

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до практичних занять та самостійної роботи з дисципліни

„ФІЗИКА ТВЕРДОГО ТІЛА“

для студентів спеціальності

176 „Мікро- та наносистемна техніка“,

освітня програма: „Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої“

першого (бакалаврського) рівня вищої освіти

денної й заочної форм навчання

Методичні вказівки до практичних занять та самостійної роботи з дисципліни „Фізика твердого тіла“ для студентів спеціальності 176 „Мікро- та наносистемна техніка“, освітня програма: „Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої“ першого (бакалаврського) рівня вищої освіти денної й заочної форм навчання/ Укл.: Валентин ПОГОСОВ, Андрій КОРОТУН. – Запоріжжя: НУ «Запорізька політехніка», 2025. – 63 с.

Укладач: Валентин ПОГОСОВ, проф., д-р фіз.-матем. наук,
Андрій КОРОТУН, проф., канд. фіз.-мат. наук

Рецензент: Валерій КУРБАЦЬКИЙ, доц., канд. фіз.-матем. наук

Відповідальний за випуск: Андрій КОРОТУН, проф., канд. фіз.-мат. наук,

Затверджено
на засіданні кафедри
інформаційної безпеки
та наноелектроніки

Протокол № 5
від “22” січня 2025 р.

Рекомендовано до видання
НМК ФІБЕК

Протокол № 6
від “29” січня 2025 р.

ЗМІСТ

1 Кристалічні структури твердих тіл	4
1.1 Основні формули і визначення	4
1.2 Приклади розв'язування задач	9
1.3 Задачі для самостійного розв'язування	15
2 Дефекти структури кристалічної будови твердих тіл	21
2.1 Основні формули і визначення	21
2.2 Приклади розв'язування задач	24
2.3 Задачі для самостійного розв'язування	27
3. Квантова теорія фотоефекту.	29
3.1. Основні формули і визначення.	29
3.2 Приклади розв'язування задач.	33
3.3 Задачі для самостійного розв'язування.	34
4. Теплові властивості кристалічної ґратки.	37
4.1. Основні формули і визначення.	37
4.2 Приклади розв'язування задач.	39
4.3 Задачі для самостійного розв'язування.	46
5. Статистика електронів у твердому тілі. Розподіл Фермі – Ді- рака.	47
5.1. Основні формули і визначення.	47
5.2 Приклади розв'язування задач.	48
5.3 Задачі для самостійного розв'язування.	52
Додаток А	55
Додаток Б	58
Додаток В	59
Додаток Г	63

1 КРИСТАЛІЧНІ СТРУКТУРИ ТВЕРДИХ ТІЛ

1.1 Основні формули і визначення

Молярна (атомна) маса речовини M , молярний (атомний) об'єм кристала V_M і густина кристала ρ пов'язані співвідношенням

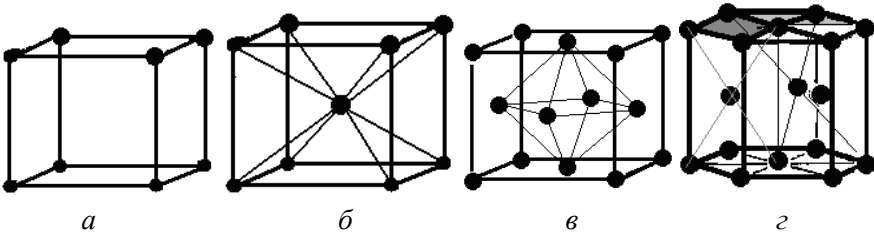
$$M = \rho V_M. \quad (1.1)$$

Константи: $R = k_B N_A = 8,314$ Дж/моль · К – універсальна газова стала; $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К = $8,617 \cdot 10^{-5}$ еВ/К – стала Больцмана; $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ – число Авогадро.

Об'єм елементарної комірки у кристалах:

- ❖ при кубічній сингонії $v = a^3$;
- ❖ при гексагональній сингонії $v = \frac{\sqrt{3}a^2c}{2}$,

де a і c – параметри ґратки. Якщо прийняти теоретичне значення $c = a\sqrt{\frac{8}{3}}$, то $v = a^3\sqrt{2}$.



a – проста кубічна; b – об'ємноцентрована кубічна (ОЦК); v – гранецентрована кубічна (ГЦК); z – гексагональна

Рисунок 1.1 – Типи кристалічних ґраток

Гексагональний тип кристалічної ґратки мають метали: Mg, Ti_α, Cd, Re, Os, Ru, Zn, Co_β, Be, Ca_β та інші.

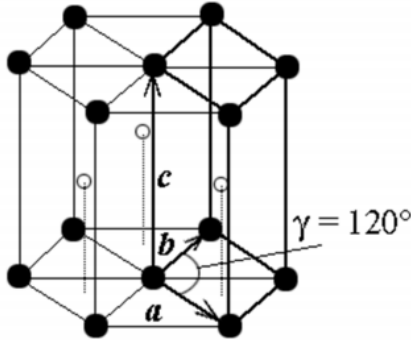


Рисунок 1.2 – Гексагональний тип кристалічної ґратки

У гексагональній ґратці атоми розташовані у вершинах і центрі шестигранних основ призми, а три атома – у середній площині призми. На елементарну комірку гексагональної щільно упакованої ґратки припадають шість атомів $\left(3 + \frac{1}{6} \cdot 12 + \frac{1}{2} \cdot 2 = 6\right)$.

Кількість елементарних комірок Z_M в одному молі кристала

$$Z_M = V_M / v, \quad \text{або} \quad Z_M = k N_A / N_0, \quad (1.2)$$

де k – кількість однакових атомів у хімічній формулі сполуки; N_0 – кількість однакових атомів, що припадають на одну елементарну комірку (наприклад, у кристалі AgBr кількість однакових атомів Ag чи Br у хімічній формулі сполуки дорівнює 1, $k=1$, $N_0=4$ (ГЦК)).

На рис. 1.1 наведено структуру NaCl ; аналогічну структуру мають сполуки KBr , AgBr , MnO тощо.

Кількість елементарних комірок Z в одиниці об'єму кристала

$$Z = Z_M / V_M, \quad (1.3)$$

або в загальному випадку

$$Z = \rho \frac{k N_A}{N_0 M}; \quad (1.4)$$

Для кристала з однаковими атомами $k = 1$.

Параметр a кубічної ґратки

$$a = \sqrt[3]{\frac{N_0 M}{k \rho N_A}}. \quad (1.5)$$

Відстань d між сусідніми атомами в кубічній ґратці:

- ❖ у гранецентрованій $d = a/\sqrt{2}$;
- ❖ у об'ємноцентрованій $d = \sqrt{3}a/2$.

Для позначення вузлів, напрямків і площин у ґратці вводять спеціальні індекси.

Індекси вузлів записують у подвійних квадратних дужках $[[mnp]]$. Для від'ємних індексів над літерою ставиться риска, наприклад \bar{m} (рис. 1.3).

Індекси напрямків записують в одинарних квадратних дужках $[mnp]$. Індекс напрямку співпадає з індексом вузла, через який проходить пряма, якщо ця пряма одночасно проходить і через початок координат $[[000]]$ (рис. 1.3).

Індекси напрямку задають не одну пряму в кристалі, а сімейство паралельних прямих. Зміна всіх індексів на протилежні за знаком $[\bar{m}\bar{n}\bar{p}]$ означає той же напрямок у кристалі. Сукупність еквівалентних напрямків позначають $\langle mnp \rangle$. Наприклад, у кубічній системі координат сімейство еквівалентних напрямків $\langle 110 \rangle$ включає напрямки

$$[110], [\bar{1}\bar{1}0], [1\bar{1}0], [\bar{1}10], \\ [101], [\bar{1}01], [10\bar{1}], [\bar{1}0\bar{1}], \\ [011], [0\bar{1}\bar{1}], [01\bar{1}] \text{ і } [0\bar{1}1].$$

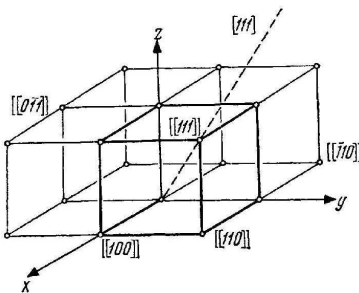


Рисунок 1.3 – Індекси вузлів та напрямків

Індекси площини (індекси Міллера) записують у круглих дужках (hkl) . Зміна всіх індексів на протилежні

за знаком $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ відповідає тому самому сімейству площин.

Індекси Міллера пов'язані з мінімальними відрізками, які відтинаються площиною на осях координат.

Для знаходження відрізків слід взяти протилежні за знаком значення індексів Міллера $\left(\frac{1}{h}; \frac{1}{k}; \frac{1}{l}\right)$ і звести їх до найменшого цілого, кратного кожному з отриманих чисел. Отримані значення є найменшими відрізками, які відтинаються площиною (hkl) на осях координат.

Якщо відомі відрізки, які відтинаються площиною на осях координат, то аналогічно визначають індекси Міллера, які пропорційні напрямним косинусам вектора нормалі до даної площини. Тому індекси Міллера для деякого сімейства площин співпадають з індексами напрямків нормалі до цих площин.

Деякі площини, які розрізняють за індексами Міллера, є еквівалентними в кристалографічному і фізичному сенсі. Наприклад, еквівалентними в кубічній ґратці є грані куба (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, $(00\bar{1})$. Кристалографічна еквівалентність їх проявляється в тому, що ці площини суміщаються одна з одною при повороті навколо однієї з осей координат на кут, кратний 90° . Фізична еквівалентність проявляється у тому, що всі ці площини мають однакову структуру в розміщенні вузлів ґратки, а отже, і однакові фізичні властивості. Сімейство еквівалентних площин позначається фігурними дужками $\{hkl\}$.

Міжплощинна відстань для кристалів кубічної сингонії

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}. \quad (1.6)$$

Кут φ між прямими $[m_1n_1p_1]$ та $[m_2n_2p_2]$ у кубічній ґратці виражається формулою

$$\cos \varphi = \frac{m_1m_2 + n_1n_2 + p_1p_2}{\sqrt{m_1^2 + n_1^2 + p_1^2} \sqrt{m_2^2 + n_2^2 + p_2^2}}. \quad (1.7)$$

Кут між площинами $(h_1k_1l_1)$ і $(h_2k_2l_2)$ визначають за формулою

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}, \quad (1.8)$$

а між прямою $[mnp]$ і площиною (hkl) – за формулою

$$\cos \varphi = \frac{hm + kn + lp}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \sqrt{m^2 + n^2 + p^2}}. \quad (1.9)$$

У структурному аналізі часто користуються поняттям *оберненої ґратки*, яка однозначно пов'язана з прямою ґраткою певними співвідношеннями. Якщо елементарна комірка прямої ґратки визначається векторами \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , а обернена ґратка векторами \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* , то справедливі співвідношення

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}\mathbf{a}^*) &= (\mathbf{b}\mathbf{b}^*) = (\mathbf{c}\mathbf{c}^*) = 2\pi; \\ (\mathbf{a}^*\mathbf{b}) &= (\mathbf{b}^*\mathbf{c}) = (\mathbf{c}^*\mathbf{a}) = (\mathbf{a}^*\mathbf{c}) = 0. \end{aligned}$$

Це означає, що вектор \mathbf{a}^* нормальний до \mathbf{b} і \mathbf{c} , тобто нормальний до площини, в якій лежить \mathbf{b} і \mathbf{c} . Отже, для ортогональних ґраток можна записати:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \perp \mathbf{a}^*, \quad \mathbf{b} \perp \mathbf{b}^*, \quad \mathbf{c} \perp \mathbf{c}^*, \\ |\mathbf{a}^*| = \left| \frac{2\pi}{\mathbf{a}} \right|, \quad |\mathbf{b}^*| = \left| \frac{2\pi}{\mathbf{b}} \right|, \quad |\mathbf{c}^*| = \left| \frac{2\pi}{\mathbf{c}} \right|. \end{aligned}$$

1.2 Приклади розв'язування задач

1.2.1 Визначте кількість N_0 вузлів, що припадає на одну елементарну комірку в гранецентрованій кубічній ґратці.

Розв'язок

Виділимо елементарну комірку в кубічній ґратці (рис. 1.4) і визначимо, скільком сусіднім елементарним коміркам належить той чи інший вузол виділеної комірки. У цій комірці є вузли двох типів: A (містяться у вершинах куба) і B (містяться на гранях куба в точці перетину діагоналей).

Вузол A належить одночасно восьми елементарним коміркам.

