

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до лабораторного практикуму 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 лабораторного практикуму 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. – 40 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

Підготовка до проведення лабораторної роботи і оформлення звіту	4
1 Лабораторна робота №1 „Вивчення атома водню за спектрами його випромінювання”	5
1.1 Теоретичні відомості	5
1.2 Завдання	9
1.3 Контрольні питання	11
2 Лабораторна робота №2 „Кристалічна структура твердих тіл”	13
2.1 Теоретичні відомості. Індеси вузлів, напрямків і площин у ґратках.	13
2.2 Завдання	20
2.3 Контрольні питання	22
3 Лабораторна робота №3 „Дефекти у реальних кристалах” . .	23
3.1 Теоретичні відомості. Класифікація кристалографічних дефектів.	23
3.2 Завдання	25
3.3 Контрольні питання	26
4 Лабораторна робота №4 „Дослідження теплових властивостей твердих тіл”	26
4.1 Теоретичні відомості	26
4.2 Завдання	30
4.3 Контрольні питання	31
5 Лабораторна робота №5 „Вивчення статистики Максвелла-Больцмана”	32
5.1 Теоретичні відомості	32
5.2 Завдання	36
5.3 Контрольні питання	37
6 Лабораторна робота №6 „Магнітні властивості твердих тіл”	37
6.1 Теоретичні відомості	37
6.2 Завдання	38
6.4 Контрольні питання	39
Рекомендована література	40

ПІДГОТОВКА ДО ПРОВЕДЕННЯ ЛАБОРАТОРНОЇ РОБОТИ І ОФОРМЛЕННЯ ЗВІТУ

Лабораторна робота включає самостійне опрацювання теоретичного матеріалу, вивчення методик проведення і планування експерименту, вимірювальних засобів і приладів, обробку й інтерпретацію експериментальних даних.

При проведенні лабораторних робіт необхідно:

– підготуватися до експрес-опитування з теоретичного матеріалу, необхідного для виконання роботи (для отримання допуску до лабораторної роботи);

– підготувати і оформити план виконання лабораторної роботи;

– після виконання лабораторної роботи провести розрахунки отриманих даних і оформити звіт, який повинен містити:

1) титульний аркуш;

2) мету роботи;

3) опис, таблицю експериментальних даних, необхідні графічні залежності;

4) основні результати (математичні залежності, алгоритми розрахунків, табличні дані, графіки тощо);

5) стислі висновки по роботі, в яких вказати: що досліджувалось, методику (чи метод) дослідження, характер теоретичної залежності, визначений характер експериментальної залежності;

6) навести конкретні встановлені факти, включаючи експериментальні й розрахункові дані; відзначити подібність і відмінність експериментальної залежності від теоретичної;

– здати звіт з виконаної лабораторної роботи і відповідати на запитання викладача (отримати залік за виконану роботу).

1 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №1 „ВИВЧЕННЯ АТОМА ВОДНЮ ЗА СПЕКТРАМИ ЙОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ”

1.1 Теоретичні відомості

Першу спробу створення неklasичної теорії будови атома з ідеєю зв'язати в одне ціле закономірності лінійчатих спектрів, ядерну модель атома Резерфорда і квантовий характер випромінювання і поглинання світла зробив Н.Бор у 1913 р. За основу він узяв планетарну модель атома, висунуту Резерфордом. Однак, з точки зору класичної електродинаміки, електрон в моделі Резерфорда, рухаючись навколо ядра, повинен був би випромінювати енергію безперервно і

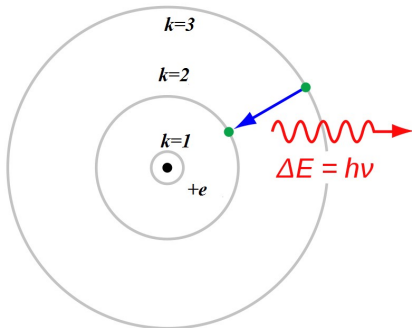


Рисунок 1.1 – Борівська модель атома водню

дуже швидко і, втративши її, впасти на ядро. Тому Бору довелося класичний опис руху електрона навколо ядра в атомі водню доповнити двома постулатами (обмеженнями), накладеними на можливі стани електронів в атомі.

1 постулат: існують деякі стаціонарні (не змінюються з часом) стани атома, знаходячись в яких він не випромінює енергії, тобто атом є стабільною системою. Класична механіка і електродина-

міка не спроможні пояснити стабільність атому.

В теорії Бора мова йде про вектор моменту імпульсу \vec{L} тіла масою m , яке обертається по колу. В класичній механіці $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, де $r \equiv |\vec{r}|$ – радіус орбіти, $\vec{p} = m\vec{v}$ – імпульс тіла, \vec{v} – вектор швидкості дотичний до траєкторії. Здогадка Бора у тому, що електрон, рухаючись по сферичній орбіті у полі ядра в атомі повинен мати стаціонарні стани атома, особливість яких полягає в дискретних значеннях

$$L_k \equiv |\vec{L}_k| = k\hbar, \quad k = 1, 2, 3, \dots,$$

тобто

$$L_k \equiv m_e v_k r_k = k \hbar, \quad (1.1)$$

де m_e – маса електрона; v_k – модуль його швидкості на орбіті; r_k – радіус орбіти; $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$ Дж \times с – константа Дірака ($\hbar = 2\pi\hbar$ – константа Планка). Увага, не плутати ціле число k з сталою Больцмана k_B !

2 постулат: при переході електрона в атомі з одного стаціонарного стану в інший випускається чи поглинається один фотон з енергією $h\nu$, рівною різниці енергій відповідних стаціонарних станів E_m і E_k

$$h\nu_{mk} = E_m - E_k, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (1.2)$$

($h\nu = \hbar\omega$, ν – лінійна частота, $\omega = \nu/2\pi$ – циклічна частота світла). Якщо $m > k$ атом, випромінює світло, якщо $m < k$, то поглинає.

