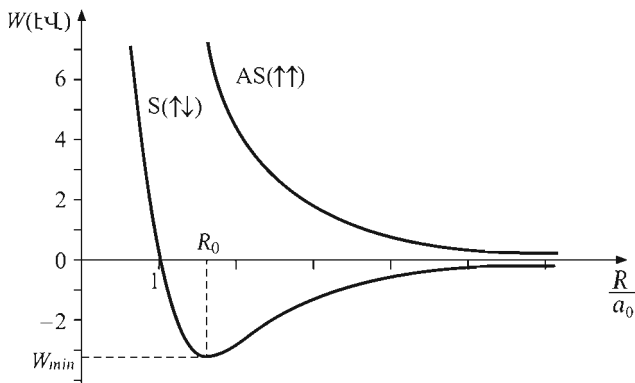
$$E_1(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-\xi}}{\xi} d\xi \quad (6.29)$$

ֆունկցիան ինտեգրալային էքսպոնենտն է:

Նկ. 37-ում պատկերված է ջրածնի երկու ատոմների փոխազդեցության էներգիայի կախումը միջատոմային R հեռավորությունից սինգլետ (S) և տրիպլետ (AS) վիճակների համար:

Սինգլետ՝ $S(\uparrow\downarrow)$ վիճակում փոխազդեցության էներգիան $R_0 = 1,5a_0 \approx 0,8 \text{ \AA}$ կետում ունի նվազագույն արժեք՝ $W_{\min} = -3,2$ էՎ, և հեռավորության հետագա փոքրացմանը զուգընթաց կտրուկ աճում է:

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



Նկ. 37. Ջրածնի երկու ատոմների փոխազդեցության էներգիայի կախումը միջատոմային հեռավորությունից համաչափ (S) և հակահամաչափ (AS) վիճակներում

Տեսության ոչ բավարար համընկնումը փորձի հետ հասկանալի է, քանի որ զրոգումների 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:

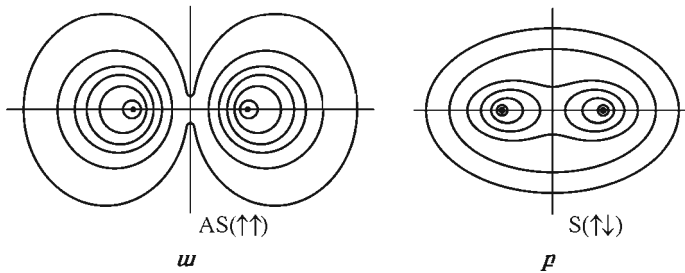
Կովալենտ կապի էներգիայի արժեքները մի քանի ատոմների զույգերի համար բերված են Աղյուսակ 17-ում:

Աղյուսակ 17.

Կովալենտ կապի էներգիաներ

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

Այսպիսով՝ կապի առաջացումը ջրածնի ատոմների միջև սինգլետ վիճակում և նրանց փոխադարձ վանումը տրիպլետ վիճակում պայմանավորված են 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-ի կարգի մեծություն է:



Նկ. 38. Հաստատուն էլեկտրոնային խտության գծերը. ա. հակահամաչափ (AS), բ. համաչափ (S) վիճակներում

Սինգլետ և տրիպլետ վիճակներում փոխազդեցության բնույթի տարբերությունը կարելի է հասկանալ՝ ուսումնասիրելով համապատասխան կոորդինատային ֆունկցիաների վարքը (նկ. 38): Տրիպլետ վիճակին համապատասխանող (6.16) $\psi_{AS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ֆունկցիան ունի հանգույց միջուկները միացնող ուղղին ուղղահայաց և այն կիսող հարթության մեջ՝ $\psi_{AS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0$ կամ $\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)$: Ընդհակառակը, սինգլետ վիճակի $\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ֆունկցիան այդ հարթության մեջ ունի առավելագույն արժեք, հետևաբար՝ էլեկտրոնների՝ միջուկների միջև տեղայնացման հավանականությունը մեծ է: Էլեկտրոնների և միջուկների միջև գործող ձգողական ուժերն էլ հենց բերում են կապված վիճակի առաջացման: Նկ. 38-ում պատկերված են միևնույն էլեկտրոնային խտության գծերը: ա. դեպքում լիցքի խտությունն ատոմների միջև ունի նվազագույն արժեք, բացասական լիցքը հիմնականում տեղայնացված է առանձին միջուկների մոտ, իսկ բ. դեպքում էլեկտրոնային ամպերը միանում են իրար՝ ստեղծելով մեկ միասնական էլեկտրոնային ամպ, որը «պարուրում է» երկու միջուկները:

Կապի առաջացումը կարելի է հեշտությամբ բացատրել նաև անորոշությունների առնչության օգնությամբ: Իրոք, եթե էլեկտրոնը մի միջուկի մոտ է, և նրա կոորդինատի անորոշությունն 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 երկու միջուկների մոտ է, ապա նրա կոորդինատի անորոշությունը՝ $b > a$, հետևաբար՝ $\Delta p' \sim \hbar/b < \hbar/a$ և $\Delta \varepsilon' \sim \hbar^2/b^2 < \Delta \varepsilon$, այսինքն՝ էլեկտրոնի կինետիկ էներգիան ավելի փոքր է, քան առաջին դեպքում: Եթե կինետիկ էներգիայի նվազումը գերազանցում է կուլոնյան վանողությամբ պայմանավորված պոտենցիալ էներգիայի աճը,

ապա համակարգի լրիվ էներգիան կփոքրանա, որն էլ համապատասխանում է ձգողության առաջացմանը:

Կովալենտ կապի կարևոր հատկությունը նրա հագեցվածությունն է, 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 կուլոնյան էներգիայի հաշվին, իսկ փոխանակային 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 դեպքում օժտված չէ գնդային համաչափությամբ, այլ ձգված է որոշակի ուղղություններով: Մյուս կողմից, կապի առաջացման համար անհրաժեշտ է փոխազդող ատոմների էլեկտրոնային ամպերի վերադրում, որի հետևանքով էլ կապվող ատոմները կողմնորոշված են միմյանց նկատմամբ որոշակի ձևով:

Կովալենտ կապի տարածական ուղղորդվածությունը խոչընդոտում է ատոմների՝ իրար նկատմամբ տեղափոխությանը (սահքին), որի հետևանքով կովալենտ բյուրեղները կոշտ են, ունեն մեծ ամրություն, բայց միաժամանակ և փխրուն են:

Սիջատմական հեռավորության մեծացմանը զուգընթաց կովալենտ փոխազդեցության ուժերը նվազում են էքսպոնենտալին օրենքով (տես (6.25), (6.27)–(6.29) բանաձևերը):

§7. Մետաղական կապի տեսությունը

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

Իրարից մեծ՝ $R \gg a_0$ հեռավորությամբ ատոմների միջև գործում են վանդերվաալսյան ձգողության ուժեր, որոնց ազդեցությամբ ատոմներն իրար են մոտենում: Երբ $R \geq a_0$, ատոմների էլեկտրոնային թաղանթները վերադրվում են: Պաուլիի սկզբունքի համաձայն՝ որոշ էլեկտրոններ ստիպված անցնում են մեծ էներգիաներով վիճակներ, ընդ որում համեմատաբար թույլ կապված արժեքական էլեկտրոնները «պոկվում» են ատոմից, և առաջանում են ազատ էլեկտրոններ և դրական իոններ: Իոնացման հետևանքով զգալիորեն մեծանում է պոկված էլեկտրոնի կոօրդինատի անորոշությունը, ուստի զգալիորեն փոքրանում են նրա իմպուլսն ու էներգիան: Ատոմներից պոկված և

ընդհանրացված էլեկտրոնների միջին էներգիան, ուստի և բոլոր էլեկտրոններից և իոններից կազմված համակարգի լրիվ էներգիան փոքրանում է չեզոք ատոմներից կազմված համակարգի էներգիայի համեմատությամբ, որն էլ, ի վերջո, հանգեցնում է կապի առաջացման:

Մետաղական կապի առաջացումը որակապես կարելի է բացատրել պարզագույն մոդելի շրջանակներում, որի համաձայն՝ մետաղն իրենից ներկայացնում է դրական կետային իոններից կազմված տարածական ցանց, որն «ընկղմված» է էլեկտրոնային գազում:

Համակարգի լրիվ էներգիան բաղկացած է էլեկտրոնների և իոնների կուլոնյան փոխազդեցության էներգիայից և էլեկտրոնների շարժման կինետիկ էներգիայից, որը $T = 0$ Կ ջերմաստիճանում բացառապես պայմանավորված է Պաուլիի սկզբունքով:

Էլեկտրոնների և իոնների կուլոնյան փոխազդեցության էներգիան կարելի է ներկայացնել

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

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

Վիճակագրական ֆիզիկայից հայտնի է, որ էլեկտրոնային գազի միջին կինետիկ էներգիան $T = 0$ Կ ջերմաստիճանում տրվում է

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

արտահայտությամբ, 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 իոն, 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 -ն իոնների խտությունն է: Վերջինս և մոտակա իոնների միջև R հեռավորությունը կապված են

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

առնչությամբ, իսկ β թվային գործակցի արժեքը որոշվում է տարրական բջիջ երկրաչափական բնութագրերով: Ընտրենք որպես տարրական բջիջ Վիգներ-Ջեյտցի բջիջը, որն, իր հերթին, մոտարկենք $R/2$ շառավղով 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՝

$$\beta = \frac{6}{\pi} : \quad (7.6)$$

Այս մոտավորության շրջանակներում մեծ ճշտությամբ կարելի է ծավալակենտրոն, նիստակենտրոն խորանարդային, ինչպես նաև խիտ դարսվածքով վեցանկյունային 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 վանդոլության 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 ու b հաստատունների միջոցով՝

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

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

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

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

(7.7), (7.9) – (7.11) բանաձևերի օգնությամբ (4.12) սահմանումից կարելի է ստանալ սեղմման առաձգական մոդուլի արտահայտությունը՝

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

որտեղ v_0 -ն տարրական բջջի ծավալն է հավասարակշռական վիճակում և (7.5) բանաձևի համաձայն՝ հավասար է $\pi R_0^3 / 6$:

Թվային գնահատումների համաձայն՝ $B_0 \approx 10^{10}$ Պա, որը, ինչպես և R_0 և u_0 մեծությունների համար ստացված արժեքները, բավական մոտ է փորձում դիտվող արժեքներին:

Քննարկված մոդելն ունի բացահայտ որակական թերություն, քանի որ հավասարակշռական R_0 հեռավորությունը կախված չէ կոնկրետ մետաղի բնութագրերից: Համաձայն (7.10) բանաձևի՝ այն մույն արժեքն ունի միևնույն արժեքականությամբ բոլոր մետաղների համար: Այս թերությունը հետևանք է կետային իոնների մոտավորության և հանգեցնում է երկու հիմնական գործոնների անտեսման:

1. Քանի որ իոններն 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 իոնի 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 կլինետիկ էներգիայի մեծացման և ցանցի հաստատունի աճին: (7.13) առնչության համաձայն՝ n_e իրական էլեկտրոնային խտությունը կախված է նյութի տեսակից իոնի շառավիղի միջոցով:

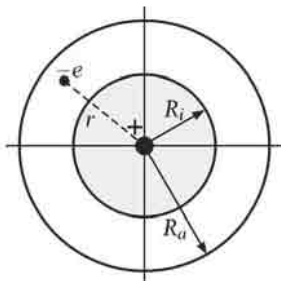
2. Իոնների վերջավոր չափերի պատճառով էլեկտրոնները չեն կարող բախանալ իոնների զրադեցրած տիրույթները, ուստի միջին հաշվով ավելի հեռու կլինեն իոնի կենտրոնից, քան կետային իոնի դեպքում, որն էլ հանգեցնում է կուլոնյան էներգիայի բացարձակ արժեքի փոքրացման: Իրոք, եթե էլեկտրոնը $R_i < R_a$ շառավղիներով գնդերի միջև է (ճկ. 39), ապա կուլոնյան փոխազդեցության էներգիայի մեծության միջինը՝

$$\bar{\varepsilon} \equiv \left(\frac{e^2}{r} \right)_{av} = \frac{e^2 \int_0^{R_i} \frac{1}{r} 4\pi r^2 dr}{\frac{4\pi}{3} (R_a^3 - R_i^3)} = \frac{3e^2}{2R_a} \left[1 + \frac{(R_i/R_a)^2}{1 + R_i/R_a} \right]^{-1} : \quad (7.14)$$

Այս գնահատման համաձայն՝

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

Այսպիսով՝ նշված երկու գործոններն էլ իոնի շառավղի մեծացմանը գուզընթաց հանգեցնում են ցանցի հաստատունի մեծացման, որն, իրոք, համապատասխանում է փորձում դիտվող արդյունքներին:



Նկ. 39. Իոնի վերջավոր չափերի հաշվառումը

Իրականում մետաղի կապի էներգիայի մեջ վերը նշված երկու հիմնական մերդրումներից բացի՝ զգալի մերդրում ունեն մաս մի շարք այլ փոխազդեցություններ (փոխսանակային, կոռելյացիոն և այլն): Մասնավորապես, ցանցի փոքր հաստատուններ ունեցող բյուրեղներում, օրինակ՝ ազնիվ մետաղներում (Cu, Ag, Au), ինչպես մաս անցումային մետաղներում (Mo, W, Re) էական դեր է խաղում իոնների չորացված ներքին թաղանթների էլեկտրոնների միջև փոխազդեցությունը, որն իր բնույթով մոտ է կովալենտայինին (տես Աղյուսակ 13): Մյուս կողմից, առաջին խմբի մետաղներում, որոնք

ունեն ցանցի համեմատաբար մեծ հաստատուններ, նշված փոխազդեցությունը գործնականորեն բացակայում է:

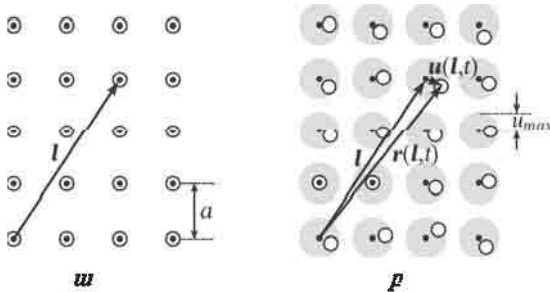
Մետաղական կապն ապահովող էլեկտրաստատիկ ուժերի բնույթով են պայմանավորված մետաղների առաձգական և պլաստիկ հատկությունները: Քանի որ էլեկտրաստատիկ ուժերն ուղղորդված չեն, ապա իոնները կարող են համեմատաբար հեշտությամբ մի տեղից մյուսը տեղափոխվել, եթե դրան չեն խոչընդոտում իոնի սեփական չափերը: Կապի էներգիան հիմնականում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

ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ՑԱՆՑԻ ԴԻՆԱՄԻԿԱՆ

§1. Ներդաշնակ մոտավորություն

Բյուրեղային կառուցվածքներն ուսումնասիրելիս ենթադրվում է, որ ատոմները (իոնները) անշարժ ամրացված են բյուրեղական ցանցի հանգույցներում (տարածական ցանցի տեսակի մոդել, նկ. 40. ա): Այս ենթադրությունն իրականում շատ արհեստական է, քանի որ կամայական ջերմաստիճանում, ներառյալ $T = 0$ Կ, ատոմները կատարում են տատանողական շարժում:

Իրականությանն ավելի մոտ է հետևյալ ենթադրությունը՝ յուրաքանչյուր ատոմի հավասարակշռության դիրք համընկնում է Բրավեի ցանցի որևէ հանգույցի հետ (նկ. 40. բ. Բրավեի ցանցի հանգույցները նշված են սև կետերով):



Նկ. 40. Տարածական ցանցի ա. տեսակի և բ. դինամիկ մոդելների սխեմատիկ պատկերումը

Այս ենթադրությունը հնարավորություն է տալիս բացատրելու պինդ մարմինների բյուրեղային կառուցվածքը և հավասարազոր է այն պնդմանը, որ, չնայած ատոմների շարժմանը, պինդ մարմնում պահպանվում է Բրավեի ցանցը, որը սակայն նկարագրում է ատոմների ոչ թե ակնթարթային, այլ միջինացված դիրքերը: Այսպիսով՝ կարելի է միարժեքորեն որոշել ամեն մի ատոմի դիրքը՝ տալով Բրավեի ցանցի $\mathbf{l}$ հանգույցը, որի շուրջ ատոմը կատարում է տատանումներ: Ատոմի ակնթարթային դիրքը նկարագրող $\mathbf{r}(\mathbf{l}, t)$ վեկտորը կարելի է ներկայացնել

$$\mathbf{r}(\mathbf{l}, t) = \mathbf{l} + \mathbf{u}(\mathbf{l}, t) \quad (1.1)$$

առնչությամբ, որտեղ $\mathbf{u}(\mathbf{l}, t)$ վեկտորն $\mathbf{l}$ հանգույցի ատոմի շեղումն է իր հավասարակշռության դիրքից t պահին (նկ. 40. բ): $\mathbf{u}(\mathbf{l}, t)$ շեղման ժամանակային միջինը տատանումների մեկ պարբերության համար՝

$$\langle \mathbf{u}(\mathbf{l}, t) \rangle = 0 : \quad (1.2)$$

Բարդ (բազիսով) բյուրեղային ցանցի դեպքում (1.1) առնչության փոխարեն ատոմի ակնթարթային դիրքը որոշվում է

$$\mathbf{r}_j(\mathbf{l}, t) = \mathbf{l} + \mathbf{d}_j + \mathbf{u}(\mathbf{l}, t) \quad (1.3)$$

արտահայտությամբ, որտեղ $\mathbf{d}_j$ վեկտորով տրվում է j -րդ ատոմի հավասարակշռության դիրքը տարրական բջջում:

Հիմնվելով բազմաթիվ փորձառական փաստերի վրա՝ կարելի է անել ևս մի ենթադրություն, որի համաձայն՝ յուրաքանչյուր ատոմի առավելագույն շեղումն իր հավասարակշռության դիրքից շատ փոքր է միջատոմային հեռավորությունից (ցանցի հաստատունից)՝

$$|\mathbf{u}(\mathbf{l}, t)| \leq u_{\max} \ll a : \quad (1.4)$$

Այս ենթադրության շնորհիվ բյուրեղային ցանցի դինամիկայի հիմնական խնդիրը բերվում է մեծ թվով ազատության աստիճաններով մեխանիկական համակարգի փոքր տատանումների ուսումնասիրությանը:

Եթե բյուրեղային ցանցի պոտենցիալ էներգիան, որը ցանցը կազմող ատոմների կոորդինատների ֆունկցիա է, վերածենք շարքի ըստ հավասարակշռության դիրքերից փոքր $\mathbf{u}(\mathbf{l}, t)$ շեղումների և անտեսենք քառակուսային անդամին հաջորդող մյուս անդամները, ապա կստանանք պոտենցիալ էներգիայի արտահայտությունն այսպես կոչված ներդաշնակ (հարմոնիկ) մոտավորությամբ: Այս մոտավորության շրջանակներում ստացվում են բազմաթիվ քանակական արդյունքներ, որոնք լավագույնս համընկնում են փորձի հետ:

Բնականաբար, ներդաշնակ մոտավորությունն ի վիճակի չէ բացատրել մի շարք ֆիզիկական երևույթներ, որոնցում սկզբունքային նշանակություն ունի ցանցի պոտենցիալ էներգիայի վերլուծության մեջ շեղման խորանարդային և ավելի բարձր կարգի անդամների հաշվառումը: Դրանց թվին են պատկանում ջերմային ընդարձակման երևույթը, ջերմահաղորդականության

գործակցի վերջավոր լինելը, առաձգական հաստատունների՝ փորձում դիտվող ջերմաստիճանային կախումները և այլն:

Գործնականում (1.4) պայմանը խախտվում է միայն պինդ հեղուկի դեպքում, որը նկարագրելու համար ստեղծվել է առանձին տեսություն:

Հետագա ուսումնասիրությունների ժամանակ ենթադրվում է, որ բյուրեղային ցանցը կարելի է նկարագրել դասական մեխանիկայի շրջանակներում: Այս ենթադրությունը լիովին հիմնավորված է բարձր ջերմաստիճաններում: Ցածր ջերմաստիճանների տիրույթում, երբ առավելապես դոսևորվում են ատոմների քվանտային հատկությունները, բյուրեղային ցանցի տեսությունը հիմնվում է քվանտային մեխանիկայի օրինաչափությունների վրա (տես IV):

§2. Տատանումները և ալիքները պարզ միաչափ ցանցում

Բյուրեղային ցանցի տատանողական շարժման ուսումնասիրությունը նպատակահարմար է սկսել միաչափ պարզ ցանցի մոդելի մանրամասն քննարկումից:

Ունենք միևնույն m զանգվածով $N+1$ միատեսակ ատոմներ, որոնք կարող են շարժվել մի ուղղի երկայնքով (օրինակ՝ x առանցքով): Կենթադրենք նաև, որ այս համակարգի Φ պոտենցիալ էներգիան նվազագույնն է, երբ ատոմները դասավորված են միմյանցից միևնույն a հեռավորությամբ կետերում՝ միաչափ ցանցի na հանգույցներում: Միաչափ պարզ ցանցում ատոմների ակնթարթային դիրքերը տրվում են (1.1) առնչությամբ որոշված $\mathbf{r}(l, t)$ վեկտորի՝ x առանցքի վրա պրոյեկցիայով՝

$$x(na, t) = na + u(na, t), \quad n = 0, 1, 2, \dots, N: \quad (2.1)$$

Ներդաշնակ մոտավորությամբ համակարգի պոտենցիալ էներգիան կարելի է ներկայացնել որպես na հավասարակշռության դիրքերից ատոմների $u(na, t) \equiv u_n(t)$ շեղումների քառակուսային ֆունկցիա՝

$$\Phi(u_0, u_1, \dots, u_N) = \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{n, n'} A(n, n') u_n u_{n'}, \quad (2.2)$$

որտեղ $\Phi_0 = \Phi(0, 0, \dots, 0)$ հաստատուն անդամը ցանցի պոտենցիալ էներգիան է հավասարակշռության վիճակում,

$$A(n, n') = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_n \partial u_{n'}} \right)_0 = A(n', n) \quad (2.3)$$

մեծություններն ուժային հաստատուններն են (n և n' ատոմների համար), որոնք որոշվում են պոտենցիալ էներգիայի ածանցյալների արժեքներով $u_n = 0$ հավասարակշռության դիրքերում: (2.2) 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 ատոմները նրա վրա ազդում են

$$\begin{aligned} F_n &= -\frac{\partial \Phi}{\partial u_n} = -\frac{1}{2} \sum_{n', n''} A(n', n'') \frac{\partial}{\partial u_n} (u_{n'} u_{n''}) = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{n', n''} A(n', n'') (u_{n''} \delta_{n, n'} + u_{n'} \delta_{n, n''}) = -\sum_{n'} A(n, n') u_{n'} \end{aligned} \quad (2.4)$$

ուժով, որտեղ δ_{ik} -ն Կրոնեկերի սիմվոլն է: $A(n, n')$ գործակիցը քվապես հավասար է այն ուժին, որով n -րդ ատոմի վրա ազդում է $u_{n'} = 1$ սմ-ով շեղված n' -րդ ատոմը: Անվերջ ($N \rightarrow \infty$) շղթայի դեպքում, երբ եզրային երևույթները կարելի է անտեսել, այդ ուժը կախված է միմիայն n և n' ատոմների միջև հեռավորությունից, այսինքն՝

$$A(n', n) = A(n' - n) = A(n - n') \equiv A(a | n - n') : \quad (2.5)$$

Եթե բոլոր ատոմները տեղաշարժվեն միևնույն $\Delta u_n = \text{const}$ չափով, ապա F_n ուժը կմնա անփոփոխ՝

$$\Delta F_n = -\sum_{n'} A(n, n') \Delta u_{n'} = -\text{const} \sum_{n'} A(n, n') = 0,$$

հետևաբար՝ յուրաքանչյուր n -ի համար

$$\sum_{n'} A(n - n') = 0 : \quad (2.6)$$

Գրենք n -րդ ատոմի շարժման հավասարումը՝

$$m \ddot{u}_n = -\sum_{n'} A(n - n') u_{n'} : \quad (2.7)$$

Ներդաշնակ տատանակի հավասարման հետ (2.7) հավասարման մմանութ-
յունից հետևում է, որ

$$u_n(t) = u_n^0 e^{-i\omega t}, \quad (2.8)$$

իսկ u_n^0 մեծությունները որոշվում են հետևյալ գծային համակարգից՝

$$m\omega^2 u_n^0 - \sum_{n'} A(n' - n) u_{n'}^0 = 0: \quad (2.9)$$

Ցանցի տեղափոխական համաչափության հատկությունից հետևում է, որ նույն (2.9) հավասարումը կարելի է գրել կամայական u_{n+k}^0 ($k = 1, 2, \dots$) շեղման համար: Իրոք, (2.9) արտահայտության մեջ n -ից անցնելով $n+k$ -ին՝ կստանանք՝

$$m\omega^2 u_{n+k}^0 = \sum_{n'} A(n' - n - k) u_{n'}^0 = \sum_{n''} A(n'' - n) u_{n''+k}^0, \quad (2.10)$$

այսինքն՝ (2.9) արտահայտությունը:

(2.9) և (2.10) հավասարումների նույնությունից հետևում է, որ նրանց լուծումները կարող են իրարից տարբերվել միայն հաստատուն (n -ից չկախված) b_k արտադրիչով, այսինքն՝

$$u_{n+k}^0 = b_k u_n^0: \quad (2.11)$$

Դժվար չէ տեսնել, որ b_k գործակիցները բավարարում են հետևյալ ֆունկցիոնալ հավասարմանը՝

$$b_{k+l} = b_k b_l, \quad (2.12)$$

որի լուծումներն են

$$b_k = e^{ikqa}: \quad (2.13)$$

(2.11) և (2.12) առնչություններից հետևում է, որ

$$u_n^0 = u(0) e^{inqa}, \quad (2.14)$$

որտեղ $u(0)$ -ն հաստատուն գործակից է, իսկ q պարամետրը որոշվում է սահմանային պայմաններից: Այսպիսով՝ (2.7) հավասարման լուծումը (2.8) և (2.13) առնչությունների միջոցով կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$u_n(t) = u(0) e^{i(nqa - \omega t)}: \quad (2.15)$$

(2.15) արտահայտությունը նկարագրում է հարթ ալիք, որի հաճախությունը ω է, աղբյուրից հեռավորությունը՝ na , իսկ ալիքային թիվը՝ q : Եթե (2.15) լուծումը տեղադրենք շարժման (2.7) հավասարման մեջ, կստանանք միաչափ պարզ ցանցում ալիքի հաճախության և ալիքային թվի միջև կապը՝ դիսպերսային հավասարումը՝

$$m\omega^2 = \sum_{n'} A(n' - n) e^{iqa(n' - n)} = \sum_l A(l) e^{iqal} : \quad (2.16)$$

Այսպիսով՝ դիսպերսային հավասարումը պատասխանում է այն հարցին, թե տվյալ միջավայրում տրված q ալիքային թվով ալիքն ինչ հաճախություն կարող է ունենալ, ընդ որում՝ այդ կապը որոշվում է համակարգի ֆիզիկական բնութագրերով (ատոմի m զանգվածով, ցանցի a հաստատունով, $A(l)$ ուժային հաստատուններով): Նկատի ունենալով ուժային հաստատունների կախումը միմիայն հանգույցների միջև հեռավորություններից՝ $A(l) = A(|l|)$ (տես (2.5) հատկությունը)՝ (2.16) հավասարումից կստանանք, որ $\omega^2(-q) = \omega^2(q)$, այսինքն՝ $\omega^2(q)$ -ն ալիքային թվի զույգ ֆունկցիա է: Նշանակում է՝ միևնույն մեծությամբ ($|q|$ -ով), սակայն ցանցում հակառակ ուղղություններով տարածվող ալիքներն ունեն նույն հաճախությունը:

Որոշենք, թե ինչ 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 Բռոն-Կառմանի պայմանից, որի համաձայն՝ շղթայի ծայրերը շարժվում են միևնույն փուլում: Միաչափ շղթայի դեպքում կարելի է պատկերացնել, որ շղթայի ծայրերը համընկնում են, այսինքն՝

$$u_n(t) = u_{n+N}(t) : \quad (2.17)$$

(2.17) և (2.15) առնչություններից հետևում է, որ

$$e^{iNqa} = 1, \quad (2.18)$$

կամ

$$q_j = \frac{2\pi}{Na} j = \frac{2\pi}{L} j, \quad (2.19)$$

որտեղ $j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots$, իսկ $L = Na$ -ն շղթայի երկարությունն է:

Այսպիսով՝ q ալիքային թիվն ընդունում է ընդհատ արժեքներ, որոնք $2\pi/L$ մեծության բազմապատիկներ են:

Մյուս կողմից, (2.18) հավասարումը չի փոխվի, եթե նրանում q -ի փոխարեն տեղադրվի $q + 2\pi k/a$, ($k = \pm 1, \pm 2, \pm \dots$) մեծությունը, հետևաբար՝ q -ի փոփոխման անվերջ տիրույթը կարելի է սահմանափակել $2\pi/a$ մեծությամբ և $q_j = 0$ կետի նկատմամբ համաչափ

$$-\frac{\pi}{a} \leq q_j < \frac{\pi}{a} \quad (2.20)$$

տիրույթով: Քանի որ ալիքային թվի՝ (2.19) առնչությամբ տրվող երկու մոտակա արժեքների միջև հեռավորությունը՝

$$\Delta q_{j,j-1} = q_j - q_{j-1} = \frac{2\pi}{Na} \equiv \Delta q \quad (2.21)$$

մեծությունը կախված չէ j -ից, այսպես q_j արժեքները q առանցքի վրա բաշխված են հավասարաչափ, իսկ (2.20) տիրույթում q ալիքային թվի թույլատրելի արժեքների թիվը հավասար է

$$\frac{2\pi/a}{\Delta q} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{Na}{2\pi} = N, \quad (2.22)$$

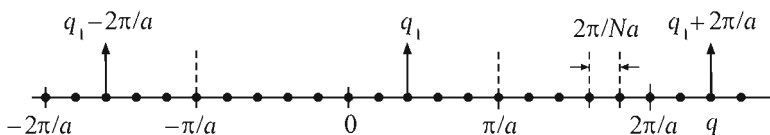
այսինքն՝ ցանցի տարրական բջիջների թվին: (2.20) տիրույթը կոչվում է միաչափ ցանցի Բրիլյուենի առաջին զոնա: Ալիքային թվի՝ այս զոնային պատկանող արժեքների համար j -ն փոփոխվում է

$$-\frac{N}{2} \leq j < \frac{N}{2} \quad (2.23)$$

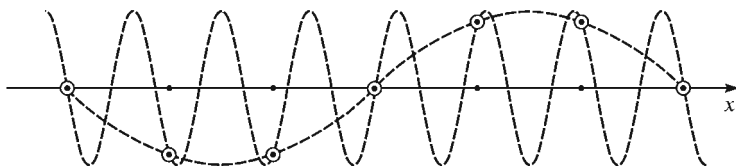
արժեքների միջև: Մակրոսկոպական մոուլի դեպքում, երբ $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$, սակայն $N/L = 1/a < \infty$ (ջերմադինամիկական սահման), $\Delta q \sim 1/N \rightarrow 0$, և q ալիքային թիվն ընդունում է անընդհատ արժեքներ: Սակայն, անկախ Δq -ի մեծությունից, ալիքային թիվը Բրիլյուենի զոնայում ընդունում է հաշվելի թվով արժեքներ (N հատ), ուստի ընդունված է q ալիքային թիվը համարել քվազիանընդհատ մեծություն: Այս հանգամանքը հաճախ էապես դյուրացնում է մաթեմատիկական հաշվարկների կատարումը, քանի որ հնարավորություն է տալիս հաշվարկներում զումարներից անցնելու ինտեգրալների:

(2.16) և (2.15) առնչությունների համաձայն՝ q_j և $q_j + 2\pi n'/a$ ալիքային քվերին համապատասխանում են միևնույն հաճախությունը՝ $\omega(q_j) = \omega(q_j + 2\pi n'/a)$, և միևնույն շեղումները՝ $u_{n,q_j}(t) = u_{n,q_j+2\pi n'/a}(t)$: Այս արդյունքն արտահայտում է այն իրողությունը, որ ֆիզիկական իմաստ ունեն միայն m զանգվածի շեղումները, քանի որ $q > \pi/a$ կամ $\lambda = 2\pi/q < 2a$ երկարությամբ ալիքները չեն համապատասխանում նոր տատանումների:

Ամենակարճ ալիքները, որոնք կարող են տարածվել ցանցում, ունեն $q = \pm \pi/a$ ալիքային քիվ և $\lambda_{\min} = 2a$ երկարություն: $2a \leq \lambda < \infty$ երկարությամբ ալիքներին համապատասխանող ալիքային քվերը լրացնում են Բրիլյուենի առաջին զոնան (նկ. 41):



Նկ. 41. q_j ալիքային քվի արժեքները և Բրիլյուենի առաջին զոնան՝ $(-\pi/a, \pi/a]$ տիրույթը



Նկ. 42. $\lambda_1 = 6a$ և $\lambda_2 = 6a/7$ երկարությամբ ալիքների պատկերները

Նկ. 41-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. 42):

Հետագա շարադրանքում հակիրճության համար կօգտագործենք «մոդ» տերմինը, որպես տրված q ալիքային քվով և $\omega(q)$ հաճախությամբ ալիքի կամ տատանողական վիճակի անվանում:

Այսպիսով՝ տատանումների թույլատրելի և ֆիզիկական իմաստ ունեցող մոդերը լրացնում են Բրիլյուենի առաջին զոնան: Չոնայի սահմաններին, այն է՝ $q = \pm \pi/a$ արժեքներին համապատասխանում է երկու մոդ՝

$$\omega_{\max} = \sqrt{\frac{2A(0)}{m} \left\{ 1 + \frac{2}{A(0)} [A(2) + A(4) + \dots] \right\}} \quad (2.24)$$

առավելագույն հաճախությամբ և

$$u_n(t) = u(0) e^{-i\omega_{\max} t} e^{\pm i \frac{\pi}{a} n a} = (-1)^n u(0) e^{-i\omega_{\max} t} \quad (2.25)$$

շեղումներով, որոնք նկարագրում են կանգուն ալիք, որում հարևան ատոմները տատանվում են հակափուլերում:

Քանի որ $u_n = 0$, ($n = 0, 1, 2, \dots, N$) դեպքում համակարգը հավասարակշռության վիճակում է, ապա ուժային հաստատունների $\|A(n, n')\|$ մատրիցը պետք է լինի դրականապես որոշված, մասնավորապես, անհրաժեշտ է, որ տեղի ունենա $A(0) > 0$ անհավասարությունը:

Նկատի ունենալով q_i ալիքային թվի արժեքները՝ կարելի է եզրակացնել, որ (2.15) արտահայտությամբ տրվող մասնավոր լուծումների թիվը հավասար է անկախ մոդերի (ցանցի ազատության աստիճանների) N թվին: Շարժման (2.7) հավասարման ընդհանուր լուծումը (2.15) լուծումների գծային համակցություն է (նշենք, որ ընդհանուր լուծման համար օգտագործված է նույն՝ $u_n(t)$ նշանակումը՝

$$u_n(t) = \sum_q A_q e^{i[anq - \omega(q)t]}, \quad (2.26)$$

այսինքն՝ n -րդ ատոմի շեղումը A_q լայնությունով հարթ ալիքների վերադրման արդյունք է: Մյուս կողմից, (2.26) ընդհանուր լուծումը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$u_n(t) = \sum_q \eta_q e^{ianq}, \quad (2.27)$$

որտեղ

$$\eta_q = A_q e^{-i\omega(q)t} \quad (2.28)$$

մեծություններն այսպես կոչված նորմալ կոորդինատներն են:

(2.27) առնչությունը կապ է հաստատում երկու տարրեր՝ $\{u_n(t)\}$ և $\{\eta_q(t)\}$ կոորդինատային հավաքածուների միջև: Ի տարբերություն $u_n(t)$ շեղումների՝ $\eta_q(t)$ կոորդինատներն իրարից անկախ են: Դրանում հեշտ է համոզվել, եթե (2.27) առնչությունը տեղադրենք (2.7) հավասարման մեջ.

$$m \sum_q \ddot{\eta}_q e^{ianq} + \sum_{n',q} A(n-n') \eta_q e^{ian'q} = 0: \quad (2.29)$$

ձևափոխենք ըստ n' -ի գումարը՝ նկատի ունենալով (2.15) կապը՝

$$\sum_{n'} A(n-n') e^{iaq(n'-n)} e^{ianq} = e^{ianq} \sum_l A(l) e^{iqal} = e^{ianq} m \omega^2: \quad (2.30)$$

(2.29) և (2.30) արտահայտություններից կստանանք՝

$$\sum_q [\ddot{\eta}_q + \omega^2(q) \eta_q] e^{iqan} = 0: \quad (2.31)$$

Քանի որ η_q մեծություններն իրարից անկախ են, ապա (2.31) հավասարումից հետևում է, որ

$$\ddot{\eta}_q + \omega^2(q) \eta_q = 0: \quad (2.32)$$

Ստացանք կարևորագույն արդյունք՝ կոորդինատների (2.27) ձևափոխությունը ցանցի տատանումների դիմամիկական խնդիրը հանգեցնում է անկախ ներդաշնակ տատանակների հավաքածուի խնդրին: Այլ կերպ ասած՝ փոխազդող ատոմների համակարգի խնդիրը բերվում է չփոխազդող ներդաշնակ տատանակների իդեալական համակարգի խնդրին:

Եթե նկատի ունենանք, որ $u_n(t)$ շեղումն իրական մեծություն է՝

$$u_n^*(t) = u_n(t), \quad (2.33)$$

ապա (2.27) առնչությունից կրիսի η_q կոորդինատների

$$\eta_q^* = \eta_{-q} \quad (2.34)$$

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 հավասար է համակարգի ազատության աստիճանների թվին:

§3. Ամենամոտ հարևանների մոտավորությունը

Վերն ստացված արդյունքները կարելի է պարզեցնել և ավելի մատչելի դարձնել ամենամոտ հարևանների մոտավորության օգնությամբ, որի համաձայն՝ (2.7) շարժման հավասարման մեջ հաշվի է առնվում տվյալ ատոմի փոխազդեցությունը միայն իր աջ և ձախ հարևանների հետ: Սա համարժեք է ուժային հաստատունների հետևյալ 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՝ (2.6) պայմանի համաձայն՝

$$A(0) + 2A(1) = 0 : \quad (3.2)$$

Քանի որ $A(0) > 0$, ապա $A(1) = -\beta < 0$, որտեղ $\beta > 0$ 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 ատոմի վրա ազդող ուժի համար (2.4) ընդհանուր արտահայտությունից կստանանք՝

$$\begin{aligned} F_n &= -\beta(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = \\ &= -\beta(u_n - u_{n+1}) - \beta(u_n - u_{n-1}) \equiv f_{n,n+1} + f_{n,n-1}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

որտեղ

$$f_{n,n\pm 1} = -\beta(u_n - u_{n\pm 1}) \quad (3.5)$$

մեծությունն այն ուժն է, որով n -րդ ատոմի վրա ազդում են աջ՝ $(n+1)$ հարևանը $(+)$ և ձախ՝ $(n-1)$ հարևանը $(-)$, իսկ β -ն կոշտության գործակիցն է: (3.1) մոտարկման հետևանքով (2.7) շարժման հավասարումն ընդունում է հետևյալ տեսքը՝

$$m\ddot{u}_n = -\beta(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}), \quad (3.6)$$

իսկ (2.16) դիսպերսային հավասարումը՝

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m}(1 - \cos qa), \quad (3.7)$$

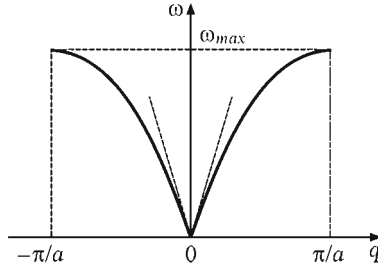
որը մասնավորապես հաստատում է $\omega^2(q)$ ֆունկցիայի՝ (2.16) հավասարումից բխող զույգության հատկությունը:

Քանի որ $\omega^2(q) > 0$, ապա (3.7) բանաձևից կստանանք՝

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| = \omega_{\max} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|, \quad (3.8)$$

որտեղ (2.24) և (3.3) արտահայտությունների համաձայն՝

$$\omega_{\max} = \sqrt{\frac{2A(0)}{m}} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} : \quad (3.9)$$



Նկ. 43. $\omega(q)$ դիսպերսային հավասարման գրաֆիկը

(3.8) դիսպերսային առնչությունից հետևում է տեղափոխական համաչափությամբ օժտված ընդհանուր համակարգերի մի կարևոր առանձնահատկություն՝ $\omega_{\max}$ առավելագույն հաճախության գոյությունը: $\omega > \omega_{\max}$ հաճախությամբ ալիքներ ցանցում տարածվել չեն կարող:

Փոքր ալիքային թվերի դեպքում կամ, ինչպես ընդունված է ասել, երկարալիքային սահմանում ($aq \ll 1$ կամ $\lambda \gg a$) (3.8) բանաձևից ստանում ենք՝

$$\omega(q) \approx \omega_{\max} \frac{qa}{2} = a\sqrt{\frac{\beta}{m}} q \equiv v_0 q, \quad (3.10)$$

որտեղ

$$v_0 = a\sqrt{\frac{\beta}{m}} \quad (3.11)$$

մեծությունը ձայնի տարածման արագությունն է ցանցում:

Երկարալիքային սահմանում, երբ ցանցը կարելի է դիտել որպես հոծ միջավայր, (3.11) բանաձևից հետևում է ձողում ձայնի արագության

$$v_0 = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (3.12)$$

արտահայտությունը, որտեղ ρ -ն ձողի նյութի խտությունն է, E -ն՝ Յունգի մոդուլը: Հարկ է նշել, որ օգտվելով ձայնի v_0 արագության փորձից հայտնի արժեքներից՝ միաչափ ցանցի մոդելի շրջանակներում կարող ենք (3.11) բանաձևի միջոցով գնահատել միջատոմային ուժերի կոշտության գործակիցը՝

$$\beta = m \left(\frac{v_0}{a} \right)^2 : \quad (3.13)$$

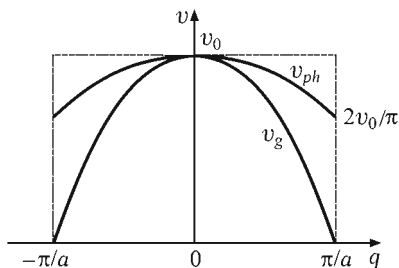
Ընդհանուր դեպքում $\omega(q)$ կախումը տարբերվում է (3.10) գծային կապից, ուստի կարելի է ներմուծել ալիքների փուլային և խմբային արագությունները, որոնք չեն համընկնում: Այս դեպքում ընդունված է ասել, որ միջավայրն օժտված է դիսպերսիայով: Սահմանման համաձայն՝ փուլային արագությունը՝

$$v_{ph} = \frac{\omega}{|q|} = \frac{\omega_{\max} a}{2} \frac{\left| \sin \frac{qa}{2} \right|}{\frac{|q|a}{2}} = v_0 \left| \frac{\sin \frac{qa}{2}}{\frac{qa}{2}} \right|, \quad (3.14)$$

իսկ խմբային արագությունը՝

$$v_g = \left| \frac{d\omega}{dq} \right| = \frac{\omega_{\max} a}{2} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| = v_0 \left| \cos \frac{qa}{2} \right| : \quad (3.15)$$

Երբ $qa \ll 1$, (3.14) և (3.15) բանաձևերի համաձայն՝ $v_{ph} = v_g = v_0$: Հակառակ սահմանում, երբ $qa = \pm\pi$, $v_g(\pm\pi/a) = 0$, այսինքն՝ էներգիայի հոսքը շղթայով բացակայում է, որը հետևանք է կանգուն ալիքի ռեժիմի հաստատման: Նկ. 44-ում պատկերված են $v_{ph}(q)$ և $v_g(q)$ կախումները:

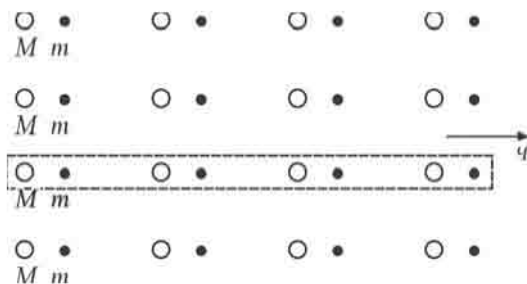


Նկ. 44. Փուլային և խմբային արագությունների գրաֆիկները

§4. Տատանումները և ալիքները բարդ (բազիսով) միաչափ ցանցում

Միաչափ ցանցի համար ստացված արդյունքները կարելի է օգտագործել պարզ, ծավալակենտրոն և միատակենտրոն խորանարդային ցանցերի՝ համաչափության որոշակի առանցքին ուղղահայաց ատոմական հարթությունների տատանումներն ուսումնասիրելիս, երբ ալիքը տարածվում է այդ նույն համաչափության առանցքի ուղղությամբ:

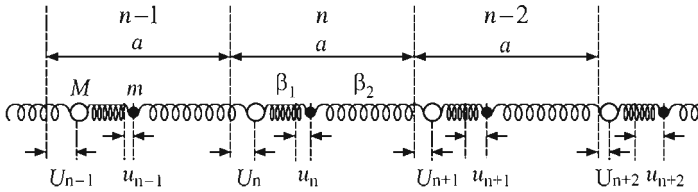
Զննարկենք այժմ այն դեպքը, երբ խորանարդային բյուրեղը կազմված է տարբեր զանգվածներով երկու տեսակի ատոմներից, ընդ որում՝ M զանգվածով ատոմները կազմում են հարթությունների մի համակարգ, իսկ m զանգվածները՝ մի այլ համակարգ, որի հարթությունները M զանգվածով ատոմների հարթությունների միջև են (նկ. 45-ում պատկերված է հավասարակշռության վիճակը):



Նկ. 45. Եռաչափ ցանցում ատոմների միաչափ ցանցի ընտրությունը

Ուսումնասիրենք ալիքների տարածումը համաչափության այն առանցքի ուղղությամբ, որին ուղղահայաց յուրաքանչյուր ատոմին հարթություն պարունակում է միայն մեկ տեսակի ատոմներ: Օրինակ՝ NaCl -ի տիպի կառուցվածքում այդպիսին է $[111]$ ուղղությունը: Նկ. 46-ում պատկերված է նկ. 45-ում կետագծերով նշված ատոմային շղթան տատանման վիճակում: Ալիքը տարածվում է ալաքի ուղղությամբ: U_n -ով նշանակված է n -րդ քգջում M զանգվածի շեղումը, u_n -ով՝ m զանգվածի շեղումը, β_1 և β_2 գործակիցներն ուժային հաստատուններն են (զսպանակների կոշտության գործակիցները): Ըղթայի յուրաքանչյուր քգիջ 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. 46-ում ենթադրված է, որ $\beta_1 > \beta_2$):



Նկ. 46. Բարդ միաչափ ցանցի մեխանիկական մոդելը

Ամենամոտ հարևանների մոտավորությամբ բարդ միաչափ (գծային) ցանցի պոտենցիալ էներգիան տրվում է

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2}\beta_1 \sum_n (U_n - u_n)^2 + \frac{1}{2}\beta_2 \sum_n (u_n - U_{n+1})^2 \quad (4.1)$$

արտահայտությամբ, որի օգնությամբ կարող ենք որոշել 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 տեղափոխական համաչափության հատկության շնորհիվ բերվում է երկու անհայտով երկու հավասարումների համակարգի՝ անհայտ B և b լայնույթների համար, քանի որ բոլոր միատեսակ ատոմները կատարում են միևնույն հաճախությամբ և միևնույն լայնությով տատանումներ, որոնք իրարից կարող են տարբերվել միմիայն տատանումների փուլերով, որը հետևանք է ցանցում մրանց զբաղեցրած դիրքերի տարբերությամբ: Այսպիսով՝ (4.2) և (4.3) հավասարումների լուծումները կներկայացնենք հետևյալ տեսքով՝

$$U_n(t) = B \exp[i(aqn - \omega t)], \quad (4.4)$$

$$u_n(t) = b \exp[i(aqn - \omega t)]: \quad (4.5)$$

Քանի որ սահմանային պայմանները նույնն են, ինչ որ պարզ (միատոմ) գծային ցանցի դեպքում (տես (2.17) պայմանը), ապա q ալիքային թվի ընդունած արժեքները տրվում են (2.19) բանաձևով, իսկ ֆիզիկական տարբեր մոդեր նկարագրող նրա արժեքներն ընկած են Բրիլյուենի առաջին զոնայում՝ $-\pi/a \leq q < \pi/a$:

(4.4) և (4.5) արտահայտությունները տեղադրելով շարժման հավասարումների մեջ և կրճատելով $\exp[i(qan - \omega t)]$ ընդհանուր արտադրիչը՝ B և b անհայտների համար կստանանք համասեռ հավասարումների հետևյալ համակարգը՝

$$[m\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]b + (\beta_1 + \beta_2 e^{iqa})B = 0, \quad (4.6)$$

$$(\beta_1 + \beta_2 e^{-iqa})b + [M\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]B = 0: \quad (4.7)$$

Այս համակարգի ոչ զրոյական լուծում ունենալու պայմանը համակարգի որոշիչի զրո 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 (4.4) և (4.5) արտահայտություններով տրվող ալիքների հաճախության և ալիքային թվի միջև կապը՝ $\omega \equiv \omega(q)$ դիսպերսային հավասարումը: Բացելով (4.8) որոշիչը և կատարելով պարզ ձևափոխություններ՝ ստանում ենք՝ քառակուսային հավասարում ω^2 -ու նկատմամբ՝

$$\omega^4 - \omega_0^2 \omega^2 + \frac{4\beta_1\beta_2}{mM} \sin^2 \frac{qa}{2} = 0, \quad (4.9)$$

որտեղ

$$\omega_0^2 = \frac{(\beta_1 + \beta_2)(m + M)}{mM}: \quad (4.10)$$

(4.9) հավասարման լուծումներն են՝

$$\omega_1^2 = \frac{\omega_0^2}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}} \right], \quad (4.11)$$

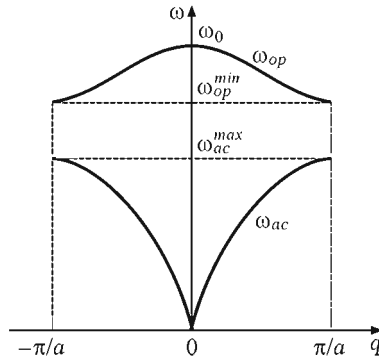
$$\omega_2^2 = \frac{\omega_0^2}{2} \left[1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}} \right], \quad (4.12)$$

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 կքննարկենք առանձին: Քանի որ $\gamma^2 \leq 1$, ապա $\omega_1(q)$ և $\omega_2(q)$ ֆունկցիաներն ընդունում են իրական արժեքներ:

Բարդ ցանցի հիմնական տարբերությունը պարզ ցանցից այն է, որ (4.11) և (4.12) հավասարումները որոշում են դիսպերսիայի երկու ճյուղ՝ ձայնային՝ $\omega_1(q) \equiv \omega_{ac}(q)$, և օպտիկական՝ $\omega_2(q) \equiv \omega_{op}(q)$, այսինքն՝ բարդ ցանցում գոյություն ունեն երկու տիպի՝ ձայնային և օպտիկական տատանումներ: q ալիքային թվի յուրաքանչյուր արժեքի համապատասխանում է երկու հաճախություն, որոնցից մեկը պատկանում է ձայնային, մյուսը՝ օպտիկական ճյուղին: Հետևաբար՝ բարդ միաչափ ցանցում անկախ տատանումների (մոդերի) թիվը կլինի հավասար Բրիլյուենի զոնայում ալիքային թվի հնարավոր արժեքների (N) և ճյուղերի թվի (2) արտադրյալին, այսինքն՝ $2N$ -ի, որը հավասար է ցանցի ազատության աստիճանների թվին:



Նկ. 47. Ձայնային և օպտիկական ճյուղերի գրաֆիկները

Նկատի ունենալով դիսպերսային հավասարումների զուգությամբ՝

$$\omega_1(-q) = \omega_1(q) \text{ և } \omega_2(-q) = \omega_2(q) \quad (4.14)$$

հատկությունը, այսուհետև կենթադրենք, որ $\omega_1, \omega_2 > 0$ և տրվում են հետևյալ բանաձևերով՝

$$\omega_{ac}(q) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}}, \quad (4.15)$$

$$\omega_{op}(q) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}}: \quad (4.16)$$

Նկ. 47-ում պատկերված են ձայնային և օպտիկական տատանումների դիսպերսային առնչությունների գրաֆիկները:

Ուսումնասիրենք այս դիսպերսային առնչությունների վարքը տարբեր մասնավոր դեպքերում:

§5. Դիսպերսային առնչությունների ուսումնասիրումը

Բարդ միաչափ ցանցի (4.15) և (4.16) դիսպերսային առնչությունները հնարավորություն են ընձեռում համեմատաբար պարզ մոդելի շրջանակներում բացահայտելու պարբերական համաչափությամբ օժտված միջավայրերում ալիքների տարածման առանձնահատկությունները, որոնք բնորոշ են մակերկաթի և եռաչափ բյուրեղային ցանցերին:

1. Երկարալիքային սահման՝ $qa \ll 1$ ($\lambda \gg a$):

Ձայնային ճյուղի հաճախությունների (4.15) բանաձևից ստացված

$$\omega_{ac}(q) \approx \frac{1}{4} \omega_0 \gamma a q \equiv v q \quad (5.1)$$

գծային կապը բնութագրական է ձայնային ալիքների համար (այստեղից էլ՝ ճյուղի անվանումը), որոնք տարածվում են

$$v = a \sqrt{\frac{\beta_1 \beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)(m + M)}} \quad (5.2)$$

արագությամբ:

Օպտիկական ճյուղի հաճախությունների համար

$$\omega_{op}(q) \approx \omega_0 \left(1 - \frac{\gamma^2 a^2}{32} q^2 \right): \quad (5.3)$$

Երբ $q \rightarrow 0$, $\omega_{ac} \rightarrow 0$, իսկ $\omega_{op} \rightarrow \omega_0$:

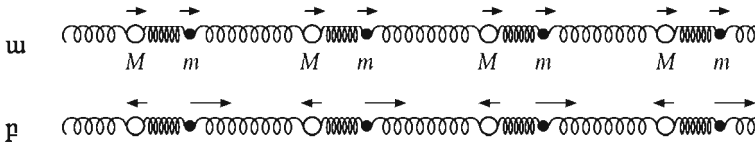
(4.6) և (4.7) արտահայտությունների համաձայն՝ շեղումների և տատանումների լայնությունների հարաբերությունը՝

$$\frac{u_n}{U_n} = \frac{b}{B} = \frac{\beta_1 + \beta_2 e^{iqa}}{\beta_1 + \beta_2 - m\omega^2} = \frac{\beta_1 + \beta_2 \gamma^2 - M\omega^2}{\beta_1 + \beta_2 e^{-iqa}} : \quad (5.4)$$

Չայնային ճյուղի տատանումների համար, երբ $q \rightarrow 0$, (5.4) առնչությունից հետևում է, որ

$$\left(\frac{b}{B}\right)_{ac} = 1, \quad \text{և} \quad u_n(t) = U_n(t), \quad (5.5)$$

այսինքն՝ բջջում ատոմները տատանվում են նույն փուլում (նկ. 48. ա)։



Նկ. 48. Մասնիկների շեղումները $q \rightarrow 0$ սահմանային դեպքում.