Отже, в дану комірку вузол A входить з часткою $\frac{1}{8}$. Вузол B входить

одночасно лише у дві комірки й, отже, в дану комірку вузол B входить з часткою $\frac{1}{2}$. Якщо врахувати,

що кількість вузлів типу A в комірці дорівнює восьми, а кількість вузлів типу B дорівнює шести, тобто числу граней, то загальна кількість атомів, що припадає на одну елементарну

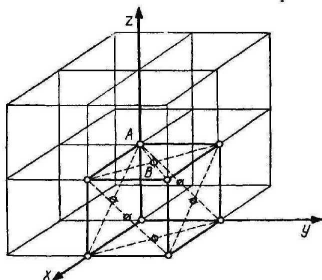


Рисунок 1.4 – До прикладу 1.1

комірку в ґратці,

$$N_0 = \frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 = 1 + 3 = 4 \text{ атоми.}$$

1.2 Визначте параметр a ґратки і відстань d між найближчими сусідніми атомами кристала Са (кальцій, кубічна ґратка). Густина ρ кристала Са дорівнює $1,55 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

$$1,55 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.$$

Розв'язок

Об'єм елементарної комірки дорівнює відношенню молярного об'єму до кількості елементарних комірок в одному молі кристала:

$$v = \frac{V_M}{Z_M}. \quad (1)$$

Молярний об'єм кальцію

$$V_M = M/\rho,$$

де ρ – густина Са; M – його молярна маса ($M = 40.08$ г/моль).
Кількість елементарних комірок в одному молі

$$Z_M = N_A / N_0, \quad (2)$$

де N_0 – кількість атомів, що припадає на одну комірку. Підставляючи (2) в (1) отримаємо:

$$a^3 = \frac{N_0 M}{\rho N_A}.$$

Звідси

$$a = \sqrt[3]{\frac{N_0 M}{\rho N_A}} \quad (3)$$

Враховуючи, що $N_0 = 4$ (див. П.1.1), маємо:

$$a = 0,556 \text{ нм}.$$

Відстань d між найближчими сусідніми атомами визначають з теореми Піфагора (рис. 1.5):

$$\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 = d^2, \quad d = a/\sqrt{2}.$$

Підставляючи в цей вираз розраховане значення a , маємо:

$$d = 0,393 \text{ нм}.$$

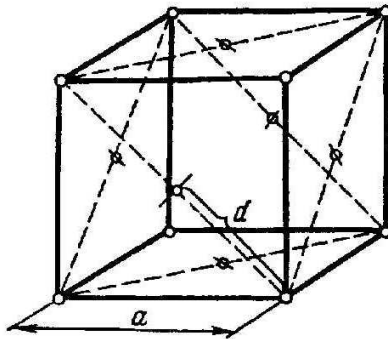


Рисунок 1.5. – До прикладу 1.2

- 1.3** Відомо, що Al кристалізується у гратці гранецентрованого куба з ребром $a = 0,4041$ нм. Обчисліть концентрацію вільних електронів n_e , припускаючи, що на кожний атом кристалічної гратки припадає 3 електрона (валентність Al дорівнює 3).

Розв'язок

У гратці гранецентрованого куба на одну елементарну комірку припадає 4 атоми. Тому концентрація атомів (кількість атомів в одиниці об'єму)

$$n = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(0,4041 \cdot 10^{-9})^3} = 6,06 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}.$$

Звідси концентрація електронів провідності

$$n_e = 3n = 3 \cdot 6,06 \cdot 10^{28} = 18,18 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}.$$

- 1.4** Густина Cu (структура ГЦК) $\rho = 8885 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, атомна маса 63,57 ($M = 63,546$ г/моль). Розрахуйте об'єм елементарної комірки v .

Розв'язок

Якщо m_0 – маса 1 атому,

$$m_0 = M/N_A,$$

то густина кристала дорівнює:

$$\rho = \frac{N_0 m_0}{v} = \frac{N_0 M}{v N_A},$$

на 1 елементарну комірку припадає 4 атоми ($N_0 = 4$). Тоді

$$v = \frac{N_0 M}{\rho N_A} = \frac{4 \cdot 63,57 \cdot 10^{-3}}{8885 \cdot 6,023 \cdot 10^{23}} = 4,75 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3.$$

- 1.5.** Визначте індекси напрямку прямої, яка проходить через вузли $[[100]]$ і $[[001]]$ кубічної примітивної гратки.

Розв'язок

Цю задачу можна розв'язати в два способи.

I-й спосіб. Зобразимо кубічну примітивну комірку, відмітимо на ній вузли з індексами $[[100]]$ і $[[001]]$, і проведемо через ці вузли пряму (рис. 1.6, а).

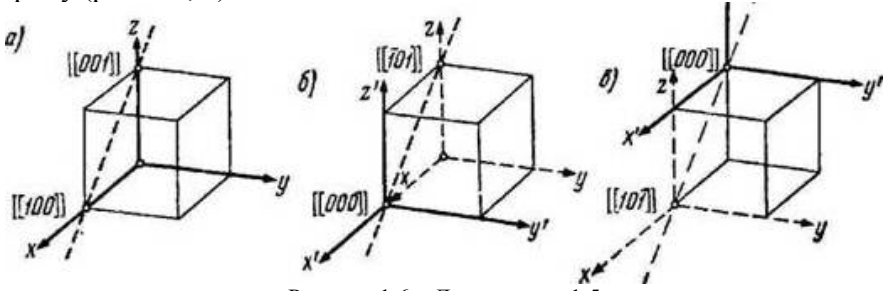


Рисунок 1.6 – До прикладу 1.5

Якби пряма проходила через початок координат, то індекси її напрямку співпадали б з індексами вузла, найближчого до початку координат, через який проходить пряма.

Задана пряма не проходить через початок координат. Але цього можна досягти, якщо перенести початок координат в один із вузлів, через які проходить пряма.

Якщо перенести початок координат у вузол $[[100]]$ (рис. 1.5, б), то вузол, який лежить на тій же прямій і найближчий до обраного початку координат, буде мати індекси $[[101]]$, а шуканий напрямок у цьому випадку буде визначатися індексами $[[\bar{1}01]]$.

Якщо ж початок координат перенести у вузол $[[001]]$ (рис. 1.5, в), то відповідно індекси шуканого напрямку будуть $[[10\bar{1}]]$.

Отже, індекси шуканого напрямку в кристалі будуть $[[\bar{1}01]]$ або $[[10\bar{1}]]$.

II-й спосіб. Не завжди буває легко визначити, як зміняться індекси вузлів при перенесенні початку координат. Тому розглянемо аналітичний метод розв'язання.

Напишемо в загальному випадку рівняння прямої $[xyz]$, яка проходить через дві точки у просторі, з індексами вузлів $[m_1 n_1 p_1]$ і $[m_2 n_2 p_2]$:

$$\frac{x - m_1}{m_2 - m_1} = \frac{y - n_1}{n_2 - n_1} = \frac{z - p_1}{p_2 - p_1}. \quad (1)$$

Величини, які стоять у знаменнику, пропорційні напрямним косинусам прямої. Оскільки ці величини цілочисельні, то вони і будуть індексами напрямку.

Підставляючи у знаменник виразу (1) значення індексів вузлів $m_1 = 1$, $n_1 = 0$, $p_1 = 0$ і $m_2 = 0$, $n_2 = 0$, $p_2 = 1$, отримаємо:

$$m_2 - m_1 = 0 - 1 = -1; \quad n_2 - n_1 = 0 - 0 = 0; \quad p_2 - p_1 = 1 - 0 = 1.$$

Отже, шукані індекси напрямку $[xyz] = \left[\left[\bar{1} 0 1 \right] \right]$.

1.6 Написати індекси Міллера для площини, яка містить вузли з індексами $\left[\left[200 \right] \right]$, $\left[\left[010 \right] \right]$ і $\left[\left[001 \right] \right]$. Ґратка кубічна, примітивна.

Розв'язок

Аналітичний метод особливо зручний тоді, коли відомі вузли не лежать на осях координат. Цей спосіб є загальним і може застосовуватися в усіх випадках.

Відомо, що індекси Міллера дорівнюють найменшим цілочисельним коефіцієнтам при змінних у рівнянні площини. Тому розв'язання задачі визначення індексів Міллера зводиться, по суті, до відшукування рівняння площини.

Рівняння площини, яка проходить через три точки з координатами $\left[\left[m_1 n_1 p_1 \right] \right]$, $\left[\left[m_2 n_2 p_2 \right] \right]$, $\left[\left[m_3 n_3 p_3 \right] \right]$, дається визначником третього порядку

$$\begin{vmatrix} x - m_1 & y - n_1 & z - p_1 \\ m_2 - m_1 & n_2 - n_1 & p_2 - p_1 \\ m_3 - m_1 & n_3 - n_1 & p_3 - p_1 \end{vmatrix} = 0.$$

У нашому випадку: $m_1 = 2$, $n_1 = 0$, $p_1 = 0$; $m_2 = 0$, $n_2 = 1$, $p_2 = 0$; $m_3 = 0$, $n_3 = 0$, $p_3 = 0$. Підставляючи значення індексів вузлів у визначник, отримуємо

$$\begin{vmatrix} x-2 & y-0 & z-0 \\ 0-2 & 1-0 & 0-0 \\ 0-2 & 0-0 & 1-0 \end{vmatrix} = 0, \text{ або } \begin{vmatrix} x-2 & y & z \\ -2 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 0.$$

Розкладемо цей детермінант за елементами першого рядка:

$$(x-2) \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} - y \begin{vmatrix} -2 & 0 \\ -2 & 1 \end{vmatrix} + z \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ -2 & 0 \end{vmatrix} = 0.$$

Розкриваючи детермінант другого порядку, отримуємо:

$$(x-2)(+1) - y(-2) + z(+2) = 0, \text{ або } x + 2y + 2z = 2.$$

Виписавши коефіцієнти при x , y , z і заключивши їх у круглі дужки, отримуємо індекси Міллера $(1, 2, 2)$.

1.3 Задачі для самостійного розв'язування

1.3.1 Елементарна комірка. Параметри ґратки

1.3.1.1 Скільки атомів припадає на одну елементарну комірку ґратки кубічної сингонії.

1.3.1.2 Визначте число елементарних комірок кристала об'ємом $V = 1 \text{ м}^3$.

№ варіанту	1	2	3	4	5
Кристал	CsCl	Cu	α -Co	Mo	Au
Тип ґратки	ОЦК	ГЦК	ГЦК	ОЦК	ГЦК
№ варіанту	6	7	8	9	10
Кристал	Ir	K	Cr	Cs	Pb
Тип ґратки	ГЦК	ОЦК	ОЦК	ОЦК	ГЦК

- 1.3.1.3 Знайдіть густину ρ кристала Ne при $T = 20 \text{ K}$, якщо відомо, що гратка ГЦК. Стала a гратки при тій самій температурі дорівнює $0,452 \text{ нм}$.
- 1.3.1.4 Знайдіть густину ρ кристала Sr (Стронцію), якщо відомо, що гратка гранецентрована кубічної сингонії, а відстань d між найближчими сусідніми атомами дорівнює $0,43 \text{ нм}$.
- 1.3.1.5 Визначте відносну атомну масу A_r кристала, якщо відомо, що відстань d між найближчими сусідніми атомами дорівнює $0,304 \text{ нм}$. Гратка оцк. Густина ρ кристала дорівнює $534 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.
- 1.3.1.6 Знайдіть сталу a гратки і відстань d між найближчими сусідніми атомами кристала: 1) Al (ГЦК); 2) W (ОЦК).
- 1.3.1.7 Використовуючи метод пакування куль, знайдіть відношення $\frac{c}{a}$ параметрів у гексагональній гратці з найщільнішим пакуванням. Вкажіть причини відхилення цієї величини в реальному кристалі від розрахованого.
- 1.3.1.8 Визначте сталі a і c гратки кристала Mg, яка має гексагональну структуру з щільним пакуванням. Густина ρ дорівнює $1,74 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.
- 1.3.1.9 Обчисліть сталу гратки кристала Be берилію, який має гексагональну структуру із щільним пакуванням. Параметр a гратки дорівнює $0,359 \text{ нм}$. Густина $\rho = 1,82 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.
- 1.3.1.10 Знайдіть густину ρ кристала He (Гелію) при $T = 2 \text{ K}$, який має гексагональну структуру з щільним пакуванням. Параметр a гратки, визначений при тій самій температурі, дорівнює $0,357 \text{ нм}$.
- 1.3.1.11 Мо (Молібден) має об'ємноцентровану кубічну гратку. Обчисліть густину і відстань між найближчими сусідніми атомами. Параметр гратки $a=0,315 \text{ нм}$, а $M = 96 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$.

- 1.3.1.12 Визначте густину Si при $T = 300 \text{ K}$, якщо період ґратки дорівнює $0,54198 \text{ нм}$.
- 1.3.1.13 Обчисліть N_A (число Авогадро), з даних: Au (ґцк),
 $\rho = 19,3 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, стала елементарної комірки дорівнює $0,4078 \text{ нм}$.
- 1.3.1.14 Довжина ребра кубічної елементарної комірки металу, який містить два атоми, за даними рентгенографічних досліджень дорівнює $3,16 \cdot 10^{-8} \text{ см}$. Густина металу $19,35 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$. Обчисліть атомну масу елемента.
- 1.3.1.15 Знайдіть густину Ag (срібла), якщо відомо, що метал кристалізується в ґранецентрованій кубічній формі, а відстань між найближчими сусідніми атомами дорівнює $2,87 \text{ \AA}$.
- 1.3.1.16 Сильвін (KCl) є кубічним кристалом з густиною $1,98 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.
 Знайдіть відстань між двома сусідніми атомами і мінімальну відстань між атомами одного сорту.
- 1.3.1.17 Кількісною мірою щільності пакування в кристалічній структурі є ступінь пакування, який дорівнює відношенню об'єму, зайнятого атомами (твердими кулями) в елементарній комірці, до її об'єму. Обчисліть ступінь пакування для простої кубічної ґратки і ґранецентрованої кубічної ґратки.
- 1.3.1.18 Йонні кристали добре описують моделлю куль, які торкаються. Обчисліть на базі цієї моделі період ґранецентрованої кубічної ґратки кухонної солі NaCl, виходячи з її густини $\rho = 2,17 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ і молярної маси $\mu = 58,45 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$.
- 1.3.1.19 У деяких металах відбувається структурний перехід від об'ємноцентрованої до ґранецентрованої кубічної ґратки, що практично не супроводжується зміною об'єму тіла. Знайдіть відношення $\frac{d_1}{d_2}$, де d_1 , d_2 – найменші відстані між атомами в ґранецентрованій та об'ємноцентрованій ґратках.