Постулати Бора дозволяють розрахувати спектр атома водню. Розв'язання системи рівнянь, складеної з (1.1) і другим законом Ньютона для електрона, що рухається по круговій орбіті в полі кулонівських сил ($-e$ – заряд електрона, $+e$ – заряд протона)

$$\frac{m_e v_k^2}{r_k} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_k^2}, \quad (1.3)$$

приводить до виразу для борівських радіусів стаціонарних орбіт електрона

$$r_k = a_0 k^2, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx 0,53 \text{ \AA}, \quad \text{\AA} = 0,1 \text{ нм}, \quad (1.4)$$

де a_0 – радіус першої борівської орбіти, ϵ_0 – електрична стала.

Енергія електрона на цих орбітах дорівнює сумі його кінетичної і потенціальної енергії

$$E_k = \frac{m_e v_k^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_k}.$$

Використовуючи (1.3), а потім (1.1) і (1.4), маємо

$$E_k = -\frac{m_e v_k^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{1}{k^2} < 0, \quad (1.5)$$

Від'ємний знак E_k означає, що електрон знаходиться у потенціальній ямі.

На підставі другого постулату Бора і формули (1.5) серії спектральних ліній випромінювання атома водню мають вигляд:

$$\nu_{mk} = c \left(\frac{1}{\lambda_m} - \frac{1}{\lambda_k} \right) = \frac{E_m - E_k}{2\pi\hbar} = R_H \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (1.6)$$

$$k = 1, 2, 3, \dots, m = k+1, k+2, k+3, \dots,$$

$$R_H = \frac{\hbar^2}{4\pi m_e a_0^2} = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ Гц},$$

де c – швидкість світла, λ – довжина світлової хвилі, яка відповідає лінії спектру, R_H – константа Рідберга для атома водню (H).

Вираз (1.6) дозволяє об'єднати всі лінії спектра в серії, які визначаються числом k , тобто серія ліній випромінювання виникає при переході електрона з верхніх орбіт m на орбіту з даним k . При $k=1$ серію енергетичних переходів називають *серією Лаймана*, при $k=2$ – *серією Бальмера*, при $k=3$ – *серією Пашена*, при $k=4$ – *серією Брекета*, при $k=5$ – *серією Пфунда*, при $k=6$ – *серією Хемфрі* і т.д.

Теорія Бора була великим кроком у розвитку атомної фізики і стала важливим етапом у створенні квантової механіки. Однак ця теорія має внутрішні протиріччя (з одного боку, застосовує закони класичної фізики, а з іншого – ґрунтується на квантових постулатах). У 1923 р. французький фізик де Бройль висунув гіпотезу про універсальність корпускулярно-хвильового дуалізму, відповідно до якого будь-які частинки матерії поряд з корпускулярними мають також хвильові властивості. У 1926 р. Е. Шредінґер сформулював основне рівняння *нерелятивістської* квантової механіки:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad (1.7)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + U, \quad \hat{p} = -i\hbar\nabla, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + U,$$

де \hat{H} і \hat{p} – оператори Гамільтона і імпульсу, $\nabla^2 \equiv \Delta$ – оператор Лапласа; $\Psi(x, y, z, t)$ – повна хвильова функція частинки; $U(x, y, z, t)$ – потенціальне функція частинки в змінному силовому полі, в якому вона рухається; $i = \sqrt{-1}$ – уявна одиниця.

Якщо силове поле, у якому рухається частинка, стаціонарне, тобто $U \equiv U(x, y, z)$, то розв'язком рівняння Шредінгера є добуток двох функцій, одна з яких є функцією лише координат x, y, z , інша – лише часу t , так що

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}, \quad (1.8)$$

де E – повна енергія частинки (незалежна від x, y, z). Підставляючи (1.8) в (1.7), записується рівняння Шредінгера для стаціонарних станів

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (1.9)$$

Рівняння (1.9) для атома водню в сферичній системі координат ($x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$) допускає поділ змінних

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi), \quad (1.10)$$

де $R_{nl}(r)$ – радіальна хвильова функція, $\Theta_{lm}(\theta)$ і $\Phi_m(\varphi)$ – кутові функції; $n = 1, 2, 3, \dots$ – називають головним квантовим числом, $l = 0, 1, 2, \dots$ – орбітальне квантове число, $m = -l, (-l+1), \dots, +l$ – магнітне квантове число. Таким чином стан частинки визначається трьома **квантовими числами** n, l, m , а кожна із трьох функцій $R(r)$, $\Theta(\theta)$ і $\Phi(\varphi)$ залежить від своєї змінної.

Аналітичні вирази хвильових функцій для $n=1$ і $n=2$ мають вигляд:

$$\begin{aligned} \psi_{100} &= R_{10}(r), & \psi_{200} &= R_{20}(r), & \psi_{210} &= R_{21}(r) \cos \theta, \\ \psi_{211} &= \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) \sin \theta e^{i\varphi}, & \psi_{21\bar{1}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) \sin \theta e^{-i\varphi}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Явний вид радіальних функцій $R_{nl}(r)$ залежить від форми потенціальної енергії $U(r)$, і у випадку водню:

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}, & R_{21}(r) &= \sqrt{\frac{1}{32\pi a_0^5}} r e^{-\frac{r}{2a_0}}, \\ R_{20}(r) &= \sqrt{\frac{1}{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{1}{2a_0} r\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Відповідно до змісту хвильової функції, ймовірність dw виявити електрон в об'ємі $dV = dx dy dz = 4\pi r^2 dr \epsilon$

$$dw = |\psi|^2 dV. \quad (1.13)$$

1.2 Завдання

1 Знайти довжини хвиль спектральних ліній у випромінюванні атома водню (рис. 1.2).

Для аналізу спектра використовують різні спектральні прилади, у тому числі: **спектрограф** – прилад для фотографічної реєстрації спектра; **спектроскоп** – прилад, призначений тільки для візуальних спостережень спектра; **монохроматор** – спектральний прилад, що виділяє випромінювання в деякому, зазвичай досить вузькому інтервалі $d\lambda$, який можна безперервно переміщати по спектру.