ա. ձայնային ճյուղ, բ. օպտիկական ճյուղ

Օպտիկական ճյուղի տատանումների համար, երբ $q \rightarrow 0$

$$\left(\frac{b}{B}\right)_{op} = \frac{\beta_1 + \beta_2}{\beta_1 + \beta_2 - m\omega_0^2} = -\frac{M}{m}, \quad (5.6)$$

այսինքն՝ բջջում ատոմները տատանվում են հակադիր փուլերում, ընդ որում՝ այնպես, որ բջջի զանգվածների կենտրոնը մնում է անշարժ (նկ. 48. բ)՝

$$mu_n(t) + MU_n(t) = 0 : \quad (5.7)$$

2. Կարճալիքային սահման՝ $qa = \pi$ ($\lambda = 2a$)։

Բրիլյուենի զոնայի սահմաններից ($qa = \pm\pi$) համապատասխանում են ձայնային և օպտիկական ճյուղի հաճախությունների հետևյալ արժեքները՝

$$\omega_{ac}(\pm\frac{\pi}{a}) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \gamma^2}} \equiv \omega_{ac}^{\max}, \quad (5.8)$$

$$\omega_{op}(\pm\frac{\pi}{a}) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - \gamma^2}} \equiv \omega_{op}^{\min} : \quad (5.9)$$

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 տատանումներն իրար նկատմամբ շեղված են 180° -ով՝ մասնիկները տատանվում են հակափուլերում:

Ձայնային և օպտիկական ալիքների խմբային արագությունների համար (4.15) և (4.16) բանաձևերից ստանում ենք՝

$$v_{ac,g} = \left| \frac{d\omega_{ac}}{dq} \right|_{\pi/a} = 0, \quad v_{op,g} = \left| \frac{d\omega_{op}}{dq} \right|_{\pi/a} = 0, \quad (5.10)$$

ինչը համապատասխանում է կանգուն ալիքների հաստատմանը:

(5.4), (4.15) և (4.16) արտահայտություններից հետևում է ձայնային (-) և օպտիկական (+) ճյուղերին համապատասխանող շեղումների հարաբերությունը՝

$$\left(\frac{u_n}{U_n} \right)_{ac,op} = \frac{\beta_1 - \beta_2}{(\beta_1 + \beta_2) \left\{ 1 - \frac{m+M}{2M} \left[1 \mp \sqrt{1 - \frac{16\beta_1\beta_2 m M}{(\beta_1 + \beta_2)^2 (m+M)^2}} \right] \right\}} : \quad (5.11)$$

Հնարավոր բազմաթիվ դեպքերից քննարկենք $m = M$, $\beta_1 > \beta_2$ դեպքը: (5.11) բանաձևից հետևում է, որ

$$\left(\frac{u_n}{U_n} \right)_{ac} = 1, \quad \left(\frac{u_n}{U_n} \right)_{op} = -1, \quad (5.12)$$

այսինքն՝ ձայնային տատանումների դեպքում ձգվում-սեղմվում են β_2 կոշտությամբ զսպանակները (նկ. 48. ա), իսկ օպտիկական տատանումների դեպքում՝ β_1 կոշտությամբ զսպանակները (նկ. 48. բ):

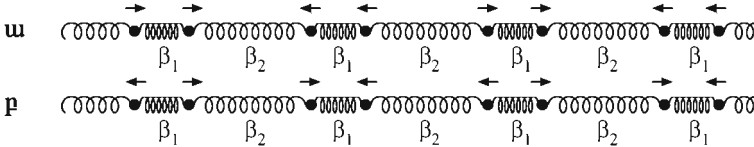
3. $\beta_1 \ll \beta_2$ մոտավորություն

Այժմ ուսումնասիրենք ձայնային և օպտիկական տատանումներն այն դեպքում, երբ $\beta_1 \ll \beta_2$: (4.13) բանաձևի համաձայն՝ $\gamma^2 \sim \beta_1/\beta_2 \ll 1$, հետևաբար (4.15), (4.16) և (5.4) արտահայտությունները վերլուծելով շարքի՝ կստանանք՝

$$\omega_{ac} = 2\sqrt{\frac{\beta_1}{m+M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| [1 + O(\gamma^2)], \quad \frac{u_n}{U_n} \approx 1, \quad (5.13)$$

$$\omega_{op} = 2\sqrt{\beta_2 \frac{m+M}{mM}} [1 + O(\gamma^2)], \quad \frac{u_n}{U_n} \approx -1: \quad (5.14)$$

Ինչպես հետևում է (5.14) արտահայտությունից, օպտիկական ճյուղի տատանումներում դիսպերսիան բացակայում է, այսինքն՝ ω_{op} հաճախությունը կախված չէ q ալիքային թվից և հավասար է $mM/(m+M)$ բերված զանգվածով և β_2 կոշտությամբ զսպանակներով կապված մոլեկուլների տատանումների հաճախությանը, իսկ մոլեկուլի մեջ մտնող ատոմները շարժվում են հակափուլերում:



Նկ. 49. Բարդ ցանցի տատանումները $m = M$, $\beta_1 > \beta_2$ դեպքում.
ա. ձայնային ճյուղ, բ. օպտիկական ճյուղ

Չայնային ճյուղի (5.13) դիսպերսային արտահայտությունը համընկնում է $(m+M)$ զանգվածով և β_1 զսպանակներով իրար կապված ատոմների գծային պարզ շղթայի դիսպերսային հավասարման հետ, իսկ յուրաքանչյուր բջջում ատոմները շարժվում են միևնույն փուլում, որի հետևանքով էլ β_1 զսպանակները համարյա չեն սեղմվում և ձգվում: (4.15) և (4.16) բանաձևերով ներկայացված ձայնային և օպտիկական ճյուղերը պատկերված են նկ. 47-ում:

4. Արգելված գոտու գաղափարը

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՝

$$\Delta\omega_g = \omega_{op}^{\min} - \omega_{ac}^{\max}: \quad (5.15)$$

Արգելված գոտում պատկանող հաճախություններով ալիքները ցանցում տարածվել չեն կարող, քանի որ արագ մարում են: Նույնը կարելի է ասել նաև $\omega > \omega_0$ հաճախություններով ալիքների մասին:

Դրանում կարելի է համոզվել, եթե արգելված գոտում պատկանող որևէ ω հաճախություն տեղադրենք (4.15) կամ (4.16) բանաձևի մեջ և ստացված արտահայտությունը դիտարկենք որպես հավասարում $q(\omega)$ ալիքային թիվը որոշելու համար: Այն ունի հետևյալ տեսքը՝

$$\cos qa = 1 - \frac{8}{\gamma^2} \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \right) \equiv -\delta: \quad (5.16)$$

Քանի որ $\Delta\omega_g$ -ին պատկանող հաճախությունների համար $\delta \geq 1$, ապա (5.16) հավասարման լուծումն ունի կոմպլեքս տեսք՝

$$q = q_1 + iq_2: \quad (5.17)$$

(5.17) արտահայտությունը տեղադրելով (5.16) հավասարման մեջ և հավասարեցնելով աջ ու ձախ մասերում ստացված արտահայտությունների իրական և կեղծ մասերը՝ կստանանք՝

$$q_1 = \frac{\pi}{a}, \quad q_2 = \pm \frac{1}{a} \ln \left(\delta + \sqrt{\delta^2 - 1} \right) \equiv q_2(\omega): \quad (5.18)$$

(5.16) հավասարումով որոշված $\delta(\omega)$ ֆունկցիան արգելված գոտու եզրերին հավասարվում է միավորի՝

$$\delta(\omega_{ac}^{\max}) = \delta(\omega_{ac}^{\min}) = 1$$

և ընդունում է առավելագույն արժեք արգելված գոտում, $\omega_0/\sqrt{2}$ կետում, որին համապատասխանում է հետևյալ արժեքը՝

$$q_2^{\max} = \frac{1}{a} \ln \left[\frac{2}{\gamma^2} - 1 + \sqrt{\left(\frac{2}{\gamma^2} - 1 \right)^2 - 1} \right]: \quad (5.19)$$

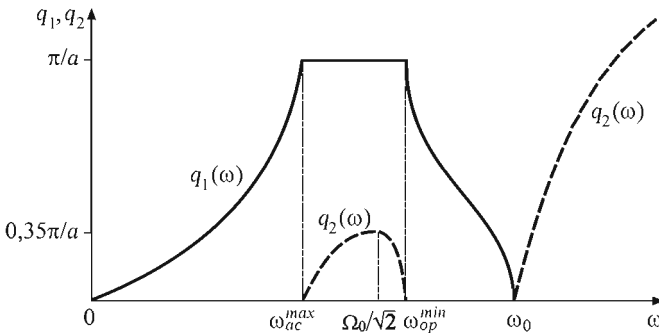
Նույն ձևով $\omega > \omega_0$ հաճախությունների համար կստանանք՝

$$q_1 = 0, \quad q_2 = \pm \frac{1}{a} \ln \left(\delta_1 + \sqrt{\delta_1^2 - 1} \right), \quad (5.20)$$

որտեղ

$$\delta_1(\omega) = \frac{8}{\gamma^2} \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \left(\frac{\omega^2}{\omega_0^2} - 1 \right) + 1 : \quad (5.21)$$

Եթե (4.4) և (4.5) բանաձևերում տեղադրենք ալիքային քվի $q = q_1 + iq_2$ արտահայտությունը, ապա կստանանք, որ m , և M զանգվածով մասնիկների տատանումների լայնությունները՝ կախված բջջի դիրքից, փոխվում են $\exp(-\alpha n q_2)$ օրենքով, ընդ որում՝ երբ $q_2 > 0$, տատանումները մարում են, իսկ $q_2 < 0$ դեպքում՝ ուժեղանում էքսպոնենցիալ լայնությունը: Ալիքային քվի իրական և կեղծ մասերի հաճախային կախումները պատկերված են նկ. 50-ում (զծագիրն արված է $\gamma^2 = 0,75$ արժեքի համար):



Նկ. 50. Ալիքային քվի իրական (հոծ գծեր) և կեղծ (կետագծեր) մասերի հաճախային կախումները

5. Այժմ դիտարկենք «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 արտահայտությունները՝

$$\omega_{ac}(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{4} \right| = \omega_{\max} \left| \sin \frac{qa}{4} \right|, \quad (5.22)$$

$$\omega_{op}(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \cos \frac{qa}{4} \right| = \omega_{\max} \left| \cos \frac{qa}{4} \right| : \quad (5.23)$$

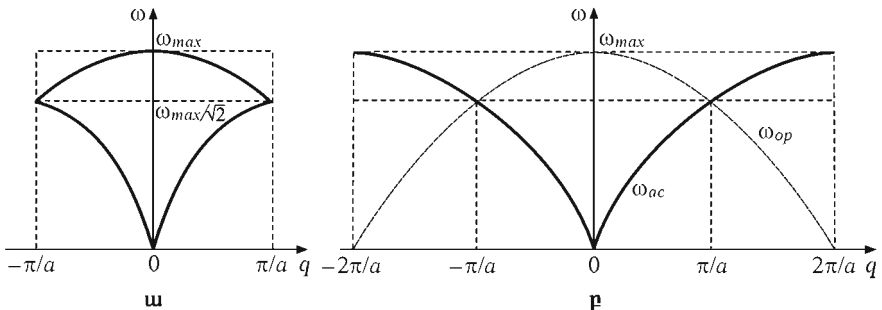
Բրիլյունեի զոնայի սահմաններին $qa = \pm\pi$, $\omega_{ac}(\pm\pi/a) = \omega_{op}(\pm\pi/a)$, և արգելված գոտին վերանում է՝ $\Delta\omega_g = 0$, որը հետևանք է համակարգում տեղի ունեցած որակական փոփոխության (նկ. 51):

Իրոք, տվյալ դեպքում ատոմների նույնությունից և կապերի միատեսակությունից հետևում է, որ բոլոր ատոմների միջև հեռավորությունները պետք է իրար հավասար լինեն, ուստի ցանցի պարբերությունը՝ $a' = a/2$: Բրիլյունեի զոնան սահմանափակված է $\pm\pi/a'$ արժեքներով, այսինքն՝ մեծացած է երկու անգամ: $(0, \pi/a)$ տիրույթում $\omega_{ac}(q)$ ճյուղը համընկնում է պարզ ցանցի դիսպերսային հավասարման հետ՝

$$\omega_{ac}(q) = \omega_{\max} \left| \sin \frac{a'q}{2} \right|, \quad (5.24)$$

իսկ ω_{op} ճյուղը՝ նույն հավասարման հետ $(\pi/a, 2\pi/a)$ տիրույթում՝ $q' = 2\pi/a - q$ համապատասխան արժեքներով, քանի որ

$$\cos \frac{aq'}{4} = \cos \left(\frac{\pi}{2} - \frac{qa}{4} \right) = \sin \frac{qa}{4} = \sin \frac{a'q}{2} :$$



Նկ. 51. Բարդ միաչափ ցանցի տատանումների ճյուղերը, երբ պարզ ցանցը դիտարկվում է որպես ա. բարդ, կրկնակի պարբերությամբ ցանց, բ. $a' = a/2$ պարբերությամբ պարզ ցանց

Ավարտելով միաչափ ցանցի տատանումների ուսումնասիրությունը՝ հարկ է նշել հետևյալը:

Մենք քննարկեցինք միայն երկայնական ալիքների տարածումը միաչափ ցանցում: Հասկանալի է, որ միաչափ ցանցում հնարավոր է զրգոել մակ

լայնական ալիքներ, որոնցում մասնիկների շեղումներն ուղղահայաց են շղթային: Լայնական ալիքների բնութագրերն ընդհանուր դեպքում ստացվում են շատ նման երկայնական ալիքների բնութագրերին: Քանի որ լայնական և երկայնական ալիքներում մասնիկների շեղումները կատարվում են փոխ-ուղղահայաց ուղղություններով, ապա այս երկու տեսակի ալիքները կարող են գրգռվել միաժամանակ և առաջին մոտավորությամբ իրարից անկախ: Լայնական ալիքներ կարելի է գրգռել երկու փոխուղղահայաց ուղղություններով միաժամանակ:

§6. Եռաչափ բարդ ցանցի տատանումները

1. *Շարժման հավասարումների ուսումնասիրումը: Դինամիկական մատրից*

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 հավասարակշռության դիրքը որոշվում է

$$\mathbf{r}_n^k = \mathbf{n} + \mathbf{d}_k \quad (6.1)$$

վեկտորով, որտեղ $\mathbf{n}$ -ը ցանցի տեղափոխության վեկտորն է, իսկ $\mathbf{d}_k$ -ն որոշում է k տեսակի ատոմի դիրքը տարրական բջջում ($\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \dots, \mathbf{d}_s$ վեկտորների համախումբը որոշում է ցանցի բազիսը): $\mathbf{n}$ տեղափոխության վեկտորով բջջի k տեսակի ատոմի շեղման վեկտորի α -րդ պրոյեկցիան նշանակենք $u_{n\alpha}^k$ -ով ($\alpha = x, y, z$):

Բյուրեղային ցանցի պոտենցիալ էներգիան $3sN$ փոփոխականների՝ $u_{n\alpha}^k$ -երի ֆունկցիա է, որն ունի մինիմում, երբ բոլոր $u_{n\alpha}^k = 0$, այսինքն՝

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial u_{n\alpha}^k} \right) = 0 : \quad (6.2)$$

էներգիայի հաշվարկի սկիզբ ընտրելով պոտենցիալ էներգիայի նվազագույն արժեքը՝ ներդաշնակ մոտավորությամբ այն կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}', k, k', \alpha, \beta} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') u_{\mathbf{n}\alpha}^k u_{\mathbf{n}'\beta}^{k'}, \quad (6.3)$$

որտեղ

$$\Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_{\mathbf{n}\alpha}^k \partial u_{\mathbf{n}'\beta}^{k'}} \right)_{00} \quad (6.4)$$

մեծություններն ուժային հաստատուններն են: Ինչպես հետևում է այս սահմանումից,

$$\Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') = \Phi_{\beta\alpha}(k'\mathbf{n}'; k\mathbf{n}): \quad (6.5)$$

Ատոմների միջև փոխազդեցության ուժերը կախված են ատոմների տեսակից և նրանց միջև հեռավորությունից, ուստի $\Phi_{\alpha\beta}$ գործակիցները կախված են $|\mathbf{n} - \mathbf{n}'|$ մեծություններից՝

$$\Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') = \Phi_{\alpha\beta}(k, k'; \mathbf{n} - \mathbf{n}'): \quad (6.6)$$

Օգտվելով (6.3) արտահայտությունից՝ կարելի է որոշել $\mathbf{n}$ -րդ բջջում k տեսակի ատոմի վրա ազդող ուժի α -րդ պրոյեկցիան՝

$$F_{\mathbf{n}\alpha}^k = -\frac{\partial \Phi}{\partial u_{\mathbf{n}\alpha}^k} = -\sum_{\mathbf{n}'k'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') \cdot u_{\mathbf{n}'\beta}^{k'}: \quad (6.7)$$

Եթե բոլոր ատոմները շեղվեն միևնույն $\mathbf{u}_0$ վեկտորով, ապա բյուրեղը որպես ամբողջություն կտեղափոխվի տարածության մեջ: Քանի որ $(\mathbf{n}, k)$ ատոմի վրա ազդող ուժը հավասարակշռության վիճակում զրո է, ապա (6.7) արտահայտությունից կստանանք՝

$$(F_{\mathbf{n}\alpha}^k)_0 = -\sum_{\beta} u_{0\beta} \sum_{\mathbf{n}'k'} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') = 0: \quad (6.8)$$

$u_{0\beta}$ -ների անկախությունից բխում է, որ

$$\sum_{\mathbf{n}'k'} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') = 0, \quad (6.9)$$

որը (2.6) առնչության ընդհանրացումն է: Բացի (6.5), (6.6) և (6.9) հատկություններից՝ $\Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}')$ ուժային հաստատունները բավարարում են նաև

այլ առնչությունների, որոնք տվյալ բյուրեղային կառուցվածքի պոտենցիալ էներգիայի համաչափության հատկությունների հետևանք են:

$\Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}')$ գործակիցը թվապես հավասար է $(\mathbf{n}, \mathbf{k})$ ատոմի վրա ազդող ուժի α առանցքով ուղղված բաղադրիչին, երբ $(\mathbf{n}', \mathbf{k}')$ ատոմը β առանցքի ուղղությամբ շեղվում է միավոր երկարության հատվածով:

$(\mathbf{n}, k)$ ատոմի շարժման հավասարումն ունի հետևյալ տեսքը՝

$$m_k \ddot{u}_{n\alpha}^k = F_{n\alpha}^k = - \sum_{\mathbf{n}'k'} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') u_{n'\beta}^{k'}: \quad (6.10)$$

Գրելով նույն հավասարումը բոլոր ատոմների շեղումների պրոյեկցիաների համար՝ կստանանք $3sN$ հավասարումների համակարգ $3sN$ անհայտ $u_{n\alpha}^k$ շեղումների համար, որը կարելի է զգալիորեն պարզեցնել, եթե հաշվի առնենք ցանցի պարբերականությունը:

Իրոք, քանի որ բոլոր տարրական բջիջները նույնական են, ապա տարբեր բջիջներում միևնույն տեսակի ատոմները տատանվում են նույն լայնությամբ, այսինքն՝ տատանումների լայնությից կախված է միայն ատոմի k տեսակից, բայց ոչ տարրական բջջի դիրքը որոշող $\mathbf{n}$ վեկտորից:

(6.10) հավասարումների համակարգի լուծումը կփոփոխվի վազող ալիքի տեսքով՝

$$u_{n\alpha}^k(t) = \frac{1}{\sqrt{m_k}} A_{\alpha}^k(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q}\mathbf{n} - \omega t)}, \quad (6.11)$$

որտեղ թվային $m_k^{-1/2}$ գործակիցը գրված է հարմարության նկատառումով:

Շարժման հավասարումների (6.10) համակարգում տեղադրելով (6.11) արտահայտությունը՝ կստանանք.

$$\omega^2 A_{\alpha}^k(\mathbf{q}) = \sum_{k'\beta} D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q}) A_{\beta}^{k'}(\mathbf{q}), \quad (6.12)$$

որտեղ

$$D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_{\mathbf{n}'} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') e^{i\mathbf{q}(\mathbf{n}' - \mathbf{n})} \quad (6.13)$$

արտահայտությունը որոշում է բյուրեղի դինամիկական մատրիցի տարրերը, որի տողերը համարակալվում են (k, α) , իսկ սյունակները՝ (k', β) կրկնակի

ցուցիչներով: Դրանք ընդունում են $3s$ հատ արժեք, հետևաբար բյուրեղի դի-
մամիկական մատրիցի ռանգը $3s$ է:

Այսպիսով՝ ցանցի պարբերականության շնորհիվ $3sN$ հավասարում-
ների համակարգի փոխարեն ստացվեց $3s$ գծային հավասարումների (6.12)
համակարգն անհայտ $A_{\alpha}^k(\mathbf{q})$ լայնությունների համար, որը կարելի է ներկա-
յացնել սեղմ տեսքով՝

$$\sum_{k'\beta} [D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q}) - \omega^2 \delta_{kk'} \delta_{\alpha\beta}] A_{\beta}^{k'}(\mathbf{q}) = 0, \quad (k=1,2,\dots,s; \alpha=x,y,z): \quad (6.14)$$

Համասեռ հավասարումների (6.14) համակարգն ունի ոչ զրոյական
լուծումներ, եթե նրա որոշիչը զրո է՝

$$|D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q}) - \omega^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{kk'}| = 0: \quad (6.15)$$

Այս բնութագրական (դիսպերսային) հավասարումից, որը $3s$ կարգի
հավասարում է ω^2 -ու նկատմամբ, տրված $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորի համար
որոշվում են $\omega^2(\mathbf{q})$ ֆունկցիայի հնարավոր արժեքները, որոնց թիվն ընդհա-
նուր դեպքում $3s$ է, և որոնք հետագայում կհամարակալենք j ($j=1,2,\dots,3s$)
ցուցիչով՝ $\omega_j(\mathbf{q})$:

2. Դիմամիկական մատրիցի հատկությունները: Դիսպերսային հավասարումների ուսումնասիրումը

(6.13) սահմանման համաձայն՝

$$D_{\alpha\beta}^{kk'*}(\mathbf{q}) = D_{\beta\alpha}^{k'k}(\mathbf{q}), \quad (6.16)$$

այսինքն՝ դիմամիկական մատրիցն էրմիտական է, հետևաբար նրա բոլոր
 ω_j^2 սեփական արժեքներն իրական են, իսկ ω_j -երը՝ կամ իրական, կամ զուտ
կեղծ: Վերջին դեպքում (6.11) շեղման ժամանակային կախումն արտա-
հայտող $\exp(-i\omega t) = \exp(\gamma t) \equiv \exp(\pm |\gamma| t)$ արտադրիչը կարող է անվերջ
մեծ լինել անցյալում ($t \rightarrow -\infty$) կամ ապագայում ($t \rightarrow +\infty$), որը համարժեք է
ցանցի քայքայմանը: Ցանցի կայունության պայմանից բխում է, որ բոլոր
 j -երի համար $\omega_j^2(\mathbf{q}) \geq 0$: Դրա համար անհրաժեշտ է, որ դիմամիկական
մատրիցի գլխավոր մինորները լինեն դրական: Այս պահանջն իր հերթին

լրացուցիչ պայմաններ է դնում $\Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}')$ ուժային հաստատունների վրա, որոնք հետևում են հավասարակշռության վիճակում ցանցի պոտենցիալ էներգիայի միմիումի գոյության պայմանից: $3s$ հատ $\omega_j^2(\mathbf{q})$ ֆունկցիաները կարելի է դիտել որպես $\omega^2(\mathbf{q})$ բազմաթեք ֆունկցիայի տարբեր ճյուղեր: Տարրական բջջի համաչափության հետևանքով որոշ ω_j արմատներ կարող են համընկնել, ուստի արմատների թիվը կարող է փոքր լինել $3s$ -ից:

Ընդհանուր դեպքում հնարավոր չէ որոշել

$$\omega = \omega_j(\mathbf{q}), \quad j = 1, 2, \dots, 3s \quad (6.17)$$

դիսպերսային հավասարումների՝ ալիքային վեկտորից կախման վերլուծական արտահայտությունները, քանի որ գոյություն չունի $3s$ ($s > 1$) աստիճանի հանրահաշվական հավասարման լուծման հաշվեկարգ (ալգորիթմ): Սակայն որոշ մասնավոր դեպքերում այն կարելի է տալ բյուրեղի պարզ մոդելների համար:

Այժմ որոշենք դինամիկական մատրիցի սեփական վեկտորները (6.12) հավասարումից, որի մեջ տեղադրված է $\omega = \omega_j(\mathbf{q})$ սեփական արժեքը՝

$$\omega_j^2(\mathbf{q}) e_{jk\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{k'\beta} D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q}) e_{jk'\beta}(\mathbf{q}), \quad (6.18)$$

որտեղ $e_{jk\alpha}(\mathbf{q})$ մեծությունը $e_{jk}(\mathbf{q})$ սեփական վեկտորի α -րդ բաղադրիչն է: Ակնհայտ է, որ j -րդ ճյուղին համապատասխանող տատանման $A_{j\alpha}^k(\mathbf{q})$ լայնույթը հաստատունի ճշտությամբ համընկնում է $e_{jk\alpha}(\mathbf{q})$ մեծության հետ: e_{jk} վեկտորն անվանում են բևեռացման վեկտոր, այն որոշում է տատանումների ուղղությունը: Դինամիկական մատրիցն էրմիտական է, ուստի նրա սեփական վեկտորներն օրթոգոնալ են՝

$$\sum_{k\alpha} e_{jk\alpha} e_{j'\alpha}^* = \delta_{jj'}, \quad (6.19)$$

և քանի որ $e_{jk\alpha}(\mathbf{q})$ պոլյեկցիաները որոշվում են համասեռ հավասարումների (6.18) համակարգից, ապա դրանք կարելի է նորմավորել՝

$$\sum_j e_{j\kappa\alpha} e_{jk'\beta}^* = \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{\alpha\beta} : \quad (6.20)$$

Սեփական վեկտորների և սեփական արժեքների համաչափության մի հատկություն հնարավոր է ապացուցել, եթե նկատի ունենանք, որ (6.13) սահմանման համաձայն՝

$$D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q}) = D_{\alpha\beta}^{kk'}(-\mathbf{q}) : \quad (6.21)$$

Գրելով (6.18) հավասարման կոմպլեքս համալուծը և նկատի ունենալով (6.21) հատկությունը՝ կստանանք, որ

$$e_{j\kappa\alpha}(\mathbf{q}) = e_{jk\alpha}^*(-\mathbf{q}) \quad (6.22)$$

կամ

$$e_{j\kappa\alpha}(\mathbf{q}) = -e_{jk\alpha}^*(-\mathbf{q}) : \quad (6.23)$$

Վերջին առնչությունը հարմար է կիրառել իրական $\mathbf{e}_{jk}$ վեկտորների դեպքում, քանի որ այն նշանակում է, որ $e_{j\kappa\alpha}(\mathbf{q})$ բաղադրիչը ձևափոխվում է նույն ձևով, ինչպես որ q_α պրոյեկցիան։

Սեփական արժեքների համար տեղի ունի

$$\omega_j^2(-\mathbf{q}) = \omega_j^2(\mathbf{q}) \quad (6.24)$$

համաչափության հատկությունը, որը հետևանք է $t \rightarrow -t$ ձևափոխության նկատմամբ մեխանիկայի հավասարումների ինվարիանտության։

Եթե դինամիկական մատրիցում $\mathbf{q}$ վեկտորի փոխարեն տեղադրենք $\mathbf{q}' = \mathbf{q} + \mathbf{g}$, որտեղ $\mathbf{g}$ -ն հակադարձ ցանցի կամայական տեղափոխության վեկտոր է, ապա կստանանք, որ

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q} + \mathbf{g}) &= \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_{\mathbf{n}'} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{g})(\mathbf{n}'-\mathbf{n})} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_{\mathbf{n}'} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') e^{i\mathbf{q}(\mathbf{n}'-\mathbf{n})} = D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (6.25)$$

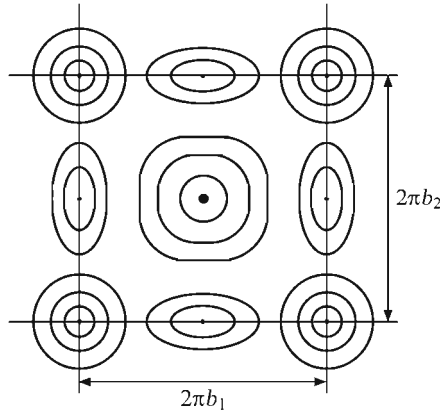
քանի որ $\mathbf{g}(\mathbf{n}' - \mathbf{n}) = 2\pi \times$ ամբողջ թիվ։ Հետևաբար՝ կհամընկնեն $\mathbf{q}' = \mathbf{q} + \mathbf{g}$ և $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորներին համապատասխանող սեփական արժեքները և սեփական վեկտորները՝

$$\omega_j(\mathbf{q} + \mathbf{g}) = \omega_j(\mathbf{q}), \quad (6.26)$$

$$\mathbf{u}_n^k(\mathbf{q} + \mathbf{g}) = \mathbf{u}_n^k(\mathbf{q}): \quad (6.27)$$

Այս արդյունքների համաձայն՝ $\mathbf{q}'$ ալիքային վեկտորով ալիքը համընկնում է $\mathbf{q}$ վեկտորով ալիքի հետ, այսինքն՝ $\mathbf{q}'$ և $\mathbf{q}$ վեկտորները ֆիզիկորեն համարժեք են: Սա հնարավորություն է տալիս դիտարկելու $\mathbf{q}$ վեկտորի փոփոխությունը սահմանափակ տիրույթում: Ընտրելով $\mathbf{g}$ և $\mathbf{n}' - \mathbf{n}$ վեկտորների ամենափոքր, ոչ զրոյական արժեքները՝ $\mathbf{g} = 2\pi\mathbf{b}_i$ ($i=1,2,3$), $\mathbf{n}' - \mathbf{n} = \mathbf{a}_i$ ($i=1,2,3$), որտեղ $\mathbf{a}_i$ -ն և $\mathbf{b}_i$ -ն ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հիմնական վեկտորներն են, կստանանք՝

$$\mathbf{q}'\mathbf{a}_i = (\mathbf{q} + 2\pi\mathbf{b}_i)\mathbf{a}_i = \mathbf{q}\mathbf{a}_i + 2\pi: \quad (6.28)$$



Նկ. 52. Հավասարաձայնային մակերևույթների պատկերումը հակադարձ ցանցի Բրիլյուենի զոնայում

Այսպիսով՝ $\mathbf{q}\mathbf{a}_i$ մեծությունը միշտ կարելի է սահմանափակել $(0, 2\pi)$ տիրույթով: Նպատակահարմար է այն ընտրել համաչափ ձևով՝ որպես տիրույթի կենտրոն ընտրելով $\mathbf{q} = 0$ կետը՝

$$-\pi \leq \mathbf{q}\mathbf{a}_i < \pi, \quad i=1, 2, 3: \quad (6.29)$$

(6.29) արտահայտությամբ տրվող 3 առնչությունները որոշում են Բրիլյուենի առաջին զոնան, կամ որ նույնն է, Վիգներ-Ջեյտցի բջիջը հակադարձ տարածության մեջ (տես I.4): Երբ $\mathbf{q}$ վեկտորը փոփոխվում է Բրիլյուենի առաջին

զոնայում, դիսպերսային հավասարման յուրաքանչյուր ճյուղի համար ստացվում է $\omega_j(\mathbf{q}) = \text{const}$ մակերևութների մի ընտանիք, որոնք կոչվում են հավասարահաճախային (հավասարաէներգիական՝ $\hbar\omega_j(\mathbf{q}) = \varepsilon_j(\mathbf{q})$) և որոնք, (6.24) հատկության համաձայն, ունեն ինվերսիայի (համաչափության) կենտրոն: Հավասարահաճախային մակերևութների պատկերները կրկնվում են հակադարձ ցանցի բջիջներում և Բրիլյուենի զոնաներում, քանի որ $\omega_j(\mathbf{q})$ ֆունկցիան $2\pi\mathbf{b}_i$ պարբերություններով եռաչափ պարբերական ֆունկցիա է (տես (6.26) առնչությունը և նկ. 52-ը):

Ընտրենք $\mathbf{q}$ տարածության մեջ այնպիսի մի $\mathbf{s}$ ուղղություն, որի համար

$$\omega_j(-q_s) = \omega_j(q_s) : \quad (6.30)$$

Մասնավորապես, այն կարող է համընկնել $\mathbf{q}$ վեկտորի ուղղության հետ:

Եթե $\omega_j(\mathbf{q})$ ֆունկցիայի երկու (կամ ավելի) ճյուղեր որևէ կետում ընդունում են միևնույն արժեքը, այսինքն՝ այդ ճյուղերը հատվում են, ապա տեղի ունի այլասերում (նկ. 53, O, A, C, C' կետերը): Այս դեպքում հարց է ծագում, թե ինչպես որոշել տատանումների տրված ճյուղն այիքային վեկտորի փոփոխման ամբողջ տիրություն: Ինչպես երևում է նկ. 53-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՝

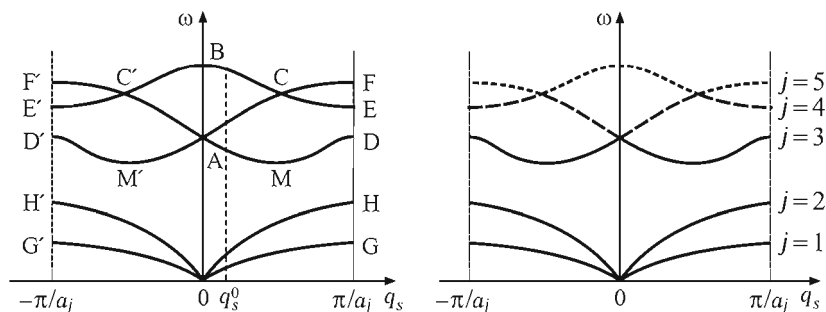
$$\omega_1(q_s^0) < \omega_2(q_s^0) < \omega_3(q_s^0) < \omega_4(q_s^0) < \omega_5(q_s^0) :$$

Կենթադրենք այժմ, որ զրված անհավասարությունները տեղի ունեն բոլոր q_s -երի համար, որն էլ հենց որոշում է ճյուղերի համարակալումը q_s -ի փոփոխման ամբողջ տիրություն (նկ. 53. բ): Վերահամարակալված բոլոր ճյուղերի համար տեղի ունի $\omega_j(-q_s) = \omega_j(q_s)$ պայմանը:

Այլասերման դեպքում q_s^i հատման կետերում $(\partial\omega_j/\partial q_s)_{q_s^i}$ ածանցյալը, որպես կանոն, թույլք 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 դեռ ենք նետում երկու ($\pm$) ճյուղերի բացասական հաճախություններին համապատասխանող մասերը և ձայնային ճյուղը որոշում (3.9) բանաձևով:



Նկ. 53 ա. Դիսպերսային ճյուղերի հատումները, բ. ճյուղերի վերահամարակալումը

Եթե $q = 0$ կետում այլասերում չկա (նկ. 53. ա, B կետը), այսինքն՝ չկա տատանումների մի քանի ճյուղերի հատում, ապա $\omega_j(q)$ ֆունկցիան կարելի է վերածել շարքի ըստ q_α պրոյեկցիաների ($\alpha = x, y, z$) աստիճանների՝

$$\omega_j(q) = \omega_j(0) + \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial \omega_j}{\partial q_{\alpha}} \right)_0 q_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial^2 \omega_j}{\partial q_{\alpha} \partial q_{\beta}} \right)_0 q_{\alpha} q_{\beta} + \dots : \quad (6.31)$$

Քանի որ $\omega_j(q)$ -ն գույգ ֆունկցիա է, (տես (6.24) հատկությունը), ապա

$$\left(\frac{\partial \omega_j}{\partial q_{\alpha}} \right)_0 = 0 : \quad (6.32)$$

II կարգի համաչափ

$$R_{\alpha\beta}^j = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \omega_j}{\partial q_{\alpha} \partial q_{\beta}} \right)_0 \quad (6.33)$$

թեմզորը կարելի է բերել անկյունագծային տեսքի, այնպես որ (6.31) վերլուծությունը կարող ենք ներկայացնել

$$\omega_j(q) = \omega_j(0) + \sum_{\alpha} q_{\alpha}^2 R_{\alpha\alpha}^j \quad (6.34)$$

տեսքով, այսինքն՝ $\mathbf{q} = 0$ կետում $\omega_j(\mathbf{q}) - \omega_j(0)$ վերլուծությունն սկսվում է q_α^2 մեծություններին համեմատական անդամներից: Մասնավորապես, խորանարդային բյուրեղի համար $R_{xx}^j = R_{yy}^j = R_{zz}^j \equiv R^j$, ուստի

$$\omega_j(\mathbf{q}) = \omega_j(0) + Rq^2, \quad (6.35)$$

այսինքն՝ փոքր $\mathbf{q}$ -երի համար $\omega_j(\mathbf{q}) = \text{const}$ հավասարահաճախային մա-կերևոյթները գնդեր են (նկ. 52):

Հարկ է նշել, որ $\omega_j(\mathbf{q})$ ֆունկցիան էքստրեմալ արժեքներ կարող է ընդունել ոչ միայն Բրիլյուենի զոնայի կենտրոնում (նկ. 53. ա, B կետ) կամ սահմանի վրա (նկ. 53. ա, F, F', ..., H, H' կետեր), այլև զոնայի ներսում (նկ. 53. ա, M, M' կետեր):

3. Ատոմների շեղումների ուսումնասիրումը: Նորմալ կոորդինատներ

Այժմ ուսումնասիրենք ցանցի տատանումների բնույթը երկարալիքային սահմանում ($\lambda \rightarrow \infty$, $\mathbf{q} \rightarrow 0$): Այս դեպքում, (6.13) սահմանման համաձայն, $D_{\alpha\beta}^{kk'}(0)$ մեծություններն իրական են, հետևաբար իրական կլինեն նաև (5.12) հավասարումից $\mathbf{q} = 0$ դեպքում ստացվող

$$\omega^2(0)A_\alpha^k(0) = \sum_{k'\mathbf{n}'} \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') A_{\beta}^{k'}(0) \quad (6.36)$$

հավասարման $A_\alpha^k(0)$ լուծումները: Ենթադրենք այժմ, որ j -րդ ճյուղին պատկանող լայնույթը՝

$$A_{j\beta}^{k'}(0) = \sqrt{m_{k'}} \text{const} \quad (\text{ըստ } k' \text{-ի}), \quad (6.37)$$

այսինքն՝ $u_{\mathbf{n}\beta j}^{k'}$ շեղումները կախված չեն ատոմի տեսակից (տես (6.11) արտահայտությունը): (6.36) և (6.37) հավասարումներից հետևում է, որ

$$\frac{1}{\sqrt{m_k}} \sum_{\beta} \frac{A_{j\beta}^{k'}(0)}{\sqrt{m_{k'}}} \sum_{k'\mathbf{n}'} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') = 0: \quad (6.38)$$

Բայց քանի որ մեզ չի հետաքրքրում $A_{j\alpha}^k(0) = 0$ ($\alpha = x, y, z$) լուծումը, ապա (6.36) հավասարումից կստանանք՝

$$\omega_j(0) = 0 : \quad (6.39)$$

Մյուս կողմից, (6.39) պայմանը տեղի կունենա, եթե $A_{j\alpha}^k(0) \neq 0$ գոնե α -ի մեկ արժեքի համար, ուստի բնական է ենթադրել, որ կա տատանումների երեք ($j = 1, 2, 3$) ճյուղ, որոնց համար $\omega_j(\mathbf{q}) \rightarrow 0$, երբ $q \rightarrow 0$:

Այս երեք ճյուղերը, որոնց համար առումների շեղումները կախված չեն առումի տեսակից, կոչվում են ձայնային և նման են միաչափ ցանցի ձայնային ճյուղին:

Այժմ քննարկենք $\mathbf{q} = 0$ դեպքը, բայց առանց (6.37) ենթադրության: Արտագրենք (6.36) հավասարումը հետևյալ տեսքով՝

$$m_k \omega_j^2(0) \frac{A_{j\alpha}^k(0)}{\sqrt{m_k}} = \sum_{k'\beta} \frac{1}{\sqrt{m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') A_{j\beta}^{k'}(0) : \quad (6.40)$$

Բազմապատկելով հավասարման երկու մասերը $e^{-i\omega t}$ արտադրիչով, օգտվելով (6.11) արտահայտությունից և կատարելով գումարում ըստ k -ի՝ (6.9) հատկության համաձայն՝ կստանանք.

$$\omega_j^2(0) \sum_k m_k u_{\mathbf{n}\alpha j}^k(t) = \sum_{k'\beta} u_{\mathbf{n}\beta j}^{k'}(t) \sum_{k\mathbf{n}'} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') = 0 : \quad (6.41)$$

Քանի որ $\omega_j(0) \neq 0$, ապա

$$\sum_{k=1} m_k u_{\mathbf{n}\alpha j}^k(t) = 0 , \quad (6.42)$$

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 դիսպերսային 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 ($q\mathbf{a}_j \ll 1$) ձայնային ճյուղերի հաճախությունները կարելի է ներկայացնել

$$\omega(\mathbf{q}) = v_j(\theta, \varphi) |\mathbf{q}|, \quad j = 1, 2, 3 \quad (6.43)$$

տեսքով, որտեղ v_j -ն j -րդ ճյուղի ալիքի տարածման արագությունն է և կախված է ալիքի տարածման ուղղությունից (θ, φ անկյունները որոշում են $\mathbf{q}$ վեկտորի ուղղությունը), իսկ օպտիկական ճյուղերի համար $\omega_j(\mathbf{q})$ դիսպերսային հավասարումը տրվում է (6.35) արտահայտությամբ, այսինքն՝ ունի էքստրեմում (մաքսիմում): Այլասերման բացակայության դեպքում $\omega_j(\mathbf{q})$ ֆունկցիան էքստրեմալ է նաև Բրիլյուենի զոնայի սահմանների վրա:

Տատանումների լրիվ պատկերը ստանալու համար անհրաժեշտ է լուծել (6.15) բնութագրական հավասարումը $\mathbf{q}$ վեկտորի բոլոր արժեքների համար, որը հնարավոր է իրականացնել միայն թվային մեթոդներով:

Այժմ ներմուծենք նորմալ կոորդինատներ եռաչափ ցանցի համար: j -րդ ճյուղին պատկանող և $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորով տատանումների համապատասխանող շեղումը տրվում է (6.11) հավասարումով: (6.10) շարժման հավասարումների համակարգի գծայնությունից հետևում է, որ ընդհանուր դեպքում շեղման վեկտորը կարելի է ներկայացնել բյուրեղի բոլոր սեփական տատանումների գծային համակցության տեսքով՝

$$u_{\mathbf{n}\alpha}^k(t) = \frac{1}{\sqrt{Nm_k}} \sum_{\mathbf{q}j} e_{j\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{q}) a_j(\mathbf{q}, t) e^{i\mathbf{q}\mathbf{n}}, \quad (6.44)$$

որտեղ առայժմ անհայտ $a_j(\mathbf{q}, t)$ գործակիցները համդես են գալիս որպես նորմալ կոորդինատներ:

(6.44) արտահայտությունը տեղադրենք շարժման (6.10) հավասարումների մեջ՝

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{m_k}{N}} \sum_{\mathbf{q}j} e^{i\mathbf{q}\mathbf{n}} [e_{j\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{q}) \ddot{a}_j(\mathbf{q}, t) + \\ & + \sum_{\mathbf{k}'\beta\mathbf{n}'} e_{j\mathbf{k}'\beta}(\mathbf{q}) a_j(\mathbf{q}, t) \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}\mathbf{n}; \mathbf{k}'\mathbf{n}') e^{i\mathbf{q}(\mathbf{n}' - \mathbf{n})}] = 0 \end{aligned} \quad (6.45)$$

և նկատի ունենալով, որ համաձայն (6.13) և (6.18) առնչությունների՝

$$\sum_{k\beta} e_{jk\beta}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{n}'} \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') e^{i\mathbf{q}(\mathbf{n}' - \mathbf{n})} =$$

$$= \sum_{k\beta} e_{jk\beta}(\mathbf{q}) D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q}) = \omega_j^2(\mathbf{q}) e_{j\alpha k}(\mathbf{q}) : \quad (6.46)$$

(6.45) և (6.46) առնչություններից հետևում է, որ $a_j(\mathbf{q}, t)$ մեծությունները բավարարում են

$$\ddot{a}_j(\mathbf{q}, t) + \omega_j^2(\mathbf{q}) a_j(\mathbf{q}, t) = 0 \quad (6.47)$$

հավասարմանը: Քանի որ $u_{n\alpha}^k(t)$ շեղումներն իրական մեծություններ են, ապա (6.44) արտահայտությունից հետևում է $a_j(\mathbf{q}, t)$ նորմալ կոորդինատների համաչափության հետևյալ հատկությունը՝

$$a_j(\mathbf{q}, t) = a_j^*(-\mathbf{q}, t) : \quad (6.48)$$

Նորմալ կոորդինատների թիվը հավասար է $3sN$ -ի, այսինքն՝ բյուրեղային ցանցի ազատության աստիճանների թվին:

§7. Սահմանային պայմանների ուսումնասիրումը

Այժմ պարզենք, թե ինչպիսի արժեքներ կարող է ընդունել ալիքային վեկտորը: Այդ նպատակով դիմենք շեղման վեկտորների վրա դրվող սահմանային պայմաններին:

Դիտարկենք անվերջ բյուրեղ, որը բաղկացած է մակրոբյուրեղներից, որոնցից յուրաքանչյուրը $N_1 \mathbf{a}_1$, $N_2 \mathbf{a}_2$ և $N_3 \mathbf{a}_3$ կողերով զուգահեռանիստ է և պարունակում է $N_1 N_2 N_3 = N$ տարրական բջիջ: Ենթադրվում է, որ N_1 , N_2 և 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 դիտարկել որպես ֆիզիկական բյուրեղ, որի տատանողական հատկություններն անհրաժեշտ է ուսումնասիրել:

Օգտվենք սահմանային պայմաններից, որոնք միաչափ բյուրեղի դեպքում օգտագործված (2.16) շրջանային կամ Բռն-Կառմանի սահմանային պայմանի եռաչափ ընդհանրացումն են, և որոնց համաձայն՝ ատոմների շեղումները պետք է լինեն պարբերական ըստ մակրոբյուրեղի չափերի՝

$$\mathbf{u}_n^k(t) = \mathbf{u}_{n+N_1\mathbf{a}_1}^k(t) = \mathbf{u}_{n+N_2\mathbf{a}_2}^k(t) = \mathbf{u}_{n+N_3\mathbf{a}_3}^k(t): \quad (7.1)$$

Նկատի ունենալով շեղման վեկտորի (6.11) արտահայտությունը՝ (7.1) սահմանային պայմաններից կստանանք՝

$$e^{i\mathbf{q}\mathbf{a}_1N_1} = e^{i\mathbf{q}\mathbf{a}_2N_2} = e^{i\mathbf{q}\mathbf{a}_3N_3} = 1, \quad (7.2)$$

այսինքն՝

$$\mathbf{q}\mathbf{a}_1N_1 = 2\pi p_1, \quad \mathbf{q}\mathbf{a}_2N_2 = 2\pi p_2, \quad \mathbf{q}\mathbf{a}_3N_3 = 2\pi p_3, \quad (7.3)$$

որտեղ $p_1, p_2, p_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots$ կամայական ամբողջ թվեր են: Ստացված երեք հավասարումներից որոշվող $\mathbf{q}$ վեկտորը փոփոխվում է հակադարձ տարածության մեջ (տես I.7) և, հետևաբար, կարող է ներկայացվել հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների միջոցով.

$$\mathbf{q} = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3: \quad (7.4)$$

Որոշենք h_1, h_2, h_3 անհայտ գործակիցները: (7.3), (7.4) հավասարումներից և (I.7.23) առնչությունից կստանանք՝

$$\mathbf{q}\mathbf{a}_1N_1 = (h_1\mathbf{a}_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{a}_1\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{a}_1\mathbf{b}_3)N_1 = h_1N_1 = 2\pi p_1,$$

այսինքն՝

$$h_1 = \frac{2\pi}{N_1} p_1: \quad (7.5)$$

Նույն եղանակով h_2 և h_3 գործակիցների համար կստանանք՝

$$h_2 = \frac{2\pi}{N_2} p_2, \quad h_3 = \frac{2\pi}{N_3} p_3: \quad (7.6)$$

Այսպիսով՝ $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորի արժեքները տրվում են

$$\mathbf{q} = \frac{2\pi p_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{2\pi p_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{2\pi p_3}{N_3} \mathbf{b}_3, \quad p_1, p_2, p_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots \quad (7.7)$$

արտահայտությամբ: Եթե $\mathbf{q}$ վեկտորի փոփոխման տիրույթը Բրիլյուենի գոնան է՝

$$-\pi \leq \mathbf{q}\mathbf{a}_i < \pi, \quad i = 1, 2, 3,$$

ապա

$$-\frac{N_1}{2} \leq p_1 < \frac{N_1}{2}, \quad -\frac{N_2}{2} \leq p_2 < \frac{N_2}{2}, \quad -\frac{N_3}{2} \leq p_3 < \frac{N_3}{2} : \quad (7.8)$$

Բրիլյունների զոնայում $\mathbf{q}$ վեկտորի տարբեր արժեքների թիվը հավասար է (7.8) պայմաններին բավարարող (p_1, p_2, p_3) եռյակի ընդունած արժեքների թվին, որը հավասար է N -ի: Այսպիսով՝ գալիս ենք կարևոր եզրակացության՝ ալիքային վեկտորը Բրիլյունների զոնայում ընդունում է ճիշտ այնքան տարբեր արժեքներ, որքան տարրական բջիջներ է պարունակում տվյալ բյուրեղը:

Այժմ ցույց տանք, որ $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորի արժեքները հակադարձ տարածության մեջ բաշխված են հաստատուն խտությամբ: (7.4) և (7.7) արտահայտություններից հետևում է, որ հակադարձ տարածության i -րդ հիմնական կոորդինատական առանցքի վրա $\mathbf{q}$ վեկտորի երկու ամենամոտ $(\Delta p_i = 1)$ արժեքների միջև տարբերությունը՝

$$\Delta q_i = \Delta h_i b_i = \mathbf{b}_i (2\pi \Delta p_i / N_i) = 2\pi \mathbf{b}_i / N_i : \quad (7.9)$$

Հետևաբար՝ յուրաքանչյուր $\mathbf{q}$ վեկտորի հակադարձ տարածության մեջ բաժին է ընկնում

$$\Omega \equiv (\Delta q_1 [\Delta q_2, \Delta q_3]) = \frac{(2\pi)^3}{N_1 N_2 N_3} (\mathbf{b}_1 [\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3]) = \frac{(2\pi)^3}{N v_0} = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad (7.10)$$

ծավալ, որտեղ v_0 -ն տարրական բջջի, իսկ V -ն ամբողջ բյուրեղի ծավալն է:

(7.10) արտահայտությունը կարելի է ստանալ նաև այլ եղանակով: Եթե նկատի ունենանք, որ $\mathbf{q}$ վեկտորի բոլոր, իրարից տարբեր N հատ արժեքներն ընկած են Բրիլյունների զոնայում, որի ծավալը՝ $\Omega_0 = (2\pi)^3 / v_0$, ապա մեկ վիճակին (մեկ $\mathbf{q}$ վեկտորին) բաժին ընկնող ծավալը՝ $\Omega_1 = \Omega_0 / N = (2\pi)^3 / N v_0 = (2\pi)^3 / V$:

Երբ $V \rightarrow \infty$, $\Omega_1 \sim 1/V \rightarrow 0$ և $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորն ընդունում է անընդհատ արժեքներ, կամ նկատի ունենալով Բրիլյունների զոնայում նրա արժեքների վերջավոր (N) թիվը՝ կարելի է համարել, որ $\mathbf{q}$ վեկտորը քվազիանընդհատ է (տես §2): Նկատի ունենալով այս հանգամանքը՝ գրենք հակադարձ տարածության $d\mathbf{q}$ ծավալում վիճակների թիվը՝

$$dN = \frac{d\mathbf{q}}{\Omega_1} = \frac{V}{(2\pi)^3} d\mathbf{q} \equiv D_{\mathbf{q}} d\mathbf{q} : \quad (7.11)$$

(7.11) արտահայտության մեջ $d\mathbf{q}$ ծավալի տարրի գործակիցը՝ $D_{\mathbf{q}} = V/(2\pi)^3$ մեծությունը հակադարձ տարածության միավոր ծավալում (1սմ^{-3} -ում) վիճակների թիվն է: $D_{\mathbf{q}}$ խտությունը կախված չէ $\mathbf{q}$ -ից, այսինքն՝ $\mathbf{q}$ վեկտորի արժեքները բաշխված են հաստատուն խտությամբ:

Օգտվելով մակրոսկոպական նմուշի դեպքում $\mathbf{q}$ վեկտորի քվազիանընդհատության հատկությունից՝ կարելի է հաշվել $\sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}}$ տիպի գումարներ:

Իրոք, եթե $V \rightarrow \infty$, ապա ըստ $\mathbf{q}$ -ի գումարում անդամները կարելի է խմբավորել $\mathbf{q}, \mathbf{q} + d\mathbf{q}$ տիրույթում, որտեղ նրանց թիվը՝ $dN = Vd\mathbf{q}/(2\pi)^3$ է, և ապա ինտեգրել $\mathbf{q}$ -ի բոլոր հնարավոր արժեքներով, այսինքն՝

$$\sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}} = \int F(\mathbf{q}) \frac{V}{(2\pi)^3} d\mathbf{q}, \quad (7.12)$$

որտեղ $F(\mathbf{q})$ -ն համարվում է $\mathbf{q}$ -ի անընդհատ ֆունկցիա: Մասնավորապես, L երկարությամբ միաչափ և S մակերեսով երկչափ համակարգերի դեպքում

$$\sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}} = \frac{L}{2\pi} \int F(q) dq = \int F(q) \frac{dq}{\Delta q} = \int F(q) \frac{dq}{(2\pi/L)} \quad (7.13)$$

$$\sum_{\mathbf{q}_{\perp}} F_{\mathbf{q}_{\perp}} = \frac{S}{(2\pi)^2} \int F(\mathbf{q}_{\perp}) d\mathbf{q}_{\perp} = \int F(\mathbf{q}_{\perp}) \frac{d\mathbf{q}_{\perp}}{\Delta \mathbf{q}_{\perp}} = \int F(\mathbf{q}_{\perp}) \frac{d\mathbf{q}_{\perp}}{(2\pi)^2/S}: \quad (7.14)$$

Շրջանային սահմանային պայմանների օգտագործումը մաթեմատիկական հնարք է, որը շատ հեշտացնում է հաշվարկները: Սակայն ծագում է հետևյալ ոչ հասարակ հարցը. կփոխվի՞ արդյոք $\mathbf{q}$ վեկտորի սեփական արժեքների բաշխումը, եթե օգտվենք կոնկրետ սահմանային պայմաններից և այնուհետև բջիջների թիվը՝ $N \rightarrow \infty$: Այս հարցը պարզաբանելու համար դիմենք Լեդերմանի թեորեմին, որի համաձայն, եթե էրմիտական մատրիցի r տողերի և r սյունակների տարրերը փոփոխենք կամայական ձևով, բայց այնպես, որ մատրիցը մնա էրմիտական, ապա մատրիցի սեփական արժեքների թիվը կամայական տիրույթում չի կարող աճել կամ նվազել ավելի, քան $2r$ -ով:

Վերադառնանք շարժման (6.10) հավասարմանը և նրա լուծումը փնտրենք

$$u_{n\alpha}^k(t) = \frac{1}{\sqrt{m_k}} v_{n\alpha}^k e^{-i\omega t} \quad (7.15)$$

տեսքով, որտեղ առկա անհայտ $v_{n\alpha}^k$ մեծությունները որոշվում են հետևյալ համակարգից՝

$$\omega^2 v_{n\alpha}^k = \sum_{k'\beta n'} \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}') v_{n'\beta}^{k'} \equiv \sum_{k'\beta n'} D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{n}, \mathbf{n}') v_{n'\beta}^{k'} : \quad (7.16)$$

Ինչպես հետևում է սահմանումից, $D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = (m_k m_{k'})^{-1/2} \Phi_{\alpha\beta}(k\mathbf{n}; k'\mathbf{n}')$ տարրերն իրական են և համաչափ, այսինքն՝ $D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ մատրիցն էրմիտական է:

Անվերջ բյուրեղի, ինչպես նաև շրջանային սահմանային պայմաններին բավարարող բյուրեղի համար $D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ տարրերը կախված են $\mathbf{n}$ -ից և $\mathbf{n}'$ -ից միայն $\mathbf{n} - \mathbf{n}'$ տարբերության ձևով: Եթե գործ ունենք իրական վերջավոր բյուրեղային ցանցի հետ, որը պարունակում է նույն 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 $D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ մեծությունը կախված կլինի և՛ $\mathbf{n}$ -ից, և՛ $\mathbf{n}'$ -ից: Մյուս կողմից, եթե $(\mathbf{n}, k)$ և $(\mathbf{n}', k')$ ատոմների հեռավորությունները բյուրեղի մակերևութից ավելի մեծ են, քան միջատոմային ուժերի գործողության շառավիղն է, ապա համապատասխան $D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ տարրը նորից կախված կլինի միայն $|\mathbf{n} - \mathbf{n}'|$ հեռավորությունից: Մակերևութային շերտի ատոմի համար $D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ տարրերը, որոնք համապատասխանում են բյուրեղից դուրս 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 $\|D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')\|$ մատրից-

ներն իրարից կտարբերվեն այն տողերի և սյունակների տարրերով, որոնք համապատասխանում են մակերևութային շերտին պատկանող ատոմներին: Քանի որ միջատոմային 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՝

$$\frac{N_1N_2 + N_2N_3 + N_1N_3}{N_1N_2N_3} = \frac{1}{N_1} + \frac{1}{N_2} + \frac{1}{N_3} \sim N^{-1/3} \quad (N_1 \sim N_2 \sim N_3) \quad (7.17)$$

կարգի մեծություն է և մեծ N -երի համար ձգտում է գրոյի:

Ընդհանուր դեպքում, եթե միջատոմային ուժերը գրոյից տարբեր են միայն վերջավոր թվով հարևանների համար, ապա կոնկրետ սահմանային պայմանների ազդեցությունն անվերջ փոքր է, եթե միայն մակերևութային շերտի ատոմների թվի հարաբերությունը բյուրեղի բոլոր ատոմների թվին շատ փոքր է մեկից:

§8. Տատանումների բաշխումը սպեկտրում: Վիճակների խտության ֆունկցիա

Բյուրեղի՝ ցանցի տատանումներով պայմանավորված մի շարք ֆիզիկական հատկություններ բացատրելու համար բոլորովին պարտադիր չէ ունենալ $\omega_j = \omega_j(\mathbf{q})$ դիսպերսային հավասարումներով տրվող լրիվ տեղեկատվությունը, բավական է գիտենալ միայն տատանումների (մոդերի) բաշխումն ըստ հաճախությունների:

Ինչպես գիտենք, մակրոսկոպական մոլշում ալիքային վեկտորի արժեքները հակադարձ տարածության մեջ բաշխված են $V/(2\pi)^3$ խտությամբ, ուստի, երբ $V \rightarrow \infty$, ալիքային վեկտորը Բրիլյուենի զոնայում ընդունում է անընդհատ արժեքներ: Ալիքային վեկտորի և տվյալ ճյուղին պատկանող հաճախությունների միջև կապից հետևում է, որ ω_j -ն նույնպես ընդունում է անընդհատ արժեքներ, ուստի կարելի է որոշել, թե քանի տատանողական մոդ է պարունակվում հաճախությունների ω , $\omega + d\omega$ տիրույթում:

Նշանակենք j -րդ ճյուղին պատկանող մոդերի քիվն ω , $\omega + d\omega$ տիրույթում $dN_j(\omega)$ -ով, որը համեմատական է $d\omega$ -ին՝

$$dN_j(\omega) = g_j(\omega) d\omega, \quad (8.1)$$

որտեղ $g_j(\omega)$ ֆունկցիան հաճախությունների միավոր տիրույթում j -րդ ճյուղի մոդերի քիվն է և կոչվում է վիճակների խտության ֆունկցիա: Յուրաքանչյուր ճյուղի վիճակների խտության ֆունկցիան բավարարում է

$$\int_{\omega_{j\min}}^{\omega_{j\max}} g_j(\omega) d\omega = N \quad (8.2)$$

նորմավորման պայմանին, որտեղ N -ը տարրական բջիջների քիվն է բյուրեղում, իսկ $\omega_{j\min}$ -ը և $\omega_{j\max}$ -ը j -րդ ճյուղին պատկանող նվազագույն և առավելագույն հաճախություններն են:

Այժմ ստանանք արտահայտություն վիճակների խտության ֆունկցիայի համար և ուսումնասիրենք նրա հատկությունները:

Ցանցի հատկություններով պայմանավորված որոշ մեծություններ, (7.12) բանաձևի համաձայն, կարող են ներկայացվել հետևյալ ընդհանուր տեսքով՝

$$\sum_{\mathbf{q}j} Q(\omega_j(\mathbf{q})) = \sum_j \int \frac{V}{(2\pi)^3} d\mathbf{q} Q(\omega_j(\mathbf{q})): \quad (8.3)$$

Այս հավասարության ձախ մասը բոլոր $3Ns$ մոդերի ներդրումների գումարն է, որը բոլոր ճյուղերին պատկանող մոդերի քիվը ω , $\omega + d\omega$ տիրույթում $g(\omega)d\omega$ նշանակելուց հետո կարելի է ներկայացնել նաև

$$\int d\omega g(\omega) Q(\omega) \quad (8.4)$$

տեսքով: (8.3) և (8.4) առնչություններից բխում է, որ

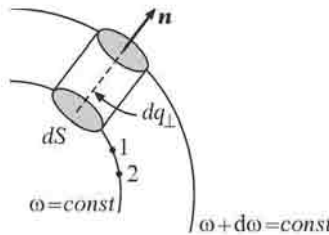
$$g(\omega) = \sum_j \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \delta[\omega - \omega_j(\mathbf{q})] \equiv \sum_j g_j(\omega): \quad (8.5)$$

Հետևաբար՝ j -րդ ճյուղի վիճակների խտության ֆունկցիան՝

$$g_j(\omega) = \sum_j \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \delta[\omega - \omega_j(\mathbf{q})], \quad (8.6)$$

որտեղ ինտեգրումն ըստ $\mathbf{q}$ -ի կատարվում է Բրիլյուենի զոնայի կամ, որ նույնն է, հակադարձ ցանցի տարրական բջջի ծավալով: (8.6) արտահայտության օգնությամբ վիճակների խտության ֆունկցիան կարելի է ներկայացնել տարբեր մաթեմատիկական բանաձևերով՝ օգտագործելով դելտա-ֆունկցիայի զանազան պատկերացումներ:

Չևսփոխենք (8.6) արտահայտությունը: Մոդերի քիվը ω , $\omega + d\omega$ տիրույթում կարելի է որոշել $\mathbf{q}$ -տարածության $\omega_j(\mathbf{q}) = \omega = \text{const}$ և $\omega_j(\mathbf{q}) = \omega + d\omega = \text{const}$ մակերևույթներով սահմանափակված ծավալը բաժանելով մեկ մոդին բաժին ընկնող $(2\pi)^3/V$ ծավալին (նկ. 54): Նշված ծավալը հաշվելու նպատակով կառուցենք dS հիմքի մակերեսով մի գլան, որի կողմնային մակերևույթն ուղղահայաց է $\omega_j(\mathbf{q}) = \omega$ մակերևույթին: Ինչպես հայտնի է, $\omega_j(\mathbf{q})$ ֆունկցիայի գրադիենտն ուղղահայաց է $\omega_j(\mathbf{q}) = \text{const}$ մակերևույթին: Դրանում հեշտ է համոզվել, եթե գրենք $\omega_j(\mathbf{q})$ ֆունկցիայի փոփոխության արտահայտությունը նույն հավասարահաճախային մակերևույթին պատկանող երկու ամվերջ մոտ 1 և 2 կետերի միջև (նկ. 54):



Նկ. 54. Վիճակների քվի հաշվարկը ω , $\omega + d\omega$ տիրույթում

Իբրեք,

$$\omega_2 - \omega_1 \approx \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{q}} \delta \mathbf{q}_{12} + \dots = 0: \quad (8.7)$$

Մյուս կողմից, քանի որ $\delta \mathbf{q}_{12}$ վեկտորն $\omega_j(\mathbf{q}) = \text{const}$ մակերևույթի վրա է (ավելի ճշգրիտ՝ 1 կետում $\omega_j(\mathbf{q}) = \text{const}$ մակերևույթին տարված շոշափող հարթության մեջ), ապա, ըստ (8.7) առնչության,

$$\nabla_{\mathbf{q}} \omega_j \equiv \frac{d\omega_j}{d\mathbf{q}} \perp \delta \mathbf{q}_{12},$$

այսինքն՝ $\nabla_{\mathbf{q}} \omega_j$ վեկտորն ուղղված է $\mathbf{q}$ կետում $\omega_j(\mathbf{q}) = \text{const}$ մակերևույթի $\mathbf{n}$ նորմալի ուղղությամբ:

dS հիմքի մակերեսով գլանի ծավալը՝

$$dS dq_{\perp} = dS \frac{d\omega}{|\partial \omega_j / \partial \mathbf{q}|} \equiv \frac{dS d\omega}{|\nabla_{\mathbf{q}} \omega_j(\mathbf{q})|}, \quad (8.8)$$

հետևաբար՝ $\omega = \text{const}$ և $\omega + d\omega = \text{const}$ մակերևույթներով սահմանափակված ծավալը՝

$$d\Omega(\omega) \equiv \iiint_{\omega \leq \omega_j(\mathbf{q}) \leq \omega + d\omega} dS dq_{\perp} = d\omega \iint_{\omega_j(\mathbf{q}) = \omega} \frac{dS}{|\partial \omega_j / \partial \mathbf{q}|} \equiv d\omega \oint \frac{dS}{|\partial \omega_j / \partial \mathbf{q}|}, \quad (8.9)$$

որտեղ ինտեգրումը կատարվում է $\omega = \omega_j(\mathbf{q}) = \text{const}$ հավասարահաճախային մակերևույթով: (7.9) արտահայտությունը բաժանելով $(2\pi)^3/V$ ծավալին և արդյունքը հավասարեցնելով ω , $\omega + d\omega$ տիրույթում մոդերի թվին՝ կատանանք.

$$\mathbf{g}_j(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \oint \frac{dS}{|\partial \omega_j / \partial \mathbf{q}|} = \frac{V}{(2\pi)^3} \oint \frac{dS}{|v_{jg}(\mathbf{q})|}, \quad (8.10)$$

որտեղ

$$v_{jg}(\mathbf{q}) = \frac{\partial \omega_j(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \equiv \nabla_{\mathbf{q}} \omega_j(\mathbf{q}) \quad (8.11)$$

վեկտորը $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորով փաթեթի խմբային արագությունն է $\omega_j(\mathbf{q})$ դիսպերսային հավասարումով նկարագրվող միջավայրում:

Ինչպես զիտենք, $\omega_j(\mathbf{q})$ ֆունկցիան պարբերական է $\mathbf{q}$ -տարածության մեջ և յուրաքանչյուր j -ի համար սահմանափակ է վերից և վարից, ինչպես նաև ընդհանուր դեպքում՝ ամենուրեք դիֆերենցելի: Այս հատկություններից անմիջապես հետևում է, որ հակադարձ ցանցի յուրաքանչյուր տարրական բջջում պետք է լինեն կետեր, որոնցում $|\nabla_{\mathbf{q}} \omega_j(\mathbf{q})| = 0$: Այդ կետերն

ընդունված է անվանել կրիտիկական: Կրիտիկական կետերում (8.10) ինտեգրալում ծագում են եզակիություններ:

Ուսումնասիրենք $g_j(\omega)$ ֆունկցիայի վարքը կրիտիկական կետերի շրջակայքում:

Քանի որ $\omega(\mathbf{q})$ -ն (ստորև j ցուցիչը բաց է թողնված) $\mathbf{q}$ -ի անընդհատ ֆունկցիա է, ապա այն կարելի է վերածել շարքի $\mathbf{q}_c$ կրիտիկական կետի շրջակայքում՝

$$\omega(\mathbf{q}) = \omega_c + \gamma_1 q_x^2 + \gamma_2 q_y^2 + \gamma_3 q_z^2 : \quad (8.12)$$

Այս արտահայտության մեջ քառակուսային անդամները բերված են անկյունագծային տեսքի, $\omega_c \equiv \omega(\mathbf{q}_c)$, $\mathbf{q} - \mathbf{q}_c$ տարբերությունը փոխարինված է $\mathbf{q}(q_x, q_y, q_z)$ -ով, իսկ վերլուծության գծային անդամները, կրիտիկական կետի սահմանման համաձայն, բացակայում են: Կախված γ_i գործակիցների նշաններից՝ հնարավոր է չորս դեպք:

1. Եթե երեք գործակիցներն էլ դրական են՝ $\gamma_i > 0$ ($i = 1, 2, 3$), ապա $\omega(\mathbf{q})$ ֆունկցիան ω_c կետում ունի տեղային մինիմում, և $\omega(\mathbf{q}) = \omega = \text{const}$ մակերևույթն էլիպսարդ է, որով սահմանափակված ծավալը՝

$$\Omega(\omega) = \frac{4\pi}{3} \frac{(\omega - \omega_c)^{3/2}}{(\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^{1/2}}, \quad (8.13)$$

իսկ ω և $\omega + d\omega$ հավասարահաճախային մակերևույթներով սահմանափակված ծավալը՝

$$d\Omega = \Omega(\omega + d\omega) - \Omega(\omega) = \frac{2\pi}{(\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^{1/2}} (\omega - \omega_c)^{1/2} d\omega : \quad (8.14)$$

Որոշված ծավալը բաժանելով մեկ վիճակին բաժին ընկնող ծավալին՝ (8.14) բանաձևից կստանանք՝

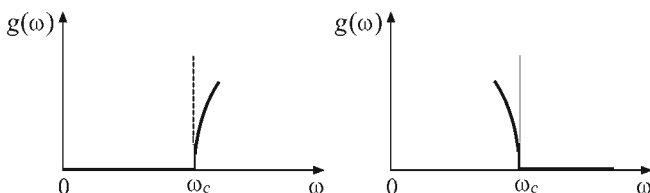
$$dN(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} d\Omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{2\pi(\omega - \omega_c)^{1/2}}{(\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^{1/2}} d\omega \equiv g(\omega) d\omega, \quad (8.15)$$

որտեղ $d\omega$ -ի գործակիցը վիճակների խտության ֆունկցիան է՝

$$g(\omega) = \frac{V}{4\pi^2 (\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^{1/2}} (\omega - \omega_c)^{1/2} : \quad (8.16)$$

Այս բանաձևը տեղի ունի $\omega > \omega_c$ տիրույթում: $\omega < \omega_c$ տիրույթը $g(\omega)$ ֆունկցիայում ներդրում չի տալիս: Այսպիսով՝ $\omega = \omega_c$ կետում $g(\omega)$ ֆունկցիան անընդհատ է, իսկ նրա ածանցյալը տարամիտում է $(\omega - \omega_c)^{-1/2}$ օրենքով (նկ. 55. ա).

$$\left. \frac{dg(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega \rightarrow \omega_c} = \frac{V}{8\pi^2(\gamma_1\gamma_2\gamma_3)^{1/2}} \frac{1}{(\omega - \omega_c)^{1/2}} \rightarrow +\infty: \quad (8.17)$$



Նկ. 55. Վիճակների խտության ֆունկցիայի վարքը կրիտիկական կետի շրջակայքում. ա. $\gamma_i > 0$ ($i=1, 2, 3$), բ. $\gamma_i < 0$ ($i=1, 2, 3$)

2. Եթե բոլոր գործակիցները բացասական են՝ $\gamma_i < 0$ ($i=1, 2, 3$), ապա $\omega(\mathbf{q})$ ֆունկցիան ω_c կետում ունի տեղային մաքսիմում: Հավասարահաճախային

$$\omega_c - \omega = |\gamma_1| q_x^2 + |\gamma_2| q_y^2 + |\gamma_3| q_z^2 \quad (8.18)$$

մակերևույթը նորից էլիպսարդ է, որի ծավալը՝

$$\Omega(\omega) = \frac{4\pi(\omega_c - \omega)^{3/2}}{3|\gamma_1\gamma_2\gamma_3|^{1/2}}: \quad (8.19)$$

Երբ ω -ն աճում է, ապա $\Omega(\omega)$ -ն նվազում է, հետևաբար՝ վիճակների խտության ֆունկցիան պետք է որոշել

$$g(\omega) = -\frac{d\Omega}{d\omega} \frac{V}{(2\pi)^3} \quad (8.20)$$

բանաձևով: Տվյալ դեպքում, (8.19) և (8.20) առնչությունների համաձայն,

$$g(\omega) = \frac{V}{4\pi^2 |\gamma_1\gamma_2\gamma_3|^{1/2}} (\omega_c - \omega)^{1/2}, \quad (8.21)$$

երբ $\omega < \omega_c$, իսկ $\omega > \omega_c$ տիրույթը ներդրում չի տալիս: $\omega = \omega_c$ կետում $g(\omega)$ ֆունկցիան անընդհատ է, իսկ նրա ածանցյալը՝

$$\left. \frac{dg(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega \rightarrow \omega_c} = -\frac{V}{8\pi^2 |\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3|^{1/2}} \frac{1}{(\omega_c - \omega)^{1/2}} \rightarrow -\infty: \quad (8.22)$$

$g(\omega)$ ֆունկցիայի վարքը կրիտիկական կետի շրջակայքում պատկերված է նկ. 55. ք-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) թամբային կետ է:

Հետագա հաշվարկները պարզեցնելու նպատակով ենթադրենք, որ $\gamma_1 = \gamma_2 \equiv \gamma$: Այս դեպքում $\omega(\mathbf{q}) = \text{const}$ մակերևույթը q_z առանցքով պտտման հիպերբոլարդ է՝

$$\omega - \omega_c = \gamma(q_x^2 + q_y^2) - |\gamma_3| q_z^2, \quad (8.23)$$

ընդ որում $\omega = \omega_c$ արժեքն ընկած է

$$q_{\perp} \equiv \sqrt{q_x^2 + q_y^2} = \left(\frac{|\gamma_3|}{\gamma} \right)^{1/2} |q_z| \quad (8.24)$$

կոնի մակերևույթի վրա (նկ. 56): Եթե $\omega < \omega_c$, ապա (8.23) հավասարումը ներկայացնում է երկխոռոչ հիպերբոլարդների ընտանիք, իսկ $\omega > \omega_c$ դեպքում՝ միախոռոչ հիպերբոլարդների ընտանիք (նկ. 56):

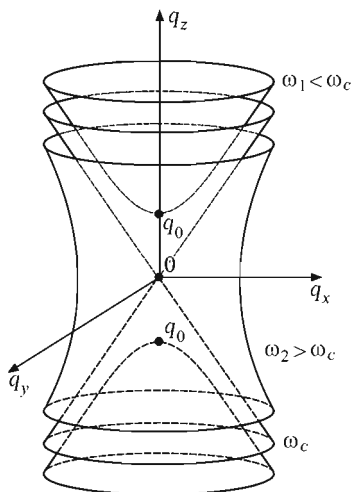
Հաշվենք $\mathbf{q}$ -տարածության այն տիրույթի ծավալը, որը սահմանափակված է հիպերբոլարդով և $q_z^0 > q_0 = [(\omega_c - \omega)/|\gamma_3|]^{1/2}$ հարթությամբ՝

$$\begin{aligned} \Omega(\omega) &= 2 \int_{q_0}^{q_z^0} \pi(q_x^2 + q_y^2) dq_z = \frac{2\pi |\gamma_3|}{\gamma} \int_{q_0}^{q_z^0} (q_z^2 - q_0^2) dq_z = \\ &= \frac{2\pi |\gamma_3|}{\gamma} \left[\frac{(q_z^0)^3}{3} + \frac{2}{3} \left(\frac{\omega_c - \omega}{|\gamma_3|} \right)^{3/2} + q_z^0 \frac{\omega - \omega_c}{|\gamma_3|} \right], \end{aligned} \quad (8.25)$$

որտեղ 2 գործակիցը հաշվի է առնում հիպերբոլարդի երկու խոռոչների առկայությունը, իսկ q_0 -ն հիպերբոլարդի գագաթի կոորդինատն է:

(8.25) և (8.15) բանաձևերից կստանանք՝

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 \gamma \sqrt{|\gamma_3|}} \left[\sqrt{|\gamma_3|} q_z^0 - (\omega_c - \omega)^{1/2} \right], \quad \omega < \omega_c : \quad (8.26)$$



Նկ. 56. Վիճակների խտության ֆունկցիայի վարքը կրիտիկական կետի շրջակայքում. $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma > 0$, $\gamma_3 < 0$

Երբ $\omega > \omega_c$, հավասարահաճախային մակերևույթն ունի միախոռոչ հիպերբոլարդի տեսք, և q_z^0 և $-q_z^0$ հարթություններով ու հիպերբոլարդով պարփակված ծավալը՝

$$\begin{aligned} \Omega(\omega) &= \int_{-q_z^0}^{q_z^0} \pi q_{\perp}^2 dq_z = 2\pi \int_0^{q_z^0} \left(\frac{\omega - \omega_c}{\gamma} + \frac{|\gamma_3|}{\gamma} q_z^2 \right) dq_z = \\ &= \frac{2\pi |\gamma_3|}{\gamma} \left[\frac{q_z^0}{|\gamma_3|} (\omega - \omega_c) + \frac{1}{3} (q_z^0)^3 \right], \end{aligned}$$

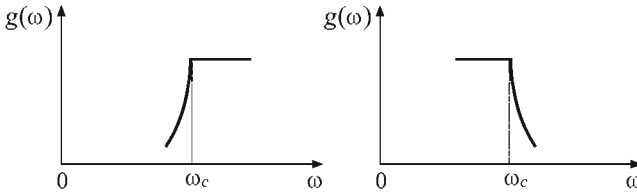
որտեղից՝

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 \gamma} q_z^0, \quad \omega > \omega_c : \quad (8.27)$$

Ինչպես հետևում է (8.26) և (8.27) բանաձևերից, $g(\omega)$ ֆունկցիան անընդ-
հատ է $\omega = \omega_c$ կետում, ածանցյալն աջից հավասար է զրոյի, իսկ ձախից՝

$$\left. \frac{dg(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega \rightarrow \omega_c} = \frac{V}{8\pi^2 \gamma \sqrt{|\gamma|}} \frac{1}{(\omega_c - \omega)^{1/2}} \rightarrow +\infty : \quad (8.28)$$

Նկ. 57. ա-ում պատկերված է $g(\omega)$ ֆունկցիայի վարքը $\omega = \omega_c$ կետի
շրջակայքում:



Նկ. 57. Վիճակների խտության ֆունկցիայի վարքը
կրիտիկական կետի շրջակայքում. $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma < 0$, $\gamma_3 > 0$

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_1) փամբային կետ է:

Կատարելով նույն գործողությունները, ինչ որ 3-րդ դեպքում,
կստանանք՝

$$\Omega(\omega) = \frac{2\pi\gamma_3}{|\gamma|} \left[\frac{1}{3} (q_z^0)^3 + \frac{2}{3} \frac{(\omega - \omega_c)^{3/2}}{\gamma_3^{3/2}} - \frac{\omega - \omega_c}{\gamma_3} q_z^0 \right], \quad \omega > \omega_c, \quad (8.29)$$

$$\Omega(\omega) = \frac{2\pi\gamma_3}{|\gamma|} \left[\frac{1}{3} (q_z^0)^3 + \frac{\omega_c - \omega}{\gamma_3} q_z^0 \right], \quad \omega < \omega_c : \quad (8.30)$$

$\Omega(\omega)$ ֆունկցիան աճում է, երբ ω -ն նվազում է, ուստի, օգտվելով (8.20) բա-
նաձևից, կստանանք՝

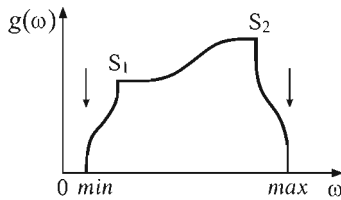
$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 |\gamma| \sqrt{\gamma_3}} \left[\sqrt{\gamma_3} q_z^0 - (\omega - \omega_c)^{1/2} \right], \quad \omega > \omega_c, \quad (8.31)$$

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 |\gamma|} q_z^0, \quad \omega < \omega_c : \quad (8.32)$$

(8.31) և (8.32) արտահայտությունների համաձայն՝ $g(\omega)$ ֆունկցիան անընդհատ է $\omega = \omega_c$ կետում, ածանցյալը ձախից հավասար է զրոյի, իսկ աջից՝

$$\left. \frac{dg(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega \rightarrow \omega_c} = -\frac{V}{8\pi^2 \gamma \sqrt{|\gamma_3|}} \frac{1}{(\omega - \omega_c)^{1/2}} \rightarrow -\infty : \quad (8.33)$$

Քննարկված օրինակներից գալիս ենք այն եզրակացությանը, որ եռաչափ ցանցի յուրաքանչյուր ճյուղի վիճակների խտության ֆունկցիան հաճախությունից կախված անընդհատ է, իսկ նրա ածանցյալը կրիտիկական կետերում ձգտում է անվերջի: Վիճակների խտության ֆունկցիայի՝ հաճախությունից կախման որակական վարքը պատկերված է նկ. 58-ում:



Նկ. 58. Վիճակների խտության ֆունկցիայի որակական վարքը

Ընդհանուր դեպքում վիճակների խտության ֆունկցիայի եզակիությունների քանակը և տեսակները որոշվում են Վան-Հոֆի թեորեմով, որի համաձայն՝ եռաչափ ցանցի տատանումների սպեկտրը յուրաքանչյուր ճյուղի համար պարունակում է առնվազն մեկական կրիտիկական կետ S_1 և 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:

Բյուրեղային ցանցի վիճակների խտության լրիվ ֆունկցիան առանձին ճյուղերի վիճակների խտության ֆունկցիաների գումար է (տես (8.5) բանաձևը), ուստի նրա գրաֆիկը բաղկացած է նկ. 58-ի տիպի գրաֆիկների գումարից, որոնց թամբային S_1 և S_2 , ինչպես նաև $\max$ և $\min$ կետերին համապատասխանում են տարբեր հաճախություններ (տես նաև IV, նկ. 75):

Այժմ ուսումնասիրենք միաչափ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան:

(8.6) ընդհանուր արտահայտության մեջ վիճակների թվի եռաչափ արտահայտությունից անցնելով միաչափ արտահայտությանը՝

$$\frac{V}{(2\pi)^3} d\mathbf{q} \rightarrow \frac{L}{2\pi} dq_z \equiv \frac{L}{2\pi} dq, \quad (8.34)$$

կստանանք՝

$$g_j(\omega) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \delta(\omega - \omega_j(q)) dq : \quad (8.35)$$

Նկատի ունենալով $\omega_j(q)$ ֆունկցիայի զույգությունը, ինչպես նաև դելտա-ֆունկցիայի հետևյալ հատկությունը՝

$$\delta[\varphi(x)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|\varphi'(x)|_{x=x_i}}, \quad (8.36)$$

որտեղ x_i -ն $\varphi(x) = 0$ հավասարման i -րդ արմատն է, վիճակների խտության ֆունկցիան կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$g_j(\omega) = \frac{L}{2\pi} \sum_i \left| \frac{d\omega_j}{dq} \right|_{q=q_i}^{-1} : \quad (8.37)$$

Պարզ ցանցի դեպքում, օգտվելով (3.9) դիսպերսային հավասարումից, վիճակների խտության ֆունկցիայի համար ստանում ենք հետևյալ արտահայտությունը (նկ. 59. ա)

$$g(\omega) = \frac{2N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} : \quad (8.38)$$

Այս արտահայտությունը կարելի է ստանալ նաև ավելի անմիջական ձևով, այն է՝ իրար հավասարեցնելով dq և $d\omega$ տիրույթներում տրված վիճակների միևնույն թիվը՝

$$2 \frac{dq}{2\pi/L} = g(\omega) d\omega \quad (8.39)$$

կամ

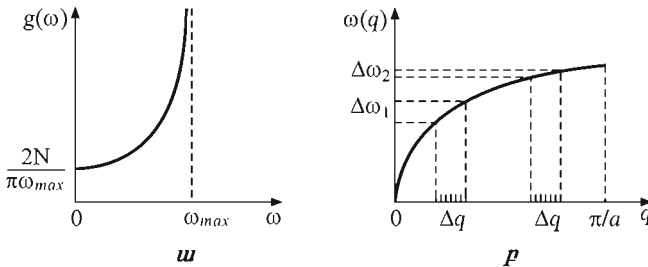
$$g(\omega) = \frac{L}{2\pi} \left| \frac{dq}{d\omega} \right| = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{|v_g|} : \quad (8.40)$$

(8.39) արտահայտության ձախ մասի 2 գործակիցը հաշվի է առնում այն հանգամանքը, որ $d\omega$ տիրություն ներդրում են տալիս L' դրական, L' բացասական q -երը (նկ. 43): Միաչափ ցանցի (3.9) դիսպերսային հավասարումից որոշելով $q(\omega)$ ֆունկցիան՝

$$q = \frac{2}{a} \arcsin \frac{\omega}{\omega_{\max}}, \quad (8.41)$$

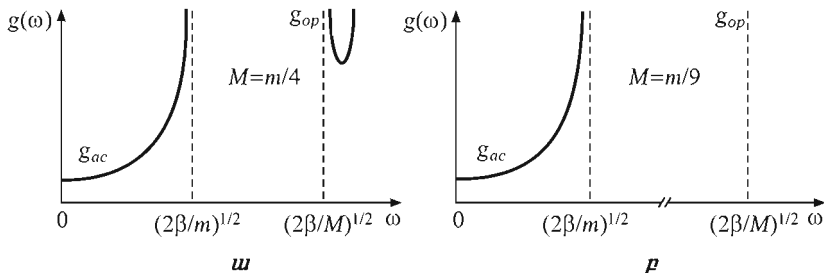
և նրա ածանցյալի արտահայտությունը տեղադրելով (8.40) բանաձևում՝ կստանանք (8.38) արտահայտությունը:

Ինչպես հետևում է (8.38) բանաձևից, երբ $\omega \rightarrow \omega_{\max}$, $g(\omega) \rightarrow \infty$ ($\omega_{\max} - \omega$)^{-1/2} օրենքով, այսինքն՝ միաչափ ցանցում եզակիությունն ավելի խիստ է արտահայտված, քան եռաչափ ցանցում՝ տարամիտում է ոչ միայն ածանցյալը, այլ նաև ֆունկցիան: Մակայն այս եզակիությունը նույնպես ինտեգրելի է, քանի որ մոդերի լրիվ թիվը, նորմավորման (8.2) պայմանի համաձայն, վերջավոր է (և հավասար կորով սահմանափակված մակերեսին, նկ. 59. ա): Վիճակների խտության ֆունկցիայի արագ աճը Բրիլյուենի գոնայի սահմանին մոտենալիս ($\omega \rightarrow \omega_{\max}$) արտահայտում է այն փաստը, որ տարբեր մոդերի համապատասխանող վիճակները բաշխվում են ավելի և ավելի խիտ (նկ. 59. բ)՝ վիճակների միևնույն թիվը՝ $(L/2\pi)\Delta q$, բաշխված է $\Delta\omega_2 < \Delta\omega_1$ հաճախային տիրություններում:



Նկ. 59. ա. Միաչափ պարզ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան, բ. պարզ միաչափ ցանցում վիճակների բաշխման վարքը

Եթե $\omega = \omega(q)$ կախումը լինի ոչ մոնոտոն, ապա միաչափ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան կունենա եզակիություններ նաև Բրիլյուենի գոնայի ներքին կետերում:



Նկ. 60. Միաչափ բարդ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիայի գրաֆիկները.

ա. $M = m/4$, բ. $M = m/9$

Միաչափ բարդ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան բաղկացած է երկու՝ ձայնային և օպտիկական ճյուղերից, որոնք տրվում են (8.37) 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. 60-ում: Ակնհայտ է, որ զոնայի եզրերին մոտենալիս, երբ $v_g \rightarrow 0$, $g_j(\omega) \rightarrow \infty$, սակայն վիճակների խտության լրիվ ֆունկցիայի ինտեգրալը վերջավոր է՝

$$\int_0^{\infty} g(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_{ac}(\pi/a)} g_{ac}(\omega) d\omega + \int_{\omega_{op}(\pi/a)}^{\omega_0} g_{op}(\omega) d\omega = N + N = 2N : \quad (8.42)$$

Հարկ է նշել, որ բջջի ատոմների զանգվածների հարաբերության մեծ արժեքների համար օպտիկական ճյուղի մոդերի խմբային արագությունը մոտ է զրոյին, որի հետևանքով օպտիկական ճյուղերը գործնականում չեն մասնակցում ցանցում էներգիայի տեղափոխմանը:

Ինչպես հետևում է ստացված արտահայտություններից, ինչպես նաև 59-րդ և 60-րդ նկարներից, միաչափ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան սպեկտրի սկզբնամասում ($\omega \rightarrow 0$) զրոյից տարբեր վերջավոր մեծություն է, իսկ եզրերի մոտ այն տարամխում է՝ $g(\omega) \rightarrow \infty$:

ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ՑԱՆՑԻ ՋԵՐՄԱՅԻՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

§1. Պինդ մարմնի ջերմունակության դասական տեսությունը

Բյուրեղային ցանցի դինամիկայի ուսումնասիրությունը հնարավորություն է տալիս վիճակագրական ֆիզիկայի մեթոդներով և որոշակի մոդելների շրջանակներում հաշվարկելու պինդ մարմնի ջերմային հատկությունները բնութագրող մեծությունները:

Տարածական ցանցի ստատիկ մոդելի համաձայն՝ ցանցի հանգույցներում սկեռված են ատոմները (իոնները), որոնց փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան հավասարակշռության վիճակում նվազագույնն է:

Ըստ դասական պատկերացումների՝ համակարգն այդ վիճակում բնութագրվում է $T=0$ Կ ջերմաստիճանով: Բացարձակ զրոյից տարբեր ջերմաստիճաններում ատոմները կատարում են անկանոն, քառասյին շարժումներ հավասարակշռության դիրքերի շուրջը: Ատոմների համակարգի մեխանիկական էներգիան ատոմների շարժման կինետիկ և նրանց փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիաների գումարն է, որի միջին արժեքը ջերմային հավասարակշռության վիճակում համակարգի ներքին էներգիան է:

Որոշենք բյուրեղային ցանցի ներքին էներգիան դասական տեսության շրջանակներում:

Դասական համակարգի յուրաքանչյուր միկրոսկոպական վիճակ միարժեքորեն որոշվում է համակարգի բոլոր մասնիկների $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \mathbf{r}$ կոօրդինատներով և $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N) \equiv \mathbf{p}$ իմպուլսներով, N -ը մասնիկների քիմն է: Վիճակագրական ֆիզիկայում որևէ $A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N) \equiv A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ դինամիկական մեծության միջին արժեքը ջերմային հավասարակշռության վիճակում 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 միկրոսկոպական 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 միկրոսկոպական վիճակը պատկերող կետն ընկած է ֆազային տարածության $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ կետն ընդգրկող $d\Gamma$ ֆազային ծավալում: Հավանականությունն այն բանի, որ համակարգը որևէ միկրոսկոպական վիճակում է, հաստատ պատահար է, ուստի 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 $(-\infty, \infty)$ տիրույթով, իսկ ըստ կոորդինատների՝ համակարգի V ծավալով:

Դասական վիճակագրական ֆիզիկայում բաշխման ֆունկցիան տրվում է բոլցմանյան բաշխման տեսքով՝

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = Z^{-1} \exp \left[-\frac{E(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{k_B T} \right], \quad (1.4)$$

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/Կ՝ Բոլցմանի հաստատունը, իսկ համակարգի վիճակագրական ինտեգրալը՝

$$Z \equiv Z(T, V, N) = \int \exp \left[-\frac{E(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{k_B T} \right] d\Gamma \quad (1.5)$$

ֆունկցիան, որոշվում է (1.3) նորմավորման պայմանից: (1.1), (1.4) և (1.5) բանաձևերի օգնությամբ ցանցի ներքին էներգիայի համար ստացվում է հետևյալ արտահայտությունը՝

$$\begin{aligned}
 U &= \int E(\mathbf{r}, \mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\Gamma = -\frac{1}{Z} \frac{d}{d\beta} \int \exp[-\beta E(\mathbf{r}, \mathbf{p})] d\Gamma = \\
 &= -\frac{1}{Z} \frac{dZ}{d\beta} = -\frac{d}{d\beta} \ln Z,
 \end{aligned}
 \tag{1.6}$$

որտեղ հարմարության համար ներմուծվել է

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \tag{1.7}$$

պարամետրը: (1.6) առնչության համաձայն՝ ներքին էներգիայի հաշվարկը հանգում է վիճակագրական ինտեգրալի՝ β պարամետրից կախման բացահայտմանը:

Ցանցի ներքին էներգիան համակարգի մակրոսկոպական վիճակը բնութագրող T, V, N պարամետրերով արտահայտելու համար անհրաժեշտ է (1.6) բանաձևում տեղադրել ցանցի լրիվ մեխանիկական էներգիայի արտահայտությունը: Ներդաշնակ մոտավորության շրջանակներում այն կարելի է ներկայացնել

$$E(\mathbf{p}, \mathbf{u}) = \sum_{i=1}^{3N} \sum_{k=1}^s \frac{p_{ik}^2}{2M_k} + \Phi_0 + \Phi(\mathbf{u}) \equiv \Phi_0 + \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{u}) \tag{1.8}$$

գումարի տեսքով, որտեղ Φ_0 -ն ատոմների փոխազդեցության էներգիան է հավասարակշռության դիրքերում, $\Phi(\mathbf{u})$ -ն՝ տատանումներով պայմանավորված պոտենցիալ էներգիան (տես III, 6.3 բանաձևը), M_k -ն՝ k տեսակի մասնիկի զանգվածը: (1.8) արտահայտության համաձայն՝ $\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{u})$ էներգիան մասնիկների իմպուլսների և կոորդինատների քառակուսային ֆունկցիա է, ուստի Z վիճակագրական ինտեգրալը կարելի է ներկայացնել Պուասոնի ինտեգրալների արտադրյալի տեսքով (Հավելված 2):

Սակայն վիճակագրական ինտեգրալի՝ մեզ հետաքրքրող ջերմաստիճանային կախումը կարելի է ստանալ ավելի դյուրին եղանակով:

Պարզ ցանցի դեպքում $\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{u})$ ֆունկցիան կախված է $3N$ իմպուլսներից և $3N$ շեղումներից, ուստի եթե (1.5) ինտեգրալում անցնենք ինտեգրման նոր փոփոխականների՝

$$p'_i = \sqrt{\beta} p_i, \quad u'_i = \sqrt{\beta} u_i \quad i = 1, 2, \dots, 3N, \tag{1.9}$$

ապա ֆազային ծավալի տարրի և $\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{u})$ էներգիայի համար համապատասխանաբար կստանանք՝

$$d\Gamma = du_{1x} du_{1y} du_{1z} \dots dp_{Nx} dp_{Ny} dp_{Nz} = \beta^{-3N} d\Gamma', \quad (1.10)$$

$$\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{u}) = \beta^{-1} \varepsilon(\mathbf{p}', \mathbf{u}'): \quad (1.5), (1.8) - (1.10)$$

բանաձևերից հետևում է վիճակագրական ինտեգրալի

$$Z = C \exp(-\beta \Phi_0) \beta^{-3N} \quad (1.11)$$

արտահայտությունը, որտեղ C մեծությունը կախված չէ β պարամետրից:

(1.6) և (1.11) բանաձևերից ցանցի ներքին էներգիան որոշվում է

$$U = \Phi_0 + 3N k_B T \quad (1.12)$$

արտահայտությամբ, որի համաձայն՝ հավասարակշռության դիրքի շուրջ տատանվող յուրաքանչյուր ատոմին 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 իրար հետ չփոխազդող ներդաշնակ տատանակների համախումբ (տես III, 2, III, 6), որոնց թիվը հավասար է համակարգի ազատության աստիճանների թվին (տվյալ դեպքում՝ $3N$ -ի):

Եթե ցանցի տարրական բջիջը պարունակում է s ատոմ, ապա նրա ազատության աստիճանների թիվը կլինի $3sN$, հետևաբար ցանցի ներքին էներգիան՝

$$U = \Phi_0 + 3sN k_B T: \quad (1.13)$$

$T = 0$ -ի ջերմաստիճանում (1.12) և (1.13) բանաձևերից հետևում է ստատիկ ցանցի մոտավորության արդյունքը՝ $U = \Phi_0$:

Որպես կանոն, մեկ մասնիկին բաժին ընկնող հավասարակշռական էներգիան՝ $\Phi_0 / N = u_0 \sim 1$ էՎ կարգի մեծություն է, իսկ ջերմային էներգիան՝

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{N} (U - \Phi_0) = 3k_B T, \quad (1.14)$$

զգալի փոքր է 1 էՎ-ից ($T = 300$ Կ-ում $k_B T \approx 0,026$ էՎ), հետևաբար (1.12), (1.13) բանաձևերում երկրորդ գումարելին զգալիորեն փոքր է Φ_0 -ից, և դրա անմիջական չափումը կապված է զգալի դժվարությունների հետ:

Փորձնականորեն շատ ավելի հարմար է չափել համակարգի ջերմունակությունը՝

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3sNk_B : \quad (1.15)$$

(1.15) բանաձևի համաձայն՝ պինդ մարմնի ջերմունակությունը հաստատուն մեծություն է, և պարզ ցանցով ($s = 1$) նյութի մեկ մոլի համար

$$C_V^\mu = 3N_A k_B = 3R, \quad (1.16)$$

որտեղ R -ը գազային հաստատունն է՝ $R = k_B N_A = 8,314 \cdot 10^7$ էրգ/մոլ·Կ = = 8,314 Ջ/մոլ·Կ $\approx 1,98$ կալ/մոլ·Կ :

(1.16) արտահայտությունը Դյուլոնգ-Պտիի օրենքն է, որի համաձայն՝ պինդ մարմնի ջերմունակությունը հաստատուն մեծություն է և կախված չէ պինդ մարմնի տեսակից: Հարկ է շեշտել, որ կատարված հաշվարկները վերաբերում են միայն ցանցային ջերմունակությանը, այլ կերպ ասած, մեկուսիչ բյուրեղային մարմիններին, որոնցում բացակայում է էլեկտրոնային գազը: Սակայն Դյուլոնգի և Պտիի փորձերում, որոնք կատարվել են սենյակային ջերմաստիճաններում, (1.16) արդյունքն ստացվել է և՛ մեկուսիչների, և՛ մետաղների համար:

Ինչպես ցույց են տվել հետագա փորձերը, ջերմաստիճանի նվազմանը զուգընթաց պինդ մարմնի ջերմունակությունը նվազում է և ձգտում զրոյի, երբ $T \rightarrow 0$ Կ: Նշանակում է՝ դասական տեսությունն ի վիճակի չէ բացատրել պինդ մարմնի ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումը: Ավելացնենք նաև, որ բարձր ջերմաստիճաններում էլ ջերմունակությունը թույլ ձևով կախված է ջերմաստիճանից և որոշակի, թեպետ և փոքր, չափով տարբերվում է $3R$ դասական արժեքից: Սակայն եթե վերջին համգամանքը պայմանավորված է ներդաշնակ ցանցի մոդելի 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 համակարգի մասնիկների միջև միջին հեռավորությունը $\bar{r}$ է, ապա դասական նկարագրությունը համապատասխանում է իրականությանը, եթե

$$\bar{r} \gg \bar{\lambda}_B, \quad (1.17)$$

որտեղ $\bar{\lambda}_B$ մեծությունը մասնիկին վերագրվող դրբրոյլյան ալիքի երկարության միջինն է: Այն կարելի է որոշել՝ Դը Բրոյլի ալիքի $\lambda = h p^{-1}$ երկարությունը միջինացնելով ըստ իմպուլսների բաշխման՝

$$\bar{\lambda}_B = \overline{h p^{-1}} = \frac{\int_0^{\infty} \frac{1}{p} 4\pi p^2 \exp\left(-\frac{p^2}{2Mk_B T}\right) dp}{\int_0^{\infty} 4\pi p^2 \exp\left(-\frac{p^2}{2Mk_B T}\right) dp} = \frac{2h}{(2\pi M k_B T)^{1/2}}, \quad (1.18)$$

որտեղ M -ն ատոմի զանգվածն է, $h = 6,63 \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ-ը՝ Պլանկի հաստատունը: Քանի որ $\bar{r} \approx (V/N)^{1/3}$, ապա (1.17) և (1.18) առնչություններից կստանանք հետևյալ անհավասարությունը՝

$$\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{M k_B T} \right)^{3/2} \ll 1, \quad (1.19)$$

որը դասական վիճակագրության կիրառելիության չափանիշն է:

Այս առնչության համաձայն՝ դասական նկարագրությունը համապատասխանում է իրականությանը փոքր խտությունների և բարձր ջերմաստիճանների տիրույթում:

Թվալին զնահատումներ կատարելու համար հարմար է (1.19) 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 ունիվերսալ հաստատումների թվալին արժեքները՝ կստանանք.

$$5 \cdot 10^4 \frac{\rho}{\mu^{5/2} T^{3/2}} \ll 1: \quad (1.20)$$

Տարրերի մեծամասնության համար $T = 100$ Կ-ում (1.20) անհավասարության ձախ մասը $10^{-3} - 10^{-2}$ կարգի մեծություն է, ուստի սենյակային ջերմաստիճաններում քվանտային երևույթները գործնականորեն դեր չեն խա-

դում: 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 նույնիսկ սենյակային ջերմաստիճաններում:

Նշանակում է՝ ջերմունակության և այլ ջերմադինամիկական մեծությունների ջերմաստիճանային կախումները ջերմաստիճանային ամբողջ տիրույթում հնարավոր է ստանալ միայն քվանտային տեսության շրջանակներում:

§2. Պինդ մարմնի ջերմունակության քվանտային տեսությունը

Քվանտային մեխանիկայում համակարգի յուրաքանչյուր միկրովիճակ միարժեքորեն տրվում է քվանտային թվերի լրիվ հավաքածուով: Ինչպես և դասական նկարագրության դեպքում, համակարգի որևէ մակրոսկոպական բնութագիր հաշվարկելու համար անհրաժեշտ է կատարել միջինացում՝ ըստ համակարգի բոլոր հնարավոր միկրոսկոպական (քվանտային) վիճակների:

Որևէ մեծության միջին արժեքը ջերմային հավասարակշռության վիճակում որոշվում է

$$\bar{A} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} w_{\alpha} \quad (2.1)$$

արտահայտությամբ, որտեղ $\alpha \equiv (n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)$ համակարգի տվյալ քվանտային վիճակը որոշող քվանտային թվերի լրիվ հավաքածուն է, $A_{\alpha} \equiv A(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)$ -ն՝ $\hat{A}$ օպերատորի միջին արժեքն α քվանտային վիճակում, իսկ $w_{\alpha} \equiv w(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)$ -ն՝ այդ վիճակում լինելու հավանականությունը:

Համակարգի՝ որևէ քվանտային վիճակում լինելու 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 տրվում է բոլցմանյան 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 (2.2) պայմանից և կոչվում է վիճակագրական գումար՝

$$Z(T, V, N) = \sum_\alpha \exp\left(-\frac{E_\alpha}{k_B T}\right) \equiv \sum_\alpha \exp(-\beta E_\alpha): \quad (2.4)$$

Համակարգի ներքին էներգիան, ինչպես և դասական վիճակագրության մեջ, արտահայտվում է վիճակագրական (2.4) գումարի միջոցով՝ (1.6) բանաձևով, ուստի խնդիրը բերվում է վիճակագրական գումարի հաշվարկին: Դրա համար, (2.4) բանաձևի համաձայն, անհրաժեշտ է որոշել համակարգի էներգիական սպեկտրը՝ E_α մեծությունների բազմությունը:

Ինչպես հայտնի է, համակարգի էներգիայի սեփական արժեքները որոշվում են Շրյոդինգերի հավասարումից: Ընդհանուր դեպքում էներգիական սպեկտրի որոշելը 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 միաչափ ներդաշնակ տատանակի էներգիական սպեկտրը տրվում է

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

բանաձևով, որտեղ ω -ն տատանակի սեփական հաճախությունն է, իսկ տատանակի վիճակը որոշվում է n քվանտային թվով: (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 տատանակների 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՝

$$E_{(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_{3N})} = \Phi_0 + \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) : \quad (2.6)$$

Ցանցի հիմնական վիճակի էներգիան՝

$$E \equiv E_{(0,0, \dots, 0, \dots, 0)} \equiv U_0 = \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i : \quad (2.7)$$

Էներգիայի (2.6) բանաձևը տեղադրենք վիճակագրական գումարի (2.4) արտահայտության մեջ և կատարենք գումարում ըստ համակարգի բոլոր հնարավոր քվանտային վիճակների՝ $n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_{3N}$ թվերին տալով բոլոր հնարավոր արժեքները՝

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{(n_1, n_2, \dots)} \exp \left\{ -\beta \left[\Phi_0 + \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} = \\ &= \exp \left[-\beta \left(\Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i \right) \right] \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \sum_{n_{3N}=0}^{\infty} \exp \left(-\beta \sum_{i=1}^{3N} \hbar \omega_i n_i \right) = \\ &= \exp(-\beta U_0) \sum_{n_1=0}^{\infty} \exp(-\hbar \beta \omega_1 n_1) \sum_{n_2=0}^{\infty} \exp(-\hbar \beta \omega_2 n_2) \dots \\ &\dots \sum_{n_{3N}=0}^{\infty} \exp(-\hbar \beta \omega_{3N} n_{3N}) \equiv \exp(-\beta U_0) \prod_{i=1}^{3N} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\hbar \beta \omega_i n) : \end{aligned} \quad (2.8)$$

(2.8) 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 ցանցի տատանումների աններդաշնակության դերը: Սակայն կատարված մոտավորությունը լրիվ հիմնավորված է, քանի որ մեծ քվանտային թվերով վիճակների ներդրումը գումարներում էքսպոնենտալ կարգի փոքր է:

(2.8) արտահայտության մեջ արտադրյալի նշանի տակ գրված արտադրիչներից յուրաքանչյուրը նվազող երկրաչափական պրոգրեսիայի գումար է՝

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\hbar\beta\omega_i n} = 1 + e^{-\hbar\beta\omega_i} + e^{-2\hbar\beta\omega_i} + \dots = \frac{1}{1 - e^{-\hbar\beta\omega_i}}, \quad (2.9)$$

ուստի

$$Z = \exp(-\beta U_0) \prod_{i=1}^{3N} (1 - e^{-\hbar\beta\omega_i})^{-1} : \quad (2.10)$$

(2.10) առնչությունը տեղադրելով (1.6) բանաձևում՝ կստանանք ցանցի ներքին էներգիայի արտահայտությունը ներդաշնակ մոտավորությամբ՝

$$U = \Phi_0 + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{1}{2} \hbar\omega_i + \frac{\hbar\omega_i}{e^{\hbar\omega_i/k_B T} - 1} \right) \equiv \Phi_0 + \sum_{i=1}^{3N} \varepsilon(\omega_i, T), \quad (2.11)$$

որտեղ

$$\varepsilon(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \frac{\hbar\omega}{2} + \varepsilon_{th} = \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \quad (2.12)$$

արտահայտությունը ω հաճախությամբ տատանակի միջին էներգիան է, ε_{th} -ը՝ ջերմային էներգիան: (2.12) բանաձևը տեղի ունի ջերմաստիճանների ամբողջ տիրույթում և իրենից ներկայացնում է Պլանկի էլեկտրամագնիսական տատանակի միջին (ջերմային) էներգիայի արտահայտության նմանակը ցանցային տատանումների դեպքում: Ցանցի մեխանիկական տատանումների քվանտացման գաղափարը պատկանում է Ա. Այնշտայնին:

Ուսումնասիրենք (2.12) բանաձևը:

Եթե տատանակի բնութագրական $\hbar\omega$ էներգիան (տատանակի երկու հարևան մակարդակների միջև հեռավորությունը) շատ փոքր է արտաքին ջերմային գրգռման $k_B T$ բնութագրական էներգիայից՝ $\hbar\omega \ll k_B T$ (բարձր ջերմաստիճաններ), ապա (2.12) բանաձևում էքսպոնենտը վերածելով շարքի և սահմանափակվելով ($\hbar\omega/k_B T$) կարգի անդամների ճշտությամբ՝ կստանանք՝

$$\varepsilon(\omega, T) \approx k_B T, \quad (2.13)$$

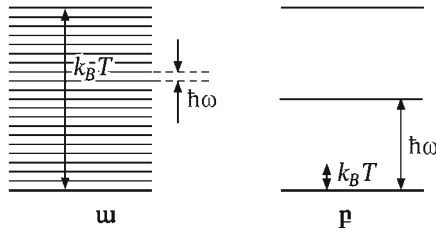
որը դասական միաչափ տատանակի ջերմային էներգիան է: Ստացված արդյունքը ֆիզիկորեն հասկանալի է. եթե գրգռման էներգիան զգալիորեն գե-

րագանցում է էներգիական սպեկտրի քվանտացման բնութագրական չափը, քվանտացումը ոչ մի դեր չի խաղում (նկ. 61. ա):

Հակառակ սահմանային դեպքում, երբ $\hbar\omega \ll k_B T$ (ցածր ջերմաստիճաններ), (2.12) բանաձևից հետևում է տատանակի միջին էներգիայի

$$\varepsilon(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \frac{\hbar\omega}{2} + \varepsilon_{th} = \frac{\hbar\omega}{2} \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \quad (2.14)$$

արտահայտությունը, որի համաձայն՝ հիմնական դերը խաղում է էներգիական սպեկտրի քվանտացումը: Տատանակը «լժվար» է գրգռել, քանի որ ջերմային զրոգման «քվանտի» $k_B T$ էներգիան զգալիորեն փոքր է քվանտացման $\hbar\omega$ բնութագրական էներգիայից, ուստի տատանակը գործնականում մնում է հիմնական վիճակում (նկ. 61. բ):



Նկ. 61. Միաչափ քվանտային տատանակի սպեկտրը.