- 1.3.1.20 Метал 1 характеризується об'ємноцентрованою кубічною ґраткою з параметром a_1 , а метал 2 – гранецентрованою кубічною ґраткою з параметром a_2 . Знайдіть відношення відстаней $\frac{d_1}{d_2}$ між найближчими сусідніми атомами даних металів.
- 1.3.1.21 Відстань між найближчими сусідніми атомами в металах 1 і 2 дорівнює d_1 і d_2 відповідно. Метал 1 характеризується гранецентрованою кубічною ґраткою, а метал 2 – об'ємноцентрованою кубічною ґраткою. Чому дорівнює відношення об'ємів елементарних комірок $\frac{V_1}{V_2}$ даних металів?

Індекси вузлів, напрямків і площин

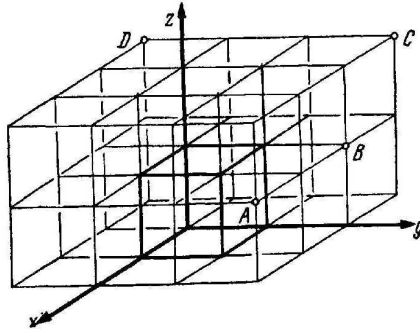


Рисунок 1.7 – До задачі 1.22

- 1.3.1.22 Визначте індекси вузлів, відмічених на рис. 1.7 буквами A , B , C , D .
- 1.3.1.23 Напишіть індекси напрямку прямої, яка проходить у кубічній ґратці через початок координат і вузол з кристалографічними індексами, у двох випадках: 1) $[[242]]$; 2) $[[112]]$.
- 1.3.1.24 Визначте індекси напрямків прямих AB , CD , KL , зображених на рис. 1.8, a - $в$.
- 1.3.1.25 Напишіть індекси напрямку прямої, яка проходить через два вузла з кристалографічними індексами (у двох випадках): 1) $[[123]]$ і $[[321]]$; 2) $[[121]]$ і $[[201]]$.

1.3.1.26 Доведіть, що напрямок $[hkl]$ у кубічній кристалічній ґратці нормальний до площини (hkl) .

1.3.1.27 Площина проходить через вузли $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[00\bar{1}]$ кубічної ґратки. Напишіть індекси Міллера для цієї площини.

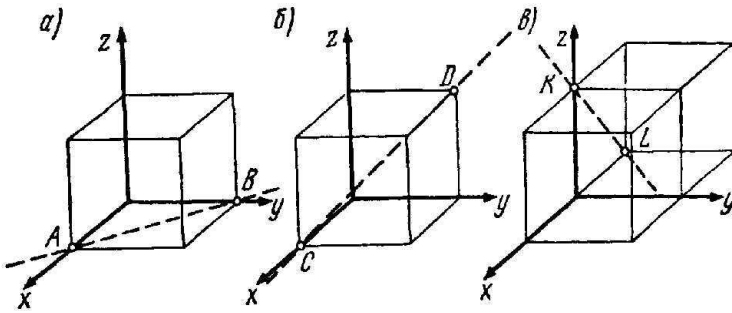


Рисунок 1.8 – До задачі 1.24

1.3.1.28 Визначте індекси Міллера для площини, яка проходить через вузли $[200]$, $[010]$, $[001]$ примітивної кубічної ґратки.

1.3.1.29 Напишіть індекси Міллера для площин у примітивній кубічній ґратці, зображених на рис. 1.9, $a - e$.

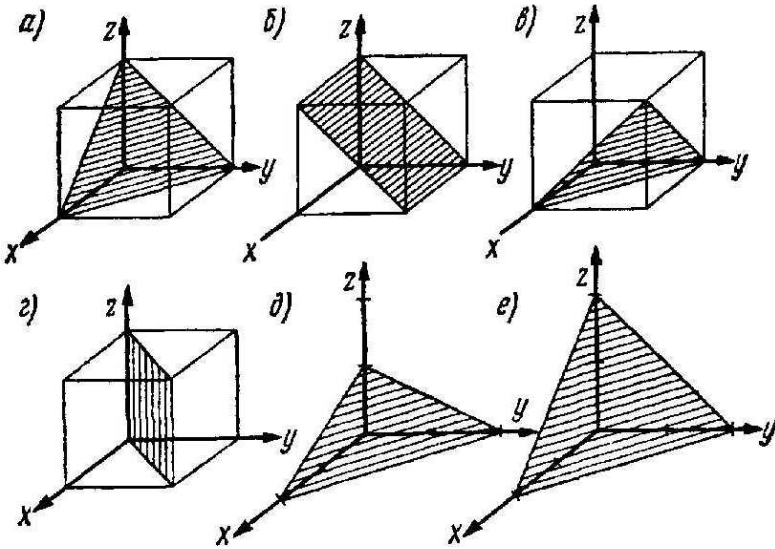


Рисунок 1.9 – До задачі 1.29

- 1.3.1.30 Систему площин у примітивній кубічній ґратці задано індексами (221). Визначте найменші відрізки, які відтинає площина на осях координат, і зобразіть цю площину.
- 1.3.1.31 Напрямок нормалі до деякої площини в кубічній ґратці задано індексами [110]. Напишіть індекси Міллера для цієї площини і вкажіть найменші відрізки, які відтинає площина на осях.
- 1.3.1.32 Площина в кубічному кристалі перетинається з осями координат x , y , z у точках $A(x, 0, 0)$, $B(0, y, 0)$ та $C(0, 0, z)$. Визначте індекси Міллера даної площини, якщо:
- $x = 0$; $y = 3$; $z = 1$;
 - $x = -2$; $y = 3$; $z = 1$;
 - $x = 2$; $y = 3$; $z = 1$;
 - $x = -2$; $y = 0$; $z = 1$.
- 1.3.1.33 Систему площин примітивної кубічної ґратки задано індексами (111). Визначте відстань d між сусідніми площинами, якщо параметр a ґратки дорівнює 0,3 нм.

- 1.3.1.34 Визначте параметр a примітивної кубічної ґратки, якщо міжплощинна відстань d для системи площин, заданих індексами Міллера (212) , дорівнює $0,12$ нм.
- 1.3.1.35 Три системи площин у примітивній кубічній ґратці задані індексами Міллера: а) (111) ; б) (110) ; в) (100) . Вкажіть, для якої системи міжплощинні відстані мінімальні, а для якої системи – максимальні. Визначте відношення міжплощинних відстаней $d_{111} : d_{110} : d_{100}$.
- 1.3.1.36 Обчисліть кут φ між двома напрямками в кубічній ґратці кристала, які задані кристалографічними індексами $[110]$ і $[111]$.
- 1.3.1.37 Визначте кут між кристалографічними напрямками $[102]$ і $[\bar{2}13]$ у кристалі кубічної сингонії.
- 1.3.1.38 Обчисліть кут φ між нормаллями до площин (у кубічній ґратці), заданих індексами Міллера (111) і $(11\bar{1})$.
- 1.3.1.39 Дві площини в кубічній ґратці задані індексами Міллера (010) і (011) . Визначте кут φ між площинами.

Обернена ґратка

- 1.3.1.40 Доведіть, що обернена ґратка від оберненої ґратки є пряма ґратка.
- 1.3.1.41 Дві ґратки є оберненими одна до одної. Покажіть, що добуток об'ємів їхніх елементарних комірок дорівнює 2π .
- 1.3.1.42 Вирозіть кути між векторами оберненої ґратки через кути прямої ґратки.
- 1.3.1.43 Покажіть, що ґратка, обернена до кубічної об'ємноцентрованої, буде кубічною гранецентрованою.
- 1.3.1.44 Вектори основних трансляцій примітивної кубічної ґратки мають вигляд: $\mathbf{a} = a_0 \mathbf{e}_x$; $\mathbf{b} = a_0 \mathbf{e}_y$; $\mathbf{c} = a_0 \mathbf{e}_z$, де $a_0 = \text{Const}$. Визначте вектори основних трансляцій \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* в оберненому просторі.

1.3.1.45 Вектори основних трансляцій гранецентрованої кубічної ґратки мають вигляд: $\mathbf{a} = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$; $\mathbf{b} = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$; $\mathbf{c} = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z)$, де $a_0 = \text{const}$. Визначте об'єм елементарної комірки v^* і вектори основних трансляцій \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* в оберненому просторі.

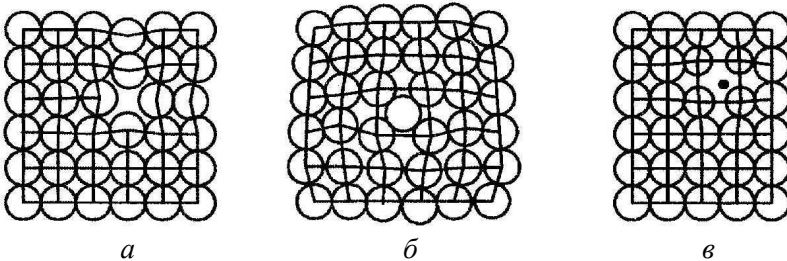
2 ДЕФЕКТИ СТРУКТУРИ КРИСТАЛІЧНОЇ БУДОВИ ТВЕРДИХ ТІЛ

2.1 Основні формули і визначення

За звичайних умов кристалічні тіла складаються з великої кількості кристалів, які називають зернами. Ці зерна по-різному орієнтовані в просторі і утворюють полікристал. Поверхні розділу зерен називають *границями зерен*. Зерна в полікристалах не є „ідеальними“ кристалами. Реальні кристали мають різні види дефектів.

Існують точкові, лінійні, поверхневі й об'ємні структурні недосконалості кристалічної ґратки.

Точковими дефектами називають такі недосконалості кристалічної ґратки, розміри яких близькі до розмірів атома. До точкових дефектів відносять вакансії (рис. 2.1, *a*), міжвузловинні і домішкові атоми (рис. 2.1, *б*, *в*).



a – вакансія; *б* – міжвузловинний атом; *в* – домішковий атом впровадження
Рисунок 2.1 – Точкові дефекти в кристалічній ґратці

Вакансії – це незайняті атомами вузли кристалічної ґратки, а *міжвузловинні атоми* – це атоми, які вийшли з вузлів ґратки і розмістились між ними.

Домішкові атоми можуть або заміщувати атоми основного металу (домішки заміщення), або втілюватися у вільні місця ґратки (домішки впровадження).

Точкові дефекти навіть при незначній концентрації суттєво впливають на фізичні властивості кристалів. Наприклад, тисячні частки атомного відсотку деяких домішок можуть у $10^5 - 10^6$ разів змінити питомий електроопір чистих напівпровідникових кристалів, хоча зміна їхніх механічних властивостей буде незначною.

Рівноважну відносну концентрацію вакансій розраховують із виразу:

$$c_v = e^{\frac{S_0}{k_B}} e^{-\frac{\epsilon_v}{k_B T}}, \quad (2.1)$$

де c_v – атомна (відносна) частка вакансій; S_0 – коливальна ентропія; ϵ_v – енергія утворення вакансії.

У металах з ГЦК ґраткою $e^{S_0/k_B} \approx 1$, тому при багатьох розрахунках користуються спрощеною формулою без врахування коливальної ентропії:

$$c_v \approx e^{-\frac{\epsilon_v}{k_B T}}. \quad (2.2)$$

Ця формула показує, що концентрація вакансій повинна сильно залежати від температури.

Аналогічно можна записати для *рівноважної концентрації міжвузловинних атомів*:

$$c_i = e^{-\frac{\epsilon_i}{k_B T}}, \quad (2.3)$$

де c_i – атомна частка міжвузловинних атомів; ϵ_i – енергія утворення міжвузловинних атомів.

Атоми, які коливально рухаються, безперервно обмінюються енергією між собою. Через хаотичність теплового руху енергія нерівномірно розподілена між різними атомами. У деякий момент атом

може одержати від сусідніх атомів такий надлишок енергії, якого буде достатньо для зайняття сусіднього положення в ґратці, якщо воно буде вільним. Так здійснюється *міграція* (переміщення) атомів в об'ємі кристалів.

Частота перескоків дефекту у нове положення в 1 с

$$\Gamma = \nu_0 e^{\frac{S_m}{k_B}} e^{-\frac{U_m}{k_B T}} \quad (2.4)$$

де ν_0 – частота коливань атомів у напрямку перевальної точки, тобто „частота спроб“ переходу в сусідній вузол ($\sim 10^{13} \text{ c}^{-1}$); S_m і U_m – відповідно ентропія й енергія активації міграції вакансій.

У випадку вакансійного механізму дифузії *коефіцієнт дифузії* – це кількість атомів, які проходять через одиницю площі, отже

$$D = a_0^2 \Gamma c_v, \quad (2.5)$$

де a_0 – період ґратки.