Для виконання завдання використовують фотографію спектра випромінювання водню, який одержують за допомогою **водневої лампи** ТВС-15. Але спочатку, для градування цього спектра, використовують спектр атома ртуті, нанесений паралельно з знімком для водню (див. рис. 1.2).

Градування полягає в тому, щоб одержати залежність довжини хвилі λ від відстані x спектральної лінії від початку відліку ($x = 0$). Для цього використовується такий прийом: можна виміряти відстань x від початку координат до спектральних ліній **атома ртуті** і побудувати лінійний графік $\lambda(x)$ для ртуті. Тоді вимірявши відстані

до спектральних ліній атома водню, за графіком $\lambda(x)$ (для ртуті) визначити відповідні значення λ (для водню). Залежності $\lambda(x)$ для ртуті і водню однакові (x можна виміряти звичайною лінійкою з екрану монітора)!

Спочатку заповнити табл. 1 для ртуті.

Таблиця 1. Ртуть, $y = 1/\lambda$.

$\lambda, \text{Å}$	3984	...
$y, 10^{-4} / \text{Å}$	2,51	...
x , поділ		

В «Екселі» зробити лінійну апроксимацію даних табл. 1 у вигляді

$$y(x) = A + Bx.$$

Підставляючи виміряні для кількох ліній водню значення x у це рівняння, заповнити табл. 2.

Таблиця 2. Водень

x	...
y	...

2 Використовуючи данні табл. 2, знайти значення k , яке відповідає спектру водню на рис. 1.2.

Якщо лінії є лініями однієї серії, тобто значення k одне і теж для різних m , то, використовуючи (1.6), можна записати

$$R_H(m) = \frac{c(y_k - y_m)}{\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{m^2}\right)} = \text{const}, \quad (1.14)$$

при заданому k . Тобто, не зважаючи на залежність $R_H(m)$, міняючи k і m , прагнемо одержати значення $R_H^* = 3,29 \cdot 10^{15}$ Гц.

Для того щоб це k знайти, треба спочатку позначити саму нижню лінію водню на рис. 1.2 як $k=1$, а вищі лінія - як $m=2,3,4, \dots$ і підставити ці значення у праву частину (1.14). Якщо $R_H(m)$ не буде дорівнювати R_H^* при максимальних m , то повторити цю процедуру

для $k = 2, m = 3, 4, 5, \dots$ і так далі до тих пір доти поки не буде досягнуто рівняння $R_H(m) = R_H^*$. Такою процедурою визначається відповідне значення k .

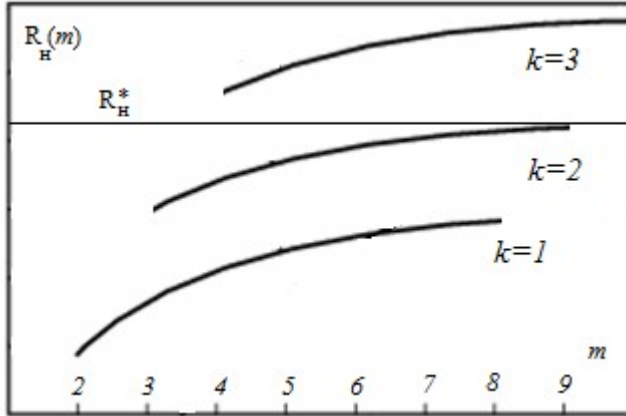


Рисунок 1.3 – Якісне, графічне зображення процедури розрахунку, в результаті якого визначається $k = 2$

3 Визначте енергії рівнів E_k і E_m , з яких і на які відбуваються переходять збуджені електрони і обчисліть швидкість руху електрона $v_{k=1}$ на першій борівській орбіті [(1.3), (1.4)]:

$$v_1 = \frac{\hbar}{m_e a_0}.$$

4 Для водню обчисліть розподіл густини електронної хмари $|\psi_{100}(r)|^2$, для $r/a_0 = 0; 0,2; 0,4; \dots; 2$ [див. (1.11), (1.12)].

1.3 Контрольні питання

- 1 Модель атома Томсона. Експерименти Резерфорда. Експерименти по вимірюванню спектрів випромінювання та поглинання світла атомами (лінійчаті спектри, як на рис. 1.2). Теорія: постулати Бора.
- 2 Серії спектральних ліній випромінювання атома водню.
- 3 Гіпотеза де Бройля, її експериментальне підтвердження.
- 4 Рівняння Шредінгера. Хвильова функція.