ա. $\hbar\omega \ll k_B T$, բ. $\hbar\omega \gg k_B T$

(2.12) արտահայտությունից հետևում է, որ ջերմաստիճանի նվազմանը գույզնաբազ ջերմային էներգիայում մեծանում է փոքր հաճախություններով տատանակների ներդրումը:

Եռաչափ ցանցում յուրաքանչյուր տատանակի սեփական հաճախությունը բնութագրվում է $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորով և դիսպերսային ճյուղի j ցուցիչով՝ $\omega_j = \omega_j(\mathbf{q})$, հետևաբար ցանցի ներքին էներգիայի (2.11) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$U = U_0 + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=1}^{3s} \frac{\hbar\omega_j(\mathbf{q})}{e^{\hbar\omega_j(\mathbf{q})/k_B T} - 1} \quad (2.15)$$

տեսքով, որտեղ U_0 գումարելին կախված չէ ջերմաստիճանից և տրվում է (2.7) բանաձևով (որտեղ $\omega_i \rightarrow \omega_j(\mathbf{q})$): (2.15) արտահայտությունից ցանցի ջերմունակության համար կստանանք՝

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = k_B \sum_q \sum_{j=1}^{3s} \left(\frac{\hbar \omega_j(\mathbf{q})}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_j(\mathbf{q})/k_B T}}{e^{\hbar \omega_j(\mathbf{q})/k_B T} - 1}, \quad (2.16)$$

որը պիճնդ մարմնի ջերմունակության քվանտային տեսության հիմնական բանաճնն է:

Ձևափոխենք ներքին էներգիայի և ջերմունակության (2.15) և (2.16) արտահայտությունները՝ նկատի ունենալով, որ մակրոսկոպական մմուշի համար $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորի արժեքները Բրիլյուննի զոնայում բաշխվաճ են $V/(2\pi)^3$ խտությամբ, և ջերմադինամիկական սահմանում ($V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, $N/V < \infty$) կարելի է համարել, որ $\mathbf{q}$, հետևաբար նաև $\omega_j(\mathbf{q})$ մեծություններն ընդունում են անընդհատ արժեքներ: Կատարելով անցում գումարից ինտեգրալի՝ համաճայն

$$\sum_{\mathbf{q}} (\dots) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int (\dots) d\mathbf{q} \quad (2.17)$$

առնչության (տես III, 7), որտեղ ինտեգրման տիրույթը Բրիլյուննի զոնայի կամ հակադարճ ցանցի տարրական բջջի ծավալն է, (2.15) և (2.16) բանաճներից կստանանք՝

$$U = U_0 + \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{3s} \int \frac{\hbar \omega_j(\mathbf{q})}{e^{\hbar \omega_j(\mathbf{q})/k_B T} - 1} d\mathbf{q}, \quad (2.18)$$

$$C_V = \frac{k_B V}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^{3s} \int \left(\frac{\hbar \omega_j(\mathbf{q})}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_j(\mathbf{q})/k_B T}}{[e^{\hbar \omega_j(\mathbf{q})/k_B T} - 1]^2} d\mathbf{q}: \quad (2.19)$$

Այս արտահայտություններն առավել հավաք տեսքով կարելի է ներկայացնել վիճակների խտության ֆունկցիայի միջոցով (III, 8)

$$g(\omega) = \sum_{j=1}^{3s} g_j(\omega), \quad (2.20)$$

որտեղ

$$g_j(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \delta[\omega - \omega_j(\mathbf{q})] \quad (2.21)$$

վիճակների խտության ֆունկցիան է j -րդ ճյուղի համար:

(2.18) – (2.22) բանաձևերի համաձայն՝

$$U = U_0 + \int \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} g(\omega) d\omega, \quad (2.22)$$

$$C_V = k_B \int \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/k_B T}}{[e^{\hbar\omega/k_B T} - 1]^2} g(\omega) d\omega : \quad (2.23)$$

Այսպիսով՝ ներքին էներգիայի, ջերմունակության, ինչպես նաև այլ ջերմադինամիկական բնութագրերի հաշվարկի համար անհրաժեշտ է իմանալ վիճակների խտության ֆունկցիան։ Այնուամենայնիվ, կարելի է (2.22) և (2.23) բանաձևերից հանգել որոշ հետևությունների՝ 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

$$E(x) = \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} = x^2 e^{-x} (1 - e^{-x})^{-2} \quad (2.25)$$

արտահայտությունը կոչվում է Այնշտայնի ֆունկցիա։ Բարձրջերմաստիճանային սահմանում $x \ll 1$, և $E(x)$ ֆունկցիան կարելի է ներկայացնել

$$E(x) \approx 1 - \frac{x^2}{12} + \frac{x^4}{240} + \dots \quad (2.26)$$

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՝

$$\int g(\omega) d\omega = 3Ns, \quad (2.28)$$

(2.27) արտահայտությունից ջերմունակության համար 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 ձգտում են զրոյի): Ջերմունակության դասական արժեքի ուղղումները՝ (2.29) բանաձևի մյուս գումարելիները, անբացահայտորեն՝ $g(\omega)$ ֆունկցիայի միջոցով կապվում են բյուրեղի ուժային հաստատունների հետ:

§3. Պինդ մարմնի ջերմունակության Այնշտայնի տեսությունը

Պինդ մարմնի ջերմունակության քվանտային տեսությունը պինդ մարմնի (ցանցի) որոշակի մոդելի շրջանակներում ստեղծել է Ա. Այնշտայնը 1907 թ.: Այդ մոդելի համաձայն՝ պինդ մարմինը ներկայացվում է որպես նույն հաճախությամբ, ներդաշնակ, չփոխազդող տատանակների համախումբ: (2.15) և (2.16) բանաձևերում համարելով բոլոր հաճախություններն իրար հավասար՝ $\omega_j(\mathbf{q}) = \omega_E$, կստանանք՝

$$U = U_0 + 3Ns\hbar\omega_E \left(\exp \frac{\hbar\omega_E}{k_B T} - 1 \right)^{-1}, \quad (3.1)$$

$$C_V = 3Nsk_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right)^2 \exp \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right) \left(\exp \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right) - 1 \right)^{-2} \equiv \\ \equiv 3Nsk_B E \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right): \quad (3.2)$$

Սահմանենք Այնշտայնի բնութագրական ջերմաստիճանը՝

$$\theta_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B}, \quad (3.3)$$

և պինդ մարմնի ջերմունակության (3.2) արտահայտությունը ներկայացնենք հետևյալ վերջնական տեսքով՝

$$C_V = 3Nsk_B \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{\exp(\theta_E/T)}{[\exp(\theta_E/T) - 1]^2} \equiv 3Nsk_BE \left(\frac{\theta_E}{T} \right): \quad (3.4)$$

Այս բանաձևն արտահայտում է ջերմունակության այնշտայնյան տեսության հիմնական արդյունքը՝ ջերմունակությունը որոշվում 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 ավաստի համար Այնշտայնն ստացել է $\theta_E = 1320$ Կ արժեքը: Պինդ մարմինների մեծ մասի համար θ_E ջերմաստիճանը 100–300 Կ տիրույթում է:

Զննարկենք ջերմունակության վարքը տարբեր ջերմաստիճանային տիրույթներում:

Բարձր ջերմաստիճաններ՝ $T \gg \theta_E$: Նկատի ունենալով Այնշտայնի ֆունկցիայի (2.26) վերլուծությունը՝ ջերմունակության համար կստանանք

$$C_V \approx 3Nsk_B \left[1 - \frac{1}{12} \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 + \dots \right] \approx 3Nsk_B \quad (3.5)$$

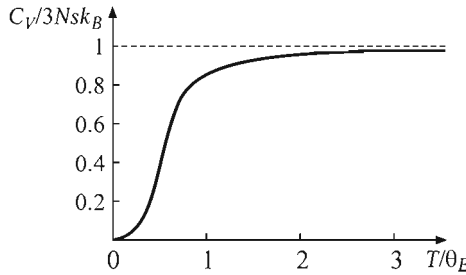
դասական արտահայտությունը:

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 $T \rightarrow 0$ Կ, ջերմունակությունը ձգտում է զրոյի էքսպոնենտալին օրենքով:

Ջերմունակության կախումը ջերմաստիճանից պատկերված է նկ. 62-ում, որտեղ կետագծերով տրված է ջերմունակության դասական արժեքը: Ինչպես հետևում է կորի վարքից, բարձր ջերմաստիճանային մոտավորությունը ճիշտ է $T \geq 2\theta_E$ տիրույթում:



Նկ. 62. Ջերմունակության ջերմաստիճանային կախման գրաֆիկն ըստ Այնշտայնի տեսության

Ինչպես ցույց են տալիս փորձերը, $T \sim T_E$ և ավելի բարձր ջերմաստիճաններում (3.4) բանաձևը բավականաչափ ճշգրիտ է նկարագրում ջերմունակության վարքը, սակայն T_E -ից ցածր ջերմաստիճաններում փորձի և ջերմունակության (3.4) բանաձևով տրվող արժեքների միջև շեղումը մեծանում է: $T \ll \theta_E$ տիրույթում (3.6) բանաձևը հակասում է փորձում ջերմունակության համար ստացվող T^3 կախմանը:

Ցածր ջերմաստիճաններում փորձի և Այնշտայնի մոդելի անհամապատասխանությունը հետևանք է այն բանի, որ փոխազդող ատոմների համակարգում տատանումների բոլոր հաճախությունները միևնույնը լինել չեն կարող: Մակրոսկոպական պինդ մարմնում, մինչև իսկ բացարձակ զրոյի ձգտող ջերմաստիճանում, միշտ կան 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: Եթե դասական մոդերի առավելագույն հաճախությունը նշանակենք ω_0 -ով, ապա $\hbar\omega_0 \approx k_B T$, և բոլոր այդպիսի մոդերը $0 \leq \omega \leq \omega_0$ տիրույթում են: q -տարածության մեջ դրանք $q_0 \sim \omega_0$ շառավղով և $q = 0$ կենտրոնով գնդի մեջ են, ուստի դասական մոդերի N_{cl} թիվը հավասար կլինի այդ գնդի ծավալի և մոդերի (վիճակների) $V/(2\pi)^3$ խտության արտադրյալին՝

$$N_{cl} = \frac{4\pi}{3} q_0^3 \frac{V}{(2\pi)^3} \sim \omega_0^3 V \sim V \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 : \quad (3.7)$$

Դասական մոդերի ներդրումը ցանցի ներքին էներգիայում կարելի է գնահատել՝ N_{cl} -ը բազմապատկելով մեկ դասական մոդին բաժին ընկնող $k_B T$ էներգիայով.

$$U \approx k_B T N_{cl} \sim VT^4, \quad (3.8)$$

որտեղից ջերմունակության համար կստանանք՝

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \sim VT^3: \quad (3.9)$$

Վերջին բանաձևի համաձայն՝ ցածր ջերմաստիճաններում ջերմունակությունը ձգտում է զրոյի, սակայն շատ ավելի դանդաղ, քան Այնշտայնի մոդելում:

Այսուհանդերձ, Այնշտայնի մոդելը շատ պարզ է, ակնառու և հաճախ օգտագործվում է տարբեր որակական արդյունքներ ստանալու համար:

Նկատի ունենալով այս հանգամանքը՝ ստանալով վիճակների խտության $g(\omega)$ ֆունկցիայի տեսքը Այնշտայնի մոդելի շրջանակներում:

(2.21) արտահայտության մեջ տեղադրենք $\omega_j(\mathbf{q}) = \omega_E$.

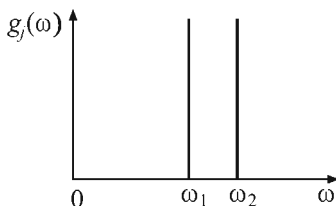
$$g_j(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \delta(\omega - \omega_E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_E) \int d\mathbf{q} = N \delta(\omega - \omega_E) \quad (3.10)$$

յուրաքանչյուր ճյուղի համար, իսկ վիճակների խտության լրիվ ֆունկցիան՝

$$g(\omega) = \sum_{j=1}^{3s} g_j(\omega) = 3Ns \delta(\omega - \omega_E): \quad (3.11)$$

Հաճախ մնան ֆունկցիաներով նկարագրվում են ցանցային տատանումների սպեկտրում սահմանային հաճախությունների տիրույթի նեղ և խիստ ընդգծված մաքսիմումները:

Վիճակների խտության ֆունկցիաների մոտարկումը $\delta(\omega - \omega_j)$ ֆունկցիաներով կարելի է կիրառել մաս օպտիկական որոշ ճյուղեր նկարագրելու համար, երբ բարդ ցանցը կազմող ատոմների զանգվածներն իրարից խիստ տարբերվում են (նկ. 63, տես մասն. նկ. 60):



Նկ. 63. Վիճակների խտության ֆունկցիան ըստ Այնշտայնի մոդելի

§4. Պինդ մարմնի ջերմունակության Դեբայի տեսությունը

Պինդ մարմնի ջերմունակության շեղումը $3Nsk_B$ դասական արժեքից զգալի է դառնում սենյակայինից ցածր ջերմաստիճաններում, իսկ « T^3 » օրենքը տեղի ունի շատ ցածր ջերմաստիճաններում: Հետևաբար կա ջերմաստիճանների մի ընդարձակ տիրույթ՝ մի քանի կելվինից մինչև սենյակային ջերմաստիճաններ, որտեղ չի կարելի օգտվել քննարկված բարձր և ցածր ջերմաստիճանային մոտավորություններից, այլ հաշվարկները պետք է կատարել (2.18) արտահայտության օգնությամբ: Դրա համար անհրաժեշտ է իմանալ վիճակների խտության $g(\omega)$ ֆունկցիան, որն, իր հերթին, որոշվում է $\omega_j(\mathbf{q})$ ($j = 1, 2, \dots, 3s$) դիսպերսային հավասարումների միջոցով: Սակայն $\omega_j(\mathbf{q})$ 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:

(2.25) բանաձևի համաձայն՝ $E(\hbar\omega/k_B T) \sim \exp(-\hbar\omega/k_B T) \rightarrow 0$, եթե $\hbar\omega \gg k_B T$, ուստի բարձրհաճախային տիրույթի ներդրումը ջերմունակության մեջ էական չէ (տես (2.24) բանաձևը): 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 հաջողված մոտարկումն այս ուղղությամբ կատարել է Պ. Դեբայը 1912 թ.:

Դեբայի ենթադրության համաձայն՝ բյուրեղական ցանցի տատանումների 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 , $q + dq$ գնդային շերտում ընդունում է

$$\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq = \frac{V}{2\pi^2} q^2 dq \quad (4.1)$$

հատ արժեք, հետևաբար երկայնական տատանումների թիվը հաճախությունների $\omega, \omega + d\omega$ տիրույթում, $\omega = v_l q$ առնչության համաձայն, կորոշվի հետևյալ արտահայտությամբ՝

$$\frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{\omega}{v_l} \right)^2 \frac{d\omega}{v_l} = \frac{V}{2\pi^2 v_l^3} \omega^2 d\omega: \quad (4.2)$$

Լայնական տատանումների թիվը նույն տիրույթում, $\omega = v_l q$ առնչության և երկու լայնական ալիքների գոյության հաշվառմամբ, կորոշվի

$$2 \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{\omega}{v_l} \right)^2 \frac{d\omega}{v_l} = \frac{V}{\pi^2 v_l^3} \omega^2 d\omega \quad (4.3)$$

արտահայտությամբ: Տատանումների լրիվ թիվը $\omega, \omega + d\omega$ տիրույթում հավասար է (4.2) և (4.3) արտահայտությունների գումարին՝

$$g(\omega) d\omega = \frac{V\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right) d\omega = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} d\omega, \quad (4.4)$$

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 կամայական հաճախությունների համար նկարագրվում է

$$g(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} \sim \omega^2 \quad (4.6)$$

ֆունկցիայով:

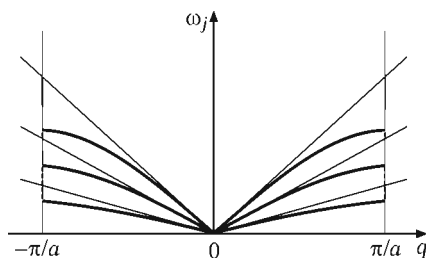
Ինչ վերաբերում է ցանցի տատանումներին, ապա փոքր ալիքային վեկտորների համար j -րդ ձայնային ճյուղի դիսպերսային հավասարումը կարելի է մոտարկել ըստ $|\mathbf{q}|$ -ի գծային ֆունկցիայով (տես III, 6)՝

$$\omega_j(\mathbf{q}) = v_j(\theta, \varphi) |\mathbf{q}|, \quad (j=1,2,3), \quad (4.7)$$

որտեղ ալիքի $v_j(\theta, \varphi)$ արագությունը բյուրեղի անիզոտրոպության հետևանքով կախված է բյուրեղում ալիքի տարածման $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$ ուղղությունից:

Այս դեպքում, երբ փոքր հաճախություններով տատանումներին մասնակցում են միաժամանակ մեծ թվով մասնիկներ ($\lambda \gg a$), միջավայրի (ցանցի) ընդհատ լինելու հանգամանքը կարելի է հաշվի չառնել: Մակայն 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 միջավայրի, որտեղ տատանումների թիվն անսահմանափակ է, ցանցում կարող են տարածվել միայն վերջավոր թվով ալիքներ, որոնց երկարությունները գերազանցում են միջատոմային հեռավորությունները:

Այսպիսով՝ հետևելով Դեբային՝ կենթադրենք, որ (4.7) գծային դիսպերսային հավասարումը կարելի է կիրառել նաև ոչ փոքր ալիքային վեկտորների համար (նկ. 64):



Նկ. 64. Չայնային ճյուղերի դիսպերսային հավասարումների գծային մոտարկումը

j -րդ ձայնային ճյուղին պատկանող վիճակների խտության ֆունկցիայի (2.21) և (4.7) բանաձևերի համաձայն՝

$$g_j(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \delta[\omega - v_j(\theta, \varphi) q] q^2 dq d\Omega = \frac{V\omega^2}{(2\pi)^3} \int_{(4\pi)} \frac{d\Omega}{v_j^3(\theta, \varphi)}, \quad (4.8)$$

որտեղ ինտեգրումը կատարվում է $d\Omega = \sin \theta d\varphi d\theta$ մարմնային անկյունով: (2.20) և (4.8) արտահայտությունների միջոցով 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 հետևում է (4.5) առնչությունը:

Այժմ որոշենք (2.22) և (2.23) արտահայտություններում ըստ հաճախության ինտեգրման սահմանները:

Մակրոսկոպական նմուշի համար կատարող հաշվարկներում միշտ ենթադրվում է անցում ջերմադինամիկական սահմանին ($N \rightarrow \infty$, $V \sim \sim L^3 \rightarrow \infty$, սակայն N/V հարաբերությունը վերջավոր է. L -ը համակարգի գծային չափն է): Միջավայրում տարածվող ալիքների երկարությունները սահմանափակված չեն երկարալիքային տիրույթում՝ $\lambda \sim L \rightarrow \infty$, նվազագույն հաճախությունը՝ $\omega_{\min} \sim \lambda_{\max}^{-1} \sim L^{-1} \rightarrow 0$:

Սակայն եթե բյուրեղի չափերը շատ փոքր 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 չափերով նմուշի համար, ընդունելով $v \sim 10^5$ սմ/վ, կստանանք՝ $T_0 \approx 1$ Կ: Փորձում, նրբափոշու ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումն ուսումնասիրելիս, $L \leq 1$ Կ տիրույթում, իրոք, դիտվել են շեղումներ տեսությունից:

Հաճախության $\omega_{\max}$ առավելագույն արժեքը, որի գոյությունը հետևանք է ցանցի ընդհատության, որոշվում է Դեբայի երկրորդ ենթադրությանը, որի համաձայն՝ բոլոր ձայնային ճյուղերում տատանումների լրիվ թիվը $3N$ է: 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՝ կստանանք $\omega_{\max}$ կամ Γ -եբայի ω_D սահմանային հաճախության համար հետևյալ արտահայտությունը.

$$\omega_{\max} \equiv \omega_D \equiv v \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} = v \left(\frac{6\pi^2}{v_0} \right)^{1/3}, \quad (4.12)$$

որտեղ $v_0 = V/N$ տարրական բջջի ծավալն է: $\omega_{\max}$ հաճախությունը համապատասխանում է $q_{\max}$ կամ Γ -եբայի q_D ալիքային թիվը, որը որոշվում է (4.11) պայմանին համարժեք

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} q_D^3 = N \quad (4.13)$$

պայմանից, որի համաձայն՝ Բրիլյուենի զոնան փոխարինված է q_D շառավղով գնդով, որը պարունակում է նույնքան տատանողական մոդ, որքան Բրիլյուենի զոնան: Γ -եբայի 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՝

$$\lambda_D = \frac{2\pi}{q_D} = \left(\frac{4\pi}{3} v_0 \right)^{1/3}: \quad (4.15)$$

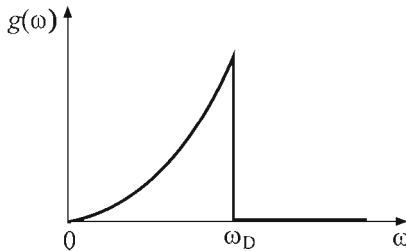
Գնահատենք ω_D , q_D և λ_D բնութագրերը:

Տարրական բջջի ծավալը կարելի է ներկայացնել $v_0 = \alpha a^3$ տեսքով, որտեղ a -ն տարրական խորանարդի կողի երկարությունն է, α -ն՝ միավորի կարգի գործակից ($a \sim 10^{-8}$ սմ, $\alpha = 1, 1/2$ և $1/4$ համապատասխանաբար պարզ, ծավալակենտրոն և միատակենտրոն խորանարդային ցանցի համար), իսկ v -ն պինդ մարմնում ձայնի տարածման բնութագրական արագությունն է ($v \sim 10^5$ սմ/վ): (4.12), (4.14) և (4.15) բանաձևերում տեղադրելով պարամետրերի նշված արժեքները՝ կստանանք.

$$\begin{aligned}\omega_D &= \frac{v}{a} \left(\frac{6\pi^2}{\alpha} \right)^{1/3} \sim 10^{13} \text{ ռադ/վ}, \\ q_D &= \frac{1}{a} \left(\frac{6\pi^2}{\alpha} \right)^{1/3} \sim 10^8 \text{ սմ}^{-1}, \\ \lambda_D &= a \left(\frac{4\pi\alpha}{3} \right)^{1/3} \sim 10^{-8} \text{ սմ}:\end{aligned}\tag{4.16}$$

Նպատակահարմար է միջավայրում ձայնի միջին v արագությունից (4.12) բանաձևի օգնությամբ անցնել Դեբայի տեսության հիմնական պարամետրերից մեկին՝ ω_D հաճախությանը: Վիճակների խտության ֆունկցիայի համար Դեբայի մոտավորությամբ կստանանք (նկ. 65)՝

$$g(\omega) = \begin{cases} 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3}, & \omega \leq \omega_D, \\ 0, & \omega > \omega_D: \end{cases}\tag{4.17}$$



Նկ. 65. Վիճակների խտության ֆունկցիան Դեբայի մոտավորությամբ

Վիճակների խտության ֆունկցիայի համար ստացված (4.17) արտահայտությունը տեղադրենք ներքին էներգիայի և ջերմունակության (2.22) ու (2.23) բանաձևերի մեջ՝

$$U = U_0 + 9N\omega_D^{-3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \omega^2 d\omega,\tag{4.18}$$

$$C_V = 9Nk_B\omega_D^{-3} \int_0^{\omega_D} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right) \frac{e^{\hbar\omega/k_B T}}{[e^{\hbar\omega/k_B T} - 1]^2} \omega^2 d\omega:\tag{4.19}$$

Եթե (4.18) և (4.19) բանաձևերում կատարենք փոփոխականի փոխարինում՝ $t = \hbar\omega/k_B T$, ապա ինտեգրման վերին սահմանում կստացվի $\hbar\omega_D/k_B T$: Ներմուծենք պինդ մարմնի Դեբայի բնութագրական ջերմաստիճանը՝

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B} \left(\frac{18\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right)^{-1/3} : \quad (4.20)$$

Կատարենք նաև 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՝

$$U = U_0 + 3Nk_B \theta_D D_E \left(\frac{\theta_D}{T} \right), \quad (4.23)$$

$$C_V = 3Nk_B D \left(\frac{\theta_D}{T} \right), \quad (4.24)$$

որոնք կիրառելի են ջերմաստիճանների ամբողջ տիրույթում և հայտնի են որպես Դեբայի միջարկումային (ինտերպոլյացիոն) բանաձևեր:

Դժվար չէ համոզվել, որ $D_E(x)$ և $D(x)$ ֆունկցիաները կապված են

$$D(x) = 4xD_E(x) - 3x(e^x - 1)^{-1} \quad (4.25)$$

առնչությամբ, որն ստացվում է (4.22) արտահայտությունը մասերով ինտեգրելիս: Սակայն նպատակահարմար է հետագա հաշվարկներում այդ ֆունկցիաների համատեղ օգտագործումը:

Հարկ է նշել, որ ներքին Էներգիայի և ջերմունակության կախումները պինդ մարմնի բնութագրերից արտահայտվում են մեկ մեծության՝ Դեբայի

θ_D ջերմաստիճանի միջոցով, որն, իր հերթին, կախված է մարմնի խտությունից և նրանում ձայնի տարածման միջին արագությունից: Գնահատումների համաձայն՝

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} \approx \frac{\hbar v}{k_B a} \sim 100 \text{ Կ} : \quad (4.26)$$

Տարբեր մարմինների համար, որպես կանոն, θ_D պարամետրի բնորոշ արժեքները մի քանի տասնյակից մինչև մի քանի հարյուր կելվին տիրույթում են (տես Աղյուսակ 18):

§5. Ներքին էներգիայի և ջերմունակության վարքը ջերմաստիճանային տարբեր տիրույթներում

Կամայական ջերմաստիճանում պինդ մարմնի ներքին էներգիան և ջերմունակությունը հաշվարկելու համար անհրաժեշտ $D(\theta_D/T)$ և $D_E(\theta_D/T)$ ֆունկցիաների արժեքները տրված են աղյուսակներում: Սակայն սահմանային դեպքերում (4.22) և (4.21) բանաձևերից կարելի է ստանալ նշված ջերմադինամիկական մեծությունների վերլուծական արտահայտություններ:

Բարձր ջերմաստիճաններ՝ $T \gg \theta_D$ ($x = \theta_D/T \ll 1$):

Նկատի ունենալով (4.21) և (4.22) ինտեգրալներում ինտեգրման վերին սահմանի փոքրությունը՝ $x \ll 1$, ենթաինտեգրալային ֆունկցիաները կարելի է վերլուծել շարքի $t=0$ կետի շուրջը: $D_E(x)$ ֆունկցիայի համար կստանանք՝

$$D_E(x) \approx \frac{3}{x^4} \int_0^x t^4 \left(1 - \frac{t}{2} + \frac{t^2}{12} + \dots \right) dt = \frac{1}{x} - \frac{3}{8} + \frac{1}{10}x + \dots : \quad (5.1)$$

$D(x)$ ֆունկցիայի արտահայտությունը $x \ll 1$ դեպքում հեշտությամբ ստացվում է (4.22) սահմանումից՝ $E(t)$ ֆունկցիայի (2.26) վերլուծության օգնությամբ՝

$$D(x) \approx \frac{3}{x^3} \int_0^x t^2 \left(1 - \frac{1}{12}t^2 + \frac{1}{240}t^4 + \dots \right) dt = 1 - \frac{1}{20}x^2 + \dots : \quad (5.2)$$

(5.1) և (5.2) վերլուծությունները տեղադրելով (4.23) և (4.24) արտահայտություններում՝ կստանանք՝

$$U = U_0 + 3Nk_B T \left[1 - \frac{3}{8} \frac{\theta_D}{T} + \frac{1}{20} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right], \quad (5.3)$$

$$C_V = 3Nk_B \left[1 - \frac{1}{20} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right], \quad (5.4)$$

որոնք համընկնում են պինդ մարմնի դասական տեսության արդյունքների հետ:

Ցածր ջերմաստիճաններ՝ $T \ll \theta_D$ ($x = \theta_D/T \gg 1$):

(4.21) ինտեգրալը ներկայացնենք երկու ինտեգրալների տարբերության տեսքով՝

$$\int_0^x \frac{t^3 dt}{e^t - 1} = \int_0^\infty \frac{t^3 dt}{e^t - 1} - \int_x^\infty \frac{t^3 dt}{e^t - 1}, \quad (5.5)$$

որոնցից առաջինը կարելի է ճշգրիտ հաշվել.

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{t^3 dt}{e^t - 1} &= \int_0^\infty t^3 e^{-t} \frac{dt}{1 - e^{-t}} = \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty t^3 e^{-nt} dt = - \sum_{n=1}^\infty \frac{\partial^3}{\partial n^3} \int_0^\infty e^{-nt} dt = \\ &= - \sum_{n=1}^\infty \frac{\partial^3}{\partial n^3} \left(\frac{1}{n} \right) = 6 \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = 6 \cdot \frac{\pi^4}{90} = \frac{\pi^4}{15}: \end{aligned} \quad (5.6)$$

Նման եղանակով երկրորդ ինտեգրալը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\begin{aligned} \int_x^\infty \frac{t^3 dt}{e^t - 1} &= - \sum_{n=1}^\infty \frac{\partial^3}{\partial n^3} \int_x^\infty e^{-nt} dt = - \sum_{n=1}^\infty \frac{\partial^3}{\partial n^3} \left(\frac{1}{n} e^{-nx} \right) = \\ &= \sum_{n=1}^\infty e^{-nx} \left(\frac{6}{n^4} + \frac{6}{n^3} x + \frac{3}{n^2} x^2 + \frac{1}{n} x^3 \right): \end{aligned} \quad (5.7)$$

Քանի որ $x \gg 1$, ապա կարելի է սահմանափակվել գումարի միայն առաջին $n=1$ անդամով՝ վերջինիս մեջ թողնելով ամենամեծ՝ x^3 անդամը: Այս մոտավորությամբ՝

$$D_E(x) \approx \frac{3}{x^4} \left(\frac{\pi^4}{15} - x^3 e^{-x} \right) = \frac{\pi^4}{5x^4} - \frac{3}{x} e^{-x}: \quad (5.8)$$

Նույն մոտավորությամբ (4.25) առնչությունից հետևում է, որ

$$D(x) \approx \frac{4\pi^4}{5x^3} - 3xe^{-x} : \quad (5.9)$$

Այս բանաձևերի օգնությամբ (4.23) և (4.24) ընդհանուր արտահայտություններից ստացվում են ներքին էներգիայի և ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումները՝

$$U = U_0 + 3Nk_B T \left[\frac{\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 - 3 \exp \left(- \frac{\theta_D}{T} \right) \right], \quad (5.10)$$

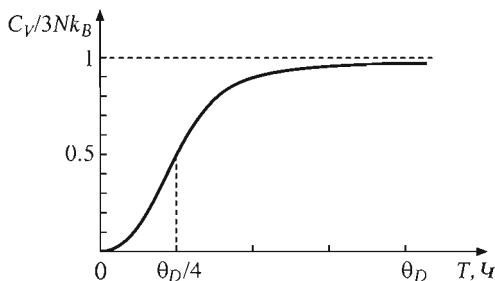
$$C_V = 3Nk_B \left[\frac{4\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 - 3 \frac{\theta_D}{T} \exp \left(- \frac{\theta_D}{T} \right) \right] : \quad (5.11)$$

Այս բանաձևերը հիմնավորում են որակական դատողությունների օգնությամբ ստացված (3.8) և (3.9) գնահատականները:

(5.11) բանաձևում առաջին գումարելին պինդ մարմնի (ցանցային) ջերմունակության « T^3 » օրենքի արտահայտությունն է՝

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 = 234 Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 : \quad (5.12)$$

Նկ. 66-ում պատկերված է ջերմունակության ջերմաստիճանային կախման կորը՝ համաձայն (4.24) բանաձևի:



Նկ. 66. Ջերմունակության ջերմաստիճանային կախման գրաֆիկն ըստ Դեբայի տեսության

Ինչպես հետևում է կորի վարքից, ջերմունակության ամենաարագ փոփոխման տիրույթը $\theta_D/4$ կետի շրջակայքն է, 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 Այնշտայնի բնութագրական ω_E հաճախությունը: Կարելի է այն վերցնել Դեբայի տեսության միջին հաճախության համար ստացվող արժեքին հավասար՝

$$\omega_E \equiv \bar{\omega} = \frac{\int_0^{\omega_D} \omega g(\omega) d\omega}{\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega} = \frac{\int_0^{\omega_D} \omega^3 d\omega}{\int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega} = 0,75\omega_D$$

կամ

$$\theta_E = 0,75\theta_D : \quad (5.13)$$

Այսպիսի ընտրության դեպքում Այնշտայնի և Դեբայի տեսություններով հաշվարկված ջերմունակության 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 բարձրջերմաստիճանային տիրույթում երկու տեսություններն էլ համընկնում են դասական տեսության հետ: Հավասարեցնելով (3.5) և (5.13) 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

$$\theta_E = \sqrt{\frac{3}{5}} \theta_D \approx 0,775\theta_D, \quad (5.14)$$

որն առանձնապես չի տարբերվում (5.13) արտահայտությունից:

Սակայն Այնշտայնի և Դեբայի տեսությունները հանգեցնում են տարբեր որակական և քանակական արդյունքների $T < 0,5\theta_D$ ջերմաստիճաններում:

§6. Դեբայի տեսության քննարկումը

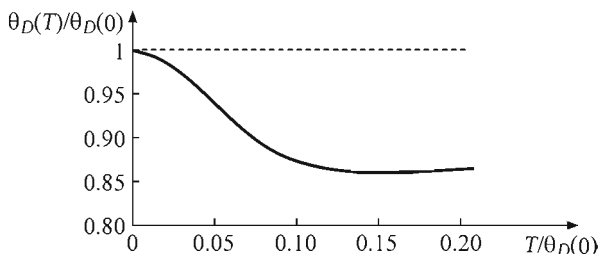
Դեբայի տեսությամբ պինդ մարմնի ներքին էներգիան և ջերմունակությունը, որոնք տրվում են (4.23) և (4.24) բանաձևերով, կամայական ջերմաստիճանում որոշվում են միայն մեկ մեծությամբ՝ θ_D/T հարաբերությամբ: Եթե յուրաքանչյուր բյուրեղի վերագրվի որոշակի բնութագրական θ_D ջերմաստիճան, ապա ջերմունակության բոլոր կորերը կհամընկնեն իրար հետ: Սակայն պարզվում է, որ տվյալ մարմնի θ_D ջերմաստիճանը կախված է այն ջերմաստիճանից, որի դեպքում փորձում ենք համապատասխանեցնել ջերմունակության տեսական և փորձարարական կորերը: Իրոք, եթե ջերմունակության՝ փորձում կամ որևէ տեսությամբ ստացված $C_V(T)$ արժեքը յուրաքանչյուր կետում հավասարեցվի Դեբայի տեսությամբ տրվող (4.24) բանաձևից ստացվող արժեքին՝

$$C_V(T) = C_V^D(T, \theta_D), \quad (6.1)$$

դրա համար օգտագործելով θ_D մեծությունը որպես «հարմարեցման» պարամետր, ապա (6.1) առնչությունից կստացվի այդ պարամետրի՝ ջերմաստիճանից կախման արտահայտություն՝

$$\theta_D = \theta_D(T): \quad (6.2)$$

Նկ. 67-ում պատկերված է արգոնի բյուրեղի Դեբայի ջերմաստիճանի ջերմաստիճանային կախման գրաֆիկը (կետագծով տրված է Դեբայի մոտավորությանը համապատասխանող $\theta_D \equiv \theta_D(0) = \text{const}$ արժեքը):



Նկ. 67. Արգոնի բյուրեղի θ_D պարամետրի ջերմաստիճանային կախման կորը

Դեբայի տեսության θ_D պարամետրը կախված չէ ջերմաստիճանից, իսկ նրա մեծությունը հաստատուն է, որի արժեքը կախված է միայն ցանցի ուժային (ատաճգական) հաստատուններից, ուստի փորձում դիտվող $\theta_D(T)$

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 հետազոտել է Մ. Բլեկմենը: Համաձայն Բլեկմենի՝ $\theta_D(T)$ ֆունկցիան ունի մինիմում միջանկյալ ջերմաստիճանների տիրույթում: Քանի որ θ_D պարամետրը կախված է առաձգական հաստատուններից (ν_l և ν_t արագությունների միջոցով), ապա նրանցից է կախված նաև այն ջերմաստիճանը, որի դեպքում տեղի ունի $T \ll \theta_D$ խիստ անհավասարությունը: Այն բյուրեղները, որոնցում միջատոմային փոխազդեցությունն ուժեղ է (օրինակ՝ ալմաստ, շափյուղա), ունեն բարձր θ_D -եր: Աղյուսակ 18-ում բերված են որոշ տարրերի Γ -երայի ջերմաստիճանների արժեքները՝ ստացված՝

ա) ըստ (4.24) բանաձևի այն կետում, որտեղ $C_V = 3Nk_B/2$,

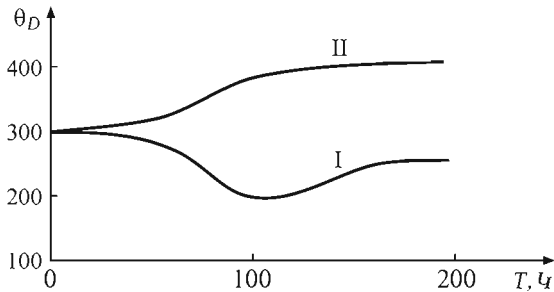
բ) ըստ ձայնի արագության (4.20) բանաձևով հաշվարկի:

Ընդունված է նաև θ_D պարամետրի որոշումը (5.12) բանաձևի միջոցով (C_V -ի՝ T^3 -ից կախման ուղղի թեքությամբ):

Աղյուսակ 18.

Որոշ բյուրեղների Γ -երայի ջերմաստիճանները

Բյուրեղ	θ_D , Կ (ա)	θ_D , Կ (բ)	Բյուրեղ	θ_D , Կ (ա)	θ_D , Կ (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	



Նկ. 68. θ_D պարամետրի վարքը I և II տիպի բյուրեղներում

Որոշ պարզ նյութերում ջերմաստիճանի բարձրացմանը զուգընթաց θ_D -ն նվազում է (I խումբ), իսկ մյուսների մոտ՝ աճում (II խումբ), (տես նկ. 68): Դեբայի ջերմաստիճանի նման վարքը պայմանավորված է հետևյալ հանգամանքով: (2.29) և (5.4) բանաձևերի համաձայն՝ բարձր ջերմաստիճանների տիրույթում Դեբայի $\theta_D(\infty)$ ջերմաստիճանը կապված է $\theta_D \equiv \theta_D(0)$ պարամետրի հետ

$$\theta_D^2(\infty) = \theta_D^2(0) \frac{\overline{\omega^2}}{\overline{\theta_D^2}} \quad (6.3)$$

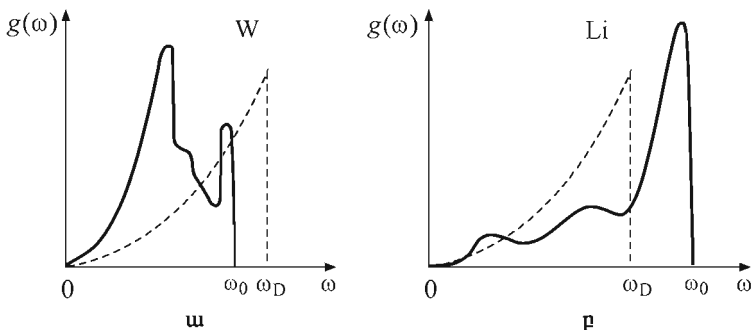
առնչությամբ, որտեղ $\overline{\omega^2}$ -ն հաճախության քառակուսային միջինն է ըստ ցանցային տեսության՝

$$\overline{\omega^2} = \int_0^{\omega_0} \omega^2 g(\omega) d\omega / \int_0^{\omega_0} g(\omega) d\omega, \quad (6.4)$$

ω_0 -ն ցանցի տատանումների առավելագույն հաճախությունն է, իսկ $\overline{\omega_D^2}$ -ն քառակուսային միջինն է ըստ Դեբայի մոտավորության՝

$$\overline{\omega_D^2} = \int_0^{\omega_D} \omega^2 g(\omega) d\omega / \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \frac{3}{5} \omega_D^2: \quad (6.5)$$

Նկ. 69-ում պատկերված են՝ ա. վոլֆրամի (I խումբ) և բ. լիթիումի (II խումբ) վիճակների խտության ֆունկցիաներն ըստ ցանցային տեսության (կետագծերով պատկերված է վիճակների խտության ֆունկցիան ըստ Դեբայի մոտավորության):



Նկ. 69 ա. Վոլֆրամի և բ. լիթիումի վիճակների խտության ֆունկցիաները

Հոծ գծերով և կետագծերով սահմանափակված մակերեսները հավասար են ձայնային մոդերի թվին ($3N$), ուստի 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. 69. ա):

Ինչպես հայտնի է, վոլֆրամի նմուշը մեծ ճշտությամբ կարելի է համարել իզոտրոպ միջավայր, որտեղ $v_l \approx 2v_t$: Դեբայի տեսությունը բարելավելու նպատակով լայնական և երկայնական ալիքները սահմանափակենք ω_D^l և ω_D^t սահմանային հաճախություններով այնպես, որ լայնական մոդերին համապատասխանի $2N$ վիճակ, իսկ երկայնականներին՝ N վիճակ:

Այս պայմաններից կստանանք՝

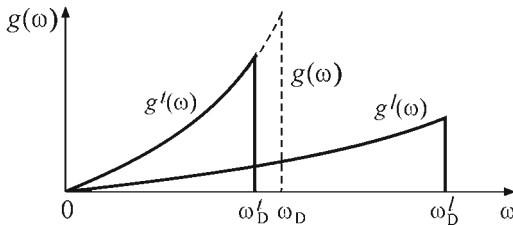
$$\omega_D^l = v_l q_D, \quad \omega_D^t = v_t q_D \approx \frac{1}{2} \omega_D^l : \quad (6.6)$$

Դեբայի ω_D հաճախությունն արտահայտելով ω_D^t -ի միջոցով՝

$$\omega_D = \omega_D^t \left[\frac{1}{3} \left(2 + \frac{v_l^3}{v_t^3} \right) \right]^{-1/3} = \omega_D^t \left[\frac{1}{3} \left(2 + \frac{1}{8} \right) \right]^{-1/3} \approx 1.12 \omega_D^t, \quad (6.7)$$

համոզվում ենք, որ այն շատ մոտ է լայնական մոդերի ω_D^l սահմանային հաճախությանը (նկ. 70), այսինքն՝ սպեկտրում հիմնականը լայնական մոդերի ներդրումն է: Գործնականորեն բոլոր բարձրհաճախային մոդերը հաշվի չեն առնվում: Սակայն Դեբայի տեսության այս անհետևողականությունն էլ հենց

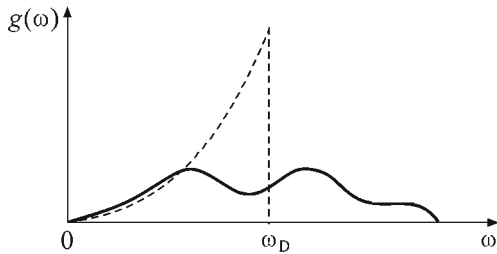
նրա հաջողության պատճառն է: Բանն այն է, որ ցանցում կարճ ալիքներն ունեն ավելի փոքր հաճախություններ, քան հոծ միջավայրում (նկ. 64): Դրա պատճառն այն է, որ ցանցն ավելի իներտ է, քան հոծ միջավայրը, քանի որ ցանցում զանգվածը կենտրոնացված է ցանցի հանգույցներում, իսկ հոծ միջավայրում այն բաշխված է ամբողջապես: Եվ երբ նրանում տարածվում է ալիք, ապա միջավայրի զանգվածի մի մասը, լինելով տատանումների հանգույցներում, մնում է դադարի վիճակում: Այլ կերպ ասած, տատանումներին մասնակցում է ոչ լրիվ զանգվածը: Դրա հետևանքով ցանցային տեսությամբ հաշվարկված սպեկտրը շեղված է փոքր հաճախությունների կողմը. համգամանք, որը, համեմայն դեպս մոտավոր ձևով, համակշռում է Դեբայի տեսության մեջ մեծ հաճախությունների արհամարհումը:



Նկ. 70. Վիճակների խտության ֆունկցիաները վոլֆրամում

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. 70-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 պարամետրը նորից որոշվում է (4.13) պայմանից:

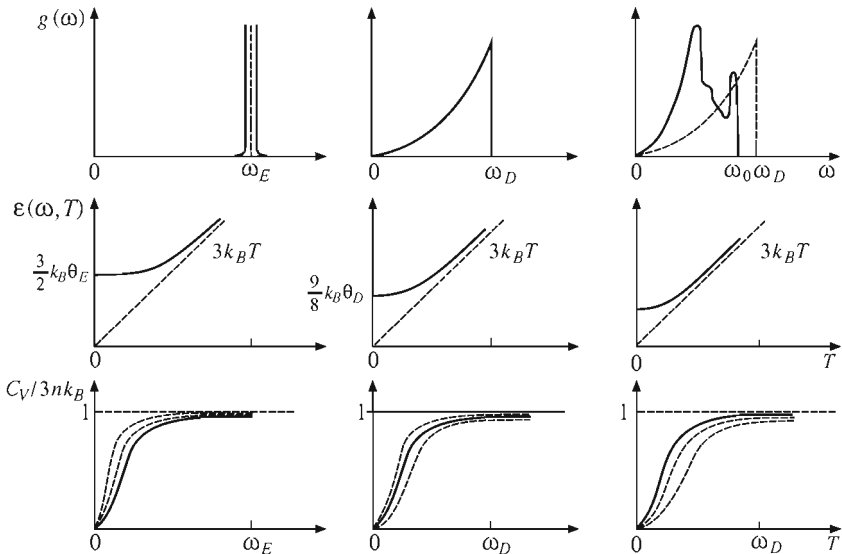
Անիզոտրոպության հետևանքով $\omega_D^{(i)}(\theta, \varphi)$ հաճախություններն իրարից զգալիորեն կտարբերվեն, ուստի գումարային սպեկտրը իզոտրոպ հոծ միջավայրի դեպքի համեմատությամբ կհարթվի (նկ. 71): Այսպիսով՝ անիզոտրոպությունը հակված է սպեկտրը շեղելու դեպի բարձր հաճախությունների կողմը, այն դեպքում, երբ ցանցի կառուցվածքի ընդհատության հաշվառումը հանգեցնում է հակառակ երևույթին:



Նկ. 71. Խիստ անիզոտրոպ միջավայրում վիճակների խտության ֆունկցիայի որակական պատկերը

Ուժեղ անիզոտրոպության դեպքում ցանցի ընդհատության հաշվառումը չի համակշռում անիզոտրոպության ազդեցությունը, ուստի և $\omega_0 > \omega_D$:

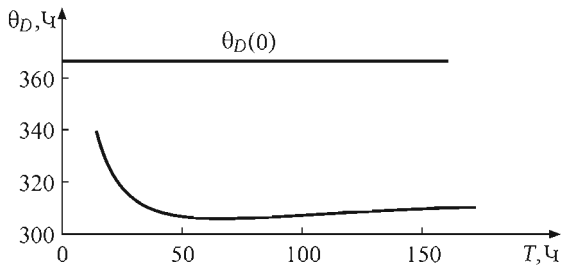
Անդրադառնալով Դեբայի ջերմաստիճանի վարքին՝ հարկ է նշել նրա երկու բնութագրական արժեքները՝ $\theta(0) \equiv \theta_D$, որը որոշվում է միայն միջավայրի առաձգական հաստատուններով, և $\theta_\infty = \theta_D^2 \overline{\omega^2} / \omega_D^2$, որը որոշվում է ցանցային տեսության շրջանակներում ուժային հաստատունների միջոցով:



Նկ. 72. Այնշտայնի, Դեբայի և ցանցային տեսությունների որակական համեմատությունը վոլֆրամի օրինակով

Համեմատենք այժմ Այնշտայնի, Դեբայի և ցանցային տեսությունների շրջանակներում մեկ ատոմին բաժին ընկնող էներգիայի և ջերմունակության համար ստացված կախումների գրաֆիկները վոլֆրամի օրինակով (նկ. 72)՝ ընդունելով $\omega_0 = \omega_D$: Չնայած տարբեր նախնական ենթադրություններին, ջերմունակություններն իրարից շատ չեն տարբերվում:

$\Theta(0) \equiv \Theta_D$ կախումը շատ ավելի զգայուն է սպեկտրի տեսքի նկատմամբ: Ջերմունակության Դեբայի կորը չափավոր բարձր ջերմաստիճաններում կարելի է համատեղել ջերմունակության ցանցային տեսությամբ ստացված կորի հետ, եթե Θ_D պարամետրն ընտրվի հավասար $\Theta_\infty < \Theta_D(0)$, որը հաստատվում է վոլֆրամի օրինակով: Վերջինիս մոտ $\Theta_D(T)$ ֆունկցիան ջերմաստիճանն աճելիս նվազում է $\Theta_D(0)$ արժեքի համեմատությամբ, որի պատճառը միջավայրի առաձգական հաստատունների նվազումն է: Սակայն սկսած 50 Կ-ից մինչև 150 Կ այն նորից դառնում է հաստատուն, որի արժեքը համապատասխանում է ցանցային տեսությունից ստացված Θ_∞ մեծությանը՝ $\Theta_D = \Theta_\infty$ (նկ. 73.): Այս պատճառով « T^3 »-ի օրենքը, որը, համաձայն արտածման, խստորեն տեղի ունի միայն շատ ցածր՝ մի քանի կելվին ջերմաստիճաններում և $\Theta_D = \Theta_D(0) = const$ դեպքում, լավագույնս համընկնում է փորձի հետ մաս 50–150 Կ տիրույթում:



Նկ. 73. $\Theta_D(T)$ պարամետրի վարքը վոլֆրամում

Այժմ համառոտակի ծանոթանանք Դեբայի տեսության կատարելագործման մի տարբերակի հետ, որն օգտագործում է ցանցային տեսության որոշ արդյունքներ:

Ինչպես տեսանք, փոքր հաճախությունների համար ցանցի տատանումների սպեկտրը կարելի է նկարագրել (4.9) արտահայտությամբ և ապահովել ճշգրիտ արդյունքների ստացումը ցածր ջերմաստիճաններում: Բարձր

ջերմաստիճաններում ջերմունակության վարքը, (2.29) բանաձևի համաձայն, որոշվում է ω^2 և ω^4 միջիններով: Ուստի բնական է սպեկտրը կառուցել այն-պես, որ փոքր հաճախությունների համար այն լինի Γ -եքայի տիպի, իսկ ω^2 և ω^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 միջարկումային բանաձև՝ միջանկյալ ջերմաստիճանների տիրույթում:

Կարելի է, օրինակ, սպեկտրն ընտրել որպես Γ -եքայի և Այնշտայնի սպեկտրների գումար՝

$$g(\omega) = 3N \left[\frac{3\omega^2}{\omega_D^3} + \eta \delta(\omega - \omega_E) \right], \quad (6.8)$$

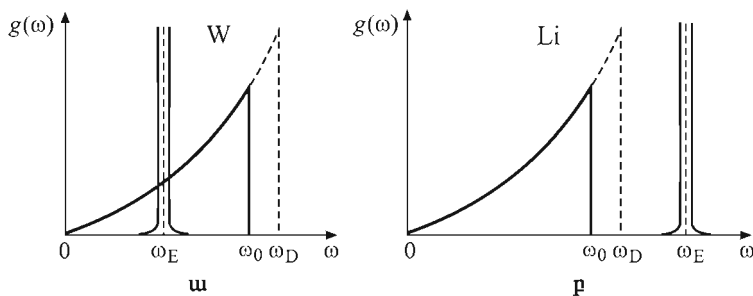
որտեղ η -ն այնշտայնյան հաճախությունների լրիվ թիվն է: Հասկանալի է, որ այժմ սպեկտրի քառակուսային մասը պետք է սահմանափակել ավելի փոքր ω_0 հաճախությամբ, քան ω_D պարամետրն է, որպեսզի հաճախությունների (մոդերի) լրիվ թիվը լինի $3N$: (6.8) արտահայտությունը բնութագրվում է ω_0 սահմանային հաճախությամբ, ինչպես նաև ω_E և η պարամետրերով, որոնք որոշվում են նորմավորման պայմանից և այն երկու պայմաններից, որոնց համաձայն ω^2 և ω^4 միջինները համընկնում են ցանցային տեսությամբ ստացվող արժեքների հետ: Որոշելով նշված երեք պարամետրերը՝ ջերմունակության արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$C_V = 3Nk_B \left[(1 - \eta) D \left(\frac{\theta_0}{T} \right) + \eta E \left(\frac{\theta_E}{T} \right) \right] \quad (6.9)$$

տեսքով, որտեղ $\theta_0 = \hbar\omega_0/k_B$, $\theta_E = \hbar\omega_E/k_B$, իսկ $D(x)$ և $E(y)$ ֆունկցիաները տրվում են համապատասխանաբար (4.22) և (2.25) բանաձևերով:

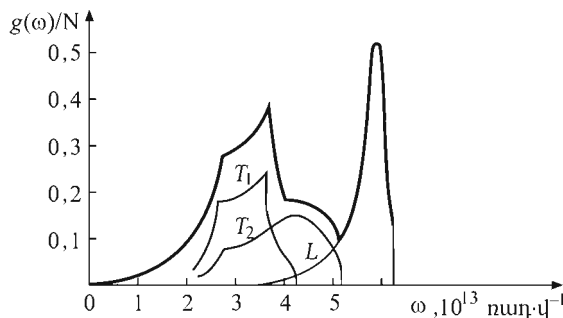
Նկ. 74-ում պատկերված են վոլֆրամի և լիթիումի սպեկտրներն ըստ այս տեսության: Նկարներից ալկնիայտ է ստացված սպեկտրների հիմնական գծերով նմանությունը ցանցային տեսությամբ հաշվարկված սպեկտրներին (նկ. 69. ա և 69. բ): Ցանցային տատանումների սպեկտրը հաճախ ստանում են փորձնական ճանապարհով: Փորձերում ուսումնասիրելով օպտիկական,

ռենտգենյան ճառագայթումների, ինչպես նաև մեյտրոնների ցրումը ցանցի տատանումների վրա՝ ստանում են ցանցի դիսպերսային հավասարումները տատանումների բոլոր ճյուղերի համար, որոնց միջոցով կառուցվում է ցանցի տատանումների սպեկտրը:



Նկ. 74. ա. Վոլֆրամի և բ. լիթիումի վիճակների խտության ֆունկցիաներն ըստ կատարելագործված տեսության

Նկ. 75-ում պատկերված է մեյտրոնների ցրման փորձերում ստացված տվյալներով կառուցված վիճակների խտության ֆունկցիան ալյումինում: Այն երկու լայնական (T_1, T_2) և երկայնական (L) տատանումների վիճակների խտության ֆունկցիաների գումարն է: N -ը տարրական բջիջների թիվն է, իսկ $g(\omega)/N$ հարաբերությունը կախված չէ բյուրեղի չափերից: Նկարում հստակ երևում են այն կետերը, որոնցում տարբեր ճյուղերի վիճակների խտության ֆունկցիաների ածանցյալները տարամիտում են (Վան Հոֆի եզակիություններ, III, 8):



Նկ. 75. Վիճակների խտության ֆունկցիան ալյումինում (մուգ գծված կորը). $g(\omega)/N$ ֆունկցիան չափված է 10^{-13} nat.u^{-1} միավորով

7. Բյուրեղային ցանցի ջերմային տատանումները: Հալման չափանիշ

Բյուրեղային ցանցի ստատիկ մոդելի համաձայն՝ բյուրեղում ատոմները սկեռված են տարածական ցանցի համադրյուններում: Սակայն այս մոդելը միայն մոտավոր ձևով է նկարագրում ատոմների տարածական դիրքերը, քանի որ ատոմների զանգվածները, ինչպես նաև նրանց միջև գործող փոխազդեցության ուժերը վերջավոր են: Դասական տեսության շրջանակներում ստատիկ ցանցի մոդելը ճշմարիտ է միայն $T = 0$ Կ-ում, իսկ քվանտային տեսության շրջանակներում այն չի համապատասխանում իրականությանն անգամ $T = 0$ Կ-ում, քանի որ, համաձայն իմպուլսի և կոորդինատի անորոշությունների առնչության, ատոմներն օժտված են գրոյից տարբեր իմպուլսներով:

Ցանցի տատանումներն ի հայտ են գալիս բազմաբնույթ ֆիզիկական երևույթներում, ուստի ծագում է ջերմային հալասարակչության վիճակում դրանց բնութագրման և գնահատման անհրաժեշտություն:

Ներդաշնակ մոտավորությամբ n -րդ տարրական բջջում k տեսակի ատոմի շեղման α -րդ պրոյեկցիան տրվում է III.6.44 արտահայտությամբ՝

$$u_{n\alpha}^k(t) = \frac{1}{\sqrt{Nm_k}} \sum_{\mathbf{q}j} e_{j\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{q}) a_j(\mathbf{q}, t) e^{i\mathbf{q}\mathbf{n}} :$$

Ջերմային հալասարակչության վիճակում շեղման $u_n^k(t)$ վեկտորի միջինը՝

$$\langle u_n^k \rangle = 0, \quad (7.1)$$

քանի որ տատանումները հալասարակչության դիրքի շուրջը կատարվում են բոլոր ուղղություններով միևնույն հավանականությամբ: Այս պայմանը համընկնում է $u_n^k(t)$ շեղման ժամանակային միջինի համար գրված

$$\overline{u_n^k(t)} = 0 \quad (7.2)$$

պայմանի հետ, որի համաձայն՝ ատոմը «դրվում» է տեղում, որը և հիմք է ծառայում ցանցի ստատիկ մոդելի համար: Շեղումների չափը բնութագրելու համար որոշենք միջին քառակուսային շեղումը ջերմային հալասարակչության վիճակում:

Սահմաններ շեղման քառակուսու միջինը հետևյալ ձևով՝

$$(\mathbf{u}_n^2)_{av} = \frac{1}{M} \sum_{kn} m_k (\mathbf{u}_n^k)^2, \quad (7.3)$$

որտեղ M -ը նմուշի զանգվածն է: Մասնավոր դեպքում, երբ ցանցը կազմված է միատեսակ ատոմներից՝ $k = 1$, $M = Nm$, (7.3) առնչությունն ընդունում է

$$(\mathbf{u}_n^2)_{av} = \frac{1}{N} \sum_n \mathbf{u}_n^2 \equiv \frac{1}{N} \sum_{n\alpha} u_{n\alpha}^2 \quad (7.4)$$

տեսքը: Հետագա հաշվարկները կկատարենք պարզ ցանցի համար:

Տեղադրենք $\mathbf{u}_{n\alpha}$ վեկտորի արտահայտությունը (7.4) սահմանման մեջ՝

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}_n^2)_{av} &= \frac{1}{N} \sum_{\alpha n} \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}', jj'} e_{j\alpha}(\mathbf{q}) e_{j'\alpha}^*(\mathbf{q}') a_j(\mathbf{q}, t) a_{j'}^*(\mathbf{q}', t) e^{in(\mathbf{q}-\mathbf{q}')} = \\ &= \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}', jj'} \sum_{\alpha} e_{j\alpha}(\mathbf{q}) e_{j'\alpha}^*(\mathbf{q}') a_j(\mathbf{q}, t) a_{j'}^*(\mathbf{q}', t) \frac{1}{N} \sum_n e^{in(\mathbf{q}-\mathbf{q}')} : \end{aligned} \quad (7.5)$$

Նկատի ունենալով

$$\sum_n e^{in(\mathbf{q}-\mathbf{q}')} = N \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'+\mathbf{g}} \quad (7.6)$$

առնչությունը (Հավելված 2), որտեղ $\mathbf{g}$ -ն հակադարձ ցանցի կամայական վեկտոր է, ինչպես նաև $\mathbf{q}'$ և $\mathbf{q}' + \mathbf{g}$ վեկտորներով բնութագրվող մոդերի համար-ժեքությունը և III.5.19 առնչությունը՝ (7.5) արտահայտությունից կստանանք՝

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}_n^2)_{av} &= \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}', jj'} \sum_{\alpha} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'+\mathbf{g}} e_{j\alpha}(\mathbf{q}) e_{j'\alpha}^*(\mathbf{q}') a_j(\mathbf{q}, t) a_{j'}^*(\mathbf{q}', t) = \\ &= \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}, jj'} \sum_{\alpha} e_{j\alpha}(\mathbf{q}) e_{j'\alpha}^*(\mathbf{q}-\mathbf{g}) a_j(\mathbf{q}, t) a_{j'}^*(\mathbf{q}-\mathbf{g}, t) = \\ &= \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}, jj'} \sum_{\alpha} e_{j\alpha}(\mathbf{q}) e_{j'\alpha}^*(\mathbf{q}) a_j(\mathbf{q}, t) a_{j'}^*(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}, j} |a_j(\mathbf{q}, t)|^2 : \end{aligned} \quad (7.7)$$

Նշենք, որ հաշվարկները կատարելիս հաշվի է առնվել շեղման վեկտորի իրական լինելը՝ ներկայացնելով $\mathbf{u}_n^2 = \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{u}_n^*$: Սակայն դժվար չէ համոզվել, որ մույն արդյունքը կստացվի նաև $\mathbf{u}_{n\alpha}^k$ -ն քառակուսի բարձրացնելուց և

միաժամանակ բևեռացման վեկտորի ու նորմալ կոորդինատի համաչափության հատկությունները (III.6) օգտագործելուց հետո:

(7.7) արտահայտությունը միջինացնելով ըստ ջերմային հավասարակշռության վիճակի՝ կստանանք.

$$\langle (\mathbf{u}_n^2)_{av} \rangle \equiv \langle \mathbf{u}_n^2 \rangle = \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}, j} \langle |a_j(\mathbf{q}, t)|^2 \rangle : \quad (7.8)$$

Որոշենք $\langle |a_j(\mathbf{q}, t)|^2 \rangle$ մեծությունը:

Ինչպես հայտնի է, ցանցի տատանումների պոտենցիալ էներգիան ներդաշնակ մոտավորությամբ $\mathbf{u}_n$ շեղումների, (հետևաբար՝ նորմալ կոորդինատների) քառակուսային ֆունկցիա է, որը տրվում է III.6.3 բանաձևով: Տեղադրելով նրանում շեղման վեկտորի արտահայտությունը և կատարելով որոշ ձևափոխություններ՝ կստանանք.