Підставляючи (2.3) в (2.4), отримаємо

$$D = \underbrace{a_0^2 \nu_0 e^{\frac{S_m}{k_B}} e^{-\frac{U_m}{k_B T}}}_{D_0} e^{-\frac{\varepsilon_v}{k_B T}} = D_0 e^{-\frac{U_m + \varepsilon_v}{k_B T}} = D_0 e^{-\frac{Q}{k_B T}}, \quad (2.6)$$

де $Q \equiv \varepsilon_v + U_m$ – енергія активації дифузії.

Вираз для прямого визначення *концентрації вакансій* c_v із вимірювань (при нагріванні до заданої температури) зміни довжини зразка і періоду ґратки має вигляд:

$$c_v = 3 \left(\frac{\Delta L}{L} - \frac{\Delta a_0}{a_0} \right), \quad (2.7)$$

де $\frac{\Delta L}{L}$ – відносна зміна довжини зразка, $\frac{\Delta a_0}{a_0}$ – відносна зміна періоду ґратки.

Якщо відома рівноважна концентрація вакансій за різних температур, легко обчислити енергію їх утворення.

Приріст електроопору $\Delta\rho_v$, зумовлений надлишковою концентрацією вакансій

$$\Delta\rho_v \propto e^{-\frac{\varepsilon_v}{k_B T}}. \quad (2.8)$$

2.2 Приклади розв'язування з

2.2.1 Оцініть енергію утворення вакансії у ГЦК-металі, якщо експериментально визначена рівноважна концентрація вакансій при температурі 927 °С дорівнює 10^{-5} .

Розв'язок

За формулою (2.2) енергія утворення вакансії

$$\varepsilon_v = -k_B T \ln c_v.$$

Підставляючи чисельні дані, матимемо:

$$\begin{aligned} \varepsilon_v &= -1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1200 \cdot \ln 10^{-5} = 5 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1200 \cdot \ln 10 \approx \\ &\approx 200 \cdot 10^{-21} \text{ Дж} = 1,1 \text{ еВ}. \end{aligned}$$

2.2.2 Для створення вакансій в Алюмінії (стала ґратки $a = 4,05 \cdot 10^{-10}$ м) потрібна енергія приблизно 0,75 еВ. Скільки існує вакансій при кімнатній температурі в стані термодинамічної рівноваги? При 550 °С? Для створення міжвузловинного дефекту в Алюмінії потрібна енергія приблизно 3 еВ. Визначте відношення $\frac{n_i}{n_v}$ при кімнатній температурі; при 550 °С.

Розв'язок

Концентрацію вакансій у стані термодинамічної рівноваги оцінимо за формулою (2.2):

$$c_v \approx e^{-\frac{\varepsilon_v}{k_B T}}. \quad (1)$$

З іншого боку

$$c_v = \frac{n_v}{n_a}, \quad (2)$$

де n_v і n_a – відповідно концентрація вакансій і атомів.

Алюміній має ГЦК ґратку, тому

$$n_a = \frac{4}{a^3}, \quad (3)$$

де a – стала ґратки (для Алюмінію $a = 4,05 \cdot 10^{-10}$ м). З формул (1) – (3) виходить:

$$n_v = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{\varepsilon_v}{k_B T}}. \quad (4)$$

Підставляючи числові значення величин, маємо для кімнатної температури

$$n_v = \frac{4}{(4,05 \cdot 10^{-10})^3} e^{-\frac{0,75 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}} \approx 1,6 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}.$$

Аналогічно знаходимо для 550 °С

$$n_v \approx 1,6 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}.$$

Для оцінки концентрації міжвузловинних атомів використаємо формулу (2.3). Тому аналогічно з формулами (1) – (3) для вакансій отримаємо

$$n_i = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}}. \quad (5)$$

З формул (4) – (5) маємо

$$\frac{n_i}{n_v} = e^{\frac{\varepsilon_v - \varepsilon_i}{k_B T}}. \quad (6)$$

Для кімнатної температури маємо

$$\frac{n_i}{n_v} = e^{\frac{(0,75-3) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{23} \cdot 300}} \approx 1,7 \cdot 10^{-38}.$$

Аналогічно для температури 550 °С:

$$\frac{n_i}{n_v} \approx 1,71 \cdot 10^{-14}.$$

2.2.3 За температури, що на 10 К менша від температури плавлення Al ($T_{\text{пл}} = 933 \text{ К}$), на долю вакансій припадає 0,08 % місць у кристалічній ґратці, а за 484 °С – лише 0,01 %. Чому дорівнює енергія утворення вакансій ε_v ? Скільки вакансій знаходиться в 1 см^3 при 527 °С, якщо припустити, що більшість вакансій утворилася внаслідок переходу атомів до поверхні?

Розв'язок

Для розрахунків використаємо формулу (2.1):

$$c_v = e^{\frac{S_0}{k_B}} e^{-\frac{\varepsilon_v}{k_B T}}, \quad \ln c_v = \frac{S_0}{k_B} - \frac{\varepsilon_v}{k_B T}, \quad \begin{cases} \ln c_{v_1} = \frac{S_0}{k_B} - \frac{\varepsilon_v}{k_B T_1}; \\ \ln c_{v_2} = \frac{S_0}{k_B} - \frac{\varepsilon_v}{k_B T_2}, \end{cases}$$

де за умовою задачі $T_1 = 923 \text{ К}$, $T_2 = 757 \text{ К}$, $c_{v_1} = 8 \cdot 10^{-4}$, $c_{v_2} = 10^{-4}$.

Розв'язуючи цю систему відносно невідомих ε_v та S_0 , знаходимо

$$\varepsilon_v = \frac{k_B T_1 T_2}{T_1 - T_2} \ln \frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} = \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 923 \cdot 757}{923 - 757} \cdot \ln \frac{8 \cdot 10^{-4}}{10^{-4}} = 1,2 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 0,75 \text{ еВ};$$

$$S_0 = 2,3 k_B.$$

Враховуючи отримані значення ε_v та S_0 , для 527 °С (800 К), отримаємо

$$c_v = e^{\frac{S_0}{k_B}} e^{-\frac{\varepsilon_v}{k_B T}} = e^{\frac{2,3 k_B}{k_B} - \frac{1,2 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 800}} = 1,8 \cdot 10^{-4}.$$

У перерахунку на 1 см^3 це складає $n_v = c_v n_a$, n_a – концентрація атомів,

$$n_a = N_A \frac{\rho}{M},$$

$$n_v = c_v N_A \frac{\rho}{\mu} = 1,8 \cdot 10^{-4} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \cdot \frac{2,7}{27} = 1,1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}.$$

2.3 Задачі для самостійного розв'язування

Точкові дефекти

- 2.3.1 Розташуйте елементи Al, Nb, Ni і Sn у ряд у порядку зростання енергії утворення вакансій.
- 2.3.2 При температурі поблизу точки плавлення рівноважна концентрація вакансій у Mg дорівнює $7,2 \cdot 10^{-4}$. Оцініть рівноважну концентрацію вакансій у Mg за кімнатної температури.
- 2.3.3 На скільки зміниться рівноважна концентрація вакансій у металі при підвищення температури від 600 до 1000 °C, якщо при 600 °C ця концентрація дорівнює $9,1 \cdot 10^{-6}$.
- 2.3.4 Експериментально визначено, що відносна концентрація вакансій у Cu дорівнює $8 \cdot 10^{-5}$ при 980 °C і $16 \cdot 10^{-5}$ при 1060 °C. За цими даними розрахуйте енергію утворення й ентропію утворення вакансій у Cu.
- 2.3.5 Нехтуючи ентропією утворення вакансій, визначте їхню рівноважну концентрацію c_v в Ag в інтервалі температур від 200 до 1200 K з кроком 200 K. Побудуйте графік $c_v(T)$.
- 2.3.6 Оцініть внутрішню енергію, зумовлену наявністю вакансій в одному молі при 27 і 1 027 °C.
- 2.3.7 Рівноважна відносна концентрація вакансій у ГЦК-металі при кімнатній температурі дорівнює 10^{-20} . Оцініть, на скільки порядків концентрація гартівних вакансій при різкому охолодженні з 927 °C буде більшою їхньої рівноважної концентрації при кімнатній температурі.
- 2.3.8 У Cu, загартованому з 600 °C, міститься $1,1 \cdot 10^{-5}$ % (ат.) вакансій. Яку температуру загартування необхідно обрати, щоб концентрація вакансій зросла на два порядки?

- 2.3.9 Приймавши енергію утворення міжвузловинного атому в міді 3 еВ, оцініть відношення кількості вакансій і міжвузловинних атомів в умовах термодинамічної рівноваги при кімнатній температурі і при 1000 °С.
- 2.3.10 У скільки разів розрізняються частоти перескоків вакансій в Al і Pt при 500 °С? Вважайте, що $S_0/k_B \approx 1$.
- 2.3.11 Енергія активації міграції вакансій у нікелі дорівнює 1,5 еВ, а енергія активації самодифузії 3,03 еВ. Визначте відношення рівноважної концентрації вакансій при 1027 °С до рівноважної концентрації при 27 °С.
- 2.3.12 Енергія активації самодифузії у міді дорівнює 2,04 еВ, а енергія активації міграції вакансій дорівнює 1,08 еВ. Визначте відношення рівноважної концентрації вакансій при 1000 °С до рівноважної концентрації вакансій при 500 °С.
- 2.3.13 Сіммонс і Баллуффі спостерігали, що коли срібний стрижень нагрівається до температури плавлення, то відносно збільшення довжини стрижня перевищує відносно збільшення його параметра ґратки на $5,6 \cdot 10^{-5}$. Вважаючи, що єдиними дефектами в стрижні є ізольовані вакансії, і приймаючи ентропію утворення вакансій рівною $1,5k_B$, обчисліть енергію утворення вакансії ϵ_v .
- 2.3.14 У дослідях з паралельного вимірювання довжини і періоду ґратки стрижня з Al концентрація вакансій при 655 °С дорівнювала $4,9 \cdot 10^{-4}$, а при 620 °С $3,7 \cdot 10^{-4}$. Визначте енергію й ентропію утворення вакансій в Al.
- 2.3.15 При нагріванні срібного стрижня до температури плавлення 961 °С відносно збільшення його довжини перевищує відносно збільшення періоду ґратки Ag на $5,6 \cdot 10^{-3} \%$. Вважаючи, що вакансійні комплекси відсутні, і вважаючи $S_0/k_B = 1,5$, визначте енергію утворення вакансій ϵ_v .
- 2.3.16 При температурі, близькій до точки плавлення, у стрижні із золота рівноважна концентрація вакансій складає $7,2 \cdot 10^{-4}$. При загартуванні ці вакансії виявились „замороженими“. Під час відпалу, який відновлює рівноважну дуже низьку концент-

рацію вакансій, відносно скорочення стрижня складає $1,1 \cdot 10^{-4}$. Як змінюється період ґратки в процесі цього відпалу?

- 2.3.17 При нагріванні металевого стрижня до деякої температури відносне збільшення його довжини перевищує відносне збільшення періоду ґратки металу на β %. Вважаючи, що вакансійні комплекси відсутні і величини S_0/k_B та E_{0v} відомі, визначте цю температуру.

Матеріал	S_0/k_B	ε_v , eV	β , %
Ag	1,5	1,13	$6,73 \cdot 10^{-4}$
W	2	3,6	$3,25 \cdot 10^{-3}$
Cu	2,4	1,28	$7,83 \cdot 10^{-3}$
Al	0,7	0,67	$4,38 \cdot 10^{-4}$
Au	0,7	0,95	$5,27 \cdot 10^{-4}$

- 2.3.18 При загартуванні з 700 і 950 °C електроопір Au при 78 K стає більшим, ніж у добре відпаленому стані відповідно на 0,7 і 9,0 %. Визначте за цими даними рівноважну концентрацію вакансій в Au при 827 °C, нехтуючи ентропійним внеском.

3 КВАНТОВА ТЕОРІЯ ФОТОЕФЕКТУ

3.1 Основні формули і визначення

Ейнштейн, в продовження ідеї Планка про квантовану енергію атомів-осциляторів, висловив гіпотезу, згідно якої світло не лише випромінюється, але і розповсюджується в просторі і поглинається речовиною у вигляді дискретних квантів електромагнітного випромінювання – фотонів.

При зовнішньому фотоелектричному ефекті електрон провідності металів поглинає фотон, одержує його енергію $\varepsilon = h\nu$ повністю. Для виходу з металу електрон повинен здійснити роботу виходу W . Тому рівняння Ейнштейна для зовнішнього фотоелектричного ефекту, яке виражає закон збереження енергії при фотоелектричному ефекті, має вигляд:

$$\varepsilon = W + K_{\max}, \quad (3.1)$$

де $K_{\max} = m v_{\max}^2 / 2$ – максимальна кінетична енергія фотоелектрона з масою m . З рівняння Ейнштейна безпосередньо випливає другий закон фотоелектру:

$$K_{\max} = h\nu - W. \quad (3.2)$$

Таким чином, v_{\max} залежать тільки від частоти світла і роботи виходу електрона з фотокатода.

Максимальна початкова кінетична енергія фотоелектронів залежить від частоти світла по лінійному закону. Вона перетворюється в нуль при частоті ν^* , яка відповідає червоній границі зовнішнього фотоелектру:

$$\nu^* = W/h. \quad (3.3)$$

Отже, червона границя залежить тільки від роботи виходу електрона W з металу.