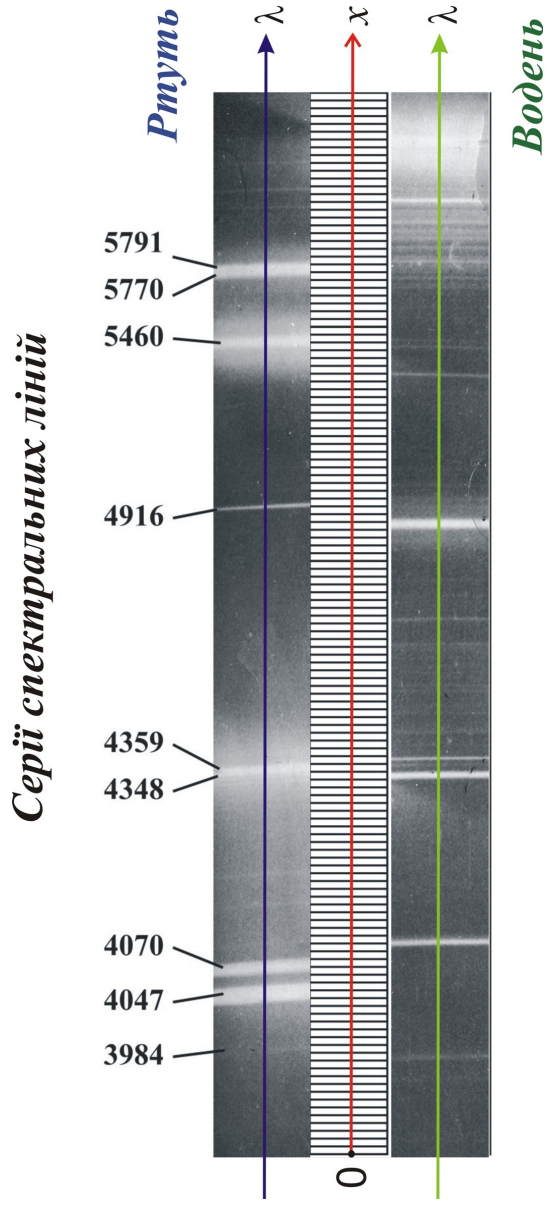


Рисунок 1.2 – Спектри, λ приведена в ангстремах (Å)

2 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 2 „КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТВЕРДИХ ТІЛ”

2.1 Теоретичні відомості. Індеси вузлів, напрямків і площин у ґратках

Незалежно від природи сил, які виникають при зближенні

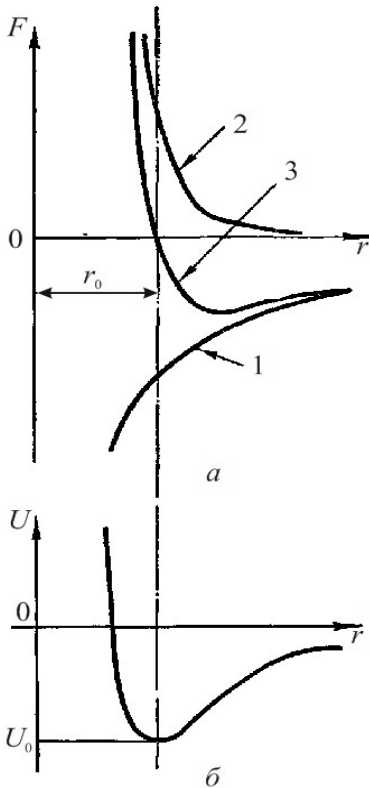


Рисунок 2.1 - Сили взаємодії і потенціальна енергія двох сусідніх атомів у кристалі

частинок, загальний характер їх залишається однаковим (рис.2.1,*a*): на відносно великих відстанях діють сили притягання (attraction) F_{at} , що швидко збільшуються зі зменшення відстані r між частинками (крива 1); на малих відстанях виникають сили відштовхування (repulsion) F_{rep} (крива 2), які зі зменшенням r збільшуються значно швидше, ніж F_{at} . На відстані $r = r_0$ сили F_{rep} врівноважують сили F_{at} , і результуюча сила F (крива 3) при $r = r_0$ дорівнює нулю, а енергія взаємодії $U(r)$ має мінімум (рис.2.1, *б*).

Тому стан частинок, зближених на відстань $r = r_0$, є станом стійкої рівноваги, внаслідок чого частинки розташовуються в строгому порядку на відстані r_0 одна від одної, утворюючи тіло з правильною внутрішньою структурою – кристал. Така структура зберігатиметься доти, поки енергія зв'язку залишається вище енергії теплового руху частинок $\propto k_B T$. Частинки мов би закріплені в

положеннях рівноваги. Для твердого стану тіла доступною формою руху атомів тіла є хаотичне коливання біля їхніх положень рівноваги.

Для опису структури кристалів користуються поняттям кристалічної ґратки, яка є характерним для даного кристала упорядкованим розташуванням частинок, що має періодичну повторюваність у трьох вимірах. З геометричної точки зору правильне періодично повторюване розміщення частинок в кристалі можна описати за допомогою операції паралельного переносу або трансляції (translation). Найменший об'єм кристалічної ґратки, трансляція якого в трьох взаємно перпендикулярних напрямках дозволяє відновити структуру твердого тіла, називають *елементарною коміркою*. Для її характеристики необхідно задати в загальному випадку шість параметрів: три ребра комірки a , b , c і три кути між ними α , β , γ . Часто за одиницю вимірювання довжини в ґратці приймають відрізки a , b , c .

За формою комірки залежно від кутів між її гранями і співвідношенням довжин ребер в класифікації розрізняють сім видів (сингоній): триклинна, моноклинна, ромбічна, ромбоєдрична, гексагональна, тетрагональна і кубічна. За розташуванням атомів в елементарній комірці розрізняють чотири найпростіші типи кристалічної ґратки: примітивний (П), базоцентрований (БЦ), об'ємноцентрований (ОЦ), гранецентрований (ГЦ). У практиці кристалографії, що має справу з реальними твердими тілами, зустрічаються кристали, ґратка яких є комбінацією найпростіших ґраток, сполучених одна з одною тим чи іншим способом. Це складні ґратки.

Кристалічні ґратки мають такі характеристики:

- *координаційне число* – кількість найближчих сусідів атома в ґратці;
- *атомний радіус* – половина відстані між найближчими сусідніми атомами в кристалі чистої речовини;
- *відносна густина пакування* – частка об'єму елементарної комірки, зайнята сферичними атомами. Густина атомів можна визначити за виразом:

$$\rho = Z/v,$$

$$Z = N_{\text{внутр.}} + \frac{1}{2}N_{\text{грані}} + \frac{1}{4}N_{\text{ребро}} + \frac{1}{8}N_{\text{вершина}}$$

– кількість атомів в елементарній комірці об'ємом v .