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, j} \omega_j^2(\mathbf{q}) |a_j(\mathbf{q}, t)|^2, \quad (7.9)$$

որն իրենից ներկայացնում է $\omega_j(\mathbf{q})$ հաճախություններով $3N$ տատանակների պոտենցիալ էներգիաների գումար:

Միջինացնենք (7.9) արտահայտությունն ըստ ջերմային հավասարակշռության վիճակի: Քանի որ ներդաշնակ տատանակի պոտենցիալ և կինետիկ էներգիաների միջիններն իրար հավասար են, ապա ցանցի տատանողական էներգիայի միջինի համար կստանանք հետևյալ արտահայտությունը՝

$$\langle E \rangle = \langle K \rangle + \langle \Phi \rangle = 2\langle \Phi \rangle = \sum_{\mathbf{q}, j} \omega_j^2(\mathbf{q}) |a_j(\mathbf{q}, t)|^2 : \quad (7.10)$$

Համեմատելով այս արտահայտությունը բյուրեղի ներքին էներգիայի (2.11) բանաձևի հետ՝ կարելի է տեսնել, որ

$$\langle E \rangle \equiv U - U_0 = \sum_{\mathbf{q}, j} \varepsilon(\omega_j(\mathbf{q}), T), \quad (7.11)$$

որտեղ $\varepsilon(\omega_j(\mathbf{q}), T)$ մեծությունը միաչափ ներդաշնակ տատանակի էներգիան է ջերմային հավասարակշռության վիճակում և տրվում է (2.12) բանաձևով: (7.10) և (7.11) բանաձևերից որոնելի մեծության համար կստանանք՝

$$\langle |a_j(\mathbf{q}, t)|^2 \rangle = \frac{\varepsilon(\omega_j(\mathbf{q}), T)}{\omega_j^2(\mathbf{q})} \equiv \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}j}}{\omega_j^2(\mathbf{q})} : \quad (7.12)$$

Այսպիսով՝ միջին քառակուսային շեղման (7.8), ինչպես նաև (7.12) արտահայտություններից հետևում է, որ

$$\begin{aligned} \langle u_n^2 \rangle &= \sum_{\mathbf{q}, j} \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}j}}{Nm\omega_j^2(\mathbf{q})} = \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}, j} \frac{\hbar}{\omega_j(\mathbf{q})} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega_j(\mathbf{q})/k_B T} - 1} \right] = \\ &= \sum_{\mathbf{q}, j} \frac{\hbar}{2Nm\omega_j(\mathbf{q})} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_j(\mathbf{q})}{2k_B T} : \end{aligned} \quad (7.13)$$

Ակնհայտ է, որ միջին քառակուսային շեղումը կախված չէ հանգույցի դիրքից՝ $\mathbf{n}$ -ից, որը ցանցի տեղափոխական համաչափության հետևանք է: Այն կախված չէ նաև ատոմների (տարրական բջիջների) թվից կամ բյուրեղի ծավալից: Վերջին պնդումն ամմիջապես հետևում է $\langle u^2 \rangle$ -ի տեսքից, եթե (7.13) բանաձևում գումարից անցնենք ինտեգրալի (տես III.7.12 կանոնը)՝

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\hbar}{2(2\pi)^3 \rho} \sum_j \int_{\Omega_0} \frac{d\mathbf{q}}{\omega_j(\mathbf{q})} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_j(\mathbf{q})}{2k_B T}, \quad (7.14)$$

որտեղ ρ -ն պինդ մարմնի խտությունն է՝ $\rho = mN/V = M/V$, Ω_0 -ն՝ Բրիլյուեների գոնայի ծավալը:

$\langle u^2 \rangle$ -ը հաշվելու համար անհրաժեշտ է տալ $\omega_j(\mathbf{q})$ դիսպերսային հավասարումն ամեն մի ճյուղի համար, որի տեսքը $\mathbf{q}$ վեկտորի փոփոխման ամբողջ տիրույթում հայտնի չէ:

Կոնկրետ քանակական արդյունքներ ստանալու նպատակով օգտվենք Դեբայի մոտավորությունից՝ $\omega_j(\mathbf{q})$ կախումը ներկայացնելով գծային ֆունկցիայի տեսքով (տես (4.7) բանաձևը): (7.13) բանաձևում անցնելով հաճախությամբ ինտեգրման՝

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\hbar}{2Nm} \int \frac{g(\omega)}{\omega} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} d\omega \equiv \frac{1}{Nm} \int \frac{g(\omega)}{\omega^2} \varepsilon(\omega, T) d\omega, \quad (7.15)$$

և ինտեգրալում տեղադրելով վիճակների խտության ֆունկցիայի (4.17) արտահայտությունը՝ կստանանք՝

$$\langle u^2 \rangle = \frac{9\hbar}{2m\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} d\omega = \frac{9\hbar^2 T^2}{2mk_B \theta_D^3} \int_0^{\theta_D/T} t \operatorname{cth} \frac{t}{2} dt : \quad (7.16)$$

Ուսումնասիրենք (7.16) արտահայտությունը ջերմաստիճանային տարբեր տիրույթներում:

1. Ցածր ջերմաստիճաններ՝ $T \ll \theta_D$

Նկատի ունենալով (7.13) բանաձևում օգտագործված

$$\operatorname{cth} \frac{t}{2} = 1 + \frac{2}{e^t - 1} \quad (7.17)$$

առնչությունը՝ (7.16) արտահայտությունից կստանանք.

$$\begin{aligned} \langle u^2 \rangle &= \frac{9\hbar^2 T^2}{2mk_B \theta_D^3} \int_0^{\theta_D/T} t \left(1 + \frac{2}{e^t - 1} \right) dt = \\ &= \frac{9\hbar^2 T^2}{2mk_B \theta_D^3} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + 2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{t dt}{e^t - 1} \right\} : \end{aligned} \quad (7.18)$$

Ինտեգրալում հիմնական ներդրումը տալիս է $t \ll 1$ տիրույթը, ուստի ինտեգրալի վերին սահմանը կարելի է փոխարինել ∞ -ով: Նկատի ունենալով, որ

$$\int_0^{\infty} \frac{t dt}{e^t - 1} = \frac{\pi^2}{6}, \quad (7.19)$$

միջին քառակուսային շեղման համար կստանանք հետևյալ արտահայտությունը՝

$$\langle u^2 \rangle = \frac{9\hbar^2}{4mk_B \theta_D} + \frac{3\pi^2 \hbar^2 T^2}{2mk_B \theta_D^3} : \quad (7.20)$$

Եթե $T \rightarrow 0$, (7.20) բանաձևում առաջին գումարելին մնում է վերջավոր, նշանակում է՝ անգամ բացարձակ զրո ջերմաստիճանում ատոմները տատանվում են իրենց հավասարակշռության դիրքերի շուրջը (զրոյական տատանումներ): Զրոյական տատանումներով պայմանավորված միջին քառակուսային շեղումը՝

$$\langle u^2 \rangle_0 = \frac{9\hbar^2}{4mk_B\theta_D} = \frac{9}{4} \frac{\hbar}{m\omega_D} = \frac{3k_B^2\theta_D^2}{8\pi^2\rho\hbar v^3} : \quad (7.21)$$

Եթե (7.21) բանաձևում կատարենք $\hbar \rightarrow 0$ անցումը, ապա $\langle u^2 \rangle \rightarrow 0$, որն էլ ապացուցում է զրոյական տատանումների քվանտային բնույթը:

(7.21) բանաձևի համաձայն՝ միջին քառակուսային շեղման մեծությունը հակադարձ համեմատական է ատոմի զանգվածին և էական է հատկապես քեթև տարրերի բյուրեղներում: Աղյուսակ 19-ում տրված են (7.21) բանաձևով

հաշվարկված $\tilde{u} = \sqrt{\langle u^2 \rangle}$ միջին շեղման, մոտակա հարևանների միջև a հեռավորության և $\tilde{u}/a$ հարաբերական շեղման արժեքները որոշ բյուրեղների համար: Ներկայացված տվյալներից պարզ երևում է $\tilde{u}$ մեծության կախումն 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, որը հետևանք է ալմաստի կարծրության):

Աղյուսակ 19.

Ատոմների զրոյական տատանումների հարաբերական շեղումները

Բյուրեղ	$m, 10^{-24}$ գ	$\theta_D, \text{Կ}$	$\tilde{u}, \text{\AA}$	$a, \text{\AA}$	$\tilde{u}/a$
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՝ $T \geq \theta_D$:

(7.16) բանաձևում ինտեգրալի վերին սահմանը՝ $\theta_D/T \leq 1$, ուստի ենթա-
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՝

$$\langle u^2 \rangle \approx \frac{9\hbar^2 T}{mk_B \theta_D^2} \left[1 + \frac{1}{36} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right] = \frac{9k_B T}{m\omega_D^2} \left[1 + \frac{1}{36} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right], \quad (7.22)$$

որը զուտ դասական արտահայտություն է (առանց երկրորդ փոքր գումարե-
լիի): Այն անմիջապես հետևում է (7.15) բանաձևից, եթե վերջինի մեջ տեղա-
դրենք միաչափ տատանակի էներգիայի $\varepsilon(\omega, T) = k_B T$ դասական արտա-
հայտությունը:

Համեմատելով միջին քառակուսային շեղումները 0 Կ-ում և բարձր ջեր-
մաստիճաններում՝ (7.21) և (7.22) բանաձևերից կստանանք՝

$$\frac{\langle u^2 \rangle_0}{\langle u^2 \rangle} = \frac{\theta_D}{4T} \left[1 - \frac{1}{36} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 + \dots \right], \quad (7.23)$$

այսինքն՝ $T \approx \theta_D$ ջերմաստիճանում միջին քառակուսային շեղումը մեծացել
է մոտավորապես 4 անգամ:

(7.22) արտահայտության օգնությամբ կարելի է ստանալ պինդ մարմնի
հալման չափանիշը (Լինդեման), որը կապ է հաստատում պինդ մարմնի
հալման (T_m) և Դեբայի (θ_D) ջերմաստիճանների միջև:

Ենթադրենք՝ T_m հալման ջերմաստիճանում ատոմների միջին շեղումը
միջատոմային a հեռավորության x մասն է՝

$$\frac{\tilde{u}}{a} \equiv \frac{\sqrt{\langle u^2 \rangle}}{a} = x : \quad (7.24)$$

(7.22) և (7.24) արտահայտություններից հետևում է որոնելի կապը՝

$$\theta_D = \left(\frac{9\hbar^2}{mk_B a^2 x^2} \right)^{1/2} T_m^{1/2} : \quad (7.25)$$

Գնահատումների համաձայն՝ պինդ մարմինների մեծամասնության
համար x մեծության արժեքներն ընկած են 0,2 – 0,25 տիրույթում:

§8. Դերայ-Ուոլերի գործոն

Բյուրեղային ցանցի ջերմային տատանումներն ի հայտ են գալիս մակային դ մարմնի հետ տարբեր տեսակի ճառագայթումների (օպտիկական, ռենտգենյան, էլեկտրոնային, նեյտրոնային) հետ փոխազդեցության ժամանակ:

Ուսումնասիրենք ռենտգենյան ճառագայթման ցրումը պարզ ցանցի վրա: Ստատիկ ցանցի վրա դիֆրակցիայի դեպքում ռենտգենյան ճառագայթման ցրումն առաձգական է, քանի որ ցրման հետևանքով փոփոխվում է միայն ռենտգենյան ալիքի $p = \hbar k$ իմպուլսի ուղղությունը, բայց ոչ մեծությունը: Ուժգնության բրեգյան մաքսիմումներն ստացվում են այն դեպքում, երբ ռենտգենյան ալիքի k ալիքային վեկտորի փոփոխությունը հավասար է հակադարձ ցանցի որևէ վեկտորի՝

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{g}, \quad |\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|, \quad (8.1)$$

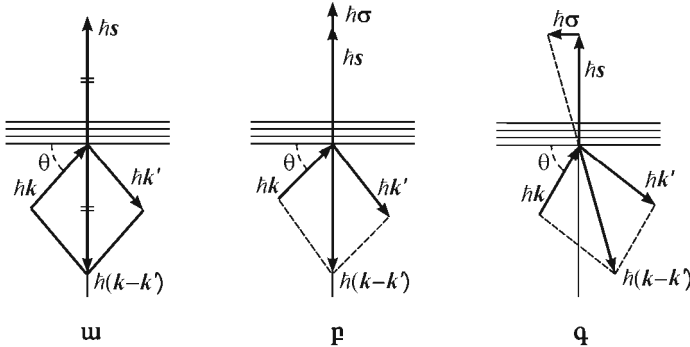
իսկ ցանցի կառուցվածքային գործոնը՝

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_l e^{i\mathbf{l}\mathbf{K}} = N\delta_{\mathbf{K},\mathbf{g}}: \quad (8.2)$$

Առաձգական ցրման հետ մեկտեղ ռենտգենյան ճառագայթումը ցանցում ցրվում է մակ ոչ առաձգական ձևով՝ գրգռելով կամ մարելով որոշակի ցանցային տատանումներ՝ դրանով իսկ փոփոխելով ցանցի ներքին վիճակը: Այսպիսի ցրումներն ընդունված է անվանել ջերմային կամ դիֆուզ:

Ռենտգենյան քվանտի էներգիան, որպես կանոն, մի քանի կէՎ-ի կարգի է, իսկ ցանցում տարածվող ալիքների առավելագույն էներգիան՝ $\hbar\omega_D = k_B\theta_D \sim 0,03$ էՎ է, ուստի փոխազդեցության հետևանքով ռենտգենյան ալիքի էներգիայի փոփոխությունը կարելի է հաշվի չառնել: Սակայն, օրինակ, 3 կէՎ էներգիայով ռենտգենյան քվանտի իմպուլսը՝ $\hbar\omega/c \sim \sim (3000/3 \cdot 10^{10})$ էՎ·վ/սմ $= 10^{-7}$ էՎ·վ/սմ, մույն կարգի է, ինչ միջավայրում տարածվող ալիքի իմպուլսը՝ $p \approx \hbar\omega_D/v \approx k_B\theta_D/v \sim (0,03/3 \cdot 10^5)$ էՎ·վ/սմ $= 10^{-7}$ էՎ·վ/սմ: Նշանակում է՝ ջերմային ցրման հետևանքով ռենտգենյան քվանտի իմպուլսը կարող է զգալիորեն փոփոխվել: Նկ. 76-ում պատկերված են ռենտգենյան ճառագայթների բրեգյան (ա) և ջերմային ցրումները լայնական (բ) ու երկայնական (գ) ալիքների վրա, $\hbar s$ -ը՝ ցանցի, $\hbar\sigma$ -ն տատանումների իմպուլսն է, $\hbar k$ և $\hbar k'$ -ը՝ ռենտգենյան քվանտինը՝ ցրումից առաջ և հե-

տո: Բրեզի θ անկյան տակ ընկնող ռենտգենյան քվանտների որոշ մասը միշտ ցրվում է ջերմային տատանումների վրա, որի հետևանքով նվազում է ամրադարձած ռենտգենյան փնջի ուժգնությունը: Որոշենք այդ նվազումը բնութագրող մեծությունը:



Նկ. 76. Ռենտգենյան քվանտի ա. առաձգական, բ, գ. ոչ առաձգական ցրումները

Ինչպես հայտնի է, ցրված փնջի ուժգնությունը համեմատական է ցանցի կառուցվածքային գործոնի մոդուլի քառակուսուն: Որևէ $\mathbf{n}$ հանգույցի ատոմի դիրքը $\mathbf{t}$ պահին տրվում է

$$\mathbf{R}_n(t) = \mathbf{n} + \mathbf{u}_n(t) \quad (8.3)$$

վեկտորով, ուստի դիմամիկ ցանցի կառուցվածքային գործոնի համար կարելի է գրել՝

$$|S_{\mathbf{K}}|^2 = \left| \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_n(t)} \right|^2 = \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')} \cdot e^{i\mathbf{K}(\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n'})} : \quad (8.4)$$

Որոշենք այս արտահայտության միջինը ջերմային հավասարակշռության վիճակում:

Ինչպես գիտենք, ջերմային հավասարակշռության վիճակում որևէ դիմամիկական մեծության միջին արժեքը որոշելու համար անհրաժեշտ է կատարել վիճակագրական միջինացում հավասարակշռական բաշխման ֆունկցիայի միջոցով: Դիտարկվող խնդրում $\exp[i\mathbf{K}(\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n'})]$ միջինացվող մեծությունը կախված է ատոմների շեղման վեկտորներից, ուստի վիճակագրական միջինացմանը կմասնակցի բաշխման ֆունկցիայի՝ միայն ատոմների

շեղումներից կախված մասը: Վերջինս որոշվում է ցանցի մասնիկների փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիայով, որը ներդաշնակ մոտավորության շրջանակներում տրվում է (7.9) արտահայտությամբ: Եթե այդ արտահայտության մեջ $\mathbf{u}_n$ շեղումներից անցնենք նորմալ կոորդինատների, ապա բաշխման ֆունկցիան կվերածվի $a_j(\mathbf{q}, t)$ փոփոխականներից կախված գաուսյան ֆունկցիաների արտադրյալի:

Միջինացնենք $\exp(i\kappa s)$ ֆունկցիան ըստ s փոփոխականից կախված

$$f(s) = A \exp\left(-\frac{s^2}{2\langle s^2 \rangle}\right) \equiv A \exp(-\alpha s^2) \quad (8.5)$$

գաուսյան ֆունկցիայի (տես Հավելված 2) (κ գործակիցն ապահովում է κs մեծության չափագուրկ լինելը, A -ն նորմավորման հաստատունն է)

$$\langle \exp(i\kappa s) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\kappa s} e^{-\alpha s^2} ds \bigg/ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha s^2} ds = e^{-\frac{\kappa^2}{4\alpha}} \equiv e^{-\frac{1}{2}\kappa^2 \langle s^2 \rangle}:$$

Ընդհանուր դեպքում, եթե κs արտադրյալի փոխարեն էքսպոնենտի արգումենտում գրված է κs սկալար արտադրյալը, ապա տեղի ունի

$$\langle \exp(\kappa s) \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}\kappa^2 \langle s^2 \rangle\right) \quad (8.6)$$

առնչությունը: (7.4) և (7.6) արտահայտությունների համաձայն՝

$$\begin{aligned} \langle |\mathbf{S}_{\mathbf{K}}|^2 \rangle &= \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')] \langle \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{u}_{\mathbf{n}} - \mathbf{u}_{\mathbf{n}'})] \rangle = \\ &= \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')] \exp\left\{-\frac{1}{2}\langle [\mathbf{K}(\mathbf{u}_{\mathbf{n}} - \mathbf{u}_{\mathbf{n}'})]^2 \rangle\right\}: \end{aligned} \quad (8.7)$$

Այժմ ձևափոխենք (8.7) արտահայտության երկրորդ արտադրիչի ցուցիչը՝ նրանում $\mathbf{u}_n$ շեղումներից անցնելով a_j նորմալ կոորդինատներին՝

$$\begin{aligned} \langle [\mathbf{K}(\mathbf{u}_{\mathbf{n}} - \mathbf{u}_{\mathbf{n}'})]^2 \rangle &= \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}', j, j'} [\mathbf{K}\mathbf{e}_j(\mathbf{q})][\mathbf{K}\mathbf{e}_{j'}(\mathbf{q}')] \langle a_j(\mathbf{q}, t) a_{j'}^*(\mathbf{q}', t) \rangle \times \\ &\times (e^{i\mathbf{q}\mathbf{n}} - e^{i\mathbf{q}\mathbf{n}'})(e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{n}} - e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{n}'}): \end{aligned} \quad (8.8)$$

Եթե $(j\mathbf{q})$ հավաքածուն տարբերվում է $(j'\mathbf{q}')$ հավաքածուից, ապա $a_j(\mathbf{q}, t)$ և $a_{j'}^*(\mathbf{q}', t)$ մեծություններն անկախ են, ուստի, (8.2) բանաձևի համաձայն,

$$\langle a_j(\mathbf{q}, t) a_{j'}^*(\mathbf{q}', t) \rangle = \begin{cases} \langle a_j(\mathbf{q}, t) a_{j'}^*(\mathbf{q}', t) \rangle = 0, & (j\mathbf{q}) \neq (j'\mathbf{q}') \\ \langle |a_j(\mathbf{q}, t)|^2 \rangle, & (j\mathbf{q}) \equiv (j'\mathbf{q}'), \end{cases}$$

այսինքն՝

$$\langle a_j(\mathbf{q}, t) a_{j'}^*(\mathbf{q}', t) \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \langle |a_j(\mathbf{q}, t)|^2 \rangle : \quad (8.9)$$

(8.8) և (8.9) արտահայտությունների համաձայն՝

$$\langle [\mathbf{K}(\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n'})]^2 \rangle = \frac{2}{Nm} \sum_{\mathbf{q}, j} |\mathbf{K}\mathbf{e}(\mathbf{q})|^2 \langle |a_j(\mathbf{q}, t)|^2 \rangle [1 - \cos \mathbf{q}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')]: \quad (8.10)$$

Ի վերջո, դիմամիկ ցանցի ցրած փնջի ուժգնության համար ստացվում է հետևյալ արտահայտությունը՝

$$I_d = I_s \exp(-2W) \frac{1}{N^2} \times \\ \times \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \exp \left\{ \mathbf{K}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') + \frac{1}{Nm} \sum_{\mathbf{q}, j} |\mathbf{K}\mathbf{e}_j(\mathbf{q})|^2 \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}, j}}{\omega_j^2} \cos \mathbf{q}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \right\}, \quad (8.11)$$

որտեղ

$$W \equiv W(\mathbf{K}) = \frac{1}{2Nm} \sum_{\mathbf{q}, j} |\mathbf{K}\mathbf{e}_j(\mathbf{q})|^2 \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}j}}{\omega_j^2(\mathbf{q})}, \quad (8.12)$$

իսկ I_s -ը ստատիկ ցանցի ցրած փնջի ուժգնությունն է: $\exp(-2W)$ արտադրիչը նկարագրում է ատոմների ջերմային տատանումների հետևանքով ցրված փնջի ուժգնության նվազումը և կոչվում է Դեբայ-Ուոլերի գործոն:

Ցրված փնջի ուժգնության նվազման երևույթը որակապես կարելի է բացատրել հետևյալ կերպ: Ինչպես գիտենք (I, 10), ատոմի վերջավոր չափերով պայմանավորված ինտերֆերենցային երևույթները փոքրացնում են ատոմի՝ ռենտգենյան ճառագայթներ ցրելու ունակությունը: Ջերմային տատանումների հետևանքով ատոմը «ղողվում» է ավելի մեծ տիրույթով, քան իր սեփական ծավալն է, այսինքն՝ տեղի է ունենում ատոմի ծավալի «արդյունաբար»

աճ, որը հանգեցնում է ատոմի ցրող ունակության հետագա փոքրացման և ցրված փնջի ուժգնության նվազման:

Դեբայ-Ուոլերի W գործոնի (8.12) արտահայտությունը կարելի է զգալիորեն պարզեցնել խորանարդային բյուրեղների դեպքում, երբ յուրաքանչյուր բևեռացման վեկտորի համար միջին հաշվով

$$|\mathbf{K}e_j(\mathbf{q})|^2 = \frac{1}{3}K^2: \quad (8.13)$$

Նկատի ունենալով (8.13) բանաձևը՝ կստանանք.

$$2W = \frac{K^2}{3Nm} \sum_{\mathbf{q},j} \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}j}}{\omega_j^2(\mathbf{q})} = \frac{K^2}{3} \langle u^2 \rangle = K^2 \langle u_\alpha^2 \rangle, \quad \alpha = x, y, z, \quad (8.14)$$

որտեղ օգտվել ենք շեղման պրոյեկցիաների քառակուսային միջինների հավասարությունից՝

$$\langle u_x^2 \rangle = \langle u_y^2 \rangle = \langle u_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle u^2 \rangle: \quad (8.15)$$

(8.14) և (7.13) բանաձևերի համաձայն՝ ջերմաստիճանի բարձրացմանը գույրնթաց դիֆրակտային զծի ուժգնությունը նվազում է, ընդ որում՝ այդ նվազումը հատկապես զգալի է մեծ ալիքային վեկտորներով անդրադարձումների համար:

Նկատի ունենալով միջին քառակուսային շեղումների փոքրությունը՝ (8.11) արտահայտության երկրորդ էքսպոնենտը վերածենք շարքի՝

$$I_d = e^{-2W} (I_0 + I_1 + \dots), \quad (8.16)$$

որտեղ կատարված են հետևյալ նշանակումները՝

$$I_0 = \frac{I_s}{N^2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')], \quad (8.17)$$

$$I_1 = \frac{I_s}{mN^3} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}', \mathbf{q}, j} \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')] |\mathbf{K}e_j(\mathbf{q})|^2 \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}j}}{\omega_j^2(\mathbf{q})} \cos \mathbf{q}(\mathbf{n} - \mathbf{n}'): \quad (8.18)$$

Եթե օգտվենք (8.2) արտահայտությունից, ապա (8.17) առնչությունից կստանանք՝

$$I_0 = I_s \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{g}}, \quad (8.19)$$

որտեղ $\mathbf{g}$ -ն հակադարձ ցանցի կամայական վեկտոր է: (8.19) բանաձևի համաձայն՝ ցրումը տեղի է ունենում միմիայն Բրեգի պայմանին՝ $\mathbf{K} = \mathbf{g}$ հավասարմանը բավարարող ուղղությամբ (առաձգական ցրում):

Նկատի ունենալով (8.18) արտահայտության զույգությունն ըստ $\mathbf{q}$ -ի, ինչպես նաև (8.2) պայմանը՝ որոշ ձևափոխություններից հետո I_1 -ի համար կստանանք՝

$$I_1 = \frac{I_s}{mN} \sum_j |\mathbf{K} \mathbf{e}_j(\mathbf{q})| \frac{\varepsilon_{qj}}{\omega_j^2(\mathbf{q})}, \quad \mathbf{K} + \mathbf{q} = \mathbf{g}, \quad (8.20)$$

որը ոչ առաձգական ցրման ուժգնությունն է և, ի տարբերություն առաձգական ցրման, զրոյից տարբեր է հակադարձ տարածության բոլոր կետերում: Այն բաշխված է անհավասարաչափ, քանի որ երբ $\mathbf{q} \rightarrow 0$ կամ $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{g}$, $\omega_j(\mathbf{q}) \rightarrow 0$ ձայնային ճյուղերի համար, և ոչ առաձգական (դիֆուզ) ցրման ուժգնությունը կտրուկ աճում է: Ընդհակառակը, օպտիկական ճյուղերի ներդրումը դիֆուզ ցրման մեջ չունի նման մաքսիմումներ և հակադարձ տարածության մեջ բաշխված է ավելի հավասարաչափ:

Փորձում չափելով I_1 մեծությունը՝ (8.20) արտահայտության միջոցով կարելի է գնահատել $\omega_j(\mathbf{q})$ հաճախությունը, որի $\mathbf{q}$ ալիքային վեկտորը որոշվում է ցրման անկյան միջոցով, և, հետևաբար, որոշել դիսպերսային հավասարման ճյուղերը:

§9. Տատանումների աններդաշնակությամբ պայմանավորված երևույթներ: Մի-Գրյունայզենի հավասարումը

Բյուրեղական ցանցի դիմամիկան նկարագրող ներդաշնակ մոտավորության հիմքում ընկած է ցանցի հանգույցների՝ որպես հավասարակշռության դիրքերի շուրջը 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 բացատրում է փորձի

արդյունքները (բացառությամբ պինդ հեղուկի): Նշված պայմաններում պոտենցիալ էներգիայի վերլուծության մեջ շեղումների խորանարդին և ավելի բարձր կարգի աստիճաններին համեմատական անդամները կարող են միայն ոչ էական ճշգրտումներ մտցնել հաշվարկներում: Սակայն կան բազմաթիվ ֆիզիկական երևույթներ, ինչպես հավասարակշռական, այնպես էլ անհավասարակշռական, որոնք սկզբունքորեն չեն կարող բացատրվել ներդաշնակ մոտավորության շրջանակներում, քանի որ դրանք պայմանավորված են ատոմների փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիայի աններդաշնակ խորանարդային և ավելի բարձր կարգի անդամներով: Դրանք թվին են պատկանում այնպիսի հավասարակշռական երևույթներ, ինչպիսիք են ջերմային ընդարձակումը, տարբեր ջերմունակությունների ($C_P \neq C_V$) գոյությունը, բարձր ջերմաստիճաններում ջերմունակության՝ ջերմաստիճանից կախված գծային աճը (շեղումը Դյուլոնգ-Պտիի օրենքից), բյուրեղի առաձգական հաստատունների ջերմաստիճանային կախումը և այլն:

Աններդաշնակությամբ պայմանավորված անհավասարակշռական երևույթներից առաջին հերթին անհրաժեշտ է նշել ցանցային ջերմահաղորդականության վերջավորության փաստը:

Ուսումնասիրենք ցանցային տատանումների աններդաշնակությամբ պայմանավորված որոշ հավասարակշռական երևույթներ:

Ընդհանուր դեպքում ցանցի պոտենցիալ էներգիայի աններդաշնակ մասը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\Phi_a = \sum_{n=3}^{\infty} \Phi_n = \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \\ l_1, \dots, l_n \\ \lambda_1, \dots, \lambda_n}} \Phi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}^{(n)} \left(\begin{matrix} k_1, \dots, k_n \\ l_1, \dots, l_n \end{matrix} \right) u_{\lambda_1}^{k_1}(\mathbf{l}_1) \dots u_{\lambda_n}^{k_n}(\mathbf{l}_n), \quad (9.1)$$

որտեղ

$$\Phi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}^{(n)} \left(\begin{matrix} k_1, \dots, k_n \\ l_1, \dots, l_n \end{matrix} \right) \equiv \left(\frac{\partial^n \Phi}{\partial u_{\lambda_1}^{k_1}(\mathbf{l}_1) \partial u_{\lambda_2}^{k_2}(\mathbf{l}_2) \dots \partial u_{\lambda_n}^{k_n}(\mathbf{l}_n)} \right)_0 \quad (9.2)$$

մեծությունները պոտենցիալ էներգիայի ածանցյալներն են հավասարակշռության դիրքերում («ուժային հաստատունները»):

Մասնավորապես, պարզ ցանցի դեպքում ($k = 1$)

$$\Phi_3 = \frac{1}{3!} \sum_{\substack{l_1, l_2, l_3 \\ \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}} \Phi_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}^{(3)}(l_1, l_2, l_3) u_{\lambda_1}(l_1) u_{\lambda_2}(l_2) u_{\lambda_3}(l_3), \quad (9.3)$$

$$\Phi_4 = \frac{1}{4!} \sum_{\substack{l_1, \dots, l_4 \\ \lambda_1, \dots, \lambda_4}} \Phi_{\lambda_1, \dots, \lambda_4}^{(4)}(l_1, \dots, l_4) u_{\lambda_1}(l_1) u_{\lambda_2}(l_2) u_{\lambda_3}(l_3) u_{\lambda_4}(l_4): \quad (9.4)$$

Սովորաբար, ելնելով շեղումների փոքրության մասին ենթադրությունից, (9.1) վերլուծության մեջ պահվում է միայն Φ_3 խորանարդային անդամը, սակայն պետք է նկատի ունենալ, որ այդպիսի մոտեցումը մաքնմատիկորեն հիմնավորված չէ: Բանն այն է, որ միայն խորանարդային անդամով համիլտոնիանն անկայուն է, այսինքն՝ համապատասխան ձևով ընտրելով 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 մաքնմատիկական ճշգրտությունն ապահովելու համար անհրաժեշտ է վերլուծության մաս չորրորդ՝ Φ_4 անդամի հաշվառումը: Որոշ դեպքերում Φ_4 անդամի հաշվառման անհրաժեշտությունը բխում է մաս պահպանման օրենքներից:

Հետագա հաշվարկներում կարևոր դեր է խաղում պինդ մարմնի վիճակի հավասարումը, որը տրվում է

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T \quad (9.5)$$

ջերմադինամիկական առնչությամբ, որտեղ $F \equiv F(T, V, N)$ ֆունկցիան համակարգի ազատ էներգիան է:

Պինդ մարմնի ազատ էներգիայի արտահայտությունը հեշտ է ստանալ անմիջապես՝ օգտվելով վիճակագրական ֆիզիկայի հիմնական բանաձևից, որը կապ է հաստատում համակարգի ազատ էներգիայի և վիճակագրական գումարի միջև՝

$$\begin{aligned} F(T, N, V) &= -k_B T \ln Z(T, N, V) = \\ &= U_0 + k_B T \sum_{\mathbf{q}, j} \ln \left[1 - \exp \left(- \frac{\hbar \omega_j(\mathbf{q})}{k_B T} \right) \right], \end{aligned} \quad (9.6)$$

որտեղ U_0 էներգիան կախված չէ ջերմաստիճանից և տրվում է (2.7) առնչությամբ:

(9.6) և (9.5) բանաձևերից հետևում է, որ

$$P = - \left(\frac{\partial U_0}{\partial V} \right)_T + \sum_{\mathbf{q}, j} \left[- \frac{\partial(\hbar\omega_j(\mathbf{q}))}{\partial V} \right] \left[\exp \left(\frac{\hbar\omega_j(\mathbf{q})}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1} : \quad (9.7)$$

Այս արտահայտության առաջին անդամը պայմանավորված է հավասարակշռության դիրքերում ատոմների փոխազդեցությամբ և զրոյական տատանումներով, իսկ երկրորդ անդամով որոշվում է ճնշման ջերմաստիճանային կախումը, որը հնարավոր է միայն հաճախության՝ ծավալից կախման շնորհիվ:

Դժվար չէ համոզվել, որ ներդաշնակ մոտավորության շրջանակներում հաճախությունը կախված չէ մարմնի ծավալից, ուստի և ճնշումը կախված չէ ջերմաստիճանից: Իրոք, ներդաշնակ տատանումների հաճախությունները որոշվում են բյուրեղի դիմադիկական մատրիցի տարրերով, որոնք, իրենց հերթին, արտահայտվում են պոտենցիալ էներգիայի երկրորդ կարգի ածանցյալների՝ հավասարակշռության դիրքերում ունեցած արժեքներով (տես III.5.12, III.5.13) և կախված չեն ատոմների դիրքերից, հետևաբար և համակարգի ծավալից:

Այժմ հաշվի առնենք պոտենցիալ էներգիայի աններդաշնակությունը՝ պահելով Φ_3 և Φ_4 անդամները, միաժամանակ պարզության համար դիտարկելով միաչափ ցանցի մոդելը՝

$$\begin{aligned} \Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2!} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i \partial u_j} \right)_0 u_i u_j + \frac{1}{3!} \sum_{i,j,k} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial u_i \partial u_j \partial u_k} \right)_0 u_i u_j u_k + \\ + \frac{1}{4!} \sum_{i,j,k,l} \left(\frac{\partial^4 \Phi}{\partial u_i \partial u_j \partial u_k \partial u_l} \right)_0 u_i u_j u_k u_l : \end{aligned} \quad (9.8)$$

II կարգի ածանցյալների համար (9.8) արտահայտությունից կստանանք՝

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i \partial u_j} = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i \partial u_j} \right)_0 + \sum_k \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial u_i \partial u_j \partial u_k} \right)_0 u_k + \\ + \sum_{k,l} \left(\frac{\partial^4 \Phi}{\partial u_i \partial u_j \partial u_k \partial u_l} \right)_0 u_k u_l, \end{aligned} \quad (9.9)$$

որի համաձայն՝ պոտենցիալ էներգիայի աններդաշնակության հաշվառումը համարժեք է $(\partial^2 \Phi / \partial u_i \partial u_j)_0$ հաստատուններն ատոմների u_i շեղումներից և, դրանով իսկ, միաչափ շղթայի երկարությունից կախված $\partial^2 \Phi / \partial u_i \partial u_j$ 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): Նշված փոխարինմամբ ուժային հաստատունների միջոցով արտահայտվող $\omega_j(\mathbf{q})$ հաճախությունները կախված կլինեն համակարգի ծավալից: Այս մոտավորությունը հայտնի է որպես քվազիներդաշնակ մոտավորություն:

Նորմալ մոդերի հաճախությունների կախումը ծավալից կարելի է բացատրել հետևյալ դատողություններով: III.6.15 բնութագրական հավասարման համաձայն՝ $\omega_j(\mathbf{q})$ հաճախությունները որոշվում են ուժային հաստատուններով: Միջատոմային հեռավորությունների փոքրացման հետ փոխազդեցության էներգիայի կորի թեքությունն անընդհատ մեծանում է (տես, օրինակ, մկ. 35), հետևաբար մեծանում են մաս էներգիայի երկրորդ կարգի ածանցյալները՝ ուժային հաստատունները: Այսպիսով՝ ծավալի փոքրացմանը զուգընթաց նորմալ մոդերի հաճախությունները մեծանում են: Հակառակը, ծավալը մեծացնելիս հաճախությունները փոքրանում են, այսինքն՝

$$\frac{\partial \omega_j(\mathbf{q})}{\partial V} < 0: \quad (9.10)$$

Հետևելով Գրյունայզենին՝ կենթադրենք, որ հաճախության ածանցյալն ըստ ծավալի միևնույնն է բոլոր մոդերի համար և նրա միջոցով կսահմանենք Գրյունայզենի հաստատունը՝

$$\gamma = -\frac{V}{\omega_j} \frac{d\omega_j}{dV} \equiv -\frac{d \ln \omega_j}{d \ln V}, \quad (9.11)$$

որը չափագուրկ, դրական մեծություն է: Այս սահմանման համաձայն՝ հաճախությունը ծավալից կախված է

$$\omega_j \sim V^{-\gamma} \quad (9.12)$$

օրենքով: γ պարամետրը որոշվում է փորձից:

Նկատի ունենալով γ պարամետրի (9.11) սահմանումը՝ (9.7) արտահայտությունից ճնշման համար կստանանք.

$$P = - \left(\frac{\partial U_0}{\partial V} \right)_T + \frac{\gamma}{V} (U - U_0), \quad (9.13)$$

որն իրենից ներկայացնում է պինդ մարմնի վիճակի հավասարումը (Գ. Մի, Է. Գրյունայզեն): Հավասարման երկրորդ անդամը համեմատական է բյուրեղի $U - U_0$ ջերմային էներգիային և ջերմաստիճանը բարձրացնելիս մեծանում է:

§10. Տատանումների աններդաշնակության ազդեցությունը ջերմադինամիկական մեծությունների վրա

Պինդ մարմնի վիճակի (9.13) հավասարման օգնությամբ կարելի է կապ հաստատել պինդ մարմինը բնութագրող տարբեր մեծությունների միջև: Դրա համար օգտվենք P, V, T պարամետրերի միջև կապից բխող հայտնի ջերմադինամիկական առնչությունից՝

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_P \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = -1: \quad (10.1)$$

Նկատի ունենալով ջերմային ծավալային ընդարձակման α գործակցի և իզոթերմային սեղմելիության β_T գործակցի սահմանումները՝

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P, \quad \beta_T \equiv \beta = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T, \quad (10.2)$$

ինչպես նաև (9.13) վիճակի հավասարումից հետևող

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{\gamma}{V} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \gamma \frac{C_V}{V} \quad (10.3)$$

կապը՝ (10.1) – (10.3) բանաձևերից կստանանք

$$\alpha = \gamma \frac{\beta C_V}{V} \quad (10.4)$$

առնչությունը, որը հայտնի է որպես Գրյունայզենի հավասարում: Այն կարելի է օգտագործել γ պարամետրը որոշելու համար, քանի որ մնացած բոլոր

բնութագրերը՝ α -ն, β -ն և C_V -ն, փորձում անմիջականորեն չափվող մեծություններ են: γ պարամետրի և ջերմային ընդարձակման գործակցի արժեքները որոշ բյուրեղների համար տրված են Աղյուսակ 20-ում (փակագծերում նշված է ջերմաստիճանի փոփոխման տիրույթը):

Գրյունայզենի հավասարման համաձայն՝ ջերմային ընդարձակումը ցանցի տատանումների ամենբողաշնակության հետևանք է՝ $\alpha = 0$, եթե $\gamma = 0$, այսինքն, երբ $\omega_j(\mathbf{q})$ հաճախությունները կախված չեն պինդ մարմնի ծավալից, հանգամանք, որը տեղի ունի ներդաշնակ մոտավորության շրջանակներում:

Սեղմելիության (10.2) սահմանումից և (9.13) վիճակի հավասարումից կարելի է ստանալ սեղմելիության հակադարձ մեծության (ծավալային սեղմման մոդուլի) արտահայտությունը՝

$$\frac{1}{\beta} = V \left(\frac{\partial^2 U_0}{\partial V^2} \right)_T + \frac{\gamma(\gamma+1)}{V} (U - U_0) - \frac{\gamma^2 C_V T}{V}: \quad (10.5)$$

(9.13), (10.4) և (10.5) բանաձևերի համաձայն՝ Գրյունայզենի հաստատունի ներմուծումը հնարավորություն է ընձեռում վիճակի հավասարումը և նրա հետ կապված α ու β բնութագրերն արտահայտելու ջերմային հատկությունները նկարագրող մեծությունների՝ ներքին էներգիայի և ջերմունակության միջոցով՝ օգտագործելով դրանց տեսական հաշվարկների արդյունքները:

Աղյուսակ 20.
 γ և α գործակիցների արժեքները

Բյուրեղ	γ	$\alpha, 10^{-5} \text{ Կ}^{-1}$	Բյուրեղ	γ	$\alpha, 10^{-5} \text{ Կ}^{-1}$
Si	0,44	1,245(280 – 330Կ)	Au	3,0	4,5(300 – 1000Կ)
Ge	0,72	1,776(280 – 330Կ)	Na	1,14	21,3(273 – 373Կ)
Cu	2,00	6,00(300 – 1000Կ)	Al	2,34	8,7(300 – 1000Կ)

Դեբայի տեսության շրջանակներում վիճակի հավասարումը և սեղմելիության արտահայտությունն արտածվում են ներքին էներգիայի (4.23) և ջերմունակության (4.24) բանաձևերի օգնությամբ՝

$$P = - \left(\frac{\partial U_0}{\partial V} \right)_T + \gamma \frac{3Nk_B \theta_D}{V} D_E \left(\frac{\theta_D}{T} \right), \quad (10.6)$$

$$\frac{1}{\beta} = V \left(\frac{\partial^2 U_0}{\partial V^2} \right)_T + \gamma(\gamma+1) \frac{3Nk_B \theta_D}{V} D_E \left(\frac{\theta_D}{T} \right) - \gamma^2 \frac{3Nk_B T}{V} D \left(\frac{\theta_D}{T} \right): \quad (10.7)$$

Այժմ պարզենք զրոյական տատանումների էներգիայի կախումը համակարգի ծավալից: Նկատի ունենալով (2.7) արտահայտությունը և ըստ մոդերի գումարից անցնելով ինտեգրալի՝ կստանանք՝

$$\begin{aligned} U_0 &= \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_j(\mathbf{q}) = \Phi_0 + \frac{9N\hbar}{2\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \omega^3 d\omega = \\ &= \Phi_0 + \frac{9}{8} N\hbar \omega_D = \Phi_0 + \frac{9}{8} Nk_B \theta_D \end{aligned} \quad (10.8)$$

Ածանցելով (10.8) արտահայտությունն ըստ ծավալի և նկատի ունենալով (9.11) սահմանումը՝ կստանանք

$$\left(\frac{\partial U_0}{\partial V} \right) = \left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial V} \right)_T - \gamma \frac{9Nk_B \theta_D}{8V}, \quad (10.9)$$

$$\left(\frac{\partial^2 U_0}{\partial V^2} \right) = \left(\frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial V^2} \right)_T + \gamma(\gamma+1) \frac{9Nk_B \theta_D}{8V^2} \quad (10.10)$$

առնչությունները, որոնց համաձայն՝ զրոյական տատանումներով պայմանավորված ներդրումները (10.6) և (10.7) բանաձևերում ծավալից կախված են $V^{-(\gamma+1)}$ և $V^{-(\gamma+2)}$ օրենքներով: Ջերմաստիճանը բարձրացնելիս ջերմային ընդարձակման հետևանքով այս ներդրումները փոքրանում են, նվազում են նաև (10.9) և (10.10) արտահայտությունների առաջին անդամները:

Երբ $T = 0$ Կ, $D_E(\theta_D/T) = D(\theta_D/T) = 0$, (10.7) բանաձևից հետևում է, որ

$$\frac{1}{\beta_0} = V \left(\frac{\partial^2 U_0}{\partial V^2} \right)_{T=0}: \quad (10.11)$$

Մյուս կողմից, երբ $T \rightarrow 0$ Կ, $C_V \sim T^3$, ուստի Գրյունայզենի (10.4) հավասարման համաձայն՝

$$\alpha \sim C_V \sim T^3: \quad (10.12)$$

U_0 պոտենցիալ էներգիան նվազագույնն է $T = 0$ -ում, և քանի որ $\alpha \rightarrow 0$, երբ $T \rightarrow 0$, ապա (10.10) բանաձևում առաջին գումարելին շատ քոյլ ջերմաստիճանային կախում կունենա: Հետևաբար, $1/\beta$ մեծության ջերմաստիճանային կախումը $T \ll \theta_D$ տիրույթում պայմանավորված կլինի (10.7) արտահայտության երկրորդ և երրորդ գումարելիներով: Օգտվելով (4.34) և (4.35) բանաձևերից՝ հեշտությամբ կստանանք սեղմելիության ջերմաստիճանային կախումն արտահայտող բանաձևը $T \ll \theta_D$ տիրույթում՝

$$\frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta_0} - \frac{9\pi^4 \gamma(\gamma-1) N k_B \theta_D}{5V} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^4 : \quad (10.13)$$

Բարձր՝ $T > \theta_D$ ջերմաստիճաններում ջերմունակությունը ձգտում է հաստատուն արժեքի, ուստի ջերմային ընդարձակման գործակիցը կունենա վերջավոր հաստատուն արժեք՝ $\alpha = const$: Հետևաբար ջերմաստիճանի փոփոխմանը զուգընթաց, (10.7) բանաձևում կփոփոխվեն բոլոր անդամները: Ջերմային ընդարձակման հետևանքով իրարից հեռացող ատոմների փոխազդեցության էներգիան կփոքրանա, ուստի կփոքրանա առաջին գումարելու ներդրումը $1/\beta$ -ում: Մյուս կողմից, երկրորդ և երրորդ անդամների գումարը ջերմաստիճանը բարձրացնելիս մեծանում է ($\sim T$ -ին): Առաջին գործոնը բերում է բյուրեղի սեղմելիության մեծացման (ցանցի «փափկեցման»), իսկ երկրորդը՝ սեղմելիության փոքրացման (ցանցի «կռշտացման»): Փորձից հետևում է, որ գերակշռում է առաջին գործոնը, և ջերմաստիճանը բարձրացնելիս ցանցի սեղմելիությունն աճում է:

Աններդաշնակությամբ է պայմանավորված մակ պինդ մարմնի՝ հաստատուն ճնշման դեպքում (C_P) և հաստատուն ծավալի դեպքում (C_V) ջերմունակությունների տարբերությունը:

C_P և C_V ջերմունակությունները կապված են հետևյալ ընդհանուր ջերմադինամիկական առնչությամբ՝

$$C_P - C_V = TV \frac{\alpha^2}{\beta} : \quad (10.14)$$

Օգտվելով Գրյունայզենի (10.4) հավասարումից՝ (10.14) արտահայտության փոխարեն կունենանք՝

$$\frac{C_P - C_V}{C_V} = \gamma \alpha T : \quad (10.15)$$

Յաճախ՝ $T \ll \theta_D$ ջերմաստիճաններում $\gamma\alpha T \sim T^4 \rightarrow 0$, ուստի C_P և C_V ջերմունակությունները գործնականորեն իրարից չեն տարբերվում: Այդ տարբերությունը փոքր է անգամ բարձր ջերմաստիճաններում, որը հետևանք է ջերմային ընդարձակման գործակցի համեմատաբար փոքր արժեքի (տես Աղյուսակ 20): Իրոք, $T \sim 1000$ Կ ջերմաստիճանում, $\alpha \sim 10^{-5}$ Կ $^{-1}$ բնութագրական արժեքի դեպքում $\gamma\alpha T \approx 0,02$, 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 կախումները նույնպես հետևանք են ուժային հաստատունների՝ ծավալից ունեցած կախման և աններդաշնակության հաշվառման արդյունք են, ուստի $\alpha = 0$ դեպքում վերանում է մակ 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 երկրորդ կարգի ածանցյալների՝ ծավալից ունեցած կախման միջոցով: Այս պատճառով տեսությունը ներկայացնում է ցանցի՝ ծավալից կախված հատկությունների կիսաքանակական նկարագրություն:

§11. Տատանումների աններդաշնակության ազդեցությունը ցանցի ջերմունակության վրա

Ջերմունակության քվանտային տեսության համաձայն՝ բարձր ջերմաստիճաններում պինդ բյուրեղային մարմնի ջերմունակությունը ձգտում է $3sNk_B$ դասական արժեքին՝ մնալով միշտ նրանից փոքր (տես (2.29) բանաձևը): Սակայն փորձում, նշված տիրույթում ջերմունակությունը գերազանցում է դասական արժեքը, ընդ որում՝ ջերմաստիճանը բարձրացնելիս շեղումն այդ արժեքից աճում է գծային օրենքով:

Աններդաշնակության ազդեցությունն առավելագույնս արտահայտվում է համեմատաբար մեծ շեղումների դեպքում, այսինքն՝ բարձր ջերմաստիճաններում (տես (7.22) բանաձևը), ուստի հաշվարկները կատարելիս կարելի է օգտվել դասական վիճակագրությունից:

Ցանցի վիճակագրական ինտեգրալը կարելի է հաշվարկել (1.5) բանաձևով՝

$$\begin{aligned}
Z &= \int \cdots \int \exp\{-\beta E(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N; \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N)\} d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_N d\mathbf{u}_1 \dots d\mathbf{u}_N = \\
&= \int \cdots \int \exp\{-\beta[H_0(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N) + \\
&\quad + \Phi_a(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N)]\} d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_N d\mathbf{u}_1 \dots d\mathbf{u}_N,
\end{aligned} \tag{11.1}$$

որտեղ $H_0(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N; \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N)$ -ն ցանցի մեխանիկական էներգիան է ներդաշնակ մոտավորությամբ ու $\mathbf{p}_i$ իմպուլսների և $\mathbf{u}_i$ շեղումների քառակուսային ֆունկցիա է (տես (1.8) բանաձևը), իսկ պոտենցիալ էներգիայի $\Phi_a(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N)$ աններդաշնակ մասը տրվում է (9.1) արտահայտությամբ, $\beta = 1/k_B T$:

(11.1) արտահայտությունը վերածենք շարքի՝ համարելով Φ_a մեծությունը փոքր գրգռում H_0 էներգիայի նկատմամբ և սահմանափակվենք վերլուծության քառակուսային անդամներով՝

$$\begin{aligned}
Z &= \int \cdots \int \exp(-\beta H_0) \left[1 - \beta \Phi_a + \frac{1}{2} \beta^2 \Phi_a^2 + \cdots \right] d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_N d\mathbf{u}_1 \dots d\mathbf{u}_N = \\
&= Z_0 \left[1 - \beta \langle \Phi_a \rangle_h + \frac{1}{2} \beta^2 \langle \Phi_a^2 \rangle_h + \cdots \right],
\end{aligned} \tag{11.2}$$

որտեղ ներդաշնակ ցանցի Z_0 վիճակագրական ինտեգրալը տրվում է (1.11) բանաձևով, իսկ ըստ ներդաշնակ մոտավորության $\langle \cdots \rangle_h$ միջինները՝

$$\begin{aligned}
\langle \Phi_a^k \rangle_h &= \frac{1}{Z_0} \int \cdots \int \exp(-\beta H_0) \Phi_a^k(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N) d\mathbf{p}_1 \cdots d\mathbf{p}_N d\mathbf{u}_1 \cdots d\mathbf{u}_N = \\
&= \frac{\int \cdots \int \exp(-\beta \Phi_2) \Phi_a^k(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N) d\mathbf{u}_1 \cdots d\mathbf{u}_N}{\int \cdots \int \exp(-\beta \Phi_2) d\mathbf{u}_1 \cdots d\mathbf{u}_N}
\end{aligned} \tag{11.3}$$

արտահայտությամբ, որտեղ $k=1, 2, \dots$, իսկ Φ_2 մեծությունը պոտենցիալ էներգիայի ներդաշնակ մասն է (III.6.3 բանաձև):

Օգտվելով համակարգի ազատ էներգիայի և վիճակագրական ինտեգրալի միջև կապից և նկատի ունենալով (11.2) առնչությունը՝ ցանցի ազատ էներգիայի համար կստանանք.