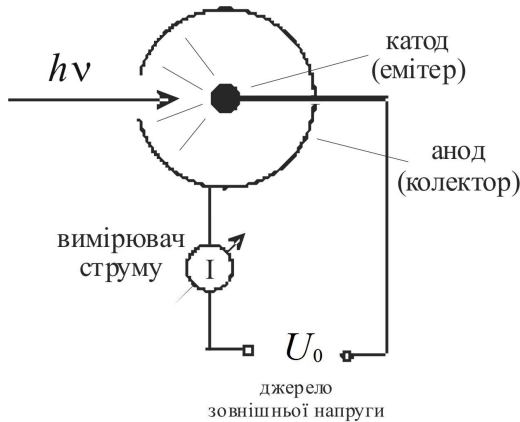


Рисунок 3.1 – Метод вакуумного сферичного конденсатора П.І. Лукірського і С.С. Прилежаєва (1926 р.) для вивчення зовнішнього фотоелектру

Краще за все рівняння Ейнштейна перевірено дослідями Лукірського та Прилежаєва, де був використаний метод сферичного конденсатора. Анодом в їх дослідженнях слугував скляний балон радіу-

сом 11 см, вкритий сріблом (рис. 3.1). У центрі балона розташовувався металевий катод у вигляді кулі радіусом 1,5 см.

Якщо між катодом і анодом створити затримуюче електричне поле, то можна записати рівняння:

$$K_{\max} = eU_0, \quad (3.4)$$

де U_0 - електрична напруга між катодом і анодом, $(-e)$ - заряд електрона (рис. 3.1).

Енергетична діаграма структури приведена на рис. 3.2.

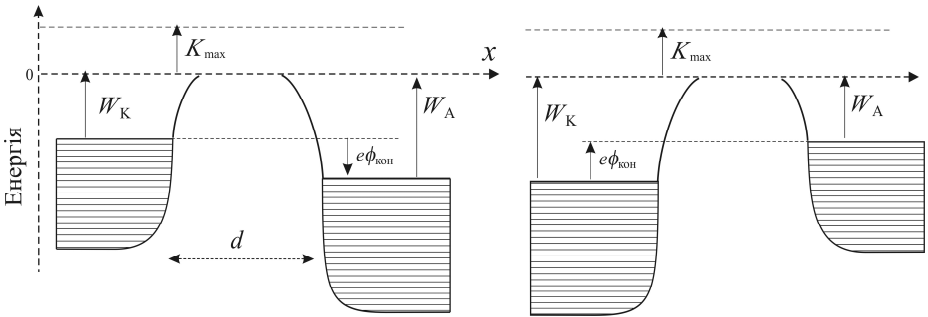


Рисунок 3.2 – Енергетична діаграма для електронів при умові $\phi_{\text{конт}} < 0$ і $\phi_{\text{конт}} > 0$.

Якщо відстань між електродами d нанометрової величини, то суттєвим є контактна різниця потенціалів між катодом (К) і анодом (А):

$$e\phi_{\text{конт}} = W_K - W_A,$$

яка відповідає за тунельний струм (див. курсовий проект «Одноелектронний діод»). В умовах експерименту Лукірьського і Прилежаєва $d = 10$ см і тунельний струм практично відсутній.

Розглянемо два режиму фотоелектру для однакових або різних металів, з яких виготовлено катод і анод.

Підставимо (3.4) в рівняння фотоелектру (3.1) і представимо цей вираз у вигляді функції $U_0 = f(\nu)$:

$$U_0 = h\nu/e. \quad (3.5)$$

Відповідно (3.5), затримуюча напруга лінійно залежить від частоти падаючого світла і ця залежність описується рівнянням $y = kx - b$. На рис. 3.3 наведено залежності $U_0(\nu)$ для алюмінію Al, цинку Zn, нікелю Ni, здобуті експериментально Лукірським і Прилежаєвим (1926 р.).

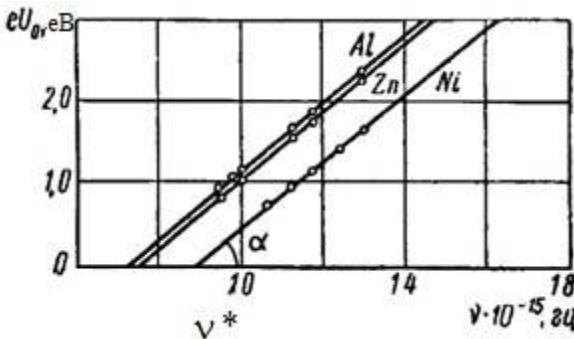


Рисунок 3.3 – Експериментальні залежності $U_0(\nu)$ для металів Al, Zn та Ni взяті з роботи Лукірського і Прилежаєва (1926 р.)

Точки перетину прямих із віссю абсцис визначають значення граничної частоти ν^* , або червоної межі фотоефекту для цих металів:

$$\nu^* = \frac{W_K}{h}. \quad (3.6)$$

Усі прямі паралельні одна одній, і згідно з рівнянням (3.5), можна записати:

$$\operatorname{tg} \alpha = h/e.$$

Звідки середнє значення сталої Планка, яке знайдене у цих дослідях, дорівнює $h = 6,543 \cdot 10^{-34}$ Дж с. Точність дослідів становила 0,1 – 0,2 %. Значення сталої Планка, отримане в дослідях із фотоефекту, співпадає з результатами інших методів визначення цієї константи. Таким чином, було підтверджено правильність квантової теорії фотоефекту.

Квантовий вихід фотоємітера. Вище в усіх прикладах розглядався одиничний акт взаємодії кванта випромінювання з електроном у

фотоемітері. Насправді в реальних приладах на фотоемітер падає потік фотонів i , в свою чергу, фотоемітер випускає у вакуум потік електронів. При цьому лише незначна частина фотонів передає свою енергію електронам так, щоб електрони могли вийти з фотоемітера. Решта фотонів поглинаються у фотокатоді без емісії електронів у вакуум або відбиваються від поверхні фотокатоду.

Тому важливою практичною характеристикою вакуумного фотоелементу є квантовий вихід фотоемітера η – відношення кількості електронів N_e , що вилетіли з емітера до кількості падаючих за той же час t квантів (фотонів, photons) N_{ph} .

Для монохроматичного випромінювання з довжиною хвилі λ квантовий вихід визначається простим співвідношенням:

$$\eta = \frac{N_e}{N_{ph}}, \quad (3.7)$$

$$\gamma \equiv \frac{I}{P_{\text{irrad}}}, \quad I = \frac{Q}{t} = \frac{eN_e}{t}, \quad P_{\text{irrad}} = \frac{h\nu N_{ph}}{t}, \quad \nu = \frac{c}{\lambda} \quad (3.8)$$

$$\eta = \frac{hc}{e\lambda} \gamma \quad (3.9)$$

де λ – довжина хвилі, γ – спектральна чутливість фотокатоду, I – сила струму фотоемісії; P_{irrad} – потужність монохроматичного випромінювання (irradiation);. Для одного і того ж фотокатоду спектральна чутливість може приймати різні значення в залежності від *спектрального складу* падаючого випромінювання.

3.2. Приклад розв'язування задач

3.2.1 Визначте максимальну швидкість v_{max} фотоелектронів, що вилітають з поверхні Ag (срібла) під дією:

- 1) ультрафіолетового випромінювання, довжина хвилі якого $\lambda_1 = 155$ нм;
- 2) γ -випромінювання (рентгенівського) з довжиною хвилі $\lambda_2 = 2,47$ нм.

Розв'язок

Максимальну швидкість фотоелектронів визначаємо з рівняння Ейнштейна для фото ефекту (3.1). Частоту світла визначаємо за формулою (3.8), роботу виходу W беремо з таблиць; для срібла $W = 4,7$ еВ.

Кінетична енергія фотоелектрона в залежності від того, яку він має швидкість, може бути виражена або за класичною формулою $K = \frac{m_0 v^2}{2}$, або за релятивістською формулою

$$K = (m - m_0)c^2,$$

де m_0 – маса спокою електрона.

Швидкість фотоелектрона залежить від енергії фотона, який викликає фото ефект: якщо енергія фотона $\varepsilon = h\nu \ll mc^2$ – (енергії спокою електрона m_0c^2), то може бути застосована класична формула (3.1). Якщо ε можна **порівняти** із величиною енергії спокою електрона m_0c^2 , то в цьому випадку кінетичну енергію треба визначати за релятивістською формулою (3.4).

1). У формулу енергії фотона $\varepsilon = hc/\lambda$ підставимо значення величин h , c , λ та, виконавши розрахунок, для ультрафіолетового випромінювання отримаємо $\varepsilon_1 = 1,28 \cdot 10^{-18}$ Дж = 8 еВ.

Це значення енергії фотона набагато менше енергії спокою електрона (0,51 МеВ). Тому для даного випадку максимальна кінетична енергія фотоелектрона може бути знайдена з формули

$$\varepsilon_1 = W + m_0 v_{\max}^2 / 2.$$

Підставивши $W = 4,7$ еВ та $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг, маємо $v_{\max} = 1,08 \cdot 10^6$ м/с.

2). Енергія фотона γ -випромінювання дорівнює:

$$\varepsilon_2 = hc/\lambda = 8,04 \cdot 10^{-15} \text{ Дж} = 0,502 \text{ МеВ}.$$

Робота виходу електрона ($W = 4,7$ еВ \ll порівняно із енергією γ -фотона, тому максимальна кінетична енергія електрона практично дорівнює енергії фотона: $K_{\max} = \varepsilon_2 = 0,502$ МеВ.

Оскільки в даному випадку кінетичну енергію електрона можна порівняти із його енергією спокою, то для визначення швидкості електрона треба взяти релятивістську формулу для кінетичної енергії, де використовується

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Остаточно маємо $v_{\text{max}} = 226 \cdot 10^6 \text{ м/с}$.

3.3. Задачі для самостійного розв'язування

- 3.3.1 Визначте максимальну швидкість фотоелектронів поблизу поверхні емітера при опроміненні цезієвого фотоелемента з роботою виходу електронів 1,81 еВ монохроматичним світлом із довжиною хвилі 0,39 мкм.
- 3.3.2 Обчисліть квантовий вихід фотокатода, чутливість якого на довжині хвилі 0,63 мкм складає $75 \cdot 10^{-6} \text{ А/Вт}$?
- 3.3.3 У фотодіоді з цезієвим фотокатодом ($W_K=1,81 \text{ еВ}$), який опромінюється світлом з довжиною хвилі 0,53 мкм, і вольфрамовим колектором ($W_A=4,5 \text{ еВ}$) визначте запірну зовнішню напругу U_0 , при якій струм фотоemisії дорівнюватиме нулю.
- 3.3.4 Цезієвий емітер фотоелемента ($W_K=1,81 \text{ еВ}$) з'єднаний з його вольфрамовим колектором ($W_A=4,5 \text{ еВ}$) через батарею з ЕРС 1,2 В, підключену позитивним полюсом до колектору. Визначте мінімальну довжину хвилі падаючого випромінювання λ , при якій ще немає струму у зовнішньому ланцюгу фотоелемента.
- 3.3.5 При освітленні цезієвого катода монохроматичним світлом з довжиною хвилі 0,23 мкм запірна напруга U_{01} виявилась рівною -2,2 В, а при довжині хвилі 0,27 мкм - $U_{02} = -1,4 \text{ В}$. Визначити числове значення сталої h .
- 3.3.6 Обчисліть енергію фотонів:
- жовтого світла з довжиною хвилі $\lambda = 5570 \text{ \AA}$,
 - синього світла з довжиною хвилі $\lambda = 4210 \text{ \AA}$,
 - ультрафіолетового випромінювання з довжиною хвилі $\lambda = 2557 \text{ \AA}$.

Визначте максимальну швидкість електронів, які вибиваються кожним із наведених вище фотонів з поверхні цезієвого фотокатода.

- 3.3.7 Обчисліть довжину монохроматичного світла, яке падає на фотомітер ($W_K = 1,0$ еВ), якщо максимальна швидкість електронів, які вибиваються з поверхні емітера, $v_{\max} = 500$ км/с.
- 3.3.8 Визначте максимальну швидкість фотоелектронів поблизу поверхні емітера при опроміненні монохроматичним світлом довжиною $0,59$ мкм емітера з роботою виходу електронів $1,6$ еВ.
- 3.3.9 Визначте максимальну швидкість фотоелектронів поблизу поверхні емітера при опроміненні фотомітера з роботою виходу електронів $1,6$ еВ монохроматичним світлом довжиною $0,36$ мкм.
- 3.3.10 Обчислити максимальну швидкість електронів, які вибиваються з поверхні фото емітера під дією монохроматичного пучка світла гелій-кадмієвого лазера з довжиною хвилі $\lambda = 0,44$ мкм. Робота виходу сурм'яно-цезієвого фото емітера дорівнює $1,6$ еВ.
- 3.3.11 Обчисліть роботу виходу електронів із фотокатода за величиною довжини хвилі $\lambda_{\max} = 12000 \text{ \AA}$, яка відповідає довгохвильовій границі фотоэффекту.
- 3.3.12 Визначити довгохвильову (червону) границю фотоэффекту для цезієвого фотокатода ($W_K = 1,81$ еВ) з'єднаного його вольфрамовим колектором ($W_A = 4,5$ еВ). На скільки зсунеться червона границя фотоэффекту за наявності затримуючого електричного поля напруженістю $E = 0,5$ В/см та відстанню між катодом і анодом $d = 10$ см?
- 3.3.13 Монохроматичне випромінювання гелій-неонового лазера з довжиною хвилі $\lambda = 6328 \text{ \AA}$ освітлює матеріали, наведені в таблиці А6 (див. Додаток). Знайти:
- 1) Із якого матеріалу електрони будуть вибиватися з максимальною швидкістю? Чому дорівнюватиме ця швидкість?
 - 2) Яку роботу виходу електронів матиме матеріал фотокатода, призначеного для роботи у видимій частині спектру електромагнітних хвиль ($\lambda = 0,35 - 0,7$ мкм). Фактично, знайти $W_K(\lambda)$! Наведіть приклади таких матеріалів.