Таблиця 2.1 – Типи структур і параметри кристалічних ґраток

Речовина	Тип ґратки	Стала ґратки, Å		
		a	b	c
Алюміній	ГЦК	4,04	4,04	4,04
Германій	Типу алмазу	5,62	5,62	5,62
Залізо	ОЦК	2,86	2,86	2,06
Кремній	Типа алмаза	5,43	5,43	5,43
Карбід кремнію	Типу цинкової обманки	4,35	4,35	4,35
Кам'яна сіль	Типу хлористого натрію	5,63	5,63	5,63
Магній	Гексагональна	3,20	3,20	5,20
Мідь	ГЦК	3,61	3,61	3,61
Окис магнію	Типу хлористого натрію	4,20	4,20	4,20
Сульфід цинку	Типу цинкової обманки	6,41	5,41	5,41
Цинк	Гексагональна щільноупакована	2,66	2,66	4,94
Графіт	Типу графіту	2,46	2,46	6,71

Симетрію розміщення атомів у кристалічній ґратці характеризують:

- *площинами симетрії* – площини, що поділяють фігуру на дві частини, розміщені одна щодо одної як предмет і його відображення;
- *осями симетрії* – прямі лінії, при повороті навколо яких на визначений кут фігура сполучається сама із собою. Порядком осі симетрії є кількість сполучень фігури при повороті на 360° ;

- *центрами симетрії* – особливі точки всередині фігури, проходячи через які пряма зустрічає тотожні точки фігури на однаковій відстані по обидві сторони від центра симетрії.

Для позначення вузлів, напрямків і площин у ґратках застосовують індекси Міллера.

Положення будь-якого вузла в ґратці можна визначити координатами x, y, z :

$$x = ma, y = nb, z = pc,$$

де m, n, p – цілі числа; a, b, c – параметри ґратки (для кубічної ґратки $a=b=c$). Якщо за одиниці довжини уздовж осей ґратки

прийняти параметри ґратки a, b, c , то координатами вузла будуть числа m, n, p . Ці числа називають **індексами вузла** і записують так: $[[mnp]]$. Для від'ємних індексів над літерою ставиться риска, наприклад \bar{m} (рис. 2.2).

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. 2.2). 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.

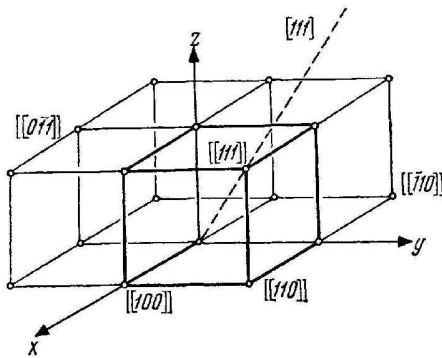


Рисунок 2.2 – Індекси вузлів та напрямків

Сукупність еквівалентних напрямків позначають $\langle mnp \rangle$. Наприклад, у кубічній системі координат сімейство еквівалентних напрямків $\langle 110 \rangle$ включає напрямки $[110]$, $[\bar{1}10]$, $[1\bar{1}0]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$, $[101]$, $[\bar{1}01]$, $[10\bar{1}]$, $[\bar{1}0\bar{1}]$, $[011]$, $[0\bar{1}1]$, $[01\bar{1}]$ і $[0\bar{1}\bar{1}]$.

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.

Площини, які збігаються з даною після повороту ґратки на деякий кут, називають *кристалграфічно еквівалентними*.

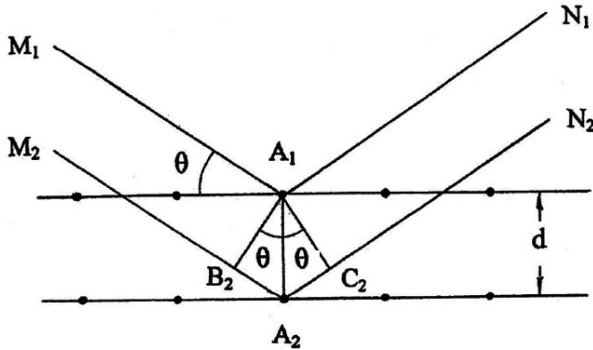


Рисунок 2.3 – Ілюстрація рівняння Вульфа-Брегга (2.1)

Для визначення типу ґратки твердого тіла застосовують дифракцію рентгенівських променів. Система атомних площин кристала може розглядатися як просторові дифракційні ґратки з періодом (відстанню між площинами), що підходить для дифракції рентгенівських променів (закон Вульфа-Брегга):

$$\lambda n = 2d \sin \theta, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (2.1)$$

де n – порядок інтерференції; λ – довжина хвилі рентгенівських променів, $\lambda = 1,54 \cdot 10^{-10}$ м; d – відстань між площинами; θ – кут дифракції (рис. 2.3). Закон описує умови, при яких спостерігаються дифракційні максимуми. На рис. 2.3 промінь $M_1A_1N_1$ проходить відстань менше на $B_2A_2 + A_2C_2$, ніж промінь $M_2A_2N_2$. $B_2A_2 = A_2C_2 = 2d \sin \theta$, тобто маємо (2.1).

У методі Дебая – Шеррера (1916 р.) для одержання

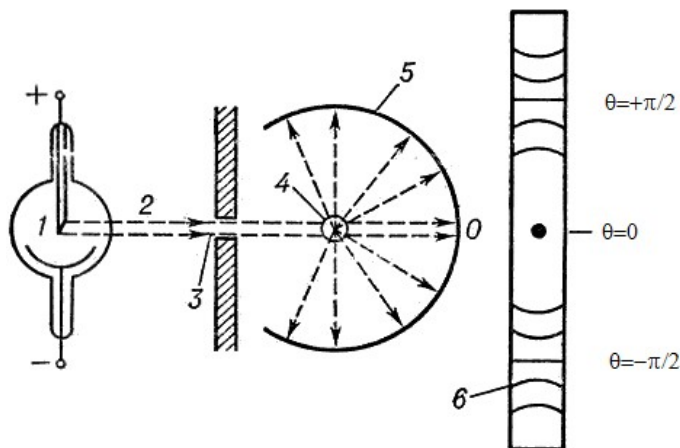
дифракційної картини, за якою визначається вид ґратки, використовують полікристалічний зразок (складається з безлічі малих монокристалів), хаотично орієнтованих один відносно одного. Монохроматичний промінь, що падає на зразок, знаходить достатню кількість площин (hkl), які знаходяться в положеннях, що задовольняють умові (2.1). Завдяки безлічі кристалів, які відбивають світло, кожна група площин з характерною відстанню d буде давати безліч променів, відбитих під тим самим кутом. Через те, що площини, які відбивають, хаотично повернені одна відносно одної і відносно первинного променя, усі відбиті промені утворюватимуть поверхні конусів з кутами 4θ . Їхнє перетинання з фотопластиною чи плівкою дає відповідні конічні перетини.