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 - \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - \beta \langle \Phi_a \rangle_h + \frac{1}{2} \beta^2 \langle \Phi_a^2 \rangle_h + \cdots \right]: \tag{11.4}$$

Վերլուծենք այն շարքի ըստ Φ_a փոքր պարամետրի: Օգտվելով $x \ll 1$ դեպքում հայտանի

$$\ln(1-x) \approx -x - \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} + \dots$$

արտահայտությունից՝ ազատ էներգիայի համար կստանանք.

$$F = F_h + \langle \Phi_a \rangle_h + \frac{1}{2k_B T} [\langle \Phi_a \rangle_h^2 - \langle \Phi_a^2 \rangle_h] + \dots, \quad (11.5)$$

որտեղ F_h - ն ազատ էներգիան է ներդաշնակ մոտավորությամբ:

Հետագա պարզեցման նպատակով կսահմանափակվենք աններդաշնակության $n = 3$ և $n = 4$ անդամներով, այսինքն՝ կենթադրենք, որ

$$\Phi_a \approx \Phi_3 + \Phi_4: \quad (11.6)$$

Քանի որ միջինացումը, (11.3) սահմանման համաձայն, կատարվում է ըստ u_i շեղումների համաչափ $\exp(-\beta\Phi_2)$ ֆունկցիայի, ապա շեղումների կենտ աստիճաններ պարունակող անդամների միջինները հավասարվում են զրոյի՝

$$\langle \Phi_3 \rangle_h \sim \langle u_i^3 \rangle_h = 0, \quad \langle \Phi_3 \cdot \Phi_4 \rangle_h \sim \langle u_i^7 \rangle_h = 0, \quad (11.7)$$

իսկ շեղման զույգ աստիճաններով անդամների միջինները թվային գործակցի ճշտությամբ կարող ենք գնահատել (7.22) բանաձևի օգնությամբ՝

$$\langle \Phi_4 \rangle_h \approx AN \langle u_i^2 \rangle^2 \approx AN \left(\frac{k_B T}{m\omega_D^2} \right)^2, \quad (11.8)$$

$$\langle \Phi_3^2 \rangle_h \approx B^2 N \langle u_i^2 \rangle^6 \approx B^2 N \left(\frac{k_B T}{m\omega_D^2} \right)^3, \quad (11.9)$$

որտեղ B գործակիցն արտահայտվում է պոտենցիալ էներգիայի երրորդ կարգի, իսկ A -ն՝ չորրորդ կարգի ածանցյալների միջոցով:

(11.5)–(11.9) արտահայտություններից ջերմունակության համար կըստանանք՝

$$C_V = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V \approx 3Nk_B + 2Nk_B \cdot k_B T \left[\frac{B^2}{(m\omega_D^2)^3} - \frac{A}{2(m\omega_D^2)^2} \right]: \quad (11.10)$$

Ջերմունակության՝ աններդաշնակությանը պայմանավորված մասում Φ_3 անդամի ներդրումը միշտ դրական է ($\sim B^2$), իսկ Φ_4 անդամի ներդրումը՝ անորոշ՝ կախված A գործակցի նշանից:

Դժվար չէ համոզվել, որ (11.10) արտահայտության մեջ փակագծերում գրված գումարելիները նույն կարգի մեծություններ են, իսկ աններդաշնակությանը պայմանավորված ուղղումը շատ փոքր է ջերմունակության $3Nk_B$ դասական արժեքից: Իրոք, ըստ մեծության կարգի

$$B \sim \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial u_i^3} \right)_0 \sim \frac{\Phi}{a^3}, \quad A \sim \left(\frac{\partial^4 \Phi}{\partial u_i^4} \right)_0 \sim \frac{\Phi}{a^4}, \quad m\omega_D^2 \sim \frac{\Phi}{a^2},$$

որտեղ a պարամետրը ցանցի հաստատունն է, հետևաբար՝

$$\frac{B^2}{(m\omega_D^2)^3} \sim \frac{\Phi^2 a^{-6}}{\Phi^3 a^{-6}} \sim \frac{1}{\Phi}, \quad \frac{A}{2(m\omega_D^2)^2} \sim \frac{\Phi a^{-4}}{\Phi^2 a^{-4}} \sim \frac{1}{\Phi},$$

իսկ ջերմունակության ուղղումը՝

$$\Delta C_V \sim Nk_B \cdot \frac{k_B T}{\Phi} \approx Nk_B \cdot \frac{k_B T}{m\omega_D^2} \cdot \frac{1}{a^2} \approx Nk_B \frac{\langle u^2 \rangle}{a^2}, \quad (11.11)$$

համեմատական է ներդաշնակ տեսության $\langle u^2 \rangle / a^2$ փոքր պարամետրին:

ՄԵԿՈՒՄԻՉՆԵՐԻ ԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

§1. Էլեկտրական դաշտը մեկուսիչներում: Դիէլեկտրական թափանցելիություն

Մեկուսիչների (կամ դիէլեկտրիկների) ամենահիմնական հատկությունը նրանց անհաղորդիչ լինելն 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 մեծ է 10^{10} Օմ-սմ-ից, որը գերազանցում է մետաղների տեսակարար դիմադրությունն ամփոփազն 10^{10} անգամ:

Էլեկտրաստատիկ երևույթները մեկուսիչներում նկարագրվում են

$$\operatorname{div} \mathbf{e} = 4\pi\rho', \quad (1.1)$$

$$\operatorname{rote} = 0 \quad (1.2)$$

միկրոսկոպական հավասարումներով, որոնցում միկրոսկոպական էլեկտրաստատիկ $\mathbf{e}$ դաշտը պայմանավորված է լրիվ «միկրոսկոպական» լիցքի ρ' խտությամբ: Իրական ֆիզիկական խնդիրներում հնարավոր չէ տալ առանձին լիցքերի բաշխումը, քանի որ նյութի մակրոսկոպական ծավալներում պարունակվում են հսկայական թվով լիցքեր, որոնցից յուրաքանչյուրը ջերմային գրգռման կամ գրոյական տատանումների հետևանքով ավելի կամ պակաս չափով շարժունակ է:

Սակայն մակրոսկոպական խնդիրներում, ինչպիսիք են գործնականում հանդիպող բոլոր խնդիրները, չի պահանջվում որոշել դաշտը նմուշի կամայական կետում, որը կետից կետ փոփոխվում է շատ կտրուկ և պատահական ձևով: Միանգամայն բավարար է իմանալ էլեկտրական դաշտի միջին լարվածությունը $l \approx 10^{-2} - 10^{-3}$ սմ գծային չափերով տիրույթներում: Այսպիսի տիրույթներում պարունակվող ատոմների թիվը՝ $N_l \sim l^3/a^3 \geq 10^{15}$ է ($a^3 \sim 10^{-24}$ սմ³ ատոմի ծավալն է), հետևաբար միկրոսկոպական էլեկտրա-

կան դաշտի լարվածության ֆլուկտուացիաները միջինացվում են: Ուստի ստորև գործ կունենանք էլեկտրաստատիկ դաշտի լիցքի խտության՝ ըստ «ֆիզիկոսներն անվերջ փոքր» $\Delta V \sim l^3$ ծավալի միջինացված մեծությունների հետ:

Միջինացման արդյունքում էլեկտրական դաշտի լարվածության միջին արժեքի՝ $\mathbf{E} = \langle \mathbf{e} \rangle$ -ի համար, որը դաշտի մակրոսկոպական բնութագիր է, (1.1) և (1.2) հավասարումներից ստացվում են

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\rho - 4\pi\operatorname{div} \mathbf{P}, \quad (1.3)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0 \quad (1.4)$$

հավասարումները, որտեղ

$$\rho = \sum_i N_i \langle q_i \rangle + \rho_0, \quad (1.5)$$

N_i -ն i տեսակի մոլեկուլների թիվն է միավոր ծավալում, $\langle q_i \rangle$ -ն՝ նրանց միջին լիցքը, ρ_0 -ն՝ լրացուցիչ (ազատ) լիցքի խտությունը, $\mathbf{P}$ -ն միջավայրի բևեռացման վեկտորն է, այսինքն՝ միջավայրի միավոր ծավալի էլեկտրական կամ երկբևեռային մոմենտը՝

$$\mathbf{P} = \sum_i N_i \langle \mathbf{p}_i \rangle, \quad (1.6)$$

իսկ $\langle \mathbf{p}_i \rangle$ -ն i տեսակի մոլեկուլի միջին երկբևեռային մոմենտը: Քանի որ, որպես կանոն, մոլեկուլներն էլեկտրաչեզոք են, ապա $\langle q_i \rangle = 0$, և լիցքի լրիվ խտությունը՝ $\rho(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r})$:

(1.3) հավասարումը կարելի է ներկայացնել նաև

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi\rho \quad (1.7)$$

տեսքով, որտեղ

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} \quad (1.8)$$

մեծությունն էլեկտրական ինդուկցիայի վեկտորն է:

Եթե արտաքին էլեկտրաստատիկ դաշտը բացակայում է, ապա նյութի միջին բևեռացումը՝ $\mathbf{P} = 0$ (այս պնդումը չի վերաբերում պիրոէլեկտրիկներին, որոնք օժտված են $\mathbf{P} \neq 0$ մոմենտով. տես §8): $\mathbf{P}(\mathbf{E})$ ֆունկցիան կարելի է վերլուծել շարքի ըստ $\mathbf{E}$ -ի կենտ աստիճանների ($\mathbf{E}$ -ի գույգ աստի-

ճանճների բացակայությունը շարքում հետևանք է $\mathbf{P} \rightarrow -\mathbf{P}$ հատկության, երբ $\mathbf{E} \rightarrow -\mathbf{E}$), այսինքն՝

$$P(E) = \chi E + bE^2 + \dots : \quad (1.9)$$

Ինչպես ցույց են տալիս փորձերը, լաբորատոր պայմաններում հասանելի էլեկտրական դաշտերի համար (1.9) վերլուծության մեջ մեծ ճշտությամբ կարելի է սահմանափակվել ըստ դաշտի լարվածության գծային անդամով, քանի որ փորձում ստացվող դաշտերը շատ թույլ են ներատոմային էլեկտրական դաշտերից՝ $|\mathbf{E}| \ll E_a \approx 10^8 - 10^9$ Վ/սմ: (1.9) արտահայտության երկրորդ գումարելին սովորաբար հաշվի է առնվում ոչ գծային օպտիկայի խնդիրներում, երբ օգտագործում են $E \approx 10^5 - 10^6$ Վ/սմ լարվածությամբ լազերային դաշտեր:

Իզոտրոպ միջավայրերում բևեռացման վեկտորը գուգահեռ է դաշտի լարվածության $\mathbf{E}$ վեկտորին, և համեմատականության գործակիցը կախված չէ նրա ուղղությունից, ուստի (1.9) բանաձևի համաձայն՝

$$\mathbf{P} = \chi \mathbf{E} , \quad (1.10)$$

որտեղ χ գործակիցը կոչվում է միջավայրի դիէլեկտրական ընկալունակություն: Այս դեպքում (1.8) սահմանմամբ որոշված ինդուկցիայի վեկտորը՝

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \mathbf{E}(1 + 4\pi\chi) \equiv \varepsilon\mathbf{E} , \quad (1.11)$$

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 $\mathbf{D}$ և $\mathbf{E}$, ինչպես նաև $\mathbf{P}$ և $\mathbf{E}$ վեկտորների միջև ունի թեմգորային 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 երկրորդ կարգի համաչափ թեմգորներ են (կրկնվող ցուցիչներով կատարվում է գումարում): Վերջիններս կապված են

$$\varepsilon_{ij} = \delta_{ij} + 4\pi\chi_{ij} \quad (1.14)$$

առնչությամբ, որտեղ δ_{ij} -ն Կրոնեկերի սիմվոլն է:

§2. Ապարևեռացնող դաշտ: Ապարևեռացման գործակից

Նմուշից դուրս տեղաբաշխված (արտաքին) լիցքերի ստեղծած էլեկտրական դաշտի լարվածությունը նշանակենք $\mathbf{E}_0$ -ով: Նմուշի առկայությամբ դաշտի լարվածության մեջ ներդրում է տալիս ինչպես $\mathbf{E}_0$ արտաքին դաշտը, այնպես էլ նմուշի բևեռացման հետևանքով առաջացած դաշտը:

Պարզենք բևեռացման ներդրումը մակրոսկոպական դաշտի լարվածության մեջ: Դրա համար անհրաժեշտ է որոշել նմուշի բոլոր երկբևեռների ստեղծած էլեկտրական դաշտը: Քանի որ նմուշի միավոր ծավալի երկբևեռային մոմենտը $\mathbf{P}$ է, ապա dV ծավալն օժտված կլինի $\mathbf{P}dV$ երկբևեռային մոմենտով: Էլեկտրաստատիկայից հայտնի բանաձևի համաձայն՝ նմուշի երկբևեռային մոմենտի ստեղծած դաշտի պոտենցիալը՝

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int dV' P(\mathbf{r}') \text{grad}' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.1)$$

որտեղ ինտեգրումն ըստ $\mathbf{r}'$ փոփոխականի կատարվում է նմուշի V ծավալով (grad' -ը նշանակում է ածանցում՝ ըստ $\mathbf{r}'$ շառավիղ-վեկտորի):

Ձևափոխենք ենթաինտեգրալ արտահայտությունը՝ օգտվելով հետևյալ բանաձևից՝

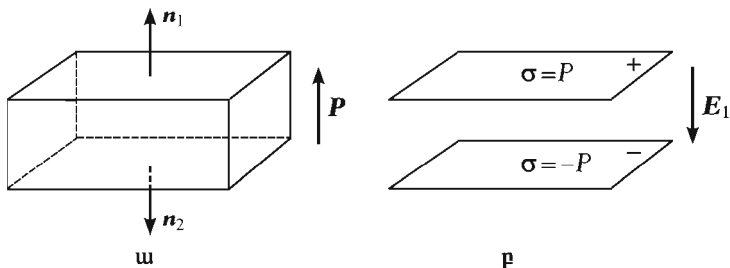
$$\mathbf{P}(\mathbf{r}') \text{grad}' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \text{div}' \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{\text{div}' \mathbf{P}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}: \quad (2.2)$$

(2.1) ինտեգրալում տեղադրելով (2.2) բանաձևը և օգտվելով Գաուսի քեռքենից՝ $\mathbf{r}$ կետում դաշտի պոտենցիալի համար կստանանք.

$$\varphi(\mathbf{r}) = \oint \frac{\mathbf{P}\mathbf{n}' dS'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \int \frac{\text{div}' \mathbf{P}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV' = \oint \frac{\mathbf{P}\mathbf{n}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dS' - \int \frac{\text{div}' \mathbf{P}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV', \quad (2.3)$$

որտեղ $\mathbf{P}\mathbf{n}'$ -ը $\mathbf{P}$ վեկտորի պրոյեկցիան է նմուշի մակերևույթի $\mathbf{n}'$ նորմալի վրա, իսկ ինտեգրումն առաջին գումարելիում կատարվում է նմուշի մակերևույթով:

(2.3) բանաձևի և պոտենցիալի ընդհանուր արտահայտության համեմատությունից բխում է, որ $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{P}\mathbf{n} = P_n$ մեծությունը լիցքի մակերևութային խտությունն է, իսկ $\rho = -\text{div}\mathbf{P}$ -ն՝ լիցքի ծավալային խտությունը:



Նկ. 77. ա. Համասեռ բևեռացված քիթեղ,
բ. քիթեղի մակերևութային առաջացած լիցքերը

Եթե մնուլը բևեռացված է համասեռ՝ $\mathbf{P} = \text{const}$, ապա $\rho = -\text{div} \mathbf{P} = 0$:

Դիտարկենք դիէլեկտրիկի համասեռ բևեռացված քիթեղ: Վերը նշված արդյունքի համաձայն՝ բևեռացմամբ ստեղծված դաշտը քիթեղի կամայական կետում հավասար է քիթեղի մակերևութային առաջացած $\sigma = \mathbf{P}\mathbf{n}$ խտությամբ լիցքերի ստեղծած էլեկտրական դաշտին (նկ. 77, $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$ միավոր վեկտորները քիթեղի վերին և ստորին մակերևութային նորմալներն են):

Լիցքավորված մակերևութային միջև դաշտի լարվածությունը՝

$$E_1 = -4\pi |\sigma| = -4\pi P, \quad (2.4)$$

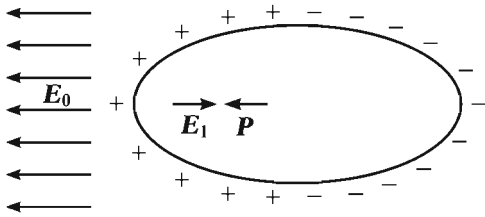
ուստի քիթեղի ներսում լրիվ մակրոսկոպական դաշտը՝

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_0 - 4\pi P \mathbf{n}_1: \quad (2.5)$$

Ինչպես հետևում է (2.5) բանաձևից, բևեռացմամբ պայմանավորված $\mathbf{E}_1$ դաշտը մնուլի ներսում ուղղված է արտաքին $\mathbf{E}_0$ դաշտին հակառակ, ուստի այն կոչվում է ապաբևեռացնող:

Ապաբևեռացնող դաշտի մեծությունը կախված է մնուլի ձևից:

Դիտարկենք էլիպսարդաձև դիէլեկտրական մնուլ: Նմուլի ձևի ընտրությամբ պայմանավորված է այն հանգամանքով, որ էլիպսարդի կիսաառանցքների հարաբերությունների տարբեր սահմանային դեպքերում կարելի է հեշտությամբ ստանալ գնդի, ձողի և սկավառակի ձև ունեցող մնուլների համար համապատասխան արտահայտություններ: Անհրաժեշտ է նկատի ունենալ նաև այն կարևոր հանգամանքը, որ նշված ձևերով մնուլներում համասեռ բևեռացումը հանգեցնում է ապաբևեռացման համասեռ դաշտի առաջացման (նկ. 78):



Նկ. 78. Էլիպսարդի համասեռ բևեռացումը ($\mathbf{P}$)
և ապաբևեռացման համասեռ դաշտը ($\mathbf{E}_1$)

Եթե ուղղանկյուն կոորդինատային համակարգի առանցքներն ուղղենք էլիպսարդի գլխավոր առանցքներով, ապա ապաբևեռացման դաշտի բաղադրիչները կարելի է ներկայացնել

$$E_{1x} = -4\pi n_x P_x, \quad E_{1y} = -4\pi n_y P_y, \quad E_{1z} = -4\pi n_z P_z \quad (2.6)$$

արտահայտություններով, որտեղ n_x, n_y, n_z դրական մեծություններն ապաբևեռացման գործակիցներն են, որոնց արժեքները կախված են էլիպսարդի գլխավոր կիսաառանցքների հարաբերությունից, և որոնց գումարը՝

$$n_x + n_y + n_z = 1: \quad (2.7)$$

Պատման էլիպսարդների համար ապաբևեռացման գործակիցներն արտահայտվում են տարրական ֆունկցիաներով:

Էլիպսարդի կիսաառանցքների երկարությունները նշանակենք a -ով, b -ով և c -ով: 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 η -ն էլիպսարդի էքսցենտրիսիտետն է՝ $\eta = (1 - b^2/a^2)^{1/2}$: Գնդաձև մմուշի համար (2.7) առնչությունից և գնդի համաչափությունից հետևում է, որ $n_x = n_y = n_z = 1/3$: Եթե էլիպսարդը քիչ է տարբերվում գնդից՝ $b \rightarrow a$, $\eta \rightarrow 0$, ապա (2.8) և (2.9) բանաձևերից կստանանք՝

$$n_x = \frac{1}{3} - \frac{2}{15}\eta^2, \quad n_y = n_z = \frac{1}{3} + \frac{1}{15}\eta^2: \quad (2.10)$$

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 $\xi = [(a/c)^2 - 1]^{1/2}$: Եթե $c \rightarrow a$ ($\xi \rightarrow 0$), ապա

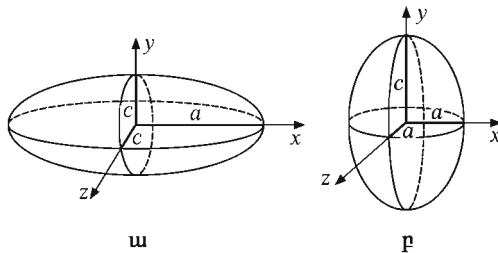
$$n_z = \frac{1}{3} + \frac{2}{15}\xi^2, \quad n_x = n_y = \frac{1}{3} - \frac{1}{15}\xi^2: \quad (2.12)$$

Եթե նմուշն ունի գլանի տեսք ($b/a \rightarrow 0$, $\eta \rightarrow 1$, նկ. 79. 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 նմուշն ունի սկավառակի տեսք ($\xi \approx a/c \rightarrow \infty$, նկ. 79. բ), ապա (2.11) բանաձևից կստանանք՝

$$n_z = 1 - \frac{\pi}{2\xi}, \quad n_x = n_y = \frac{\pi}{4\xi} \rightarrow 0: \quad (2.14)$$



Նկ. 79. ա. Ձգված էլիպսարդ, բ. սեղմված էլիպսարդ

Ինչպես հետևում է ապաբևեռացման գործակիցների սահմանային (2.13) արտահայտություններից, ապաբևեռացնող դաշտը կարելի է փոքրացնել մինչև զրո՝ օգտագործելով բարակ և երկար նմուշներ:

Երբեմն, եթե նմուշն ունի թիթեղի տեսք, ապաբևեռացնող դաշտի փոքրացման համար իրար են միացնում թիթեղի հանդիպակաց նիստերին նստեցված մետաղե էլեկտրոդները (այսպես կոչված՝ կարճ միացում):

Եթե E_0 արտաքին համասեռ դաշտն ուղղված է էլիպսարդաձև նմուշի գլխավոր առանցքով, ապա մակրոսկոպական դաշտի լարվածությունը՝

$$E = E_0 + E_1 = E_0 - 4\pi n P : \quad (2.15)$$

(1.10) արտահայտության համաձայն՝

$$P = \chi E = \chi(E_0 - 4\pi n P), \quad (2.16)$$

որտեղից հետևում է բևեռացման և արտաքին դաշտի լարվածության միջև կապը՝

$$P = \frac{\chi}{1 + 4\pi n \chi} E_0 : \quad (2.17)$$

(2.17) առնչությունից կարելի է եզրակացնել, որ տրված E_0 արտաքին դաշտում բևեռացման մեծությունը կախված է մնուշի ձևից՝ n մեծությունից: Եթե $4\pi n \chi \ll 1$, կարելի է ապաբևեռացնող դաշտի դերն անտեսել: Սակայն եթե $\chi \gg (4\pi n)^{-1}$, ապա (2.17) բանաձևից կստանանք՝

$$P \approx \frac{1}{4\pi n} E_0, \quad (2.18)$$

այսինքն՝ բևեռացման մեծությունը հիմնականում որոշվում է մնուշի ձևով:

§3. Տեղային դաշտ: Լորենցի դաշտ

Ինչպես պարզեցինք, արտաքին էլեկտրաստատիկ դաշտում տեղադրված մնուշում մակրոսկոպական դաշտի լարվածությունն այդ դաշտի E_0 և մնուշի բևեռացման հետևանքով առաջացած դաշտի E_1 լարվածությունների գումարն է՝ $E = E_0 + E_1$:

Այժմ պարզենք, թե ինչպիսի՞ն է էլեկտրաստատիկ դաշտի լարվածությունը որևէ մոլեկուլի (երկբևեռի) տեղում, այսինքն՝ ինչպիսի՞ դաշտ է անմիջականորեն ազդում այդ երկբևեռի վրա: Քանի որ երկբևեռը որոշակի կետում է, օրինակ՝ ցանցի հանգույցում, ապա նրա վրա ազդող դաշտը կտարբերվի մակրոսկոպական դաշտից, որը «ֆիզիկորեն անվերջ փոքր» ծավալով միջինացման արդյունք է: 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՝ $\bar{r} \gg a$ (այս պայմանը տեղի ունի մոտ զազերում), ապա

$E_{loc} \approx E \approx E_0$, այսինքն՝ տեղային դաշտը կարելի է նույնացնել մակրոսկոպական դաշտի հետ:

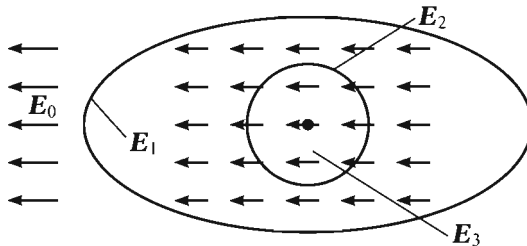
Այլ է իրադրությունը կոնդենսացված միջավայրերում՝ խիտ գազերում, հեղուկներում, պինդ մարմիններում: Իրոք, տրված մոլեկուլի վրա ազդող դաշտն էապես կախված է մյուս մոլեկուլների էլեկտրական դաշտերից, ուստի անհրաժեշտ է հաշվի առնել երկրևեռների էլեկտրաստատիկ փոխազդեցությունը: Այս փոխազդեցության հաշվառման հանրահայտ մեթոդն առաջարկել է Հ. Լորենցը:

Ընտրենք որևէ մոլեկուլ և որոշենք նրա վրա ազդող դաշտի լարվածությունը: Այն արտաքին E_0 դաշտի և նմուշի բոլոր մոլեկուլների երկրևեռային մոմենտների ստեղծած դաշտերի լարվածությունների գումարն է՝

$$E_{loc} = E_0 + E_{dip} = E_0 + \sum_i \frac{3(\mathbf{p}_i \mathbf{r}_i) \mathbf{r}_i - \mathbf{p}_i r_i^2}{r_i^5}, \quad (3.1)$$

որտեղ $\mathbf{p}_i$ -ն i -րդ հանգույցում տեղադրված երկրևեռային մոմենտն է:

E_{dip} դաշտի լարվածությունը սովորաբար հարմար է ներկայացնել երեք գումարելիների տեսքով:



Նկ. 80. Բևեռացված էլիպսարդում առաջացող դաշտերը

Այդ նպատակով նմուշում մտովի առանձնացնենք մի գնդաձև խոռոչ, որի կենտրոնն ընտրված մոլեկուլն է (նկ. 80): Խոռոչի R շառավիղը շատ մեծ է միջմոլեկուլային հեռավորությունից (ցանցի a հաստատունից), սակայն շատ փոքր է մակրոսկոպական հեռավորությունների համեմատությամբ («ֆիզիկորեն անվերջ փոքր» գնդոլորտ): Այն երկրևեռները, որոնց հեռավորությունները գնդոլորտի կենտրոնից գերազանցում են $10a \approx 50 \text{ \AA}$ -ը, E_{dip} -ում տալիս են զործնականում անընդհատորեն փոփոխվող ներդրում, որը,

(2.3) բանաձևի համաձայն, կարելի է ներկայացնել մնուշի արտաքին S_1 մակերևութով բաշխված լիցքերի ստեղծած (ապարենոացման) դաշտի և երևակայական գնդոլորտի S_2 ներքին մակերևութով բաշխված լիցքերի ստեղծած E_2 դաշտի (ընդունված է վերջինիս «Լորենցի դաշտ» անվանումը) գումարի տեսքով: E_{dip} -ում վերջին E_3 ներդրումը տալիս են խոռոչում պարունակվող մոլեկուլները:

Այժմ որոշենք Լորենցի դաշտը E_2 -ը:

Գնդոլորտի կենտրոնում նրա dS տարրի σdS լիցքի ստեղծած դաշտի լարվածությունը՝

$$dE_s = \frac{\sigma dS}{R^2} = \sigma \sin \theta d\theta d\varphi = P \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi \quad (3.2)$$

և ուղղված է dS տարրը գնդի կենտրոնին միացնող ուղղով: Նրա պրոյեկցիան մակրոսկոպական դաշտի ուղղության վրա հավասար է $dE_s \cos \theta = P \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\varphi$: Գնդոլորտի մակերևութով բաշխված լիցքի ստեղծած դաշտի լարվածությունը գնդոլորտի կենտրոնում՝

$$E_2 = P \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\varphi = 2\pi P \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{4\pi}{3} P, \quad (3.3)$$

այսինքն՝ այն համասեռ է և ունի բևեռացման վեկտորի ուղղությունը:

Վերջապես, խոռոչում տեղադրված երկրակեռների ստեղծած E_3 դաշտն ուղղակիորեն կախված է բյուրեղի ատոմային կառուցվածքից: Որոշենք այդ դաշտը՝ ենթադրելով, որ բյուրեղն օժտված է խորանարդային համաչափությամբ: Դիցուք՝ բոլոր երկրակեռներն ուղղված են z առանցքով և ունեն p մեծություն: Այդ դեպքում գնդի կենտրոնում նրանց ստեղծած դաշտի լարվածության z բաղադրիչը՝

$$E_{3z} = p \sum_i \frac{3z_i^2 - r_i^2}{r_i^5} = p \sum_i \frac{2z_i^2 - x_i^2 - y_i^2}{r_i^5}. \quad (3.4)$$

Գումարումը կատարվում է ըստ գնդում տեղադրված բոլոր երկրակեռների՝ բացի նրանից, որի տեղում դաշտը որոշվում է: Խնդրի համաչափությունից (գնդաձև մնուշ, խորանարդային բյուրեղ) հետևում է, որ

$$\sum_i \frac{z_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{x_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{y_i^2}{r_i^5}, \quad (3.5)$$

ուստի $E_{3z} = 0$: Նույն ձևով կստանանք, որ $E_{3x} = E_{3y}$, այսինքն՝

$$\mathbf{E}_3 = 0 : \quad (3.6)$$

Կատարված մոտավորությունների շրջանակներում տեղային դաշտի լարվածության համար կստանանք հետևյալ վերջնական արտահայտությունը՝

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 + \mathbf{E}_3 = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \frac{4\pi}{3} \mathbf{P} : \quad (3.7)$$

Մասնավորապես, դիէլեկտրական գնդի ապաքսեռացնող դաշտի լարվածությունը՝ $\mathbf{E}_1 = -4\pi\mathbf{P}/3$, ուստի (3.7) բանաձևից հետևում է, որ տեղային դաշտի լարվածությունը հավասար է արտաքին լիցքերի ստեղծած դաշտի լարվածությանը և էապես տարբերվում է մակրոսկոպական $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 - 4\pi\mathbf{P}/3$ դաշտից:

Օգտագործելով $\mathbf{P}$ և $\mathbf{E}$ վեկտորների միջև

$$\mathbf{P} = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi} \mathbf{E} \quad (3.8)$$

կապը՝ (3.7) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$\mathbf{E}_{loc} = \left(1 + \frac{4\pi}{3} \frac{\varepsilon - 1}{4\pi} \right) \mathbf{E} = \frac{\varepsilon + 2}{3} \mathbf{E} \quad (3.9)$$

տեսքով: Քանի որ $\varepsilon \geq 1$, ապա $|\mathbf{E}_{loc}| \geq |\mathbf{E}|$:

§4. Բևեռացվելիության տեսությունը

Էլեկտրական դաշտում ատոմը (մոլեկուլը) դաշտի ազդեցությամբ ձեռք է բերում զրոյից տարբեր երկբևեռային մոմենտ: Բնական է ենթադրել, որ այն համեմատական է մոլեկուլի վրա անմիջականորեն ազդող տեղային դաշտի լարվածությանը՝

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \alpha \mathbf{E}_{loc}, \quad (4.1)$$

որտեղ α -ն բևեռացվելիության գործակիցն է: Նկատի ունենալով բևեռացման $\mathbf{P}$ վեկտորի (1.6) սահմանումը՝ (4.1) առնչությունից կստանանք՝

$$\mathbf{P} = N\langle \mathbf{p} \rangle = N\alpha \mathbf{E}_{loc} = N\alpha \left(\mathbf{E} + \frac{4\pi}{3} \mathbf{P} \right), \quad (4.2)$$

որտեղ N -ը երկբևեռների (մոլեկուլների) խտությունն է: Մյուս կողմից, օգտագործելով $\mathbf{P}$ և $\mathbf{E}$ վեկտորների միջև (1.10) կապը՝ (4.2) հավասարումից կստանանք ընկալունակության արտահայտությունը՝

$$\chi = \frac{N\alpha}{1 - \frac{4\pi}{3} N\alpha} : \quad (4.3)$$

Այս առնչությունը կապ է հաստատում մոլուխի մակրոսկոպական χ և միկրոսկոպական α բնութագրերի միջև: Եթե մոլուշը տարբեր նյութերի խառնուրդ է, ապա (4.3) առնչությունում $N\alpha$ արտադրյալն անհրաժեշտ է փոխարինել $N_j \alpha_j$ արտադրյալների գումարով, որտեղ α_j -ն j տեսակի մոլեկուլի բևեռացվելիությունն է, N_j -ն՝ այդպիսի մոլեկուլների թիվը միավոր ծավալում: (1.12) և (4.3) արտահայտություններից դիելեկտրական 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 $\sum_j N_j \alpha_j = 3/4\pi$, $\varepsilon \rightarrow \infty$ (այսպես կոչված՝ «բևեռացման աղետ»): Սա նշանակում է վերջավոր բևեռացում գրոյական արտաքին դաշտում:

(4.3) և (1.12) բանաձևերի օգնությամբ բևեռացվելիությունը կարելի է արտահայտել դիելեկտրական թափանցելիության միջոցով՝

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{4\pi N\alpha}{3} : \quad (4.5)$$

Այս բանաձևը հայտնի է որպես Կլաուզիուս-Մոսոտիի հավասարում: Քանի որ $N = (\rho/\mu) N_A$, որտեղ ρ -ն նյութի խտությունն է, μ -ն՝ մոլային զանգ-

վածը, ապա (4.5) հավասարումից հետևում է, որ $(\varepsilon - 1)/(\varepsilon + 2)$ մեծությունը համեմատական է նյութի խտությանը:

Բևեռացվելիությունն արտահայտենք նյութի միկրոսկոպական բնութագրերի միջոցով:

Հայտնի է ատոմների (մոլեկուլների) համակարգի բևեռացման առաջացման երկու մեխանիզմ՝

ա. *ատոմային բևեռացվելիություն*, երբ տեղային էլեկտրական դաշտի ազդեցությամբ փոխվում է մոլեկուլում լիցքի բաշխումը, որի հետևանքով մոլեկուլը ձեռք է բերում զրոյից տարբեր երկբևեռային մոմենտ,

բ. *կողմնորոշումային բևեռացում*, երբ տեղային էլեկտրական դաշտի ազդեցությամբ մոլեկուլների քառասյանորեն կողմնորոշված հաստատուն երկբևեռները ձեռք են բերում որոշակի ուղղորդվածություն:

1. Ծանոթանանք ատոմային բևեռացվելիության պարզագույն տեսությանը՝ օգտվելով առաձգականորեն կապված էլեկտրոնների մոդելից:

Հավասարակշռության դիրքից շեղված էլեկտրոնի վրա ազդում է քվազիառաձգական

$$\mathbf{F} = -m\omega_0^2 \mathbf{r} \quad (4.6)$$

ուժը, որտեղ m -ն էլեկտրոնի զանգվածն է, ω_0 -ն՝ սեփական հաճախությունը, $\mathbf{r}$ -ը՝ շեղումը հավասարակշռության դիրքից: Զվազիառաձգական ուժի և $\mathbf{E}$ լարվածությամբ էլեկտրական դաշտում էլեկտրոնի վրա ազդող $-e\mathbf{E}$ ուժի գումարը հավասարեցնելով զրոյի՝ կստանանք՝

$$\mathbf{r} = \frac{-e}{m\omega_0^2} \mathbf{E}, \quad (4.7)$$

հետևաբար՝ էլեկտրոնի $\mathbf{r}$ շեղումով պայմանավորված երկբևեռային մոմենտը՝

$$\mathbf{p} = -e\mathbf{r} = \frac{e^2}{m\omega_0^2} \mathbf{E} \equiv \alpha_1 \mathbf{E}, \quad (4.8)$$

իսկ բևեռացվելիությունը՝

$$\alpha_1 = \frac{e^2}{m\omega_0^2}: \quad (4.9)$$

Եթե ատոմում կա Z էլեկտրոն, որոնցից յուրաքանչյուրի համար քվազիառաձգական ուժը $-m\omega_j^2 \mathbf{r}$ է, 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, որոնք քվանտային ծագում ունեն:

Եթե արտաքին դաշտը (հետևաբար՝ մաս տեղայինը) ժամանակից կախված փոփոխվում է ω հաճախությամբ, ապա փոփոխական էլեկտրական դաշտի լարվածության և երկբևեռային մոմենտի միջև գծային կապն արտահայտում է դինամիկ բևեռացվելիության

$$\alpha_e(\omega) = \frac{e^2}{m} \sum_j \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2} \quad (4.11)$$

բանաձևը: Ատոմներում որոշ ω_j հաճախություններ պատկանում են սպեկտրի օպտիկական տիրույթին (օրինակ՝ սպեկտրի մանուշակագույն տիրույթի համար $\omega \approx 5 \cdot 10^{15}$ ռադ-վ⁻¹), ուստի եթե $\omega \ll \omega_j$, ապա կարելի է օգտվել ստատիկ բևեռացվելիության (4.10) բանաձևից:

Գնահատենք ստատիկ բևեռացվելիությունը՝ ենթադրելով, որ $\omega_0 \approx \omega$.

$$\alpha_e \sim \alpha_1 \sim \frac{e^2}{m\omega_0^2} \sim \frac{10^{-19}}{10^{-27} \cdot 10^{31}} \text{ սմ}^3 \approx 10^{-23} \text{ սմ}^3,$$

որն ատոմի ծավալի կարգի մեծություն է:

Այժմ պարզենք, թե ինչպես է մոլեկուլների ջերմային շարժումն ազդում դաշտի մակածած երկբևեռային մոմենտի մեծության վրա:

Գրենք ω_0 հաճախությամբ եռաչափ ներդաշնակ 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 երկրեւոյնների (տատանակների) համակարգը կարելի է նկարագրել դասական վիճակագրությամբ, մեկ մասնիկին բաժին ընկնող միջին երկրեւոյին մոմենտի համար կատանանք՝

$$\langle p \rangle = \langle p_z \rangle = e \frac{\int_{-\infty}^{\infty} z \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \left(\frac{m\omega_0^2}{2} z^2 - ezE \right) \right\} dz}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \left(\frac{m\omega_0^2}{2} z^2 - ezE \right) \right\} dz} :$$

Այս արտահայտությունը հարմար է ներկայացնել

$$\langle p \rangle = -e \frac{\partial}{\partial v} \ln \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma z^2 + v z} dz \quad (4.13)$$

տեսքով, որտեղ կատարված են հետևյալ նշանակումները՝

$$v \equiv \frac{eE}{k_B T}, \quad \gamma = \frac{m\omega_0^2}{2k_B T} : \quad (4.14)$$

(4.13) բանաձևում ենթադրարիթմական արտահայտությունը ներկայացնելով Պուասոնի ինտեգրալի տեսքով (Հավելված 2)՝ կատանանք՝

$$\langle p \rangle = -e \frac{\partial}{\partial v} \ln \left(e^{-v^2/4\gamma} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \right) = \frac{ev}{2\lambda} = \frac{e^2 E}{m\omega_0^2} = \alpha_1 E, \quad (4.15)$$

որը նույնությամբ համընկնում է (4.8) արտահայտության հետ:

Այսպիսով՝ ատոմական բևեռացվելիության (4.9) բանաձևը, հետևաբար՝ նաև (4.10) առնչությունը ճիշտ են նաև ջերմային շարժման հաշվառման դեպքում:

2. Ծանոթանանք կողմնորոշումային բևեռացման տեսության հետ:

Դիցուք՝ նյութը կազմող մոլեկուլներն ունեն $\mathbf{p}_0$ երկրեւոյին մոմենտ, որը կարող է կողմնորոշված լինել կամայական ուղղությամբ: Եթե արտաքին էլեկտրական դաշտը բացակայում է, ապա ջերմային շարժման հետևանքով երկրեւոյին մոմենտներն ունեն պատահական ուղղություններ, այնպես որ համակարգի արդյունաբար երկրեւոյին մոմենտը զրո է:

Եթե կիրառված է էլեկտրական դաշտ, ապա երկրեւոյինը ձգտում են կողմնորոշվել դաշտի ուղղությամբ, քանի որ այն համապատասխանում է

փոքրագույն էներգիայով վիճակին: Կողմնորոշման հետևանքով համակարգը ձեռք է բերում զրոյից տարբեր երկբևեռային մոմենտ: Որոշենք այն:

Էլեկտրական դաշտում $\mathbf{p}_0$ երկբևեռային մոմենտի պոտենցիալ էներգիան՝

$$U = -\mathbf{p}_0 \mathbf{E} = -p_0 E \cos \theta, \quad (4.16)$$

որտեղ θ -ն $\mathbf{p}_0$ երկբևեռի կազմած անկյունն է դաշտի ուղղության հետ: Մեկ մոլեկուլին բաժին ընկնող միջին երկբևեռային մոմենտը՝

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{\int d\Omega p_0 \cos \theta \exp(-U/k_B T)}{\int d\Omega \exp(-U/k_B T)} = \\ &= p_0 \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \cos \theta \exp\left(\frac{p_0 E}{k_B T} \cos \theta\right)}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \exp\left(\frac{p_0 E}{k_B T} \cos \theta\right)}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

որտեղ $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ -ն մարմնային անկյունն է: (4.17) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$\langle p \rangle = p_0 \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_0^{\pi} e^{\beta \cos \theta} \sin \theta d\theta \quad (4.18)$$

ստացով, որտեղ

$$\beta = \frac{p_0 E}{k_B T}: \quad (4.19)$$

Ենթալոգարիթմական ինտեգրալը՝

$$\int_0^{\pi} e^{\beta \cos \theta} \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 e^{\beta x} dx = \frac{e^{\beta} - e^{-\beta}}{\beta} = \frac{2}{\beta} \operatorname{sh} \beta,$$

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 L անժրվենի ֆունկցիան է: Այսպիսով՝ E էլեկտրական դաշտի կողմնորոշիչ ազդեցության շնորհիվ մեկ մոլեկուլին բաժին ընկնող միջին երկրևեռային մոմենտը որոշվում է հետևյալ առնչությամբ՝

$$\langle p \rangle = p_0 L \left(\frac{p_0 E}{k_B T} \right): \quad (4.21)$$

Ուսումնասիրենք ստացված արտահայտությունը տարբեր սահմանային դեպքերում:

Եթե $\beta = p_0 E / k_B T \ll 1$ (թույլ դաշտեր), ապա, օգտվելով L անժրվենի ֆունկցիայի

$$L(\beta) = \frac{\beta}{3} - \frac{\beta^3}{45} + \dots \quad (4.22)$$

վերլուծությունից, միջին երկրևեռային մոմենտի համար կստանանք՝

$$\langle p \rangle \approx \frac{p_0^2 E}{3k_B T} \equiv \alpha_2 E, \quad (4.23)$$

ուստի կողմնորոշումային բևեռացվելիությունը՝

$$\alpha_2 \approx \frac{p_0^2}{3k_B T}: \quad (4.24)$$

Գնահատենք α_2 բևեռացվելիությունը: p_0 երկրևեռային մոմենտը 1 դեբայի ($1D$) կարգի մեծություն է. օրինակ՝ ջրի մոլեկուլի երկրևեռային մոմենտը՝ $p_0(\text{H}_2\text{O}) = 1,87D$ (մշեք, որ $1D \approx 3,33 \cdot 10^{-30}$ Կլ·մ): Սենյակային ջերմաստիճանում ($k_B T \approx 4 \cdot 10^{-21}$ Ջ) մինչև անգամ $E \approx 10^6$ Վ/մ լարվածությամբ դաշտում $\beta = p_0 E / k_B T \approx 10^{-3}$, իսկ $\alpha_2 \approx 10^{-23}$ սմ³, որը մոյն կարգի մեծություն է, ինչ որ էլեկտրոնային բևեռացվելիությունը:

Եթե $\beta = p_0 E / k_B T \gg 1$ (ուժեղ դաշտեր), ապա, նկատի ունենալով, որ

$$L(\beta) \approx 1 - \frac{1}{\beta} + O(e^{-2\beta}), \quad (4.25)$$

միջին երկրևեռային մոմենտի համար կստանանք՝

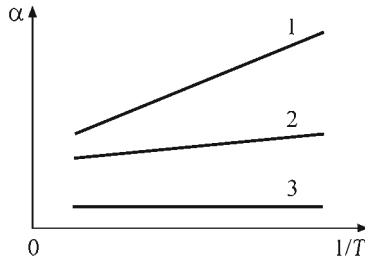
$$\langle p \rangle \approx p_0 : \quad (4.26)$$

Սա նշանակում է, որ երկրեւոյան մոմենտը հասել է հագեցման, այսինքն՝ այն ընդունում է հնարավոր ամենամեծ արժեքը, որն, իր հերթին, հետևանք է դաշտի կողմնորոշիչ ազդեցության, որը «ճնշում» է թույլ ջերմային շարժումը: Ընդհանուր դեպքում, երբ բևեռացվելիության երկու մեխանիզմներն էլ գործում են, ընդհանուր բևեռացվելիությունը տրվում 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-Դեբայի բանաձև:

Տարբեր ջերմաստիճանային կախումներ ունենալու հետևանքով էլեկտրոնային և կողմնորոշումային բևեռացվելիությունները փոքրում հեշտությամբ զատվում են իրարից: Նկ. 81-ում պատկերված է բևեռացվելիության կախումը $1/T$ մեծությունից բևեռային ($p_0 \neq 0$. 1 և 2 ուղիղներ) և ոչ բևեռային ($p_0 = 0$. 3 ուղիղ) մոլեկուլներից բաղկացած համակարգերի համար:



Նկ. 81. Բևեռացվելիության ջերմաստիճանային կախումը բևեռային (1, 2) և ոչ բևեռային (3) մոլեկուլների համակարգում

3. Ատոմային (էլեկտրոնային) բևեռացվելիությունն ուսումնասիրելիս ենթադրել ենք, որ ատոմի (մոլեկուլի) միջուկը մնում է անշարժ: Սակայն իրականում էլեկտրական դաշտի ազդեցությամբ տեղաշարժվում են նաև միջուկները: Այս երևույթը, որը հայտնի է շեղումային բևեռացվելիություն անվամբ, հարկ է հաշվի առնել հատկապես խոնային բյուրեղներում: Մյուս սահմանային դեպքը, երբ ատոմային բևեռացվելիությունը հաշվելիս խոնների տեղաշարժը հաշվի է առնվում, իսկ էլեկտրոնային թաղանթի դեֆոր-

մացիան (էլեկտրոնային բևեռացվելիությունը) անտեսվում է, հայտնի է որ-
պես «կոշտ» իոնների մոտավորություն:

Որոշենք շեղումային բևեռացվելիությունը «կոշտ» իոնների մոտավո-
րությամբ:

Դիցուք՝ իոնային բյուրեղի տարրական բջիջը բաղկացած է Ze և $-Ze$
լիցքերով երկու իոններից: Եթե իոնները «կոշտ» են, ապա տարրական բջջի
երկբևեռային մոմենտը՝

$$\mathbf{p} = Ze\mathbf{u}_+ - Ze\mathbf{u}_- \equiv Ze(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) \equiv Ze\mathbf{s}, \quad (4.28)$$

որտեղ $\mathbf{u}_+$ -ը ($\mathbf{u}_-$ -ը) դրական (բացասական) իոնի շեղումն է հավասարա-
կշռության դիրքից,

$$\mathbf{s} = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_- : \quad (4.29)$$

Եթե բյուրեղի դեֆորմացիան տարածության մեջ դանդաղ է փոփոխ-
վում, ապա դրական և բացասական իոնների շեղումների համար կարելի է
գրել հետևյալ շարժման հավասարումները՝

$$m_+ \ddot{\mathbf{u}}_+ = -\kappa(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + Ze\mathbf{E}_{loc}, \quad (4.30)$$

$$m_- \ddot{\mathbf{u}}_- = -\kappa(\mathbf{u}_- - \mathbf{u}_+) - Ze\mathbf{E}_{loc}, \quad (4.31)$$

որտեղ κ -ն քվազիառաձգական ուժի գործակիցն է: Անցնելով $\mathbf{s}$ մեծությանը՝
(4.30) և (4.31) հավասարումներից կստանանք.

$$\ddot{\mathbf{s}} = \frac{Ze}{M} \mathbf{E}_{loc} - \frac{\kappa}{M} \mathbf{s}, \quad (4.32)$$

որտեղ $M = m_+ m_- / (m_+ + m_-)$ մեծությունը բջջի բերված զանգվածն է:

Եթե տեղային դաշտի լարվածությունը ժամանակից կախված փոփոխ-
վում է $\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{F}_0 e^{-i\omega t}$ օրենքով, ապա (4.32) հավասարման լուծումը կարելի
է ներկայացնել $\mathbf{s} = \mathbf{s}_0 e^{-i\omega t}$ տեսքով, որտեղ

$$\mathbf{s}_0 = \frac{Ze\mathbf{F}_0}{M(\omega_i^2 - \omega^2)}, \quad (4.33)$$

$$\omega_i^2 = \frac{\kappa}{M} : \quad (4.34)$$

(4.28) և (4.33) բանաձևերից շեղումային բևեռացվելիության համար կստա-
նանք՝

$$\alpha_i = \frac{Z^2 e^2}{M(\omega_i^2 - \omega^2)} : \quad (4.35)$$

Այս բանաձևից հետևում է, որ շեղումային բևեռացվելիությունը նույն տեսքն ունի, ինչ որ էլեկտրոնային բևեռացվելիությունը: Սակայն ռեզոնանսային ω_i հաճախությունը համապատասխանում է ցանցի ω_D բնութագրական տատանումների հաճախությանը, այսինքն՝ այն $\omega_D \approx 10^{13}$ ռադ/վ կարգի մեծություն է, որն էլեկտրոնային ω_j հաճախություններից փոքր է շուրջ $10^2 - 10^3$ անգամ: Հետևաբար՝ շեղումային բևեռացվելիությունն էապես կախված կլինի արտաքին դաշտի ω հաճախությունից սպեկտրի ենթակարմիր և օպտիկական տիրույթներում: Մյուս կողմից, քանի որ իոնային M զանգվածը մոտ 10^4 անգամ գերազանցում է էլեկտրոնայինը, ապա α_i և α_e գործակիցները կարող են լինել նույն կարգի մեծություններ, որը վկայում է «կոշտ» իոնների մոտավորության սահմանափակ լինելու հանգամանքի մասին:

§5. Օպտիկական տատանումներն իոնային բյուրեղներում

Օպտիկական տատանումներն իոնային բյուրեղներում առանձնահատուկ դեր են խաղում, քանի որ իոնների շարժման հետևանքով ծագում են զգալի երկբևեռային մոմենտներ:

Ուսումնասիրենք օպտիկական տատանումները խորանարդային կառուցվածքով իոնային բյուրեղներում երկարալիքային սահմանում, երբ իոնների շարժումը բոլոր բջիջներում համաժամանակային (սինքրոն) է, որը հնարավորություն է տալիս դիտարկելու իոնների շարժումը միայն մեկ բջջում: Այսուհետև կենթադրենք, որ էլեկտրական դաշտի առկայությամբ իոնը ձեռք է բերում ինչպես էլեկտրոնային, այնպես էլ շեղումային բևեռացվելիություն (այսպես կոչված դեֆորմացվող իոնների մոտավորություն): Այս դեպքում բևեռացման վեկտորի համար, ի տարբերություն (4.28) արտահայտության, կարելի է գրել

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= N_0(Ze\mathbf{u}_+ + \alpha_+ \mathbf{E}_{loc}) + N_0(-Ze\mathbf{u}_- + \alpha_- \mathbf{E}_{loc}) = \\ &= N_0[Ze(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + (\alpha_+ + \alpha_-) \mathbf{E}_{loc}], \end{aligned} \quad (5.1)$$

որտեղ N_0 -ն միավոր ծավալում բջիջների թիվն է, $\alpha_{\pm}$ -ը՝ դրական և բացասական իոնների բևեռացվելիությունները: (5.1) բանաձևում փակագծերում առաջին գումարելին պայմանավորված է իոնների շեղումներով, իսկ երկրորդը՝ արտաքին դաշտում իոնների ձեռք բերած երկբևեռային մոմենտներով: Այսպես կոչված «կոշտ» իոնների մոտավորության շրջանակներում $\alpha_+ = \alpha_- = 0$

Անցնելով $\mathbf{E}_{loc}$ տեղային դաշտից մակրոսկոպական $\mathbf{E}$ դաշտին՝ (3.7), (5.1) և (4.32) բանաձևերից կատանանք՝

$$\mathbf{P} = \frac{N_0}{1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha} (Ze\mathbf{s} + \alpha\mathbf{E}), \quad (5.2)$$

$$M\ddot{\mathbf{s}} = -M\omega_0^2 \mathbf{s} + \frac{Ze}{1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha} \mathbf{E}, \quad (5.3)$$

որտեղ կատարված են հետևյալ նշանակումները՝

$$\omega_0^2 = \frac{\kappa}{M} - \frac{4\pi}{3M} \frac{N_0 Z^2 e^2}{1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha}, \quad (5.4)$$

$$\alpha = \alpha_+ + \alpha_- : \quad (5.5)$$

Հետագա հաշվարկները հեշտացնելու նպատակով ներմուծենք $\mathbf{s}$ վեկտորից հաստատուն գործակցով տարբերվող մի նոր մեծություն՝

$$\mathbf{w} = (MN_0)^{1/2} \mathbf{s}, \quad (5.6)$$

և (5.3) ու (5.2) հավասարումները ներկայացնենք հետևյալ տեսքով՝

$$\ddot{\mathbf{w}} = -\omega_0^2 \mathbf{w} + \frac{N_0 Ze}{(MN_0)^{1/2} \left(1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha\right)} \mathbf{E}, \quad (5.7)$$

$$\mathbf{P} = \frac{N_0 Ze}{(MN_0)^{1/2} \left(1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha\right)} \mathbf{w} + \frac{N_0 \alpha}{1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha} \mathbf{E} : \quad (5.8)$$

(5.7) և (5.8) հավասարումներն արտածվեցին միկրոսկոպական եղանակով, սակայն դրանք կարելի է գրել նաև երևութաբանորեն՝ հիմնվելով զուտ ֆիզիկական դատողությունների վրա:

Իրոք, շարժման

$$\ddot{\mathbf{w}} = b_{11}\mathbf{w} + b_{12}\mathbf{E} \quad (5.9)$$

հավասարումն արտահայտում է այն փաստը, որ իոնի արագացումը ($\ddot{\mathbf{w}} \sim \ddot{\mathbf{s}}$) պայմանավորված է ինչպես $b_{11}\mathbf{w}$ քվադրատաձգական ուժով, այնպես էլ էլեկտրական դաշտում իոնի վրա ազդող $b_{12}\mathbf{E}$ ուժով, իսկ

$$\mathbf{P} = b_{21}\mathbf{w} + b_{22}\mathbf{E} \quad (5.10)$$

հավասարման համաձայն՝ միավոր ծավալի երկբևեռային մոմենտն առաջացնում է ինչպես հավասարակշռության դիրքերից իոնների շեղումների ($b_{21}\mathbf{w}$), այնպես էլ իոնների բևեռացվելիության ($b_{22}\mathbf{E}$) հետևանքով:

Հարկ 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 դաշտերում իոնի վրա ազդող ուժերի հարաբերությունը՝

$$\left| \frac{f_L}{f_E} \right| \sim \frac{v}{c} \sim \frac{a\omega_D}{c} \approx 10^{-5} : \quad (5.11)$$

Վերը գրված հավասարումներում առկա $\mathbf{P}$ և $\mathbf{E}$ վեկտորները որոշվում են Մաքսվելի հավասարումներից՝

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \operatorname{div}(\mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}) = 0, \quad (5.12)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{H} = 0, \quad (5.13)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{H}}, \quad (5.14)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} (\dot{\mathbf{E}} + 4\pi\dot{\mathbf{P}}), \quad (5.15)$$

որոնցում արված են հետևյալ ենթադրությունները.