- 3.3.14 На фотоелемент падає потік монохроматичного випромінювання потужністю 100 мВт з довжиною хвилі 550 нм. Чому дорівнюватиме квантовий вихід фотокатоду на даній довжині хвилі, якщо фотострум дорівнює 35 мкА?
- 3.3.15 Визначте квантовий вихід фотокатоду, якщо його чутливість на довжині хвилі 0,69 мкм складає $1 \cdot 10^{-6}$ А/Вт.
- 3.3.16 Визначте квантовий вихід фотокатоду, якщо його чутливість на довжині хвилі 0,63 мкм складає $2 \cdot 10^{-6}$ А/Вт.
- 3.3.17 На фотоелемент падає світловий потік з довжиною хвилі 550 нм і потужністю 120 мВт. Чому дорівнюватиме квантовий вихід фотокатоду на даній хвилі, якщо фотострум дорівнює 150 мкА?
- 3.3.18 Ізольований фотокатод, виготовлений із цезію ($W_K = 1,81$ еВ), опромінюється світлом з довжиною хвилі 0,38 мкм. До якого потенціалу зарядиться фотокатод?
- 3.3.19 При освітленні вакуумного фотоелементу монохроматичним світлом з довжиною хвилі 0,66 мкм запірна напруга U_{01} виявилась рівною 1,555 В, а при довжині хвилі 0,44 мкм - $U_{02} = 2,343$ В. Як визначити числове значення сталої Планка?
- 3.3.20 Визначте максимальну швидкість електронів, які вибиваються кожним із наведених в задачі 3.6 фотонів з поверхні цезієвого фотокатоду.
- 3.3.21 Визначте максимальну швидкість фотоелектронів поблизу поверхні емітера при опроміненні монохроматичним світлом довжиною 0,59 мкм емітера з роботою виходу електронів 1,6 еВ.
- 3.3.22 Визначте максимальну швидкість фотоелектронів поблизу поверхні емітера при опроміненні фотоемітера з роботою виходу електронів 1,6 еВ монохроматичним світлом довжиною 0,36 мкм.

4. ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІЧНОЇ ҐРАТКИ

4.1. Основні формули і визначення

Теплові властивості кристала – теплоємність і теплопровідність – зазвичай описують моделлю ідеального газу фотонів.

Молярна внутрішня енергія хімічно простих (які складаються з однакових атомів) твердих тіл у класичній теорії теплоємності виражають формулою

$$U = 3RT, \quad (4.1)$$

де R – універсальна газова стала; T – термодинамічна температура.

Теплоємність c_m системи (тіла) за сталого об'єму визначають як похідну від внутрішньої енергії U за температурою, тобто

$$c_m = \left(\frac{dU}{dT} \right)_V = \frac{m}{M} C, \quad (4.2)$$

де C - молярна теплоємність.

Закон Дюлонга і Пті: при кімнатній температурі молярна теплоємність одноатомних твердих тіл є величина стала, однакова для хімічно простих речовин, і дорівнює $3R$:

$$C = 3R. \quad (4.3)$$

Середнє значення енергії $\langle \varepsilon \rangle$ квантового осцилятора, яка припадає на один ступінь вільності, в квантовій теорії Ейнштейна виражають формулою

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}, \quad (4.4)$$

де ω – циклічна частота коливань осцилятора.

Молярну внутрішню енергію кристала в квантовій теорії теплоємності Ейнштейна визначають за формулою

$$U = 3R \frac{\Theta_E}{e^{\frac{\Theta_E}{T}} - 1}, \quad (4.5)$$

де $\Theta_E = \hbar\omega/k_B$ – характеристична температура Ейнштейна.

Молярна теплоємність кристала в квантовій теорії теплоємності Ейнштейна

$$C = 3R \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\Theta_E}{T}}}{\left(e^{\frac{\Theta_E}{T}} - 1 \right)^2}. \quad (4.6)$$

При низьких температурах ($T \ll \Theta_E$)

$$C = 3R \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{\Theta_E}{T}}. \quad (4.7)$$

Молярна теплоємність кристала за Дебаєм

$$C = 3R \left(12 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx - \frac{3 \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)}{e^{\frac{\Theta_D}{T}} - 1} \right). \quad (4.8)$$

Граничний закон Дебая: в області низьких температур¹ ($T \ll \Theta_D$) формула (4.8) набуває вигляду

$$C = \frac{12\pi^4}{5} R \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3. \quad (4.8, a)$$

Теплове розширення твердих тіл. Сила $f(x)$, яка повертає частинку в положення рівноваги при ангармонічних коливаннях, визначають за виразом

$$F(x) = -\beta x + \gamma x^2, \quad (4.9)$$

де β – коефіцієнт гармонічності, пов'язаний з сталою ґратки a між атомами кристала і модулем повздовжньої пружності Y співвідношенням

$$\beta = aY; \quad (4.10)$$

¹ Вважати при розв'язуванні задач $T \ll \Theta_D$, якщо $T/\Theta_D < 0,1$.

γ – коефіцієнт ангармонічності, який характеризує асиметрію коливань атомів у твердому тілі,

$$\gamma = \frac{\beta}{2a}. \quad (4.11)$$

Коефіцієнт лінійного розширення, за визначенням,

$$\lambda_T = \frac{1}{l_0} \frac{dl}{dT}, \quad (4.12)$$

де l_0 - довжина стрижня при нульовій температурі. Теоретично його виражають через коефіцієнти β і γ формулою

$$\lambda_T = \frac{\gamma k_B}{\beta^2 a}. \quad (4.13)$$

За визначенням коефіцієнт об'ємного розширення

$$\alpha_V = \frac{1}{V_0} \frac{dV}{dT} = 3\lambda_T. \quad (4.14)$$

4.2. Приклади розв'язування задач

4.2.1 Скориставшись законом Дюлонга і Пті, визначте, з якого матеріалу зроблено кульку масою $m = 25$ г, якщо для її нагрівання від $t_1 = 10^\circ\text{C}$ до $t_2 = 30^\circ\text{C}$ необхідно витратити кількість теплоти $Q = 117$ Дж.

Розв'язок

Витрачену кількість теплоти визначимо за формулою

$$Q = cm(t_2 - t_1),$$

де c – питома теплоємність матеріалу кульки.

За законом Дюлонга і Пті молярна теплоємність $C = 3R$. Молярна C і питома c теплоємності пов'язані співвідношенням

$$c = \frac{C}{M} = \frac{3R}{M}.$$

Тоді

$$Q = cm(t_2 - t_1) = \frac{3R}{M} m(t_2 - t_1),$$

звідки

$$M = \frac{3mR(t_2 - t_1)}{Q} = \frac{3 \cdot 0,025 \cdot 8,31 \cdot (30 - 10)}{117} = 107 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}.$$

Відповідь: срібло.

4.2.2 Обчисліть за класичною теорією теплоємність C кристала броміду алюмінію AlBr_3 об'ємом $V = 200 \text{ см}^3$. Густина ρ броміду алюмінію дорівнює $3,01 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$.

Розв'язок

Хімічна формула сполуки AlBr_3 містить чотири атоми ($k = 4$). Тому, відповідно до закону Неймана – Коппа, молярна теплоємність кристала:

$$C = 3R \cdot k.$$

Теплоємність C всього кристала дорівнює

$$C = \frac{m}{M} C = \frac{\rho V}{M} C = \frac{3k\rho V}{M} R.$$

Отже, підставляючи в останню формулу чисельні значення, отримаємо

$$C = \frac{3 \cdot 4 \cdot 3,01 \cdot 10^3 \cdot 200 \cdot 10^{-6}}{267 \cdot 10^{-3}} \cdot 8,31 = 225 \frac{\text{Дж}}{\text{К}}.$$

Відповідь: $C = 225 \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$.

4.2.3 Користуючись теорією теплоємності Ейнштейна, визначте зміну внутрішньої енергії одного моля кристалу при нагріванні його від $T_1 = 0$ до $T_2 = 0,1\Theta_E$. характеристичну температуру Ейнштейна для даного кристалу прийміть рівною $\Theta_E = 300 \text{ К}$.

Розв'язок

Молярна внутрішня енергія кристала в квантовій теорії теплоємності Ейнштейна визначається формулою (4.5):

$$U = 3R \frac{\Theta_E}{e^{\frac{\Theta_E}{T}} - 1}. \quad (1)$$

Зміна внутрішньої енергії:

$$\Delta U = \int_{T_1}^{T_2} dU = \int_{T_1}^{T_2} \frac{dU}{dT} dT = \int_{T_1}^{T_2} C dT. \quad (2)$$

Для низьких температур ($T \ll \Theta_E$) теплоємність визначають за виразом (4.7):

$$C = 3R \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{\Theta_E}{T}}. \quad (3)$$

Підставляючи вираз (2) в (1), отримуємо:

$$\Delta U = \int_{T_1}^{T_2} 3R \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{\Theta_E}{T}} dT. \quad (4)$$

Введемо нову змінну $x = \Theta_E/T$, тоді $dx = -(\Theta_E/T^2) dT$. При цьому температура T_1 відповідає $x_1 \rightarrow \infty$, $T_2 - x_2 = \frac{\Theta_E}{0,1\Theta_E} = 10$.

Остаточно отримуємо

$$\Delta U = -3R\Theta_E \int_{10}^{\infty} e^{-x} dx = 3R\Theta_E e^{-10} = 3 \cdot 8,31 \cdot 300 \cdot e^{-10} \text{ Дж} = 340 \text{ Дж}.$$

Відповідь: $\Delta U = 340 \text{ Дж}$.

4.2.4 Визначте кількість теплоти ΔQ , необхідну для нагрівання кристала NaCl масою $m = 20 \text{ г}$ на $\Delta T = 2 \text{ К}$ у двох випадках: 1) $T_1 = \Theta_D$; 2) $T_1 = 2 \text{ К}$. Характеристична температура Дебая $\Theta_D = 320 \text{ К}$ для NaCl.

Розв'язок

Кількість теплоти, яка підводиться для нагрівання тіла від температури T_1 до T_2 , обчислимо за формулою

$$\Delta Q = \int_{T_1}^{T_2} c_m dT, \quad (1)$$

де c_m – теплоємність тіла (системи). Теплоємність c_m тіла пов'язана з молярною теплоємністю C співвідношенням

$$c_m = \frac{m}{M} C,$$

тому

$$\Delta Q = \frac{m}{M} \int_{T_1}^{T_2} C dT = \frac{m}{M} C(T_1) \Delta T. \quad (2)$$

Молярну теплоємність $C(T_1)$ у теорії Дебая виражають співвідношенням (4.8):

$$C = 3R \left(12 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx - \frac{3 \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)}{e^{\frac{\Theta_D}{T}} - 1} \right).$$

$$\Delta Q = 2,87 \frac{m}{M} R \Delta T = 2,87 \cdot \frac{20 \cdot 10^{-3}}{58,5 \cdot 10^{-3}} \cdot 8,31 \cdot 2 \text{ Дж} = 16,3 \text{ Дж}.$$

У другому випадку ($T \ll \Theta_D$)

$$C = \frac{12\pi^4}{5} R \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3,$$

отримаємо

$$\Delta Q = \frac{12\pi^4}{5} \frac{m}{M} \frac{R}{\Theta_D^3} \int_{T_2}^{T_2+\Delta T} T^3 dT = \frac{12\pi^4}{5} \frac{m}{M} \frac{R}{\Theta_D^3} \left(\frac{(T_2 + \Delta T)^4}{4} - \frac{T_2^4}{4} \right).$$

Відповідь: $\Delta Q = 16,3 \text{ Дж}$; $\Delta Q = 1,22 \text{ мДж}$.

4.2.5 При нагріванні деякого металу від $t_1 = 0^\circ\text{C}$ до $t_2 = 500^\circ\text{C}$ його густина зменшується в 1,027 рази. Знайдіть для цього металу коефіцієнт лінійного розширення α_l , вважаючи його постійним у заданому інтервалі температур.

Розв'язок

Густина металу при температурі t_2 дорівнює $\rho = \frac{m}{V}$, тоді його густина при температурі t_1 дорівнює $\rho_0 = \frac{m}{V_0}$.