Для одержання дебаєграми у методі Дебая – Шеррера готують полікристалічний зразок у вигляді циліндричного стовпчика діаметром $0,2 \div 0,6$ мм (рис. 2.4). Зразок поміщають у центр циліндричної камери радіусом R на спеціальному столику і добре центрують його. По поверхні циліндра усередині камери поміщають стрічку фотоплівки довжиною $2\pi R$ і через діафрагму посиляють промінь на зразок. Після експозиції на плівці виникають характерні лінії почорніння у вигляді дуг кіл.

Відстані між двома симетричними лініями $2S_n$ - довжини двох дуг (рис. 2.4 і рис. 2.5) пов'язані з кутами дифракції співвідношенням (довжина дуги на колі пов'язана з радіусом кола та кутом)

$$2S_n = 4\theta_n R, \quad (2.2)$$

де R - радіус стрічки фотоплівки, який співпадає з радіусом циліндричної камери (фотоплівка розміщується на внутрішній поверхні циліндра), θ_n - кут у радіанах, 1 радіан = $57,3$ градусів. Визначивши кути θ_n , проводять індифікацію ліній дебаєграми, при цьому під індифікацією розуміють операцію визначення індексів інтерференції (НК) кожної лінії дебаєграми. Індокси інтерференції (НКЛ) дорівнюють добутку індексів сімейства площин (hkl), завдяки відображенню від яких вийшла дана лінія на дебаєграмі, на порядок відображення n : $H = nh$, $K = nk$, $L = nl$.



1 - рентгенівська трубка; 2 - пучок монохроматичного рентгенівського випромінювання; 3 - діафрагма (щілину); 4 - кристал; 5 - фотоплівка; 6 - рентгенограма; O - слід, який залишає променями, що проходять кристал наскрізь

Рисунок 2.4 – Схема зйомки рентгенограми по методу Дебая - Шеррера.

Так, лінія з індексами (200) виходить в результаті відбивання другого порядку від площин (100), а лінія (420) – від площин (210) і т.д. Міжплощинні відстані d різні для різних сімейств площин, тому їх звичайно наводять з відповідними індексами d_{hkl} (у розрахунках для простоти часто використовуються d_{HKL}). Зв'язок міжплощинної відстані з індексами інтерференції для кубічної ґратки визначається за формулою

$$a = d_{HKL} \sqrt{H^2 + K^2 + L^2}, \quad (2.3)$$

де a – стала ґратки. З (2.1) і (2.3) можна одержати

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (H^2 + K^2 + L^2). \quad (2.4)$$

Формула (2.4) описує всі можливі відображення для простих кубічних ґраток. У випадку складних ґраток частина відбиттів гаситься.

2.2 Завдання

Дебаєграми речовин А, Б, В надані на рис. 2.5.

1 Визначити тип ґратки цієї речовини.

Для цього треба скористатися рівнянням (2.2).

Позначимо відстань між горизонтальними рисками на рис. 2.4 (вони на дебаєграмі рис. 2.4 позначені кутами $\theta = +\pi/2$ і $\theta = -\pi/2$) як ΔS :

$$\Delta S = \frac{2\pi R}{2}, \quad R = \frac{\Delta S}{\pi}. \quad (2.5)$$

Тоді з (2.2) витікає, що

$$\theta_n = \frac{\pi(2S_n)}{4\Delta S}. \quad (2.6)$$

Якщо записати рівняння (2.4) для різних кутів θ_n , послідовно розділити всі $\sin^2 \theta_n$ на $\sin^2 \theta_1$, то одержимо ряд значень Q_n :

$$Q_n = \frac{\sin^2 \theta_n}{\sin^2 \theta_1} = \frac{H_n^2 + K_n^2 + L_n^2}{H_1^2 + K_1^2 + L_1^2}. \quad (2.7)$$

Заповнити таблицю

n	1	2	3	4	5
$(2S_n)$					
θ_n					
$\sin^2 \theta_n$					
Q_n					

Значення Q_n повинні дорівнювати відношенню цілих чисел. Для ґраток різного типу характерний свій ряд значень Q_n (табл.2.2).

Таблиця 2.2 – Ряд Q_n для кубічних ґраток

Тип ґратки	Q_n
Примітивна	1; 2; 3; 4; 5; 6; 8; 9; 10; 11;
Об'ємноцентрована	1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10;
Гранецентрована	1; 1,33; 2,66; 3,67; 4; 5,33; 6,67; 8; 9; 10,67
Типу алмаза	1; 2,66; 3,67; 5,33; 6,33; 8; 9; 10,67; 11,67

2 Визначити індекси інтерференції (HKL). Знаючи уточнений ряд Q_n для досліджуваних ґраток, і пам'ятаючи, що кожне значення Q_n дорівнює відношенню цілих чисел, представити всі Q_n у вигляді простих дробів з найменшим однаковим знаменником. Тоді в знаменнику дробів будуть числові значення $H_1^2 + K_1^2 + L_1^2$, а в