ա. իոնային բյուրեղները մեկուսիչներ են՝ նրանցում ազատ լիցքի խտությունը զրո է (տես (5.12) հավասարումը),

բ. իոնային բյուրեղներն օժտված չեն մագնիսական հատկություններով՝ համակարգի մագնիսական մոմենտը զրո է (տես (5.13) հավասարումը):

(5.9), (5.10) կամ որ մույնն է (5.7), (5.8) և (5.12) – (5.15) հավասարումների համակարգի լուծումները կփնտրենք

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &= \mathbf{w}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \mathbf{P} = \mathbf{P}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \\ \mathbf{E} &= \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \end{aligned} \quad (5.16)$$

տեսքով: (5.16) լուծումները տեղադրելով նշված համակարգում՝ կստանանք.

$$-\omega^2 \mathbf{w} = b_{11} \mathbf{w} + b_{12} \mathbf{E}, \quad (5.17)$$

$$\mathbf{P} = b_{21} \mathbf{w} + b_{22} \mathbf{E}, \quad (5.18)$$

$$\mathbf{k}(\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) = 0, \quad (5.19)$$

$$\mathbf{k}\mathbf{H} = 0, \quad (5.20)$$

$$[\mathbf{k}, \mathbf{E}] = \frac{\omega}{c} \mathbf{H}, \quad (5.21)$$

$$[\mathbf{k}, \mathbf{H}] = -\frac{\omega}{c} (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}): \quad (5.22)$$

(5.17) հավասարումից որոշված

$$\mathbf{w} = \frac{b_{12}}{-\omega^2 - b_{11}} \mathbf{E} \quad (5.23)$$

արտահայտությունը տեղադրելով (5.18) հավասարման մեջ՝ կստանանք.

$$\mathbf{P} = \left(\frac{b_{12}^2}{-\omega^2 - b_{11}} + b_{22} \right) \mathbf{E} \quad (5.24)$$

($b_{12} = b_{21}$, որը հետևում է (5.7) – (5.10) հավասարումներից):

Նկատի ունենալով $\mathbf{D}$ և $\mathbf{E}$ վեկտորների միջև կապը՝

$$\mathbf{D}(\omega) = \mathbf{E}(\omega) + 4\pi \mathbf{P}(\omega) = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\omega), \quad (5.25)$$

ինչպես նաև (5.24) առնչությունը՝ $\varepsilon(\omega)$ 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 տեղադրենք b_{11} , b_{12} և b_{22} գործակիցների արտահայտությունները, որոնք հեշտությամբ ստացվում են (5.7)–(5.10) հավասարումներից, ապա կստանանք $\varepsilon(\omega)$ ֆունկցիայի միկրոսկոպական արտահայտությունը: Սակայն ավելի նպատակահարմար է այն արտահայտել փորձում հեշտությամբ չափվող բնութագրերի միջոցով:

Այսպես, երբ $\omega \rightarrow \infty$,

$$\varepsilon(\infty) = 1 + 4\pi b_{22} \quad (5.27)$$

մեծությունը բարձրհաճախյին (օպտիկական) դիէլեկտրական հաստատունն է, որն արտահայտվում է $\omega \gg \omega_0$ հաճախությամբ էլեկտրամագնիսական ալիքների բեկման ցուցչի միջոցով: Մյուս կողմից, երբ $\omega \rightarrow 0$,

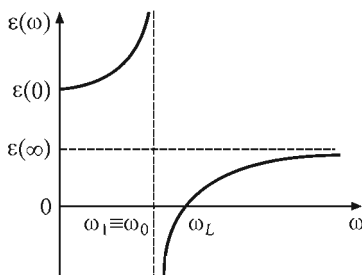
$$\varepsilon(0) = 1 + 4\pi b_{22} - \frac{4\pi b_{12}^2}{b_{11}} = \varepsilon(\infty) - \frac{4\pi b_{12}^2}{b_{11}}, \quad (5.28)$$

$$4\pi b_{12}^2 = b_{11}[\varepsilon(\infty) - \varepsilon(0)] = -\omega_0^2[\varepsilon(\infty) - \varepsilon(0)],$$

որտեղ $\varepsilon(0)$ մեծությունը ստատիկ դիէլեկտրական հաստատունն է: (5.27) և (5.28) բանաձևերի օգնությամբ դիէլեկտրական թափանցելիության (5.26) բանաձևը կընդունի հետևյալ տեսքը՝

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)}{1 - (\omega/\omega_0)^2}: \quad (5.29)$$

$\varepsilon(\omega)$ ֆունկցիայի գրաֆիկը պատկերված է նկ. 82-ում:



Նկ. 82. Դիէլեկտրական ֆունկցիայի հաճախային կախման գրաֆիկը

Աղյուսակ 21.

$\varepsilon(0)$, $\varepsilon(\infty)$ հաստատունները և լայնական ու երկայնական
հաճախություններն իոնային բյուրեղներում

Բյուրեղ	$\varepsilon(0)$	$\varepsilon(\infty)$	$\omega_T, 10^{13} \text{ռադ}\cdot\text{վ}^{-1}$	$\omega_L, 10^{13} \text{ռադ}\cdot\text{վ}^{-1}$
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

Աղյուսակ 21-ում տրված են $\varepsilon(0)$ և $\varepsilon(\infty)$ հաստատունների արժեքները մի քանի իոնային բյուրեղների համար:

(5.19) և (5.25) հավասարումների համաձայն՝

$$(\mathbf{kE})\varepsilon(\omega) = 0 : \quad (5.30)$$

Ուսումնասիրենք ստացված հավասարումը:

$$I \text{ դեպք. } \varepsilon(\omega) = 0, (\mathbf{kE}) \neq 0 : \quad (5.31)$$

Այս պայմանը համարժեք է նաև

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = 0 \quad (5.32)$$

հավասարմանը: Նկատի ունենալով վերջին հավասարումը՝ (5.22) և (5.20)

հավասարումներից կստանանք՝

$$\mathbf{H} = 0 : \quad (5.33)$$

Մյուս կողմից, (5.21) և (5.33) հավասարումների համաձայն՝

$$[\mathbf{k}, \mathbf{E}] = 0, \quad (5.34)$$

և քանի որ $\mathbf{E} \neq 0$, ապա $\mathbf{E} \parallel \mathbf{k}$: Եթե $\mathbf{E}$ վեկտորն ընտրված է, ապա $\boldsymbol{\omega}$, $\mathbf{P}$ վեկտորները որոշվում են (5.23) և (5.24) հավասարումներից և ուղղված են

նույն ուղղով, ինչ որ $\mathbf{E}$ վեկտորը: Այսպիսով, քննարկվող դեպքում բոլոր վեկտորները երկայնական են՝ $\mathbf{w} \parallel \mathbf{P} \parallel \mathbf{E} \parallel \mathbf{k}, \mathbf{H} = 0$, իսկ հաճախությունները որոշվում են (5.31) պայմանից: Նկատի ունենալով (5.29) հավասարումը՝ երկայնական տատանումների հաճախության համար կստանանք՝

$$\omega_L = \left[\frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)} \right]^{1/2} \omega_0, \quad (5.35)$$

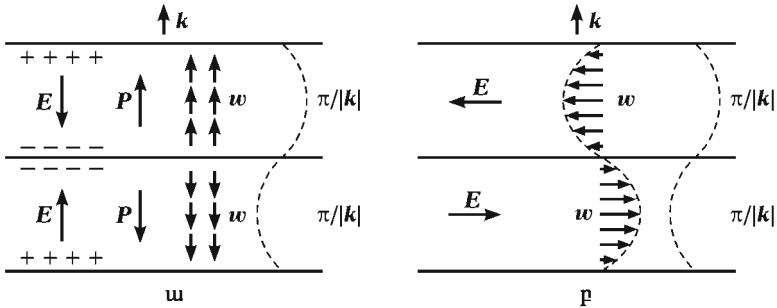
որը կախված չէ $\mathbf{k}$ ալիքային վեկտորից:

Նկ. 83. ա-ում պատկերված են երկայնական տատանումների դեպքում $\mathbf{k}, \mathbf{E}, \mathbf{P}$ և $\mathbf{w}$ վեկտորների ուղղությունները: Այսպիսի տատանումներն ընդունված է անվանել երկայնական օպտիկական կամ LO-տատանումներ:

II դեպք. $\varepsilon(\omega) \neq 0, (\mathbf{kE}) = 0$: (5.36)

Քանի որ $\mathbf{E} \neq 0$, ապա $\mathbf{k} \perp \mathbf{E}$, այսինքն՝ տվյալ դեպքում գործ ունենք լայնական տատանումների հետ: (5.21) հավասարման համաձայն՝ $\mathbf{k}, \mathbf{E}$ և $\mathbf{H}$ վեկտորները կազմում են փոխուղղահայաց վեկտորների աջակոդյան համակարգ, հետևաբար՝

$$kE = \frac{\omega}{c} H : \quad (5.37)$$



Նկ. 83. Օպտիկական տատանումներն իոնային բյուրեղներում. ա. երկայնական տատանումներ, բ. լայնական տատանումներ

(5.20) հավասարումը տեղի ունի, քանի որ $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$, 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

$$\frac{k^2 c^2}{\omega^2} = \varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} : \quad (5.39)$$

Հարկ է նշել, որ (5.39) առնչությունից որոշված հաճախությունները կախված են ալիքային $\mathbf{k}$ վեկտորի մեծությունից: Յուրաքանչյուր $\mathbf{k}$ վեկտորի համար կա երկու անկախ լուծում, որոնք համապատասխանում են $\mathbf{E}$ լարվածության երկու հնարավոր և $\mathbf{k}$ վեկտորին ուղղահայաց ընտրությունների: Այսպիսով՝ այս դեպքում բոլոր լուծումները փոխուղղահայաց են՝ $\mathbf{k}, (\mathbf{w} \parallel \mathbf{P} \parallel \mathbf{E} \parallel), \mathbf{H} = 0$: Նկ. 83. ք-ում պատկերված են $\mathbf{w}$, $\mathbf{P}$, $\mathbf{E}$ և $\mathbf{k}$ վեկտորները լայնական օպտիկական կամ TO-տատանումների դեպքում: Ինչպես հետևում է (5.9) հավասարումից, լայնական տատանումների դեպքում ($b_{11} = -\omega_0^2$)

$$\ddot{\mathbf{w}}_t = -\omega_0^2 \mathbf{w}_t, \quad (5.40)$$

որտեղ $\mathbf{w}_t$ վեկտորը $\mathbf{w}$ վեկտորի բաղադրիչն է $\mathbf{k}$ ալիքային վեկտորի ուղղությամբ՝ շեղման լայնական բաղադրիչը, հետևաբար լայնական տատանումների հաճախությունը՝ $\omega_T = \omega_0$:

(5.35) արտահայտությունը, գրված

$$\omega_L^2 = \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)} \omega_T^2 \quad (5.41)$$

տեսքով, հայտնի է որպես Լիդեյն-Մաքս-Թեյերի բանաձև և տեղի ունի մասնի խորանարդային բյուրեղների համար: Քանի որ $\varepsilon(0) > \varepsilon(\infty)$, ապա միշտ $\omega_L > \omega_T$: Ֆիզիկորեն սա հետևանք է այն բանի, որ լայնական տատանումների դեպքում վերադարձնող ուժը քվադրատաձգական ուժն է, իսկ երկայնական տատանումների դեպքում ծագում է լրացուցիչ վերադարձնող ուժ՝ պայմանավորված էլեկտրական դաշտով:

§6. Էլեկտրամագնիսական ալիքի փոխազդեցությունը ցանցային տատանումների հետ

Ավելի հանգամանորեն ուսումնասիրենք էլեկտրամագնիսական ալիքի և ցանցի օպտիկական տատանումների փոխազդեցության հետևանքով համակարգում տեղի ունեցող ֆիզիկական երևույթները:

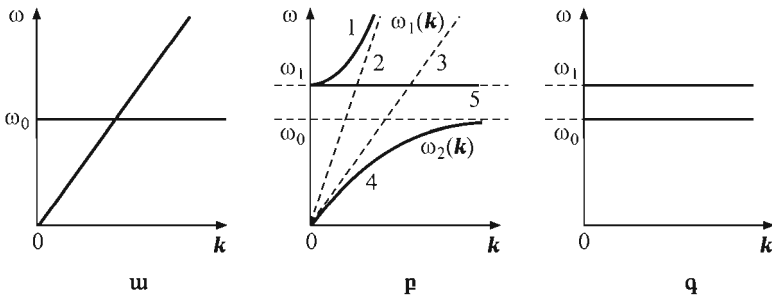
Նախ ենթադրենք, որ ցանցի օպտիկական տատանումները չեն փոխազդում էլեկտրամագնիսական տատանումների հետ՝ $e = 0$: Այս դեպքում Մաքսվելի հավասարումները բերվում են վակուումում էլեկտրամագնիսական ալիքների հավասարմանը, որից հետևում է վակուումում էլեկտրամագնիսական ալիքի դիսպերսային հավասարումը՝

$$\omega = ck, \quad (6.1)$$

իսկ շարժման (5.17) հավասարումից՝ ցանցի օպտիկական ճյուղի տատանումների դիսպերսային հավասարումը ($ka \ll 1$) դեպքում՝

$$\omega = \omega_0: \quad (6.2)$$

Նկ. 84-ում պատկերված են (6.1) և (6.2) հավասարումները: Նրանց համապատասխանող կորերը հատվում են: Հատման կետում տարբեր բնույթի՝ մեխանիկական և էլեկտրամագնիսական տատանումների հաճախությունները համընկնում են, այդ պատճառով անգամ թույլ փոխազդեցության առկայությամբ կոդիվի ռեզոնանս, որն էապես կազդի համակարգում ընթացող և՛ էլեկտրական, և՛ մեխանիկական պրոցեսների վրա:



Նկ. 84. Էլեկտրամագնիսական և մեխանիկական ալիքների փոխազդեցությունը. ա. փոխազդեցությունը բացակայում է ($e=0$), բ. փոքր ալիքային թվերի դեպքը, գ. մեծ ալիքային թվերի դեպքը

Իրոք, փոխազդեցության հաշվառմամբ ($e \neq 0$) (5.39) հավասարումից, որը կարելի է ներկայացնել

$$\omega^4 - \omega^2 \left[\omega_L^2 + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon(\infty)} \right] + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon(0)} \omega_L^2 = 0 \quad (6.3)$$

տեսքով, որոշվում են դիսպերսային հավասարման երկու ճյուղերը՝

$$\omega_{1,2}^2(k) = \frac{1}{2} \left[\omega_L^2 + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon(\infty)} \right] \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left[\omega_L^2 + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon(\infty)} \right]^2 - \frac{4k^2 c^2}{\varepsilon(0)} \omega_L^2} : \quad (6.4)$$

Ուսումնասիրենք այս արտահայտությունները երկարալիքային մոտավորության շրջանակներում ($ka \ll 1$), տարբեր սահմանային դեպքերում:

Փոքր ալիքային թվերի համար՝

$$k \ll \frac{\omega_L}{c} \sqrt{\varepsilon(0)},$$

(6.4) հավասարումներից ստացվում են հետևյալ արտահայտությունները՝

$$\omega_1(k) \approx \omega_L + \frac{k^2 c^2}{2\omega_L^2 \varepsilon(\infty)}, \quad (\text{նկ. 84. ք, կոր 1}), \quad (6.5)$$

$$\omega_2(k) \approx \frac{c}{\sqrt{\varepsilon(0)}} k, \quad (\text{նկ. 84. ք, կոր 3}): \quad (6.6)$$

Ակնհայտ է, որ (6.6) բանաձևը ներկայացնում է էլեկտրամագնիսական ալիքի դիսպերսային հավասարումը $\varepsilon(0)$ ստատիկ դիէլեկտրական թափանցելիությամբ միջավայրում: Նշանակում է՝ տվյալ դեպքում միջավայրը հասցնում է «համակերպվել» էլեկտրամագնիսական դաշտին և փոքրացնում է միայն ալիքի տարածման արագությունը՝ $c \rightarrow c / \sqrt{\varepsilon(0)}$ (նկ. 84. ք, կոր 3):

Մեծ ալիքային թվերի համար՝

$$k \gg \frac{\omega_L}{c} \sqrt{\varepsilon(0)},$$

(6.4) հավասարումներից ստանում ենք՝

$$\omega_1(k) \approx \frac{c}{\sqrt{\varepsilon(\infty)}} k, \quad (\text{նկ. 84. ք, կոր 2}), \quad (6.7)$$

$$\omega_2(k) \approx \omega_0 : \quad (6.8)$$

(6.7) բանաձևն էլեկտրամագնիսական ալիքի դիսպերսային հավասարումն է $\varepsilon(\infty)$ դիէլեկտրական թափանցելիությամբ միջավայրում: Այսպիսով՝ մեծ՝ $\omega \gg \omega_L$ հաճախությամբ էլեկտրամագնիսական ալիքները ցանցի իներտության հետևանքով չեն կարող նրան շարժման մեջ դնել, ուստի ցանցը չի խանգարում էլեկտրամագնիսական ալիքների տարածմանը:

Մեխանիկական և էլեկտրամագնիսական տատանումների փոխազդեցության հետևանքով հաճախությունների սպեկտրում առաջանում է արգելված տիրույթ: Իրոք, ինչպես հետևում է $\varepsilon(\omega)$ ֆունկցիայի

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \quad (6.9)$$

արտահայտությունից (տես նաև նկ. 82), $\Delta\omega = \omega_L - \omega_T$ տիրույթին պատկանող հաճախությունների համար $\varepsilon(\omega) < 0$, և, (5.39) բանաձևի համաձայն,

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon(\omega)} = i \frac{\omega}{c} \sqrt{|\varepsilon(\omega)|} \equiv i\delta, \quad \delta > 0 \quad (6.10)$$

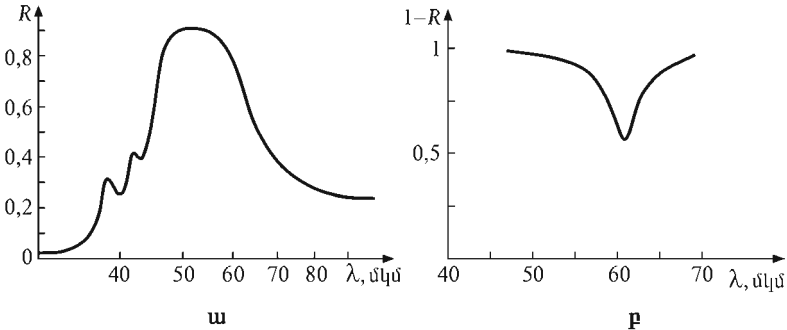
ալիքային թիվը կեղծ է, ուստի ալիքը մարում է $\exp(ikx) = \exp(-\delta x)$ օրենքով: Այսինքն՝ ալիքը չի կարող անցնել բյուրեղով, որի հաստությունը x ուղղությամբ ավելի մեծ է, քան δ^{-1} մեծությունը: Այլ կերպ ասած, $\Delta\omega$ տիրույթին պատկանող հաճախություններով էլեկտրամագնիսական ալիքներն անդրադառնում են բյուրեղի մակերևութային շերտից:

Այս երևույթն ընկած է «մնացորդային ճառագայթների» մեթոդի հիմքում, որի միջոցով ստացվում է գործնականորեն համասեռ ենթակարմիր ճառագայթում, երբ նախապես անհամասեռ փունջը բազմիցս անդրադառնում է բյուրեղային շերտերից, այնպես որ փնջում մնում է միայն ամենաուժեղ անդրադարձած հաճախությունների մի նեղ շերտ: Նկ. 85. ա-ում պատկերված է սենյակային ջերմաստիճաններում NaCl բյուրեղի անդրադարձման գործակցի՝ փորձում ստացված կախումն ալիքի երկարությունից:

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, (6.9) բանաձևի համաձայն (տես նաև նկ. 82)՝ բեկման ցուցիչն աճում է $\sqrt{\varepsilon(0)}$ -ից 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՝ ձգտելով $[\sqrt{\varepsilon(\infty)} - 1]^2 / [\sqrt{\varepsilon(\infty)} + 1]^2$ սահմանային արժեքին:



Նկ. 85. ա. NaCl հաստ բյուրեղի անդրադարձման գործակիցի կախումն ալիքի երկարությունից, բ. NaCl բյուրեղի 0,17 մկմ հաստությամբ թիթեղի բացթողման կորը

Այսպիսով՝ (6.9) դիսպերսային 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 $R < 1$: Փորձի և տեսության անհամապատասխանությունը պայմանավորված է ուսումնասիրված տեսության մոտավոր բնույթով, քանի որ նրանում օգտագործված շարժման հավասարման մեջ հաշվի են առնված շեղման վեկտորի միայն գծային անդամները, որն անբավարար է հատկապես $\omega \sim \omega_T$ հաճախության մոտակայքում: Վերջին հաշվով հենց ոչ գծային անդամներով է պայմանավորված $\omega \sim \omega_T$ տիրույթում փորձում դիտվող ուժեղ կլանումը:

Նկ. 85. բ-ում պատկերված է NaCl-ի $d = 0,17$ մկմ հաստությամբ բարակ թիթեղի բացթողման կորը՝ $(1 - R)$ մեծության կախումն ալիքի երկարությունից, երբ ճառագայթումն ընկնում է թիթեղի մակերևույթին ուղղահա-

յաց ուղղությամբ: Փորձում մինչև 1 մկմ հաստությամբ թիթեղներում բացթողման միմիմումի հաճախությունը գործնականորեն կախված չէ թիթեղի հաստությունից և հավասար է ω_T -ին ($\lambda_T = \lambda_0 \approx 61$ մկմ):

Այժմ քննարկենք այն սահմանային դեպքը, երբ էլեկտրամագնիսական ալիքի արագությունը $c \rightarrow \infty$ (մկ. 84. գ), այսինքն, երբ արհամարհվում է ալիքի «ուշացումը»: Ֆիզիկորեն սա նշանակում է, որ լույսի՝ ցանցի հաստատունն անցնելու ժամանակը՝ $\Delta t \sim a/c$, շատ փոքր է տատանումների $T = 2\pi/\omega_0$ պարբերությունից: Այս դեպքում, երբ $k \neq 0$, (5.39) հավասարումից հետևում է $\omega = \omega_0 \equiv \omega_T$ կայք, որը համընկնում է էլեկտրամագնիսական դաշտի հետ չփոխազդող օպտիկական տատանումների (5.41) դիսպերսային հավասարման հետ: Եթե $\omega \neq \omega_0$, ապա (5.39) հավասարումը տեղի ունի միայն $k = 0$ արժեքի համար:

Երկայնական ալիքները կախված չեն «ուշացումից», նրանք քվադիստատիկ են: Նկ. 84. բ և գ կորերի տարբերությունն ի հայտ է գալիս այնպիսի ալիքային թվերի համար, որոնց դեպքում

$$ak \leq a \frac{\omega_0}{c} \approx \frac{v}{c} \approx 10^{-5}, \quad (6.12)$$

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՝ $k \sim \omega_0/c \leq 10^3$ 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 բևեռացվելիության համար ստացված արտահայտություններում ենթադրվում է, որ առանց արտաքին դաշտի երկբևեռային մոմենտը կարող է կողմնորոշված լինել կամայական 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 երկբևեռային 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 երկբևեռային մոմենտը, այնքան ավելի հեշտությամբ և արագ է մոլեկուլը փոխում 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 ռելաքսացիայի ժամանակ, իսկ նրա հակադարձ մեծությունը՝ ռելաքսացիայի հաճախություն:

Եթե արտաքին դաշտի հաճախությունը մեծ է ռելաքսացիայի հաճախությունից, ապա համակարգում տեղի ունեցող փոփոխությունները դաշտի փոփոխությունից հետ են մնում:

Կողմնորոշումային պրոցեսներում ռելաքսացիայի հաճախությունն էապես կախված է ջերմաստիճանից և փոփոխվում է լայն տիրույթում:

Հեղուկներում ռելաքսացիայի ժամանակամիջոցը (τ) կապված է մածուցիկության η գործակցի հետ

$$\tau = \frac{4\pi\eta a^3}{k_B T} \quad (7.1)$$

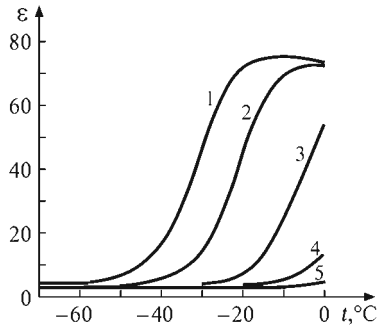
մոտավոր արտահայտությամբ, որտեղ a -ն գնդաձև մոլեկուլի շառավիղն է: Սենյակային ջերմաստիճանում ջրի համար ($\eta = 10^{-2}$ պուազ, $a \approx 10^{-8}$ սմ) $\tau \approx 10^{-11}$ վ, որը համընկնում է փորձի հետ:

Նկ. 86-ում պատկերված են սառույցի դիէլեկտրական թափանցելիության ջերմաստիճանային կախման կորերը հիմք տարբեր հաճախությունների համար:

Համաձայն Պ. Դեբայի՝ կողմնորոշումային բևեռացվելիության կախումն արտաքին $E_0 \exp(-i\omega t)$ դաշտի հաճախությունից որոշվում է

$$\alpha(\omega) = \frac{\alpha_0}{1 - i\omega\tau} \quad (7.2)$$

բանաձևով, որտեղ α_0 -ն ստատիկ կողմնորոշումային բևեռացվելիությունն է:



Նկ. 86. Սառույցի դիէլեկտրական թափանցելիության կախումը ջերմաստիճանից տարբեր հաճախությունների դեպքում
(1. 300գ, 2. 1 կգ, 3. 5 կգ, 4. 20 կգ, 5. 60 կգ)

Այժմ որոշենք դիէլեկտրական թափանցելիության արտահայտությունը ռելաքսացիոն պրոցեսների հաշվառմամբ:

Եթե բևեռացվելիությունը պայմանավորված է ϵ' էլեկտրոնային (ատոմային), ϵ'' կողմնորոշումային պրոցեսներով, ապա, նկատի ունենալով (7.2) արտահայտությունը, բևեռացման վեկտորի համար կարելի է գրել՝

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_d = \left(\chi_1 + \frac{\chi_2}{1 - i\omega\tau} \right) \mathbf{E}, \quad (7.3)$$

որտեղ χ_1 -ը էլեկտրոնային, իսկ χ_2 -ը կողմնորոշումային բևեռացվելիություններով պայմանավորված ստատիկ ընկալունակություններն են: Առաջին գումարելու մեջ $i\omega\tau$ անդամի բացակայությունը ֆիզիկորեն նշանակում է, որ էլեկտրոնային բևեռացվելիությամբ պայմանավորված բևեռացումը դաշտի փոփոխության հետ համաժամանակ է փոփոխվում, որը հետևանք է էլեկտրոնների փոքր իներտության: (7.3) բանաձևում $\mathbf{E}$ լարվածության գործակիցը կոմպլեքս ընկալունակությունն է, որը տեղադրելով (1.12) արտահայտության մեջ՝ կստանանք՝

$$\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi\chi_1 + \frac{4\pi\chi_2}{1 - i\omega\tau}: \quad (7.4)$$

χ_1 և χ_2 մեծություններն արտահայտենք $\epsilon(\omega)$ 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)–(7.6) 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 ստացվում են դիէլեկտրական թափանցելիության իրական (ε_1) և կեղծ (ε_2) մասերի արտահայտությունները՝

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad (7.8)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + (\omega\tau)^2} \omega\tau : \quad (7.9)$$

Նկ. 87. ա-ում պատկերված են $\varepsilon_1(\omega)$ և $\varepsilon_2(\omega)$ ֆունկցիաները: (7.8) և (7.9) բանաձևերի համաձայն՝ ցածրհաճախյին՝ $\omega\tau \ll 1$ և բարձրհաճախյին՝ $\omega\tau \gg 1$ տիրույթներում $\varepsilon_2(\omega) \approx 0$, այսինքն՝ $\varepsilon(\omega)$ ֆունկցիան իրական է:

Եթե $\varepsilon_2(\omega) \neq 0$, ապա միջավայրում առկա են էներգիական կորուստներ: Իրոք, ըստ Ջոուլ-Լենցի օրենքի՝ միավոր ժամանակում, միավոր ծավալում անջատված էներգիան (երբ դաշտը փոփոխվում է $e^{-i\omega t}$ օրենքով)՝

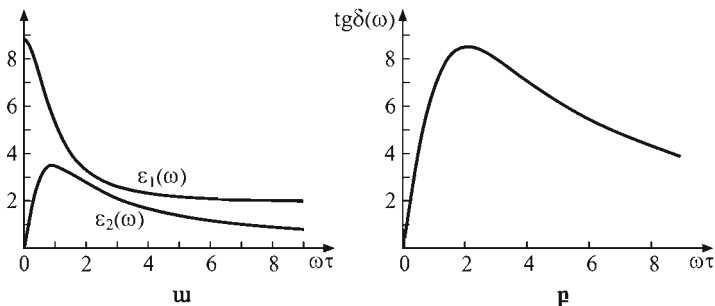
$$Q = \overline{\sigma E^2} = \frac{1}{2} \sigma E_0^2, \quad (7.10)$$

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 հետևում է էներգիական կորուստների արտահայտությունը՝

$$Q = \frac{\omega \varepsilon_2(\omega)}{8\pi} E_0^2 : \quad (7.12)$$



Նկ. 87. ա. LiF-ի դիէլեկտրական թափանցելիության իրական ($\epsilon_1(\omega)$) և կեղծ ($\epsilon_2(\omega)$) մասերի գրաֆիկները, բ. կորուստների անկյան տանգենսի գրաֆիկը

Միջավայրի հաղորդականությամբ պայմանավորված կորուստների (7.12) արտահայտությունն ընդունված է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$Q = \frac{\omega \epsilon_1(\omega)}{8\pi} E_0^2 \operatorname{tg} \delta, \quad (7.13)$$

որտեղ

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1(\omega)}, \quad (7.14)$$

իսկ δ մեծությունը կոչվում է կորուստների անկյուն (նկ. 87. բ)։

Ինչպես հետևում է (7.8) և (7.9) բանաձևերից, $\epsilon_1(\omega)$ և $\epsilon_2(\omega)$ մեծություններն իրարից անկախ չեն՝ $\epsilon_2(\omega) = [\epsilon_1(\omega) - \epsilon_\infty] \omega \tau$:

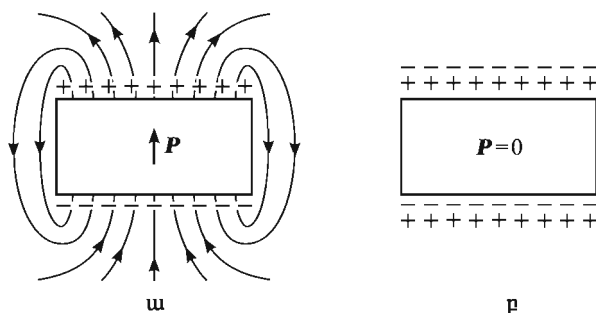
Ընդհանուր դեպքում, անկախ $\epsilon_1(\omega)$ և $\epsilon_2(\omega)$ ֆունկցիաների տեսքից, եթե հայտնի է $\epsilon_1(\omega) - \epsilon_\infty$ կամ $\epsilon_2(\omega)$ ֆունկցիաներից որևէ մեկը հաճախությունների $[0, \infty]$ տիրույթում, ապա մյուսը կարելի է որոշել այսպես կոչված դիսպերսային առնչությունների 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 միայն միջև համեմատականության, որն արտահայտված է (1.13) առնչությամբ։ Ամենաընդհանուր դեպքում այդ կապն արտահայտվում է

$$D_i = D_{0i} + \varepsilon_{ik} E_k \quad (8.1)$$

հավասարումով, որտեղ $\mathbf{D}_0$ -ն հաստատուն ($\mathbf{E}$ -ից չկախված) վեկտոր է, իսկ ε_{ik} մեծությունները դիէլեկտրական քափանցելիության թեմզորի տարրերն են (կրկնվող k ցուցիչով կատարվում է գումարում՝ $k=1,2,3$): $\mathbf{D}_0$ ազատ անդամը կարող է գրոյից տարբեր լինել միայն որոշակի համաչափությամբ օժտված բյուրեղներում: Եթե $\mathbf{D}_0 \neq 0$, ապա դիէլեկտրական մմուշն ինքնաբերաբար բեռնացված է, այսինքն՝ արտաքին դաշտի բացակայությամբ այն ունի գրոյից տարբեր բեռնացում (նկ. 88): Այսպիսի բյուրեղները կոչվում են պիրոէլեկտրիկներ:



Նկ. 88. ա. Պիրոէլեկտրիկի ինքնաբեր բեռնացումը, բ. մակերևութային լիցքի համակշռումն ազատ լիցքերով

Գործնականում ինքնաբեր բեռնացումը միշտ շատ փոքր է (ներմուլեկուլային դաշտերի համեմատությամբ), քանի որ ներքին էլեկտրական դաշտի ազդեցությամբ մմուշում առաջանում է թույլ էլեկտրական հոսանք: Այն գրոյից տարբեր է այնքան ժամանակ, քանի դեռ մակերևութի վրա առաջացող ազատ լիցքերը լրիվ չեն համակշռել բեռնային լիցքերը և ներքին դաշտը չեն դարձրել գրո: Նույն ձևով են գործում մաս օղից դիէլեկտրիկի մակերևութին անցնող իոնները (նկ. 88. բ):

Սակայն եթե բյուրեղի ջերմաստիճանն արագ փոխենք ΔT -ով, ապա ինքնաբեր P_0 բեռնացումը կփոխվի ΔP_0 -ով, և մմուշի մակերևութին կառաջանա

$$\sigma = \Delta P_0 = p_m \Delta T \equiv \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_X \Delta T \quad (8.2)$$

խտությամբ մակերևութային լիցք. p_m գործակիցը պիրոէլեկտրական հաստատունն է, իսկ X -ով նշանակված է այն բնութագրերի համախումբը, որոնք մնուշի ջերմաստիճանը փոփոխելիս պահվում են հաստատուն: Տուրմալինի բյուրեղի համար 20°C -ում $p_m \approx 1,3 \text{ CGSE}/\text{սմ}^2\cdot\text{Կ}$: Ինչպես ցույց են տալիս փորձերը, p_m գործակցի ջերմաստիճանային կախումը նման է բյուրեղի ջերմունակության և ջերմային ընդարձակման գործակիցների ջերմաստիճանային կախումներին:

Պիրոէլեկտրական երևույթը պայմանավորված է որոշ բարդ բյուրեղային կառուցվածքներում էլեկտրական լիցքերի ոչ համաչափ բաշխումով: Անգամ արտաքին ազդակների բացակայությամբ դրական և բացասական լիցքերի «ծանրության կենտրոնները» չեն համընկնում, այսինքն՝ բյուրեղն ինքնաբերաբար բևեռանում է:

Ինքնաբեր բևեռացման ջերմաստիճանային կախումը պայմանավորված է երկու պատճառով: Նախ՝ ջերմաստիճանի փոփոխությանը զուգընթաց փոփոխվում է ազատ բյուրեղի ծավալը, ուստի և մնուշի միավոր ծավալի երկբևեռային 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՝

$$P_0 = \alpha E, \quad (8.3)$$

որտեղ α գործակիցը կախված չէ E -ից՝ ի տարբերություն սեզնետաէլեկտրիկների, որոնցում $\alpha = \alpha(E)$ (տես §10):

Բյուրեղի համաչափության բոլոր ձևափոխությունների դեպքում նրա հատկությունները պետք է մնան անփոփոխ, ուստի 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 նյութերին բնորոշ են ֆազային անցումների բացակայությունը և ինքնաբեր 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

$$\Delta T = q \Delta E \equiv \left(\frac{\partial T}{\partial E} \right)_X \Delta E \quad (8.4)$$

առնչությամբ, որտեղ q մեծությունն էլեկտրակալորական երևույթի գործակիցն է: Այն կապված է պիրոէլեկտրական p_m հաստատունի հետ

$$q = -p_m T C^{-1} \quad (8.5)$$

բանաձևով, որտեղ C -ն բյուրեղի տեսակարար ջերմունակությունն է:

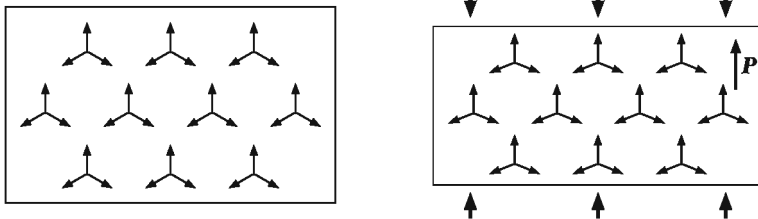
§9. Պիեզոէլեկտրականություն

Ինչպես հայտնի է, արտաքին էլեկտրական դաշտում բյուրեղում առաջանում են ներքին մեխանիկական լարումներ, որոնց ազդեցությամբ մուշի ծավալը փոփոխվում է: Ծավալի փոփոխությունը համեմատական է էլեկտրական դաշտի լարվածության քառակուսուն՝ $\Delta V \sim E^2$: Այս երևույթը հայտնի է էլեկտրաստրիկցիա անունով և դիտվում է բոլոր բյուրեղային ու ոչ բյուրեղային պինդ մարմիններում:

Սակայն մի շարք 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 երևույթն անվանում են պիեզոէլեկտրականություն. այն հայտնաբերել են Ժ. և Պ. Կյուրիները 1880 թ. քվարցի բյուրեղներում: Պիեզոէլեկտրական հատկությամբ օժտված բյուրեղները կոչվում են պիեզոէլեկտրիկներ (նկ. 89):

Եթե պիեզոէլեկտրիկի որոշակի ձևով կտրված թիթեղը ենթարկենք մեխանիկական լարման (ձգում, սեղմում կամ սահք), ապա նրա մակերևույթներին կծագեն էլեկտրական լիցքեր, որոնք պայմանավորված են թիթեղի բևեռացմամբ: Երևույթի ֆիզիկական էությունը բացատրվում է մեխանիկական լարումների ազդեցությամբ լիցքերի շեղման հետևանքով բյուրեղի տարրական բջջի բևեռացմամբ կամ առկա բևեռացման փոփոխությամբ (այսպես կոչված ուղիղ պիեզոէլեկտրություն):



Նկ. 89. Դեֆորմացիայի (սեղմման) հետևանքով բևեռացման առաջացումը պիեզոէլեկտրիկում

Եթե քիթերը տեղադրենք էլեկտրական դաշտում, ապա դաշտի ազդեցությամբ տարրական բջջում տեղի կունենա լիցքերի տեղաշարժ և, որպես հետևանք, նրանց միջև միջին հեռավորությունների փոփոխություն, այսինքն՝ դեֆորմացիա (հակադարձ պիեզոէլեկտրություն):

Պիեզոէլեկտրականության գոյության անհրաժեշտ պայմանը բյուրեղի համաչափության կենտրոնի բացակայությունն է:

Հարկ է իրարից տարբերել բնական պիեզոէլեկտրությոնը, որն ի հայտ է գալիս որոշ միաբյուրեղներում (քվարց, տուրմալին, ցինկի խաբուսակ և այլն) և արհեստական պիեզոէլեկտրությոնը, որն ստեղծվում է որոշ նյութերում (նաև ոչ բյուրեղային) պիեզոէլեկտրական տեքստուրա, այսինքն՝ բևեռացման անիզոտրոպություն ստեղծելու միջոցով: Վերջինս իրականացվում է էլեկտրական դաշտի կամ մեխանիկական հատուկ մշակման ճանապարհով: Արհեստական պիեզոէլեկտրական նյութերում (էլեկտրետներ, պիեզոխեցիներ) պիեզոէլեկտրական հատկություններն արտահայտված են առավել ցայտուն ձևով:

Դիէլեկտրիկների պիեզոէլեկտրական հատկություններն արտահայտվում են մեխանիկական լարումների σ_{ik} թեմզորի կամ դեֆորմացիայի u_{ik} թեմզորի տարրերի և, մյուս կողմից, բևեռացման $\mathbf{P}$ (կամ $\mathbf{D}$) և էլեկտրական դաշտի լարվածության $\mathbf{E}$ վեկտորի բաղադրիչների միջև գծային կապերով:

Պիեզոէլեկտրականության երևութաբանական տեսությունը հիմնվում է համակարգի ջերմադինամիկական վիճակի՝ արտաքին ազդակներից (մեխանիկական լարումներ, էլեկտրական դաշտեր) և ջերմաստիճանից կախված փոփոխությունների մասին պատկերացումների վրա: Ընդամին, պիեզոէլեկտրությի հավասարումներն ստացվում են բյուրեղի հավասարակշռության, այսինքն՝ համապատասխան ջերմադինամիկական պոտենցիալների մինիմումի պայմանից:

Եթե որպես անկախ փոփոխականներ ընտրենք ջերմաստիճանը, շեղման թեքողի u_{ik} և էլեկտրական դաշտի լարվածության վեկտորի E_i բաղադրիչները, ապա միավոր ծավալում պարունակվող նյութի քանակի ազատ էներգիայի դիֆերենցիալը կարելի է ներկայացնել

$$dF = -SdT + \sigma_{ik} du_{ik} - \frac{1}{4\pi} D_i dE_i \quad (9.1)$$

արտահայտությամբ, որտեղ S -ը էնտրոպիայի խտությունն է (կրկնվող ցուցիչներով ենթադրվում է գումարում, $i, k = 1, 2, 3$):

Երբեմն նպատակահարմար է որպես անկախ փոփոխականներ ընտրել լարման թեքողի σ_{ik} բաղադրիչները: Դրա համար (9.1) առնչությունն արտադրենք 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

$$\Phi = F - u_{ik}\sigma_{ik} \quad (9.3)$$

արտահայտությունը ջերմադինամիկական (Գիբսի) 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) բանաձևերից՝

$$d\Phi = -SdT - u_{ik}d\sigma_{ik} - \frac{1}{4\pi} D_i dE_i: \quad (9.4)$$

(9.4) հավասարումից ինդուկցիայի վեկտորի D_i և դեֆորմացիայի թեքողի u_{ik} բաղադրիչները կարելի է արտահայտել ջերմադինամիկական $\Phi(T, \sigma_{ik}, E_i)$ 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 ջերմադինամիկական 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 թեմզորն է, իսկ $d_{i,kl}$ -ը՝ պիեզոէլեկտրական հաստատունների թեմզորը, որը համաչափ է ըստ k և l ցուցիչների՝

$$d_{i,kl} = d_{i,lk} : \quad (9.8)$$

Վերջին հատկությունը հետևանք է լարումների թեմզորի $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$ համաչափության հատկության:

(9.5)–(9.7) արտահայտություններից հետևում 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) հավասարումն արտահայտում է լարման թեմզորի տրված արժեքների համար ինդուկցիայի վեկտորի բաղադրիչների կախումն էլեկտրական դաշտի լարվածությունից, իսկ (9.10) հավասարումը՝ դեֆորմացիայի թեմզորի բաղադրիչների կախումը լարման թեմզորի բաղադրիչներից տրված $\mathbf{E}$ 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 դեֆորմացիայի թեմզորում էլեկտրական դաշտով պայմանավորված ներդրումն է, որը նկարագրում է հակադարձ պիեզոէլեկտրական երևույթը: Այսպիսով՝ $\mathbf{u}$ ուղիղ, և՛ հակադարձ պիեզոէլեկտրական երևույթները բնութագրվում են $d_{i,kl}$ թեմզորի միջոցով:

Եթե որոշակի պայմաններում բյուրեղի դեֆորմացիան տեղի է ունենում տրված ինդուկցիայի դեպքում, կամ դիտարկվում է ինդուկցիայի վեկտորի բաղադրիչների կախումն էլեկտրական դաշտի լարվածությունից տրված դեֆորմացիայի դեպքում, ապա նշված մեծությունների միջև կապերում ε_{ik} և μ_{iklm} գործակիցների փոխարեն հանդես են գալիս մոր գործակիցներ, որոնք կարելի է արտահայտել ε_{ik} , μ_{iklm} և $d_{i,kl}$ գործակիցների միջոցով:

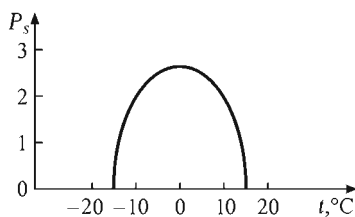
Պիեզոէլեկտրական նմուշում էլեկտրական դաշտը և լարումների դաշտը որոշվում են էլեկտրաստատիկայի և առաձգականության տեսության

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0 \quad (9.12)$$

հիմնական հավասարումների համատեղ լուծումից՝ օգտագործելով (9.9) ու (9.10) «նյութական» հավասարումները և համապատասխան եզրային պայմանները:

§10. Սեզնետալեկտրականություն

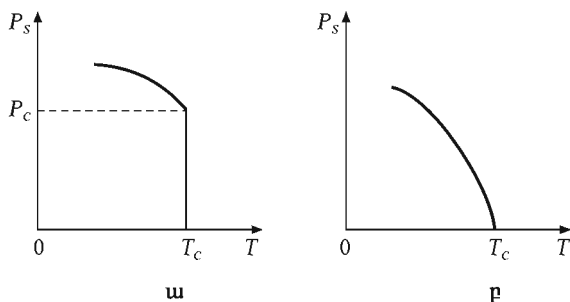
Որոշ դիէլեկտրական բյուրեղներ, որոնք դեֆորմացված չեն, ջերմաստիճանը փոփոխելիս որոշակի ջերմաստիճանում, որն ընդունված է անվանել Կյուրիի ջերմաստիճան՝ T_c , անցնում են նոր վիճակի, որը բնութագրվում է զրոյից տարբեր ինքնաբեր բևեռացման ի հայտ գալով: Այսինքն՝ T_c ջերմաստիճանում մոտ շրջաօղակում $\mathbf{P}_s = 0$ չբևեռացված, այսպես կոչված «պարալեկտրական» վիճակից անցնում է $\mathbf{P}_s \neq 0$ պիրոլեկտրական վիճակի: Այդպիսի բյուրեղները կոչվում են սեզնետալեկտրիկներ:^{*)} Մեծ թվով սեզնետալեկտրիկներում պիրոլեկտրական վիճակն իրականանում է $T < T_c$ տիրույթում (Ադյուսակ 22): Սակայն հայտնի են նաև այնպիսի սեզնետալեկտրիկներ, որոնք պիրոլեկտրական վիճակում են ջերմաստիճանների միայն որոշակի տիրույթում, որից դուրս, ինչպես ցածր, այնպես էլ բարձր ջերմաստիճաններում նրանք անցնում են պարալեկտրական վիճակի (օրինակ՝ սեզնետայան աղը, նկ. 90):



Նկ. 90. Սեզնետայան աղի բևեռացման՝ ջերմաստիճանից կախման գրաֆիկը.

P_s -ը տրված է մկԿլ/սմ² միավորով:

*) Արտասահմանյան զրականության մեջ ընդունված է ֆեռոլեկտրիկներ (ֆեռոլեկտրականություն) անվանումը, որը պայմանավորված է ֆեռոմագնիսական նյութերում ինքնաբեր մագնիսացման երևույթի հետ առկա նմանությամբ:



Նկ. 91. ա. I կարգի և բ. II կարգի ֆազային անցումները սեզնետաէլեկտրիկներում

Եթե պարաէլեկտրական վիճակից պիրոէլեկտրականին անցնելիս ինքնաբեր բևեռացումը փոխվում է թռիչքով (նկ. 91. ա), ապա տեղի ունի առաջին կարգի ֆազային անցում, իսկ եթե այն փոփոխվում է անընդհատ ձևով, ապա անցումը երկրորդ կարգի է (նկ. 91. բ):

Որոշ սեզնետաէլեկտրիկներ չունեն Կյուրիի ջերմաստիճան, քանի որ ջերմաստիճանը բարձրացնելիս հալվում են՝ ընդհուպ մինչև հալման ջերմաստիճանը մնալով սեզնետաէլեկտրիկ:

Սեզնետաէլեկտրական նյութերը կարելի է բաժանել երկու հիմնական խմբի՝ ա. կարգավորմամբ բնորոշվող և բ. շեղմամբ բնորոշվող:

Առաջին խմբի նմուշներում անցումը պայմանավորված է իոնների կարգավորմամբ, իսկ երկրորդ խմբի նմուշներում՝ միմյանց նկատմամբ իոնային ենթացանցների շեղմամբ:

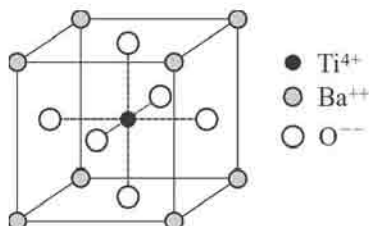
Աղյուսակ 22.

Որոշ սեզնետաէլեկտրիկների բնութագրեր

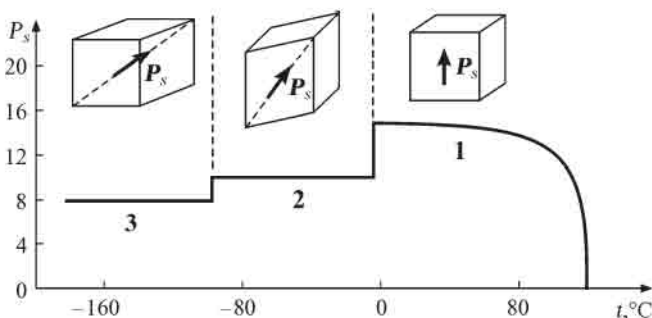
Բյուրեղ	T_c , Կ	P , մկԱ/սմ ²
Կալիումի դիհիդրոֆոսֆատ (KH_2PO_4)	123	4,75
Կալիումի դիդեյտերիումֆոսֆատ (KD_2PO_4)	213	4,83
Ռութիլիումի դիհիդրոֆոսֆատ (RbH_2PO_4)	147	5,6
Ռութիլիումի դիդեյտերիումֆոսֆատ (RbD_2PO_4)	218	—
Բարիումի տիտանատ (BaTiO_3)	393	26,0
Կապարի տիտանատ (PbTiO_3)	763	> 50
Կադմիումի տիտանատ (CdTiO_3)	55	—
Կալիումի նիոբատ (KNbO_3)	708	30,0
Սեզնետյան աղ ($\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{D}_2\text{O}$)	297 (max), 255 (min)	0,25

Առաջին խմբում են 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 գրեթե կկրկնապատկվի (օրինակ՝ KH_2PO_4 -ի $T_c \approx 123$ Կ, իսկ KD_2PO_4 -ի $T_c \approx 213$ Կ, Աղյուսակ 22):

Այսպիսի զգալի իզոտոպական շեղումը սովորաբար կապում են ջրածնի իոնի՝ մի քանի հավասարակշռական դիրքերի միջև քվանտային բունելային անցման հնարավորության հետ:



Նկ. 92. Բարիումի տիտանատի տարրական բջիջը չբևեռացված վիճակում



Նկ. 93. Բարիումի տիտանատի բյուրեղի ինքնաբեր բևեռացման կախումը ջերմաստիճանից. 1. քառակուսային, 2. միաթեթ, 3. եռանկյունային կառուցվածքների տիրույթները. P_s -ը տրված է մկԿ/սմ² միավորով:

Սեգնետաէլեկտրիկների երկրորդ խմբին են պատկանում պերովսկիտի (CaTiO_3) տիպի կառուցվածքով իոնային բյուրեղները (Նկ. 92): Այդ խմբին պատկանող բարիումի տիտանատի (BaTiO_3) բյուրեղն ունի խորանարդային կառուցվածք: Խորանարդի զագաթնելում բարիումի Ba^{++} իոններն են, միատերի կենտրոններում՝ ֆլուորիդի O^{--} իոնները, իսկ խորանարդի կենտրոնում՝ տիտանի Ti^{4+} իոնը: $T < T_c$ տիրույթում այս կառուցվածքը որոշ չափով դեֆոր-

մացվում է՝ Ba^{++} և Ti^{4+} իոնները տեղաշարժվում են O^- իոնների նկատմամբ, որի հետևանքով տարրական բջիջը ձեռք է բերում երկբևեռային մոմենտ: Ջերմաստիճանի հետագա նվազմանը զուգընթաց 0°C -ին և ապա -90°C -ին մոտ ջերմաստիճաններում BaTiO_3 բյուրեղը կրում է կառուցվածքային փոփոխություններ՝ քառակուսային կառուցվածքից անցնելով նախ միաբեք, ապա եռանկյուն համակարգին պատկանող կառուցվածքի, որոնց համապատասխանում են ինքնաբեր բևեռացման վեկտորի տարբեր ուղղություններ (նկ. 93):

§11. Սեգնետաէլեկտրականության երևութաբանական տեսությունը

Ծանոթանա՞նք սեգնետաէլեկտրականության երևութաբանական տեսությանը, որը ֆազային անցումների տեսության կոնկրետ կիրառության մի օրինակ է:

Օգտվենք Գիբսի G պոտենցիալի արտահայտությունից, որը, ի տարբերություն (9.3) բանաձևով տրվող $\Phi(T, \sigma_{ik}, E_i)$ ջերմադինամիկական պոտենցիալի, կախված է T , σ_{ik} և D_i անկախ փոփոխականներից՝

$$dG = -SdT - u_{ik}d\sigma_{ik} + \frac{1}{4\pi} E_i dD_i : \quad (11.1)$$

Պարզության համար կենթադրենք, որ $D_i = D$ ինդուկցիան ուղղված է այն բյուրեղագրական առանցքով, որով ուղղվում են ինքնաբեր բևեռացումը և կիրառվող էլեկտրական դաշտի լարվածությունը:

Կենթադրենք նաև, որ մեխանիկական լարումները բացակայում են, և չբևեռացած ֆազը կենտրոնահամաչափ է: Արված ենթադրությունների շրջանակներում Գիբսի պոտենցիալը կարելի է ներկայացնել բազմանդամի տեսքով՝

$$G = G(D, T, \sigma) \approx \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\alpha}{2} D^2 + \frac{\gamma}{4} D^4 + \frac{\delta}{6} D^6 \right), \quad (11.2)$$

որը հաշվարկվում է պարաէլեկտրական վիճակում ունեցած արժեքից: α , γ և δ գործակիցներն ընդհանուր դեպքում կախված են ջերմաստիճանից, ընդ որում՝ անհրաժեշտ է, որ $\delta > 0$, որպեսզի ապահովվի համակարգի վիճակի կայունությունը, երբ $D \rightarrow \infty$: (11.2) արտահայտության մեջ D -ի կենտ աստիճաններով անդամների բացակայությունն ապահովում է G պոտենցիալի անփոփոխությունը $D \rightarrow -D$ ձևափոխության նկատմամբ:

Սկզբում ուսումնասիրենք II կարգի ֆազային անցումները՝ $\gamma > 0$:

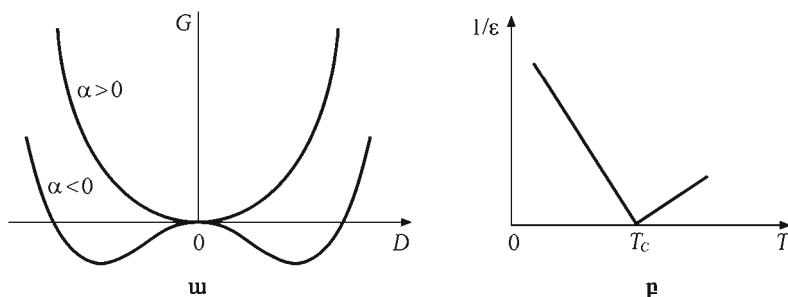
Եթե $\alpha > 0$, ապա G պոտենցիալն ունի միակ մինիմում $D = 0$ կետում, սակայն եթե $\alpha < 0$, ապա այն ընդունում է նվազագույն արժեք D -ի՝ զրոյից տարբեր արժեքների համար (նկ. 91. ա): Եթե $\alpha(T)$ գործակիցը, անընդհատ փոփոխվելով, ընդունում է (T_c -ում) զրոյական արժեք, ապա գործ ունենք Π կարգի ֆազային անցումների հետ: Անցման T_c կետի շրջակայքում $\alpha(T)$ գործակիցը ներկայացնենք

$$\alpha = \beta(T - T_c) \quad (11.3)$$

տեսքով, որտեղ β -ն դրական հաստատուն է:

Կապը դաշտի լարվածության և ինդուկցիայի միջև, (11.1) և (11.2) առնչությունների համաձայն, տրվում է հետևյալ հավասարումով՝

$$E = 4\pi \left(\frac{\partial G}{\partial D} \right)_T = \alpha(T)D + \gamma D^3 + \delta D^5: \quad (11.4)$$



Նկ. 94. Π կարգի ֆազային անցումներում.