Відносна зміна об'єму при нагріванні

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \frac{V - V_0}{V_0} = \frac{\rho_0}{\rho} - 1. \quad (1)$$

З іншого боку,

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \alpha_V \Delta T,$$

де α_V – температурний коефіцієнт об'ємного розширення. Оскільки метал ізотропний, то температурний коефіцієнт лінійного розширення $\lambda_T = \alpha_V/3$, тоді

$$\Delta V/V_0 = 3\lambda_T \Delta T = 3\lambda_T (t_2 - t_1). \quad (2)$$

Прирівнюючи у виразах (1) і (2) праві частини, маємо

$$\rho_0/\rho - 1 = 3\lambda_T (t_2 - t_1), \quad \lambda_T = 1,8 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}.$$

Відповідь: $\lambda_T = 1,8 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$

4.2.6 Оцініть термічний коефіцієнт розширення твердого тіла

α , вважаючи, що коефіцієнт ангармонічності $\gamma \approx \frac{\beta}{2a}$.

При оцінці прийміть: модуль Юнга $Y = 100$ ГПа, міжатомна відстань $a = 0,3$ нм.

Розв'язок

Теоретичне значення термічного коефіцієнту розширення α_T можна оцінити за формулою (4.13):

$$\lambda_T = \frac{\gamma k_B}{\beta^2 r_0}. \quad (1)$$

З урахуванням наближеної рівності $\gamma \approx \frac{\beta}{2a}$ формула (1) набуває вигляду:

$$\lambda_T \approx \frac{k_B}{2\beta a^2}. \quad (2)$$

Використовуючи співвідношення (4.10), перепишемо (2) у вигляді:

$$\lambda_T \approx \frac{k_B}{2Ea^3} = 2,6 \cdot 10^{-6} \text{ К}.$$

Відповідь: $\lambda_T = 2,6 \cdot 10^{-6} \text{ К}$.

4.3. Задачі для самостійного розв'язування

- 4.3.1 Скориставшись законом Дюлонга і Пті, знайдіть, у скільки разів питома теплоємність Алюмінію більше за питому теплоємність Платини.
- 4.3.2 Свинцева куля летить із швидкістю $v = 400 \frac{\text{м}}{\text{с}}$, ударяється об стінку і входить в неї. Вважаючи, що 10% кінетичної енергії кулі йде на її нагрівання, знайдіть, на скільки градусів нагрілась куля. Питому теплоємність свинцю визначте за законом Дюлонга і Пті.
- 4.3.3 Визначте зміну ΔU внутрішньої енергії кристала нікелю при нагріванні його від $t_1 = 0^\circ \text{C}$ до $t_2 = 200^\circ \text{C}$. Маса кристала $m = 20 \text{ г}$. Обчислити теплоємність C .
- 4.3.4 Знайдіть частоту ν коливань атомів Аргентуму за теорією теплоємності Ейнштейна, якщо характеристична температура Θ_E Аргентуму дорівнює 165 К.
- 4.3.5 Знайдіть, у скільки разів зміниться середня енергія $\langle \varepsilon \rangle$ квантового осцилятора, яка припадає на один ступінь вільності, з підвищенням температури від $T_1 = \Theta_E/2$ до $T_2 = \Theta_E$?
- 4.3.6 Використовуючи квантову теорію теплоємності Ейнштейна, обчисліть зміну ΔU молярної внутрішньої енергії кристала при нагріванні його на $\Delta T = 2 \text{ К}$ від температури $T = \Theta_E/2$.
- 4.3.7 Скориставшись теорією теплоємності Ейнштейна, визначте зміну ΔU молярної внутрішньої енергії кристала при нагріванні його від нуля до $T = 0,25\Theta_E$. Характеристичну температуру Ейнштейна для даного кристала прийміть рівною $\Theta_E = 300 \text{ К}$.
- 4.3.8 У кристалі повареної солі NaCl при температурі $T = 10 \text{ К}$ теплоємність одиниці об'єму $\bar{c} = 830 \cdot 10^4 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3 \cdot \text{К}}$. Оцініть швидкість звуку s у кристалі та його дебайвську температуру Θ_D . Стала ґратки NaCl дорівнює $a = 0,3 \text{ нм}$.
- 4.3.9 Використовуючи теорію Дебая, обчисліть питому теплоємність заліза при температурі $T = 15 \text{ К}$. Прийміть температуру

Дебая для заліза рівною $\Theta_D = 467 \text{ К}$. Умову $T \ll \Theta_D$ вважати виконаною.

- 4.3.10 Температура Дебая алмазу $\Theta_D = 2000 \text{ К}$. Визначте його питому теплоємність при температурі $T = 30 \text{ К}$.
- 4.3.11 Обчисліть дебаївську частоту ω_D , якщо відомо, що молярна теплоємність C срібла при $T = 20 \text{ К}$ дорівнює $C = 1,7 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3 \cdot \text{К}}$.
- 4.3.12 Елементарна комірка кристала Купруму – гранецентрований куб. Визначте лінійний коефіцієнт теплового розширення α_l монокристала Купруму, якщо модуль Юнга $Y = 12,3 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, а густина $\rho = 8,9 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.
- 4.3.13 Знайдіть коефіцієнт об'ємного розширення α_v для анізотропного кристала, коефіцієнти лінійного розширення якого за трьома взаємно перпендикулярними напрямками становлять $\lambda_T^{(1)} = 1,25 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$; $\lambda_T^{(2)} = 1,10 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$; $\lambda_T^{(3)} = 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$.
- 4.3.14 Обчисліть максимальну силу F_{\max} , яка повертає атом твердого тіла в положення рівноваги, якщо коефіцієнт гармонічності $\beta = 50 \text{ Н/м}$, а коефіцієнт ангармонічності $\gamma = 500 \text{ ГПа}$.
- 4.3.15 Оцініть коефіцієнт гармонічності β у формулі (4.9), якщо рівноважна відстань a між частинками дорівнює $0,3 \text{ нм}$, модуль Юнга $Y = 200 \text{ ГПа}$.

5 СТАТИСТИКА ЕЛЕКТРОНІВ У ТВЕРДОМУ ТІЛІ. РОЗПОДІЛ ФЕРМІ – ДІРАКА

5.1. Основні формули і визначення

У моделі вільних електронів з масою m вважають, що метал містить газ електронів, здатних переміщуватися по всьому об'єму. В основному стані найнижчі одноелектронні рівні заповнені аж до **енергії Фермі** при $T = 0$

$$\varepsilon_F(T=0) = \frac{m \vartheta_F^2}{2} = \frac{p_F^2(T=0)}{2m} \equiv \varepsilon_F, \quad p_F(T=0) = \hbar [3\pi^2 n(T=0)]^{1/3}, \quad (5.1)$$

де $p_F(T=0)$ та $n(T=0)$ – ферміївський імпульс та концентрація електронів при $T=0$, відповідно, $v_F = p_F/m$ – швидкість Фермі. Температурна залежність $\varepsilon_F(T)$ визначається залежністю $n(T)$ в (5.1). Температуру

$$T_0 = \varepsilon_F(T=0)/k_B \quad (5.2)$$

називають **температурою виродження**.

Концентрація вільних електронів з енергією в інтервалі $(\varepsilon; \varepsilon + d\varepsilon)$ має вигляд

$$n(\varepsilon)d\varepsilon = f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon,$$

де функція Фермі – Дірака

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T} + 1} \quad (5.3)$$

(див. рис. 5.1), а $g(\varepsilon)$ – густина станів.

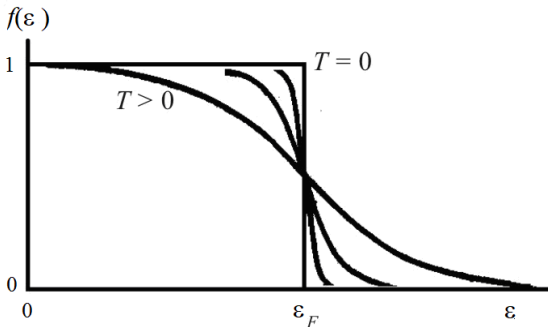


Рисунок 5.1 Графічне зображення функції Фермі – Дірака

Остаточно

$$n(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T} + 1}. \quad (5.4)$$

При температурі $T=0$ вираз (5.4) набуває вигляду

$$n(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon. \quad (5.5)$$

Температурну залежність $\varepsilon_F(T)$ також можна приблизно оцінити з (5.3) при умові $\varepsilon_F(0) \gg k_B T$ як

$$\varepsilon_F(T) \approx \varepsilon_F(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F(0)} \right)^2 \right]. \quad (5.6)$$

5.2. Приклади розв'язування задач

5.2.1 Визначте концентрацію вільних електронів у алюмінію при температурі $T = 0$ К, якщо відомо, що їхня енергія Фермі дорівнює 11,69445 еВ.

Розв'язок

Концентрацію вільних електронів визначимо за формулою (5.1) для енергії Фермі, яка пов'язана з середньою енергією вільних електронів:

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m\varepsilon_F}{\hbar^2} \right)^{3/2} = 1,818165 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}.$$

5.2.2 Визначте температуру виродження T_0 для Калію, якщо на кожний атом припадає по одному вільному електрону. Густина калію $\rho = 860 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

Розв'язок

Температура виродження дається (5.2) та (5.1). Для одновалентного Калію концентрація електронів дорівнює концентрації атомів,

$$n = \frac{\rho N_A}{M}.$$

Остаточного маємо

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2mk_B} \left(3\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right)^{2/3} = 2,36 \cdot 10^4 \text{ К}.$$

5.2.3 Визначте положення рівня Фермі і сумарну кінетичну енергію вільних електронів в $V = 1 \text{ см}^3$ Аргентуму при температурі поблизу абсолютного нуля, вважаючи, що число вільних електронів дорівнює числу атомів Аргентуму.

Розв'язок

Для одновалентного Аргентуму концентрація електронів дорівнює концентрації атомів,

$$n = \frac{\rho N_A}{M}.$$

Далі

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right)^{2/3} = 8,8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 5,5 \text{ еВ}.$$

Сумарна кінетична енергія вільних електронів

$$K = V \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon dn = \frac{2V \sqrt{2m^3}}{5\pi^2 \hbar^3} \varepsilon_F^{5/2} = 3,08 \cdot 10^{-4} \text{ Дж}.$$

5.2.4 Оцініть середню енергетичну відстань $\delta\varepsilon$ між дозволеними енергетичними рівнями зони провідності в кристалі Аргентуму об'ємом $V = 1 \text{ см}^3$, якщо енергія Фермі $\varepsilon_F = 5,5 \text{ еВ}$.

Розв'язок

Середня енергетична відстань між дозволеними рівнями $\delta\varepsilon = \varepsilon_F / N$, де N – число рівнів, заповнених електронами. Концентрація вільних електронів пов'язана з енергією Фермі виразом (5.1). Усі рівні, які лежать нижче рівня Фермі, практично повністю заповнені електронами, причому згідно принципу Паулі на кожному рівні знаходиться два електрони. Звідси виходить, що

$$\delta\varepsilon = \frac{2\varepsilon_F}{nV} = 3 \cdot 10^{-42} \text{ Дж} = 1,88 \cdot 10^{-23} \text{ еВ}$$

5.2.5 Відомо, що в системі за температури T в стані з енергією 6,35852 еВ середня кількість електронів $N = 0,2$, а в стані з енергією 5,64148 еВ середня кількість електронів $N = 0,8$. Знайдіть температуру T і рівень Фермі ε_F .

Розв'язок

Середня кількість електронів у стані з енергією ε визначається функцією Фермі – Дірака:

$$N(\varepsilon) = f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T} + 1}.$$

Отже:

$$\frac{1}{e^{\frac{11600(6,35852 - \varepsilon_F)}{T}} + 1} = 0,2; \quad \frac{1}{e^{\frac{11600(5,64148 - \varepsilon_F)}{T}} + 1} = 0,8.$$

Звідки $\varepsilon_F = 6$ еВ, $T = 3000$ К.

5.2.6 Шматок металу об'ємом $V = 20$ см³ перебуває при температурі $T = 0$ К. Визначте число ΔN вільних електронів, імпульси яких відрізняються від максимального імпульсу p_F не більше ніж на $0,1p_F$. Енергія Фермі $\varepsilon_F = 5$ еВ.

Розв'язок

Щоб визначити розподіл вільних електронів у металі за імпульсами, скористаємось розподілом Фермі для вільних електронів при $T = 0$ К і формулою (5.5). Переходячи до змінної p , ця формула записується як:

$$dn(p) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \right)^3 \frac{p}{\sqrt{2m}} \frac{p}{m} dp = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} p^2 dp.$$

Кількість вільних електронів в одиниці об'єму з імпульсами в інтервалі від $p_F - 0,1p_F$ до p_F визначимо інтегруванням у відповідних межах:

$$\Delta n = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} \int_{0,9 p_F}^{p_F} p^2 dp = \frac{0,271 p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

Враховуючи $p_F^2 = 2m\varepsilon_F$,

$$\Delta N = \frac{0,271}{3\pi^2} \left(\frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar^2} \right)^3 V = 2,9 \cdot 10^{23}.$$

5.3. Задачі для самостійного розв'язування

5.3.1 Наскільки наближеним є запис функції Фермі у вигляді

$$f(\varepsilon) \approx e^{-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}}$$

при $\delta\varepsilon = 2k_B T$ і при $\delta\varepsilon = 10k_B T$?