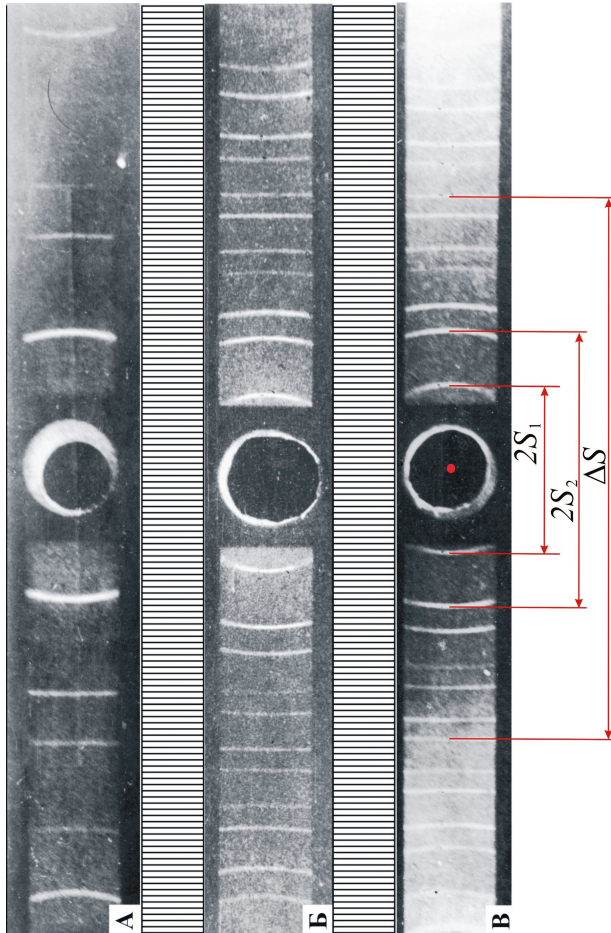


Рисунок 2.5 – Рентгеновські знімки речовин А, Б, В ($2S_n$ і ΔS можна виміряти звичайною лінійкою з екрану монітора).

чисельнику кожного дробу – $H_n^2 + K_n^2 + L_n^2$. За отриманими значеннями сум квадратів індексів шляхом простого підбору визначаються індекси інтерференції (HKL) для всіх кутів Q_n .

3 Визначити порядок відбиття n , рівний найбільшому загальному дільнику індексів (HKL).

4 По (2.4) визначити сталу ґратки a для лінії з найбільшим кутом, якщо $\lambda = 1,54 \cdot 10^{-10}$ м.

5 За значенням a і табл. 2.1 визначити матеріал.

6 Визначити для всіх кутів Q_n значення d_{hkl} .

7 Вказати індекси вузлів, напрямків та площин, обумовлених атомами, номери яких задасть викладач (рис. 2.6).

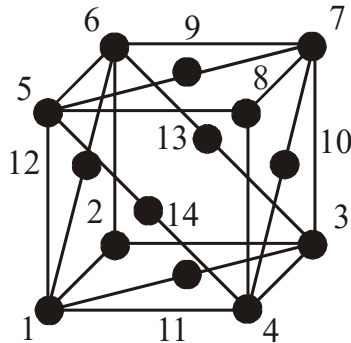


Рисунок 2.6– Кубічна гранецентрована ґратка

2.3 Контрольні питання

- 1 Поясніть, чому тверді тіла мають кристалічну структуру.
- 2 Сингонії і типи кристалічної ґратки.
- 3 Які основні характеристики кубічної ґратки?
- 4 Сучасні методи дослідження структури твердих тіл.

3 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 3 „ДЕФЕКТИ У РЕАЛЬНИХ КРИСТАЛАХ”

3.1 Теоретичні відомості

Характерною рисою напівпровідникових матеріалів є різка залежність їх основних властивостей не лише від вмісту сторонніх домішок, але й від ступеню досконалості кристалічної будови – фізичної чистоти матеріалу. Більшість параметрів напівпровідникових матеріалів „структурно чутливі“.

До таких параметрів насамперед відносять теплопровідність, швидкість дифузії, швидкість фазових перетворень тощо. Властивостей, зовсім не чутливих до структурних дефектів, майже немає, але практично такі властивості, як температура плавлення, діелектричні, парамагнітні й діамагнітні характеристики та пружні модулі можна віднести до структурно нечутливих.

Дефекти структури істотно впливають на характеристики і експлуатаційну надійність напівпровідникових приладів. Ця обставина потребує створення так званої „бездефектної технології“, в задачу якої входить розробка і реалізація технологічних прийомів, спрямованих на отримання бездефектного матеріалу, виготовлення бездефектних приладів.

Проблема створення бездефектної технології має дуже важливе технічне й економічне значення, оскільки дозволяє не лише поліпшити характеристики напівпровідникових приладів, але й підвищити відсоток виходу придатних виробів.

Ідеальна періодичність структури кристала порушується насамперед тепловими коливаннями атомів. Оскільки теплові коливання атомів відбуваються біля їх положень рівноваги, можна вважати, що атом в середньому перебуває в положенні рівноваги, тому в такому наближенні теплові коливання не порушують періодичності структури кристала.

Дефекти поділяють на точкові, лінійні, поверхневі та об'ємні.

Розміри **точкових дефектів** у всіх трьох вимірах не перевищують однієї або декількох міжатомних відстаней. До точкових дефектів відносять вакансії, міжвузлові атоми, атоми домішок, а також їхні кластери.

Лінійні дефекти (дислокації) характеризуються тим, що порушення періодичності простираються в одному вимірі на відстані набагато більшій за параметр ґратки, тоді як у двох інших вимірах вони не перевищують декількох параметрів ґратки.

Поверхневі дефекти (межі зерен і двійників, дефекти пакування, міжфазні межі, стінки доменів у двох вимірах) мають розмір, який у багато разів перевищує параметр ґратки, а в третьому – декілька параметрів ґратки.

Об'ємні (тримірні) дефекти – це пори і вкраплення іншої фази. Вони зазвичай виникають при вирощуванні кристалів або в результаті деякого впливу на кристал.

Дислокації виникають в результаті пластичної деформації кристала в процесі росту або при наступних обробках.

Точкові дефекти можуть з'явитися у твердих тілах внаслідок нагрівання (теплові дефекти), опромінення швидкими частинками (радіаційні дефекти), відхилення складу хімічних сполук від стехіометрії (стехіометричні дефекти), пластичної деформації.