ա. Գիրսի ջերմադինամիկական պոտենցիալի կախումն ինդուկցիայից,
բ. դիէլեկտրական թափանցելիության հակադարձ մեծության կախումը
ջերմաստիճանից

Եթե $T \geq T_c$, ապա փոքր D -երի համար, արհամարհելով γD^3 և δD^5 անդամները, (11.4) հավասարումից կստանանք՝

$$D = \frac{E}{\alpha(T)} = \frac{E}{\beta(T - T_c)} \equiv \varepsilon E, \quad \varepsilon = \frac{1}{\beta(T - T_c)}: \quad (11.5)$$

Մասնավորապես, եթե $E = 0$, ապա $D = 0$, և, հետևաբար, մոմշի բևեռացումը՝ $P = 0$ (նկ. 91. բ):

Եթե $T \leq T_c$ և $E = 0$, ապա, նկատի ունենալով D -ի փոքր լինելու հանգամանքը՝ (11.4) հավասարումից կստանանք՝

$$D_0 \approx \left(-\frac{\alpha}{\gamma} \right)^{1/2} = \left(\frac{\beta}{\gamma} \right)^{1/2} (T_c - T)^{1/2} : \quad (11.6)$$

(11.6) արտահայտությունից հետևում է, որ այս դեպքում մոլուշն օժտված է

$$P_s = \frac{1}{4\pi} D_0 = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\beta}{\gamma} \right)^{1/2} (T_c - T)^{1/2} \quad (11.7)$$

ինքնաբեր բևեռացմամբ:

Քանի որ D և E մեծությունների միջև (11.4) հավասարումով տրված կախումն ունի ոչ գծային բնույթ, ապա անհրաժեշտ է օգտվել դիֆերենցիալ դիֆերենցիալ քափանցելիության սահմանումից՝

$$\varepsilon = \frac{dD}{dE}, \quad (11.8)$$

որը $D(E)$ գծային ֆունկցիայի դեպքում համընկնում է (1.11) սահմանման հետ: Այսպիսով՝ $E \rightarrow 0$ դեպքում (11.4), (11.6) և (11.8) առնչություններից պիրոէլեկտրական վիճակում սեզմետաէլեկտրիկի դիֆերենցիալ քափանցելիության համար կստանանք՝

$$\varepsilon = \left(\frac{dD}{dE} \right)_{E=0} \approx \frac{1}{-\beta(T_c - T) + 3\gamma D_0^2} = \frac{1}{2\beta(T_c - T)} \quad (11.9)$$

արտահայտությունը, որտեղ հաշվի չի առնված $D_0^4 \sim (T_c - T)^2$ կարգի անդամը:

Ինչպես հետևում է (11.5) և (11.9) առնչություններից, դիֆերենցիալ քափանցելիության հակադարձ մեծությունը պիրոէլեկտրական վիճակում երկու անգամ մեծ է, քան պարաէլեկտրական վիճակում (նկ. 94. բ):

Նմուշի էնտրոպիան պարաէլեկտրական և պիրոէլեկտրական ֆազերում ($E = 0$ դեպքում) ընդունում է հետևյալ արժեքները՝

$$S = \frac{\beta^2}{2\gamma} (T - T_c), \text{ երբ } T < T_c \text{ և } S = 0, \text{ երբ } T > T_c : \quad (11.10)$$

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

$$\Delta C = \left(T \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{T \leq T_c} - \left(T \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{T \geq T_c} = \frac{\beta^2 T_c}{2\gamma} \quad (11.11)$$

վերջավոր բռիչք:

Այժմ անցնենք I կարգի ֆազային անցումների ուսումնասիրությանը սեզնետալեկտրական բյուրեղներում, երբ (11.2) արտահայտության մեջ γ գործակիցը բացասական է՝ $\gamma < 0$:

Այս դեպքում G պոտենցիալը կարող է ունենալ միևնույն նվազագույն արժեքն ինչպես $D = 0$, այնպես էլ $D = \pm D_s$ կետերում: Նորից կենթադրենք, որ $\alpha(T)$ գործակիցը կարելի է ներկայացնել

$$\alpha = \beta(T - T_0) \quad (11.12)$$

տեսքով, որտեղ T_0 -ն կոչվում է Կյուրի-Վեյսի ջերմաստիճան և հավասար չէ անցման T_c ջերմաստիճանին: Նշանակելով $\gamma' = -\gamma > 0$ (11.2) առնչությունից կստանանք՝

$$G = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{\beta(T - T_0)}{2} D^2 - \frac{\gamma'}{4} D^4 + \frac{\delta}{6} D^6 \right], \quad (11.13)$$

որից բխում է վիճակի դիէլեկտրական հավասարումը՝

$$E = 4\pi \left(\frac{\partial G}{\partial D} \right)_T = \beta(T - T_0)D - \gamma' D^3 + \delta D^5: \quad (11.14)$$

G պոտենցիալի՝ D ինդուկցիայից կախման կորերը տարբեր ջերմաստիճաններում պատկերված են նկ. 95. ա-ում: Ակնհայտ է, որ I կարգի ֆազային անցում ($E = 0$ դաշտում) տեղի է ունենում, երբ G -ն և նրա I կարգի ածանցյալը միաժամանակ դառնում են զրո, այսինքն, երբ

$$\frac{\beta}{2}(T - T_0) - \frac{\gamma'}{4} D_0^2 + \frac{\delta}{6} D_0^4 = 0, \quad (11.15)$$

$$\beta(T - T_0) - \gamma' D_0^2 + \delta D_0^4 = 0 \quad (11.16)$$

հավասարումները բավարարվում են միաժամանակ:

(11.15) և (11.16) հավասարումներից անմիջապես հետևում է կապը T_0 և T_c ջերմաստիճանների միջև՝

$$T_c = T_0 + \frac{3}{16} \frac{\gamma'^2}{\beta\delta}: \quad (11.17)$$

(11.15) հավասարման մեջ տեղադրելով $T = T_c$ և օգտվելով (11.17) առնչությունից՝ ինքնաբերական բևեռացման համար կստանանք հետևյալ արտահայտությունը՝

$$P_s = \frac{1}{4\pi} D_0, \quad \text{որտեղ} \quad D_0^2 = \frac{3\gamma'}{4\delta}, \quad \text{երբ} \quad T = T_c: \quad (11.18)$$

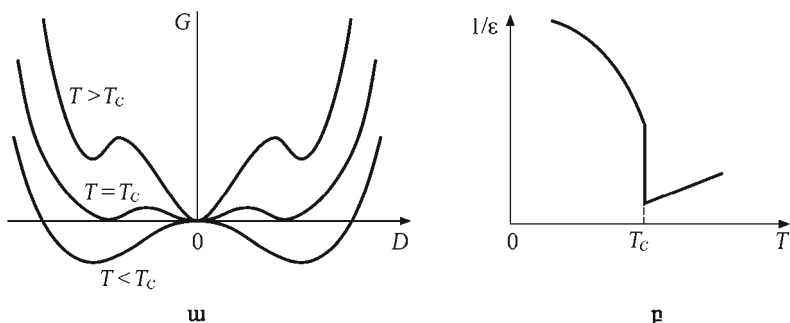
Հակադարձ դիէլեկտրական թափանցելիության համար $E = 0$ դեպքում (11.14) հավասարումից կստանանք՝

$$\varepsilon^{-1} = \left(\frac{\partial E}{\partial D} \right)_{E=0} = \beta(T - T_0) - 3\gamma' D_0^2 + 5\delta D_0^4: \quad (11.19)$$

Երբ $T > T_c$, $D_0 = 0$ և

$$\varepsilon^{-1} = \beta(T - T_0) \quad (11.20)$$

(նկ. 95. ք):



Նկ. 95. *1 կարգի ֆազային անցումներում ա. Գիբսի ջերմադինամիկական պոտենցիալի կախումն ինդուկցիայից, բ. դիէլեկտրական թափանցելիության հակադարձ մեծության կախումը ջերմաստիճանից*

Երբ $T \leq T_c$, $D_0(T)$ ֆունկցիան որոշելու համար անհրաժեշտ է լուծել (11.15) հավասարումը: Կատարենք նշանակում՝

$$\xi = T_c - T, \quad \xi \rightarrow 0, \quad (11.21)$$

ξ -ի գծային անդամների հաշվառումով (10.15) հավասարումից կստանանք՝

$$D_0^2 \approx D_0^2(T_c) + \frac{2\beta}{\gamma'} \xi: \quad (10.22)$$

Ստացված արտահայտությունը տեղադրելով (11.19) առնչության մեջ և նկատի ունենալով (11.17) բանաձևը՝ հակադարձ դիէլեկտրական թափանցելիության համար կստանանք՝

$$\frac{1}{\varepsilon} = \frac{3\gamma'^2}{4\delta} + 8\beta\xi = \frac{3\gamma'^2}{4\delta} + 8\beta(T_c - T), \quad T \rightarrow T_c^-, \quad (11.23)$$

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 (11.20) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$\frac{1}{\varepsilon} = \frac{3\gamma'^2}{16\delta} + \beta(T - T_c), \quad T \rightarrow T_c^+ \quad (11.24)$$

տեսքով, որից հետևում է, որ $T = T_c$ կետում

$$\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)_{T \rightarrow T_c^+} \equiv \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^+ = \frac{3}{16} \frac{\gamma'^2}{\delta}: \quad (11.25)$$

(11.23) արտահայտության համաձայն, երբ $T = T_c$,

$$\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)_{T \rightarrow T_c^-} \equiv \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^- = \frac{3}{4} \frac{\gamma'^2}{\delta} = 4 \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^+: \quad (11.26)$$

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

$$\frac{d}{dT} \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^- = -8\beta, \quad \frac{d}{dT} \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^+ = \beta \quad (11.27)$$

արժեքները (նկ. 95. բ):

Սեզոնետաէլեկտրիկի բևեռացման թռիչքաձև փոփոխությունը T_c կետում բերում է էնտրոպիայի թռիչքաձև փոփոխության՝

$$\Delta S = -\frac{\beta}{2} D_0^2, \quad (11.28)$$

հետևաբար՝ անցման թաքնված ջերմությունը՝

$$T_c \Delta S = \frac{\beta}{2} T_c D_s^2: \quad (11.29)$$

Ինչպես հետևում է ստացված արդյունքներից, անկախ ֆազային անցման կարգից՝ սեզոնետաէլեկտրիկի դիէլեկտրական թափանցելիությունը անցման T_c կետին մոտենալիս շատ արագ աճում է: Համաձայն բազմաթիվ փորձերի՝ այն կարող է ընդունել մինչև 10^5 կարգի արժեքներ: Դիէլեկտրա-

կան թափանցելիության այսպիսի վարքը հիշեցնում է «բևեռացման աղետը» (տես (4.4) բանաձևը): Մյուս կողմից, համաձայն Լիդեյն-Մաքս-Թելերի

$$\frac{\omega_T^2}{\omega_L^2} = \frac{\varepsilon(\infty)}{\varepsilon(0)} \quad (11.30)$$

բանաձևի, եթե ստատիկ դիէլեկտրական թափանցելիությունը ձգտում է անսահմանության (իրականում ընդունում է շատ 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: Նշանակում է, որ $T < T_c$ դեպքում բյուրեղն ինքնաբերաբար և անընդհատ դեֆորմացվում է, որի հետևանքով էլ առաջանում է բևեռացված վիճակ:

Սինչև այժմ քննարկումների ընթացքում ենթադրվել է, որ մոուլը, որի հետ գործ ունենք, համասեռ է և անվերջ մեծ: Իրական բյուրեղներին անցնելիս հարկավոր է նկատի ունենալ ինչպես մոուլի սահմանների, այնպես էլ նրանում տարբեր տիպի արատների առկայությունը:

Եթե մոուլն օժտված է զրոյից տարբեր բևեռացմամբ, ապա նրանից դուրս գոյություն ունի էլեկտրական ապաբևեռացնող դաշտ, որն օժտված է որոշակի էներգիայով: Էներգիական տեսակետից նպատակահարմար է, որ մոուլում առաջացման առանձին տիրույթներ (դոմեններ), որոնց բևեռացման վեկտորների գումարը լինի զրոյին մոտ, քանի որ այդ դեպքում ապաբևեռացնող դաշտը գործնականում կբացակայի: Դոմենների չափերը կախված են մոուլի չափերից, ինչպես նաև ջերմաստիճանից և $10^{-4} - 1$ սմ կարգի են: Տարբեր բևեռացմամբ դոմեններ միմյանցից բաժանված են այսպես կոչված դոմենային պատերով, որոնց հաստությունը ցանցի մի քանի հաստատունի կարգի է, և որոնք օժտված են էներգիայով: Նմուշը տվյալ պայմաններում դադարում է տրոհվել մոր դոմենների, եթե տրոհման հետևանքով ապաբևեռացման դաշտի էներգիայի փոքրացումը դառնում է մոտ դոմենային պատ ստեղծելու համար անհրաժեշտ էներգիայի կարգի (դոմենների առաջացման, նրանց չափերի որոշման, դոմենային պատերի շարժման, հիստերեզիսի և նման այլ հարցերն ավելի հանգամանորեն շարադրված են զրքի II մասում՝ մագնիսականությանը նվիրված բաժնում):

Հավելված 1. ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ՀԱՍՏԱՏՈՒՆՆԵՐԻ ԱՂՅՈՒՄԱԿ
 (լստ X-Ray data Booklet, Lawrence Berkeley National Laboratory,
 Second edition, January 2001 գործույթի)

Մեծություն	Նշանակում	Թվային արժեք և միավոր (CGSE)
Էլեկտրոնի զանգված	m	$9,10938188(72) \cdot 10^{-28}$ գ
Տարրական լիցք	e	$4,80320420^{-19} \cdot 10^{-10}$ CGSE _q
Պրոտոնի զանգված	M_p	$1,67262158(13) \cdot 10^{-24}$ գ
Լույսի արագություն	c	$2,99792458 \cdot 10^{10}$ սմ/վ
Պլանկի հաստատուն	h $\hbar = h/2\pi$	$6,62606876(52) \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ $1,054571596(82) \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ
Ավոգադրոյի հաստատուն	N_A	$6,02214199(47) \cdot 10^{23}$ մոլ ⁻¹
Բոլցմանի հաստատուն	k_B	$1,3806503(24) \cdot 10^{-16}$ էրգ/Կ
Նուրբ կառուցվածքի հաստատուն	$\alpha = e^2/\hbar c$	$1/137,03599976(50)$
Բորի շառավիղ	$a_B = \hbar^2/me^2$	$0,52917772083(19) \cdot 10^{-8}$ սմ
Ռիդբերգի հաստատուն	$Ry = me^4/2\hbar^2$	$13,60569172(53)$ (էՎ)
Բորի մագնետոն	$\mu = e\hbar/2mc$	$0,927400(87) \cdot 10^{-20}$ էրգ/Գս
1 էլեկտրոն-վոլտ	1 էՎ	$1,6021765 \cdot 10^{-12}$ էրգ
	1 էՎ/ h	$2,417989 \cdot 10^{14}$ Հց
	1 էՎ/ $\hbar c$	$8,065554 \cdot 10^3$ սմ ⁻¹
	1 էՎ/ k_B	$1,16045 \cdot 10^4$ Կ

Մաթեմատիկական հաստատուններ

$$\pi = 3,141592653589793, \quad e = 2,718281828459045$$

I. Ինտեգրալների հաշվարկ Պուասոնի ինտեգրալի միջոցով

ա) Դասընթացում հանդիպող մի շարք ինտեգրալներ կարելի է հեշտությամբ հաշվել՝ իմանալով 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 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՝

$$I_0^2(\alpha) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho e^{-\alpha \rho^2} d\rho = \pi \int_0^{\infty} e^{-\alpha t} dt = \frac{\pi}{\alpha}, \quad I_0(\alpha) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} : \quad (2.3)$$

(2.1) արտահայտության ենթաինտեգրալային ֆունկցիան գույժ 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՝

$$\begin{aligned}
 I_{2n}(\alpha) &= \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \\
 &= (-1)^n \frac{d^n I_0(\alpha)}{d\alpha^n} = (-1)^n \pi^{1/2} \frac{d^n}{d\alpha^n} (\alpha^{-1/2}) = \frac{(2n-1)!!}{(2\alpha)^n} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} :
 \end{aligned}
 \tag{2.6}$$

Կենտ ցուցչի դեպքում զրոյից տարբեր է հետևյալ ինտեգրալը՝

$$\begin{aligned}
 \tilde{I}_{2n+1}(\alpha) &= \int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx = (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \int_0^{\infty} x e^{-\alpha x^2} dx = \\
 &= \frac{1}{2} (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \int_0^{\infty} e^{-\alpha t} dt = \frac{1}{2} (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \frac{1}{\alpha} = \frac{n!}{2\alpha^{n+1}} :
 \end{aligned}
 \tag{2.7}$$

(2.5) և (2.7) ինտեգրալները կարելի է ներկայացնել մեկ բանաձևով՝

$$\tilde{I}_k(\alpha) = \int_0^{\infty} x^k e^{-\alpha x^2} dx, \quad (k = 0, 1, 2, \dots)
 \tag{2.8}$$

որը $t = \alpha x^2$ փոփոխականի փոխարինումից հետո արտահայտվում է Էյլերի Γ -ֆունկցիայի միջոցով՝

$$\tilde{I}_k(\alpha) = \frac{1}{2\alpha^{(k+1)/2}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right) :
 \tag{2.9}$$

$k = 0$ մասնավոր դեպքում, $\Gamma = \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$, և ստացվում է (2.4) բանաձևը:

զ) Հաշվենք հետևյալ ինտեգրալը՝

$$I_0(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 + \beta x} dx, \quad \alpha > 0, \quad \beta - \text{ն կամայական մեծություն է:}
 \tag{2.10}$$

Ենթաինտեգրալային էքսպոնենտի ցուցիչում ստեղծենք լրիվ քառակուսի և անցնենք ինտեգրման նոր փոփոխականի՝

$$I_0(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha \left(x - \frac{\beta}{2\alpha}\right)^2 + \frac{\beta^2}{4\alpha}} dx = \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha y^2} dy =$$

$$= \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) I_0(\alpha) = \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} : \quad (2.11)$$

$I_0(\alpha, \beta)$ ինտեգրալի օգնությամբ կարելի է հաշվել նաև

$$I_k(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 + \beta x} x^k dx, \quad (k=1, 2, \dots) \quad (2.12)$$

ինտեգրալը: Այսպես՝

$$I_k(\alpha, \beta) = \frac{d^k}{d\beta^k} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 + \beta x} x^k dx = \frac{d^k I_0(\alpha, \beta)}{d\beta^k} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \frac{d^k}{d\beta^k} \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) : \quad (2.13)$$

II. Ֆանցային գումարներ

Ըստ ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հանգույցների որոշ գումարների հաշվարկման համար դիտարկենք

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{l}) \quad (2.14)$$

պարբերական ֆունկցիան, որի միջոցով կարելի է ներկայացնել ցանցում զանգվածի, լիցքի կամ այլ մեծությունների բաշխումներ:

(2.14) ֆունկցիան ներկայացնենք Ֆուրիեի շարքի տեսքով՝

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \rho_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}, \quad (2.15)$$

որտեղ ֆուրիե-գործակիցը՝

$$\rho_{\mathbf{g}} = \frac{1}{V} \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{l}} \int_V \delta(\mathbf{r} - \mathbf{l}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{g}\mathbf{l}} = \frac{N}{V} = \frac{1}{v_0} \quad (2.16)$$

(2.14)–(2.16) բանաձևերից հետևում է ուղիղ և հակադարձ ցանցերով գումարների միջև նշանավոր կապը՝

$$\sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{l}) = \frac{1}{v_0} \sum_{\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} : \quad (2.17)$$

Այժմ (2.17) առնչությունը բազմապատկենք $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ արտադրիչով և ինտեգրենք բյուրեղի ծավալով՝

$$\sum_{\mathbf{g}} \int e^{i\mathbf{r}(\mathbf{g}-\mathbf{k})} d\mathbf{r} = v_0 \sum_{\mathbf{l}} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{l}) d\mathbf{r} = v_0 \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} : \quad (2.18)$$

Նկատի ունենալով I.7.26 առնչությունը՝ կստանանք.

$$\sum_{\mathbf{g}} \delta_{\mathbf{g},\mathbf{k}} = \frac{v_0}{V} \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} : \quad (2.19)$$

Չախ մասում գրված գումարը 0 է, եթե $\mathbf{k} \neq \mathbf{g}$ և հավասար է 1-ի, եթե $\mathbf{k} = \mathbf{g}$, որտեղ $\mathbf{g}$ -ն հակադարձ ցանցի կամայական վեկտոր է: Այսպիսով՝

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{g}} : \quad (2.20)$$

(2.20) առնչությունը կարելի է ստանալ մաս ուղղակի հաշվարկի միջոցով: Ըստ $\mathbf{l}$ վեկտորի գումարը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} = \sum_{l_1, l_2, l_3} e^{-il_1 \mathbf{k}\mathbf{a}_1 - il_2 \mathbf{k}\mathbf{a}_2 - il_3 \mathbf{k}\mathbf{a}_3} : \quad (2.21)$$

$\mathbf{k}$ վեկտորը փոփոխվում է հակադարձ տարածության մեջ, ուստի, օգտվելով III.7.7 բանաձևից, կստանանք՝

$$\mathbf{k}\mathbf{a}_1 = \frac{2\pi p_1}{N_1}, \quad \mathbf{k}\mathbf{a}_2 = \frac{2\pi p_2}{N_2}, \quad \mathbf{k}\mathbf{a}_3 = \frac{2\pi p_3}{N_3}, \quad (2.22)$$

որտեղ p_1 -ը p_2 -ը և p_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են:

(2.21) գումարը երեք մույնատիպ գումարների արտադրյալ է: Հաշվենք դրանցից մեկը՝

$$\begin{aligned} \sum_{-N_1/2 \leq l_1 < N_1/2} e^{-il_1 \frac{2\pi p_1}{N_1}} &= \frac{e^{i\pi p_1} - e^{-i\pi p_1}}{1 - e^{-i\frac{2\pi p_1}{N_1}}} = \frac{\sin \pi p_1}{\sin \frac{\pi p_1}{N_1}} e^{i\frac{\pi p_1}{N_1}} = \\ &= \begin{cases} 0, & \text{եթե } p_1 \neq 0 \\ N_1, & \text{եթե } p_1 = 0 \end{cases} \equiv N_1 \delta_{p_1,0} : \end{aligned} \quad (2.23)$$

Հետևաբար՝

$$\sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} = N_1 N_2 N_3 \delta_{p_1,0} \delta_{p_2,0} \delta_{p_3,0} = N \delta_{\mathbf{k},0} :$$

Եթե $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{g}$, ապա

$$\sum_l e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{g})l} = \sum_l e^{-i\mathbf{k}l} = N\delta_{\mathbf{k}-\mathbf{g},0} \equiv N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{g}}:$$

Հավելված 3. ՄԱԴԵԼՈՒՆԳԻ ՀԱՍՏԱՏՈՒՆԻ ՀԱՇՎԱՐԿՄԱՆ ՄԵԹՈԴՆԵՐԸ

1. Մադելոնգի մեթոդ

Բյուրեղը մոտով բաժանվում է էլեկտրաչեզոք ուղիղների և հարթությունների, որոնց ստեղծած պոտենցիալները, հեռավորությունից կախված, արագ նվազում են: Հետևաբար՝ դաշտը տվյալ 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 ստեղծած դաշտի պոտենցիալը: Այսպիսի համակարգում լիցքի բաշխումը տրվում է

$$\rho(x, y, z) = \delta(y)\delta(z) \left[\sum_n e\delta(x - na) - \frac{e}{a} \right] \equiv \delta(y)\delta(z)\rho(x) \quad (3.1)$$

ֆունկցիայով, որը բավարարում է էլեկտրաչեզոքության պայմանին՝

$$\int \rho(x, y, z) dx dy dz = \int_0^L \left[\sum_n e\delta(x - na) - \frac{e}{a} \right] dx = eN - \frac{e}{a}L = 0, \quad (3.2)$$

որտեղ N -ը տարրական (միաչափ) բջիջների թիվն է, իսկ L -ը՝ ցանցի երկարությունն x ուղղությամբ: (3.1) արտահայտության համաձայն՝ լիցքի խտությունը միաչափ պարբերական ֆունկցիա է, ուստի այն կարելի է ներկայացնել Ֆուրիեի միաչափ շարքի տեսքով, որի ֆուրիե-գործակիցները, I.7.11 բաժանակի համաձայն, տրվում են

$$\rho_g = \frac{1}{a} \int_0^a \rho(x) e^{-igx} dx = \frac{e}{a} (1 - \delta_{g,0}) \quad (3.3)$$

արտահայտությամբ, որտեղ $g = (2\pi/a)m$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots$: Հետևաբար (3.1) ֆունկցիան կարելի է ներկայացնել

$$\rho(x, y, z) = \delta(y)\delta(z) \frac{e}{a} \sum_{m \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{a} mx} \quad (3.4)$$

շարքի տեսքով: Օգտվելով Պուասոնի հավասարման լուծման ընդհանուր տեսքից և (3.4) արտահայտությունից՝ պոտենցիալի համար կստանանք՝

$$\varphi(\mathbf{R}) = \int \frac{\rho(\mathbf{R}')}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|} d\mathbf{R}' = \frac{e}{a} \sum_{m \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{a} xm} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i \frac{2\pi}{a} m(x'-x)}}{\sqrt{(x'-x)^2 + y^2 + z^2}} dx': \quad (3.5)$$

Վերջին ինտեգրալն արտահայտվում է Մակ-Ղոնալդի զրո կարգի ֆունկցիայի միջոցով, որի ինտեգրալային պատկերացումներից մեկն էլ

$$K_0(p) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipt}}{\sqrt{1+t^2}} dt, \quad p > 0 \quad (3.6)$$

արտահայտությունն է: (3.5) և (3.6) բանաձևերից հետևում է, որ

$$\varphi(\mathbf{R}) = \frac{2e}{a} \sum_{m \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{a} xm} K_0\left(\frac{2\pi}{a} |m| r\right), \quad (3.7)$$

որտեղ $r = \sqrt{y^2 + z^2}$ հեռավորությունն է «լարից»: Ինչպես հետևում է (3.7) բանաձևից և $K_0(p)$ -ի՝ $p \gg 1$ դեպքում ասիմպտոտական վարքից՝

$$K_0(p) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2p}} e^{-p} \left(1 - \frac{1}{8p} + \frac{1}{14p^2} + \dots\right), \quad (3.8)$$

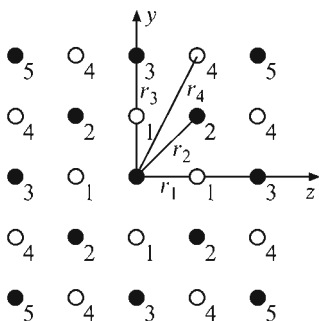
«լարից» հեռանալիս $\varphi(\mathbf{R})$ ֆունկցիան նվազում է էքսպոնենցիալորեն օրենքով:

Իրարից $a/2$ հեռավորությամբ և իրար հաջորդող դրական ու բացասական խոններով «լարի» պոտենցիալը հավասար է (3.7) բանաձևով տրվող երկու շարքերի գումարին, ընդ որում, եթե e լիցքը դրված է $x = 0$ կետում, ապա

$$\begin{aligned} \Phi(x, r) &= \varphi(x, r) + \varphi\left(x + \frac{a}{2}, r\right)_{e \rightarrow -e} = \\ &= \frac{2e}{a} \sum_{m \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{a} xm} (1 - e^{i\pi m}) K_0\left(\frac{2\pi}{a} |m| r\right): \end{aligned} \quad (3.9)$$

Միավորելով $\pm m$ անդամները և նկատի ունենալով, որ (3.9) արտահայտության մեջ ներդրում են տալիս միայն կենտ m -ով գումարելիները, կստանանք՝

$$\Phi(x, r) = \frac{8e}{a} \sum_{m=0}^{\infty} \cos \left[(2m+1) \frac{2\pi x}{a} \right] K_0 \left[\frac{2\pi}{a} (2m+1) r \right] : \quad (3.10)$$



Նկ. Հ1. Դրական և բացասական խոնների «լարերի» հատումները yz հարթության հեն

Պոտենցիալը կոորդինատների սկզբնակետում շրջապատի ուղիղների և 0 կետը պարունակող ուղղի ստեղծած պոտենցիալների գումարն է (նկ. Հ1, x առանցքն ուղղահայաց է գծագրի հարթությանը): «1» ուղղի (կա 4 այդպիսի ուղիղ) պոտենցիալը, (3.10) բանաձևի համաձայն, $\Phi(0, r_1)$ է ($r_1 = a/2$): «2» ուղղի (կա մույնպիսի 4 ուղիղ) պոտենցիալը $\Phi(a/2, r_2)$ է, ($r_2 = a/\sqrt{2}$), քանի որ «2» ուղիղն x առանցքի ուղղությամբ $\xi = a/2$ -ով շեղված է այն ուղղի նկատմամբ, որի համար գրված է (3.10) արտահայտությունը: Նման ձևով տրվում են «3», «4» և այլ ուղիղների պոտենցիալները:

Նպատակահարմար է հաշվարկները ներկայացնել աղյուսակի ձևով (Աղյուսակ Հ1): Հաշվարկներն էապես կիեշտանան, եթե (3.10) 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՝

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

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	$\frac{a}{2}$	$\approx 4 \cdot \frac{8e}{a} K_0(\pi)$	$4 \cdot \frac{8e}{a} \cdot 0,0295$
2	4	$\frac{a}{2}$	$\frac{a}{\sqrt{2}}$	$\approx -4 \cdot \frac{8e}{a} K_0(\pi\sqrt{2})$	$-4 \cdot \frac{8e}{a} \cdot 0,0068$
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 սկզբնակետով անցնող «0» ուղղի պոտենցիալը չի կա-
րելի հաշվել (3.10) 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 ան-
միջականորեն՝

$$\begin{aligned} \Phi_0(0) &= 2 \left(\frac{e}{a/2} - \frac{e}{2 \cdot a/2} + \frac{e}{3 \cdot a/2} - \frac{e}{4 \cdot a/2} + \dots \right) = \\ &= \frac{4e}{a} \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right) = \frac{4e}{a} \ln 2: \end{aligned} \quad (3.11)$$

Այս արտահայտության օգնությամբ կարելի է, ի դեպ, որոշել միաչափ իոնա-
յին բյուրեղի Մադելունգի հաստատումը՝

$$-e\Phi(0) = -\frac{e^2}{a/2} 2 \ln 2 \equiv -\frac{e^2}{R} A, \quad A = 2 \ln 2: \quad (3.12)$$

Դիտարկվող մոտավորության շրջանակներում 0, 1, 2, 3 և 4 ուղիղների
ստեղծած դաշտում $-e$ լիցքի էլեկտրաստատիկ էներգիան հավասար է Աղ-
յուսակ Հ1-ի վերջին սյունակում գրված ներդրումների գումարին՝ բազմա-
պատկած $(-e)$ -ով, այսինքն՝

$$u_{el} \equiv -A \frac{e^2}{R} = -e \cdot \frac{8e}{a} (0,3465 + 0,1180 - 0,0272 - 0,0036 + 0,0032) =$$

$$= -\frac{e^2}{a/2} 1,7476 : \quad (3.13)$$

Քանի որ $R = a/2$, ապա (3.13) արտահայտությունից կստանանք Մադելունգի հաստատումի համար հետևյալ արժեքը՝ $A = 1,7476$, որը շատ քիչ է տարբերվում $1,747565$ ճշգրիտ արժեքից:

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

2. 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 իոնային բյուրեղները կազմված են դրական և բացասական իոնային ցանցերից, լրիվ պոտենցիալը հաշվելիս տարանուն ցանցերի համասեռ բաշխված լիցքերն իրար համակշռում են, և արդյունքում մնում է դրական և բացասական իոնների ստեղծած դաշտը:

Ընտրված մոդելի շրջանակներում լիցքի խտությունը տրվում է հետևյալ պարբերական ֆունկցիայով՝

$$\rho(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{l}} e\delta(\mathbf{R} - \mathbf{l}) - \frac{e}{v_0}, \quad (3.14)$$

որտեղ v_0 -ն տարրական բջջի ծավալն է, գումարումը կատարվում է ըստ Բրավեի ցանցի հանգույցների: $\rho(\mathbf{R})$ ֆունկցիան կարելի է ներկայացնել Ֆուրիեի շարքի տեսքով, որի գործակիցները՝

$$\rho_{\mathbf{g}} = \frac{1}{v_0} \int_{v_0} \rho(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{R}} d\mathbf{R} = \frac{1}{v_0} (1 - \delta_{\mathbf{g},0}), \quad (3.15)$$

$\mathbf{g}$ -ն հակադարձ ցանցի կամայական վեկտոր է:

Բյուրեղի պարբերականության հետևանքով ցանցի $\varphi(\mathbf{R})$ պոտենցիալը նույնպես կարելի է ներկայացնել Ֆուրիեի շարքի տեսքով՝

$$\varphi(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{g}} \varphi_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{R}}, \quad (3.16)$$

որի $\varphi_{\mathbf{g}}$ գործակիցները կապված են $\rho_{\mathbf{g}}$ գործակիցների հետ

$$\varphi_{\mathbf{g}} = \frac{4\pi}{g^2} \rho_{\mathbf{g}} \quad (3.17)$$

առնչությամբ, որն անմիջականորեն բխում է Պուատրոնի հավասարումից: (3.15)–(3.17) բանաձևերից հետևում է պոտենցիալի

$$\varphi(\mathbf{R}) = \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{\mathbf{g} \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{i\mathbf{g}\mathbf{R}} \quad (3.18)$$

արտահայտությունը: Ստացված շարքը նույնքան վատ է զուգամիտում, որքան և կուլոնյան $1/|\mathbf{R}_i|$ անդամներով շարքը: Իրոք, եթե (3.18) բանաձևում մենք $|\mathbf{g}|$ -երի համար գումարից անցնենք ինտեգրալի, ապա $|\mathbf{g}|$ և $|\mathbf{g}| + |d\mathbf{g}|$ տիրույթում վիճակների թվի արտահայտության մեջ ծագող g^2 արտադրիչը կկրճատվի հայտարարի g^2 -ու հետ: Արդյունքում $\mathbf{g}$ վեկտորի մեծացման հետ $\exp(i\mathbf{g}\mathbf{R})$ արտադրիչը փոփոխում է նշանը, սակայն նրա մեծությունը չի փոքրանում, հետևաբար շարքը չի զուգամիտում:

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

$$\delta(\mathbf{R}) \rightarrow \varepsilon^3 \pi^{-3/2} \exp(-\varepsilon^2 R^2), \quad (3.19)$$

որտեղ ε պարամետրը որոշում է կորի լայնությունը, իսկ $\varepsilon^3 \pi^{-3/2}$ գործակիցն ապահովում է նորմավորումը: (3.14) բանաձևում կատարենք (3.19) փոխարինումը և որոշենք լիցքի բաշխման «նոր» $\rho^{\varepsilon}(\mathbf{R})$ ֆունկցիայի ֆորմե-գործակիցները՝

$$\rho_{\mathbf{g}}^{\varepsilon} = \frac{1}{v_0} \int_{v_0} \rho^{\varepsilon}(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{R}} d\mathbf{R}: \quad (3.20)$$

(3.14) և (3.19) բանաձևերի համաձայն՝

$$\rho^{\varepsilon}(\mathbf{R}) = \sum_i e \varepsilon^3 \pi^{-3/2} \exp[-\varepsilon^2 (\mathbf{R} - \mathbf{l})^2] - \frac{e}{v_0}: \quad (3.21)$$

(3.21) բաշխումը տեղադրելով (3.20) արտահայտության մեջ՝ կստանանք.

$$\rho_{\mathbf{g}}^{\varepsilon} = \frac{e\varepsilon^3}{v_0\pi^{3/2}} I_{\mathbf{g}}^{\varepsilon} - \frac{e}{v_0} \delta_{\mathbf{g},0}, \quad (3.22)$$

որտեղ

$$I_{\mathbf{g}}^{\varepsilon} = \sum_{\mathbf{l}} \int_{v_0} e^{-i\mathbf{g}\mathbf{R}-\varepsilon^2(\mathbf{R}-\mathbf{l})^2} d\mathbf{R} : \quad (3.23)$$

Չևափոխենք (3.23) ինտեգրալը՝ նկատի ունենալով, որ $\exp(i\mathbf{g}\mathbf{l})=1$, ինչպես նաև տարրական բջջի v_0 ծավալով ինտեգրումից անցնենք բյուրեղի $V(\rightarrow \infty)$ ծավալով ինտեգրալի՝

$$\begin{aligned} I_{\mathbf{g}}^{\varepsilon} &= \sum_{\mathbf{l}} \int_{v_0} e^{-i\mathbf{g}(\mathbf{R}-\mathbf{l})-\varepsilon^2(\mathbf{R}-\mathbf{l})^2} d\mathbf{R} = \int_{V(\rightarrow\infty)} e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}-\varepsilon^2r^2} d\mathbf{r} = \\ &= \int_{V(\rightarrow\infty)} e^{-\varepsilon^2\left(\mathbf{r}+i\frac{\mathbf{g}}{2\varepsilon^2}\right)-\frac{\mathbf{g}^2}{4\varepsilon^2}} d\mathbf{r} = e^{-\frac{\mathbf{g}^2}{4\varepsilon^2}} \int_{V(\rightarrow\infty)} e^{-\varepsilon^2r^2} d\mathbf{r} = \\ &= 4\pi e^{-\frac{\mathbf{g}^2}{4\varepsilon^2}} \int_0^{\infty} r^2 e^{-\varepsilon^2r^2} dr = 4\pi e^{-\frac{\mathbf{g}^2}{4\varepsilon^2}} \left[-\frac{d}{d\varepsilon^2} \frac{1}{2} I_0(\varepsilon^2) \right] = \pi^{3/2} \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\mathbf{g}^2}{4\varepsilon^2}} : \end{aligned} \quad (3.24)$$

(3.24) և (3.22) արտահայտություններից հետևում է, որ

$$\rho_{\mathbf{g}}^{\varepsilon} = \frac{e}{v_0} \left(e^{-\mathbf{g}^2/4\varepsilon^2} - \delta_{\mathbf{g},0} \right) : \quad (3.25)$$

(3.17) և (3.25) բանաձևերի օգնությամբ կստանանք՝

$$\varphi_{\varepsilon}^{(1)}(\mathbf{R}) = \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{\mathbf{g} \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{-g^2/4\varepsilon^2 + i\mathbf{g}\mathbf{R}} : \quad (3.26)$$

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

Սակայն (3.26) արտահայտությունը չի համապատասխանում իրականությանը, քանի որ անհրաժեշտ է որոշել կետային դրական լիցքերի և բացասական ֆոնի դաշտը: Դրա համար ձևափոխենք (3.26) արտահայտությունը՝ գումարելով նրան ցանցի հանգույցներում տեղադրված դրական կետա-

յին լիցքերի և գառայան բաշխումով բացասական լիցքերի ստեղծած պոտենցիալը: Վերջինս համակշռում է գառայան բաշխումով դրական լիցքերի պոտենցիալը (մկ. Հ2):

Որոշենք դրական կետային լիցքերի և գառայան բաշխումով բացասական լիցքերի խտության՝

$$\rho_{\varepsilon}^{(2)}(\mathbf{R}) = e \sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{l}) - e\pi^{-3/2} \varepsilon^3 \sum_{\mathbf{l}} e^{-\varepsilon^2(\mathbf{R}-\mathbf{l})^2} \quad (3.27)$$

ստեղծած $\varphi_{\varepsilon}^{(2)}(\mathbf{R})$ պոտենցիալը: (3.27) բաշխումը տեղադրելով Պուասոնի հավասարման լուծման

$$\varphi_{\varepsilon}^{(2)}(\mathbf{R}) = \int \frac{\rho(\mathbf{R}')}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|} d\mathbf{R}' \quad (3.28)$$

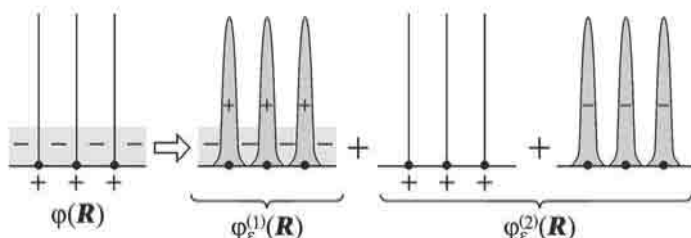
արտահայտության մեջ և հաշվելով ի հայտ եկող ինտեգրալները (տես Հավելված 2)՝ կստանանք՝

$$\varphi_{\varepsilon}^{(2)}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{l}} \frac{e}{|\mathbf{l} - \mathbf{R}|} \operatorname{erfc}(\varepsilon |\mathbf{l} - \mathbf{R}|), \quad (3.29)$$

որտեղ

$$\operatorname{erfc} x = 1 - \operatorname{erf} x = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (3.30)$$

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



Նկ. Հ2. *Դրական իոնների և բացասական ֆոնի ստեղծած դաշտի ներկայացումը երկու պոտենցիալների գումարի տեսքով*

Կազմենք $\varphi_{\varepsilon}^{(1)}$ և $\varphi_{\varepsilon}^{(2)}$ ֆունկցիաների գումարը և որոշենք նրա ածանցյալն ըստ ε պարամետրի: (3.26) և (3.29) 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՝

$$\frac{d}{d\varepsilon} \left(\varphi_{\varepsilon}^{(1)} + \varphi_{\varepsilon}^{(2)} - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0} \right) = 0 : \quad (3.31)$$

Այս առնչությունից հետևում է, որ

$$\Phi(\mathbf{R}) = \varphi_{\varepsilon}^{(1)}(\mathbf{R}) + \varphi_{\varepsilon}^{(2)}(\mathbf{R}) - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0} \quad (3.32)$$

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

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

$$\begin{aligned} \Phi^+(\mathbf{R}) &= \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{g \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{-g^2/4\varepsilon^2 + 4g\mathbf{R}} + \\ &+ \sum_l \frac{e}{|\mathbf{l} - \mathbf{R}|} \operatorname{erfc}(\varepsilon |\mathbf{l} - \mathbf{R}|) - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0} : \end{aligned} \quad (3.33)$$

Երբ $\varepsilon \rightarrow \infty$, (3.33) արտահայտությունից ստացվում է (3.18) բանաձևը:

Այժմ որոշենք ցանցի պոտենցիալը որևէ իոնի տեղում, որտեղ դաշտը եզակիություն ունի՝ պայմանավորված տվյալ իոնի $e/|\mathbf{R}|$ պոտենցիալով, ուստի ցանցի մյուս բոլոր իոնների ստեղծած դաշտը $\mathbf{R} = 0$ կետում

$$\begin{aligned} \Phi^+(0) &= \lim_{R \rightarrow 0} \left[\Phi^+(\mathbf{R}) - \frac{e}{|\mathbf{R}|} \right] = \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{g \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{-g^2/4\varepsilon^2} + \\ &+ \sum_{l \neq 0} \frac{e}{|\mathbf{l} - \mathbf{R}|} \operatorname{erfc}(\varepsilon |\mathbf{l} - \mathbf{R}|) - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0} + e \lim_{R \rightarrow 0} \left[\frac{1}{R} \operatorname{erfc}(\varepsilon R) - \frac{1}{R} \right] : \end{aligned} \quad (3.34)$$

$x \ll 1$ տիրույթում

$$\operatorname{erfc} x \approx 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} x + \frac{2}{3\sqrt{\pi}} x^3 + \dots, \quad (3.35)$$

ուստի

$$\lim_{R \rightarrow 0} \left[\frac{1}{R} \operatorname{erfc}(\varepsilon R) - \frac{1}{R} \right] = -\frac{2\varepsilon}{\sqrt{\pi}}: \quad (3.36)$$

Այսպիսով՝ ցանցի սեփական պոտենցիալի համար կստանանք հետևյալ վերջնական արտահայտությունը՝

$$\Phi^+(0) = \frac{4\pi e}{v_0} \sum_{g \neq 0} \frac{1}{g^2} e^{-g^2/4\varepsilon^2} + \sum_{l \neq 0} \frac{e}{|l|} \operatorname{erfc}(\varepsilon |l|) - \frac{2\varepsilon e}{\sqrt{\pi}} - \frac{\pi e}{\varepsilon^2 v_0}: \quad (3.37)$$

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

$$\Psi(\mathbf{R}) = \sum_{i=1}^s \Phi_i(\mathbf{R} - \mathbf{R}_i), \quad (3.38)$$

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

$$u_{el} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s e_j \Psi(\mathbf{R}_j) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s e_j \Phi_j(0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j}^s e_j \Phi_i(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j): \quad (3.39)$$

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

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

և (3.39) ընդհանուր արտահայտությունից հետևում է, որ

$$u_{el} = e[\Phi^+(0) - \Phi^-(\mathbf{R}_-)], \quad (3.40)$$

որտեղ ենթադրվում է, որ դրական իոնը $\mathbf{R}_1 = 0$, իսկ բացասական իոնը՝ $\mathbf{R}_2 \equiv \mathbf{R}_-$ կետում է:

(3.40) բանաձևում տեղադրելով (3.37) և (3.38) արտահայտությունները և արդյունքը հավասարեցնելով Մադելունգի $-e^2 A/R_0$ էներգիային՝ կատանանք Մադելունգի հաստատունի արտահայտությունը՝

$$A = \frac{2\varepsilon R_0}{\sqrt{\pi}} - \sum_{l \neq 0} \frac{R_0}{|\mathbf{l} - \mathbf{R}_-|} \operatorname{erfc}(\varepsilon |\mathbf{l} - \mathbf{R}_-|) + \sum_{l \neq 0} \frac{R_0}{|\mathbf{l}|} \operatorname{erfc}(\varepsilon |\mathbf{l}|) - \frac{R_0}{\pi v_0} \sum_{b \neq 0} \frac{1}{b^2} \exp\left(-\frac{\pi^2 b^2}{\varepsilon^2}\right) [1 - \exp(2\pi i \mathbf{b} \mathbf{R})], \quad (3.41)$$

որտեղ $\mathbf{b} = \mathbf{g}/2\pi$, իսկ գումարումները կատարվում են ըստ ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հանգույցների:

(3.41) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել ավելի հարմար տեսքով, եթե նշված գումարումները կատարվեն կոորդինացիոն գնդաձևերով: Եթե N_s -ով նշանակենք ուղիղ ցանցում R_s շառավղով գնդաձևի վրա որոշակի նշանով իոնների թիվը ($\mu_s = 1$ դրական, $\mu_s = -1$ բացասական լիցքերի համար), v_s -ով՝ հակադարձ ցանցում b_s շառավղով գնդաձևի վրա հանգույցների թիվը, ինչպես նաև $\kappa_s = \mathbf{b} \cdot \mathbf{R}_-$, ապա կստանանք՝

$$A = \frac{2\varepsilon R_0}{\sqrt{\pi}} - R_0 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{R_s} \mu_s N_s \operatorname{erfc}(\varepsilon R_s) - \frac{R_0}{\pi v_0} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{v_s}{b_s^2} e^{-\pi^2 b_s^2 / \varepsilon^2} (1 - e^{i2\pi \kappa_s}): \quad (3.42)$$

Այժմ պարզենք, թե ինչպես է լավագույն ձևով որոշվում դեռևս կամայական ε պարամետրը: (3.33) բանաձևի համաձայն, երբ ε -ն աճում է, ուղիղ ցանցով գումարի գույքամիտությունն արագանում է, իսկ հակադարձ ցանցով գումարինը՝ դանդաղում: ε -ը նվազելիս դիտվում է հակառակ վարքը:

Ֆիզիկական դատողություններից ակնհայտ է, որ $\Phi^+(0) < 0$ և կախված չէ ε -ից: Հետևաբար, որքան փոքր է բացարձակ արժեքով (3.37) բանաձևում վերջին երկու անդամների գումարը, այնքան փոքր է ամվերջ գումարների ներդրումը: Նշված գումարը նվազագույնն է, եթե

$$\frac{d}{d\varepsilon} \left(\frac{2\varepsilon}{\sqrt{\pi}} + \frac{\pi}{\varepsilon^2 v_0} \right) = 0 \quad \text{կամ} \quad \varepsilon_{\min} = \frac{\pi^{1/2}}{v_0^{1/3}}: \quad (3.43)$$

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

$$\exp\left(-\frac{\pi^2}{\varepsilon^2 R_0^2}\right) = \exp(-\varepsilon^2 R_0^2), \text{ կամ } \varepsilon = \frac{\pi^{1/2}}{R_0}: \quad (3.44)$$

Մադելունգի հաստատունի հաշվարկի ընթացքն ուսումնասիրենք NaCl -ի օրինակի վրա: Ինչպես դրական, այնպես էլ բացասական իոնները կազմում են միատակենտրոն խորանարդային ցանցեր, որոնք իրար նկատմամբ շեղված են $\mathbf{R}_-(R_0, 0, 0)$ վեկտորով: Ուղիղ ցանցը տրվում է (տես I. 3.16) $\mathbf{c}_1(0, R_0, R_0)$, $\mathbf{c}_2(R_0, 0, R_0)$, $\mathbf{c}_3(R_0, R_0, 0)$ հիմնական վեկտորներով, իսկ հակադարձ (ծավալակենտրոն խորանարդային) ցանցը՝ (տես I.9.10) $\mathbf{b}_1(-1/2R_0, 1/2R_0, 1/2R_0)$, $\mathbf{b}_2(1/2R_0, -1/2R_0, 1/2R_0)$, $\mathbf{b}_3(1/2R_0, 1/2R_0, -1/2R_0)$ հիմնական վեկտորներով: $\kappa_s = \mathbf{b}\mathbf{R} = b_x R_0 = (-n_1 + n_2 + n_3)/2$, տարրական բջջի ծավալը՝ $v_0 = 2R_0^3$, հետևաբար՝ (3.42) արտահայտության վերջին անդամում ներդրում են տալիս միայն կենտ կոորդինացիոն գնդադրամները, որոնց համար $1 - \exp(2\pi i \kappa_s) = 1 - \exp[i\pi(-n_1 + n_2 + n_3)] = 2$:

(3.43) պայմանից ստացվում է ε -ի գնահատականը՝

$$\varepsilon_{\min} = \frac{\pi^{1/2}}{2^{1/3} R_0} \approx \frac{1,4068}{R_0}: \quad (3.45)$$

(3.42) արտահայտության մեջ անցնելով չափայնություն չունեցող մեծությունների՝

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

կստանանք՝

$$A = \frac{2\varepsilon}{\sqrt{\pi}} - \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\mu_s N_s}{R_s} \operatorname{erfc}(\varepsilon R_s) - \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{v_s}{b_s^2} \exp\left(-\frac{\pi^2 b_s^2}{\varepsilon^2}\right): \quad (3.46)$$

Քանի որ դրական իոնը $\mathbf{R}_1 = 0$ կետում է, ապա բացասական իոնների կոորդինատները խորանարդային առանցքներով տրվում են ամբողջ թվերով, որոնց գումարը կենտ է: Որպեսզի հաշվենք $R_s = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^{1/2}$ շառավղով կոորդինացիոն գնդադրամի վրա բոլոր կետերը, անհրաժեշտ է գտնել $\pm n_1 \pm n_2 \pm n_3$ ($n_1, n_2, n_3 \geq 0$) թվերի տարբեր զուգորդությունների թիվը:

Աղյուսակ Հ2.

$(n_1, n_2, n_3), R_s$ և N_s մեծությունները
(I-V կոորդինացիոն գնդոլորտների համար)

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

Աղյուսակ Հ2-ում բերված են առաջին հինգ կոորդինացիոն գնդոլորտների համար $(n_1, n_2, n_3), R_s$ և N_s մեծությունները դրական ու բացասական խոնների համար:

Հարկ է նշել, որ $s = 4$, $\mu_s = -1$ դեպքում ուղիղ ցանցով կատարվող գումարում պետք է վերցնել $N_s = 24 + 6 = 30$: Մինչև անգամ մեծ ճշտությամբ հաշվարկներում բավական է հաշվի առնել երկու կոորդինացիոն գնդոլորտ հակադարձ տարածության մեջ և երեք-չորս կոորդինացիոն գնդոլորտ՝ ուղիղ ցանցում: Նշված մոտավորությամբ Մադելունգի հաստատունի համար ստացվում է $A = 1,7475645946$ արժեքը:

ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

Ընդհանուր գրականություն

1. Չ. 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 (т. 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. Չ. 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. Г. С. Жданов. Физика твердого тела. М., Изд. Московского университета, 1961.
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика, ч.I, М., Наука, 1976.
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М., ФМЛ, 1963.
12. Р. Кубо. Статистическая механика. М., Мир, 1967.
13. Таблицы физических величин. Справочник, под ред. акад. И. К. Кикоина. М., Атомиздат, 1976.
14. Ch. Kittel. Introduction to Solid State Physics, 8th ed., Wiley, 2004.
15. G. Grosso, G. Pastori Parravicini. Solid State Physics, 2nd ed., Academic press is an imprint of Elsevier, 2013.
16. Ph. Hofmann. Solid State Physics. An introduction, Wiley-VCH, 2008
17. H. C. Gupta. Solid State Physics. Vikas Publ. House, PVT Ltd. 2nd revised and enlarged ed., 2001.
18. R. I. Turton. The Physics of Solids. Oxford University Press, 2000.
19. H. Ibach, H. Lüth. Solid-State Physics. 4th extensively updated and enlarged ed., Springer, 2009.
20. I. D. Patterson, B. C. Bailey. Solid-State Physics. Introduction to the Theory, Springer, 2007.

I գլխի գրականություն

1. Պ. Հ. Բեգիրզանյան, Ռենտգենյան հետազոտությունների ֆիզիկական հիմունքները, Երևան, ԵՊՀ հրատ., 1977.
2. М. П. Шаскольская. Очерки о свойствах кристаллов. М., Наука, 1978.
3. Е. Е. Флинт. Начала кристаллографии. М., Высш. школа, 1961.
4. Р. Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М., ИЛ, 1950.

II գլխի գրականություն

1. Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. М., ИЛ, 1961.
2. В. Хабердигтл. Строение материи и химическая связь. М., Мир, 1974.
3. Дж. Слэтер. Диелектрики, 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. Марадудин, Э. Монтролл, 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.

ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

ՊԻՆԴ ՍԱՐՄՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ՆԵՐԱԾՈՒԹՅՈՒՆ

ԵՐԿՐՈՐԴ ՀՐԱՏԱՐԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

ՄԱՍ I

Համակարգչային ձևավորումը՝

Ն. Հովակիմյանի

Կազմի ձևավորումը՝

Ա. Պատվականյանի

Տեխ. խմբագիր՝

Հ. Ասլանյան

Չափսը՝ 60x84 1/16: Տպ. մամուլ 18:

Տպաքանակը՝ 200 օրինակ:

ԵՊՀ հրատարակչություն

ք. Երևան, 0025, Ալեք Մանուկյան 1



ՄԱՅՈՐԱՆՈՒԹՅՈՒՆ
ԵՐԵՎԱՆ 2015