- 5.3.2 Визначте частку вільних електронів у Літій при температурі $T = 0$ К, швидкість яких менше половини максимального значення.
- 5.3.3 Визначте температуру, при якій імовірність знаходження електрона з енергією $\varepsilon = 0,5$ еВ вище рівня Фермі в металі дорівнює 1%.
- 5.3.4 Визначте кількість електронних станів в одиниці об'єму металу з енергією 0,3 – 0,4 еВ.
- 5.3.5 Які ймовірності того, що кімнатної температури ($k_B T = 0,025$ еВ) електрон займе стани, що лежать на 0,1 еВ вище і на 0,1 еВ нижче рівня Фермі?
- 5.3.6 Яка ймовірність того, що електрон у металі матиме енергію, рівну енергії Фермі?
- 5.3.7 Визначте температуру, при якій середня кінетична енергія молекул ідеального газу дорівнює середній енергії вільних електронів у Купрумї при температурі $T = 0$ К.
- 5.3.8 За абсолютного нуля рівень Фермі для Купруму 7,04 еВ. Визначте значення рівня Фермі при $T = 20$ К.
- 5.3.9 Експериментальне значення енергії Фермі для літію за температури $T = 0$ К дорівнює 3,5 еВ. Яке значення ефективної маси електрона слід підставити в формулу, щоб отримати узго-

дження між теоретичними та експериментальними значеннями енергії Фермі?

- 5.3.10 Визначте, яка частина електронів провідності в металі при $T = 0 \text{ K}$ має кінетичну енергію, більшу $0,5\epsilon_F$.
- 5.3.11 При якій температурі ймовірність знайти в провіднику електрон з енергією $0,5 \text{ eV}$ над рівнем Фермі дорівнює 2%?
- 5.3.12 Чому дорівнює ймовірність того, що в металі в квантовому стані з енергією, рівною хімічному потенціалу, буде знаходитися вільний електрон?
- 5.3.13 Яка частина вільних електронів в Алюмінії при температурі $T = 0 \text{ K}$ має кінетичну енергію, яка перевищує половину максимальної?
- 5.3.14 Обчисліть мінімальну довжину хвилі де Бройля для вільних електронів у мідному провіднику, де енергія Фермі складає 7 eV .
- 5.3.15 Обчисліть енергію Фермі при температурі $T = 0 \text{ K}$ для Алюмінію. Вважайте, що на кожний атом Алюмінію припадає три вільних електрони.
- 5.3.16 Визначте концентрацію n вільних електронів у металі при температурі $T = 0 \text{ K}$, енергія Фермі якого ϵ_F .
- 5.3.17 На якій висоті (в eV) від дна зони провідності розміщений рівень Фермі в одновалентному Натрії, який містить $n = 2,5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ атомів. Вважати температуру $T = 0 \text{ K}$.
- 5.3.18 Визначте різницю енергій (в одиницях $k_B T$) між електроном, який перебуває на рівні Фермі, та електронами, які знаходяться на рівнях, ймовірності заповнення яких дорівнюють $0,20$ і $0,80$.
- 5.3.19 Яка ймовірність заповнення електронами в металі енергетичного рівня, розміщеного на $0,001 \text{ eV}$ нижче рівня Фермі при температурі $18 \text{ }^\circ\text{C}$?
- 5.3.20 Як і у скільки разів зміниться ймовірність заповнення електронами енергетичного рівня в металі, якщо рівень розміщений на $0,01 \text{ eV}$ нижче рівня Фермі і температура змінюється від 200 до 300 K ?

- 5.3.21 Обчисліть у моделі вільних електронів при $T = 0$ К густину електронів поблизу рівня Фермі $\varepsilon_F = 3$ еВ.
- 5.3.22 Визначте інтервал (в еВ) між сусідніми рівнями вільних електронів у металі при $T = 0$ К поблизу верхнього заповненого рівня (енергії Фермі), якщо об'єм металу дорівнює 1 см^3 , а концентрація вільних електронів $n = 2 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$.
- 5.3.23 Який зв'язок між концентрацією електронів і енергією Фермі при $T = 0$ К.
- 5.3.24 Обчисліть середню кінетичну енергію вільних електронів в Алюмінії при $T = 0$ К, якщо відомо, що їх максимальна енергія дорівнює 11,7 еВ.

Додаток А
Кристалічні ґратки твердих тіл

Таблиця А.1 – Характеристики кубічних ґраток

Характеристика	Тип ґратки		
	Проста	ОЦК	ГЦК
Об'єм елементарної комірки	a^3	a^3	a^3
Кількість точок ґратки на одну комірку	1	2	4
Об'єм примітивної комірки	a^3	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
Кількість точок ґратки на одиницю об'єму	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
Кількість найближчих сусідів	6	8	12
Відстань між найближчими сусідами	a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a = 0,866a$	$\frac{a}{\sqrt{2}} = 0,707a$
Кількість сусідів, які слідує за найближчими	12	6	6
Відстань до сусідів, які слідує за найближчими	$a\sqrt{2}$	a	a

Таблиця А.2 – Тип кристалічної ґратки і густина ρ деяких металів при $T = 293 \text{ K}$

Метал	Тип кристалічної ґратки	ρ , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	Метал	Тип кристалічної ґратки	ρ , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
Алюміній Al	ГЦК	2 698	Молибден Mo	ОЦК	10 220
Барій Ba	ОЦК	3 594	Натрій α -Na	ГЦУ	971
Берилій α -Be	ГЦУ	1 848	Нікол Ni	ГЦК	8 902
Ванадій V	ОЦК	6 110	Ніобій Nb	ОЦК	8 570
Вольфрам W	ОЦК	19 300	Станум α -Sn	ПК	5 750
Гадоліній α -Gd	ГЦУ	7 900	Осмій Os	ГЦУ	22 590
Гафній α -Hf	ГЦУ	13 310	Паладій Pd	ГЦК	12 020
Гольмій α -Ho	ГЦУ	8 795	Платина Pt	ГЦК	21 450
Германій Ge	ПК	5 323	Реній Re	ГЦУ	21 020
Європій Eu	ОЦК	5 243	Родій Rh	ГЦК	12 410
Ферум α -Fe	ОЦК	7 874	Рубідій Rb	ОЦК	1 532
Аурум Au	ГЦК	19 320	Плюмбум Pb	ГЦК	11 350
Іридій Ir	ГЦК	22 560	Аргентум Ag	ГЦК	10 500
Ітрій α -Y	ГЦУ	4 465	Скандій α -Sc	ГЦУ	2 989
Кадмій α -Cd	ГЦУ	8 650	Стронцій α -Sr	ГЦК	2 540
Калій K	ОЦК	862	Талій α -Tl	ГЦУ	11 850
Кальцій α -Ca	ГЦК	1 550	Тантал Ta	ОЦК	16 654
Кобальт α -Co	ГЦК	8 900	Тітан α -Ti	ГЦУ	4 540
Лантан α -La	ГЦУ	6 145	Хром Cr	ОЦК	7 190
Літій β -Li	ГЦК	534	Цезій Cs	ОЦК	1 873
Магній Mg	ГЦУ	1 738	Цинк Zn	ГЦУ	7 133
Манган α -Mn	ОЦК	7 440	Цирконій α -Zr	ГЦУ	6 506
Купрум Cu	ГЦК	8 960	Ербій α -Er	ГЦУ	9 066

Таблиця А. 3 – Експериментальні значення ентропії S_0 та енергії ε_v утворення вакансій; енергії міграції U_m та енергії активації $Q_a = \varepsilon_v + U_m$ самодифузії вакансії в різних металах

Метал	S_0/k_B	ε_v , еВ	U_m , еВ	Q_a , еВ
ГЦК-гратка				
Au	0,7	0,95	0,83	1,78
Ag	1,5	1,13	0,66	1,79
Cu	2,4	1,28	0,71	1,99
Al	0,7	0,67	0,62	1,29
Pt	–	1,51	1,43	2,94
ОЦК-гратка				
W	2	~3,6	1,7	~5,3
Mo	–	~3,2	1,3	~4,5

Додаток Б

Теплові властивості твердих тіл

Таблиця Б.1 – Температури Дебая та температури плавлення деяких речовин

Матеріал	Температура плавлення $T_{пл}$, К	Температура Дебая Θ_D , К
Літій	454	344
Натрій	371	158
Алюміній	933	428
Калій	336	91
Титан	1941	420
Ванадій	2163	380
Хром	2176	630
Залізо	1808	470
Кобальт	1765	445
Вольфрам	3683	400
Мідь	1356	343
Реній	3453	430
Ніобій	2760	275
Молібден	2898	450
Родій	2233	480
Паладій	1825	274
Срібло	1234	225
Іридій	2716	420
Платина	2042	240
Гафній	2500	252
Цирконій	2128	291
Золото	1336	165
Свинець	600	105
Тантал	3269	240
Нікель	1726	450

Додаток В
Електричні властивості твердих тіл

Таблиця В.1 – Електронні густини деяких металічних елементів згідно моделі вільних електронів

Елемент	Z	$n, 10^{22} \text{ см}^{-3}$	$r_s, \text{ \AA}$	r_s/a_0
Li (78 K)	1	4,70	1,72	3,25
Na (5 K)	1	2,65	2,08	3,93
K (5 K)	1	1,40	2,57	4,86
Rb (5 K)	1	1,15	2,75	5,20
Cs (5 K)	1	0,91	2,98	5,62
Cu	1	8,47	1,41	2,67
Ag	1	5,86	1,60	3,02
Au	1	5,90	1,59	3,01
Be	2	24,7	0,99	1,87
Mg	2	8,61	1,41	2,66
Ca	2	4,61	1,73	3,27
Sr	2	3,55	1,89	3,57
Ba	2	3,15	1,96	3,71
Nb	1	5,56	1,63	3,07
Fe	2	17,0	1,12	2,12
Mn (α)	2	16,5	1,13	2,14
Zn	2	13,2	1,22	2,30
Cd	2	9,27	1,37	2,59
Hg (78 K)	2	8,65	1,40	2,65
Al	3	18,1	1,10	2,07
Ga	3	15,4	1,16	2,19
In	3	11,5	1,27	2,41
Tl	3	10,5	1,37	2,48
Sn	4	14,8	1,17	2,22
Pb	4	13,2	1,22	2,3
Bi	5	14,1	1,19	2,25
Sb	5	16,5	1,13	2,14

Таблиця В.2 – Питомі електричні опори та час релаксації деяких елементів (при $T = 273 \text{ K}$)

Елемент	ρ , мкОм·см	τ , 10^{-14} с
Li	8,55	0,88
Na	4,2	3,2
K	6,1	4,1
Rb	11,0	2,8
Cs	18,8	2,1
Cu	1,56	2,7
Ag	1,51	4,0
Au	2,04	3,0
Be	2,8	0,51
Mg	3,9	1,1
Ca	3,43	2,2
Sr	23	0,44
Ba	60	0,19
Nb	15,2	0,42
Fe	8,9	0,24
Zn	5,5	0,49
Cd	6,8	0,56
Hg	У рідкому стані	—
Al	2,45	0,80
Ga	13,6	0,17
In	8,0	0,38
Tl	15	0,22
Sn	10,6	0,23
Pb	19,0	0,14
Bi	107	0,23
Sb	39	0,55

Таблиця В.3 – Експериментальні значення коефіцієнта тепло провідності.

Елемент	$\kappa, \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}$
Li	0,71
Na	1,38
K	1,0
Rb	0,6
Cu	3,85
Ag	4,18
Au	3,1
Be	2,3
Mg	1,5
Nb	0,52
Fe	0,80
Zn	1,13
Cd	1,0
Al	2,38
In	0,88
Tl	0,5
Sn	0,64
Pb	0,38
Bi	0,09
Sb	0,18

Таблиця В.4 – Ширина забороненої зони у напівпровідників

Речовина	E_g , еВ ($T = 300$ К)	E_g , еВ ($T = 0$ К)
Si	1,12	1,17
Ge	0,67	0,75
PbS	0,37	0,29
PbSe	0,26	0,17
PbTe	0,29	0,19
InSb	0,16	0,23
GaSb	0,69	0,79
AlSb	1,5	1,6
InAs	0,35	0,43
InP	1,3	—
GaAs	1,4	—
GaP	2,2	—
Sn (сіре олово)	0,1	—
Se (сірий)	1,8	—
Te	0,35	—
B	1,5	—
C (алмаз)	5,5	—

Додаток Г

Емісійні властивості матеріалів

Таблиця Г.1 – Робота виходу електрона W .

Елемент	W , еВ	Елемент	W , еВ	Елемент	W , еВ
Li	2,38	Ge	4,76	Sm	2,7
Be	3,92	As	5,11	Gd	3,1
B	4,5	Se	4,72	Tb	3,15
C	4,7	Rb	2,35	Dy	3,25
Na	2,35	Y	3,3	Ho	3,22
Mg	3,64	Zr	3,9	Er	3,25
Al	4,25	Nb	3,99	Tm	3,1
Si	4,8	Mo	4,3	Hf	3,53
S	6,0	Ru	4,6	Ta	4,12
K	2,22	Pd	4,8	W	4,54
Ca	2,8	Ag	4,3	Re	5,0
Sc	3,3	Cd	4,1	Os	4,7
Ti	3,92	In	3,8	Ir	4,7
V	4,12	Sn	4,38	Pt	5,32
Cr	4,58	Sb	4,08	Au	4,3
Mn	3,83	Te	4,73	Hg	4,52
Fe	4,31	Cs	1,81	Tl	3,7
Co	4,41	Ba	2,49	Pb	4,0
Ni	4,5	La	3,3	Bi	4,4
Cu	4,4	Ce	2,7	Th	3,3
Zn	4,24	Pr	2,7	U	3,3
Ga	3,96	Nd	3,2		