Теплові точкові дефекти. Відхід атома на поверхню кристала або до будь-якої межі всередині кристала і наступний перехід на його місце атома, розташованого нижче цього шару, призводить до утворення вакансій, які називають дефектами **Шотткі**.

Перехід атома із свого вузла в будь-який міжвузловинний простір приводить до виникнення парного дефекту „вакансія – міжвузловий атом“, який називають дефектом **Френкеля**. Точкові дефекти схильні до об'єднання в *кластери* дефектів.

Утворення точкових дефектів потребує значних витрат енергії (1,5÷4,5 eV), тому, на перший погляд, виникнення теплових дефектів енергетично не вигідне бо енергія кристалу зростає. Але при кінцевих температурах стан кристалу характеризується вільною енергією

$$F = E - TS, \quad (3.1)$$

а наявність теплових дефектів не лише збільшує внутрішню енергію кристала на $\Delta E > 0$, але і збільшує ентропію на $\Delta S > 0$. Тому при кінцевих температурах $T > 0$ зміна

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S > 0, \quad (3.2)$$

тобто процес виникнення теплових дефектів є енергетично вигідним, а F має мінімум при деякій концентрації дефектів і заданій температури T .

Концентрацію дефектів Шоттки і Френкеля знаходять як

$$n_{\text{Sh}} = N e^{-\frac{\varepsilon_{\text{Sh}}}{k_{\text{B}}T}}, \quad n_{\text{Fr}} = \sqrt{NN'} e^{-\frac{\varepsilon_{\text{Fr}}}{2k_{\text{B}}T}}, \quad (3.3)$$

де N , N' – кількість атомів і міжвузловин у кристалі; ε_{Sh} , ε_{Fr} , – енергія утворення дефекту Шоттки і Френкеля; k_{B} – стала Больцмана. Концентрація теплових точкових дефектів дорівнює нулю при $T = 0$ К і експоненційно зростає з температурою.

Дислокаціями називають «лінійні» перекручування (не обов'язково по прямій лінії) типу обриву або зсуву атомних шарів, які порушують правильність їх чергування в ґратці.

Найважливішою кількісною характеристикою дислокацій є вектор Бюргерса \mathbf{b} , що являє собою нев'язку контуру Бюргерса, побудованого навколо дислокації. Модуль \mathbf{b} дорівнює одній з міжатомних відстаней у кристалі. Зазвичай модуль \mathbf{b} дорівнює найкоротшій міжатомній відстані. Прийнято розрізняти: крайові дислокації; гвинтові дислокації; змішані дислокації.

Процес виявлення дислокаційних ямок травлення в монокристалах кремнію складається з наступних операцій:

- досліджувану поверхню кремнію шліфують мокрим способом на склі абразивним мікропорошком або за допомогою діамантового кола;
- зразки хімічно полірують у суміші кислот;
- зразки витримують у селективному витравлювачі;
- для підрахунку ямок травлення зазвичай використовують металографічні мікроскопи МІМ-6, МІМ-7, МІМ-8 та ін.

3.2 Завдання

- 1 Ознайомтесь з інструкцією по експлуатації мікроскопа.
- 2 Підготуйте таблицю для запису результатів (табл. 3.1).
- 3 На отриманому зразку методом вибіркового хімічного травлення вивчіть морфологію структуроутворення, характер дефектів структури та їх розподіл.
- 4 Визначте характер розподілу дислокаційних ямок травлення по заданому викладачем напрямку на поверхні зразка і розрахуйте середню густину дислокацій.

5 Побудуйте графік розподілу дислокацій за заданим напрямком.

6 Визначте кристалографічну орієнтацію площини шліфа, на якій виявлені дислокації.

Таблиця 3.1 – Таблиця для запису результатів

Відстань по заданому напрямку, мм	0	1	2	3	4
Кількість дислокацій					
Густина дислокацій, мм ⁻²					

3.3 Контрольні питання

- 1 Що розуміють під дефектом структури твердого тіла?
- 2 Класифікація структурних дефектів у твердих тілах.
- 3 Власні точкові дефекти в кристалах простих речовин.
- 4 Домішкові дефекти в кристалах простих речовин. Вплив домішкових дефектів на електрофізичні властивості напівпровідників.
- 5 Рівноважні і нерівноважні точкові дефекти. Концентрація рівноважних точкових дефектів.
- 6 Лінійні дефекти. Основні характеристики лінійних дефектів. Класифікація дислокацій. Геометричні моделі основних типів дислокацій.
- 7 Механізми утворення і розмноження дислокацій у твердих тілах.
- 8 Методи дослідження дефектів структури.

4 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 4 ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛОВИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ТВЕРДИХ ТІЛ

4.1 Теоретичні відомості

Розглянемо лінійний ланцюжок однакових атомів масою m , які розташовані на відстані a . Припустимо, що n -ий атом зміщений із положенні рівноваги на відстань u_n .

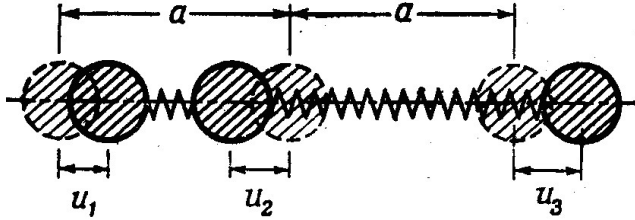


Рисунок 4.1 (аналогічний рис. 2.1 б) – Лінійний ланцюжок однакових атомів, які розташовані на відстані a

Якщо відхилення атомів u_n мале, то сили взаємодії можна розглядати як квазіпружні, тобто пропорційні відхиленню (закон Гука).

Тому при урахування лиш найближчих сусідів сила F_n буде дорівнювати сумі сил, що діють із сторони атомів $n - 1$ та $n + 1$.

$$F_n = -\beta(u_n - u_{n+1}) - \beta(u_n - u_{n-1}) = \beta(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n), \quad (4.1)$$

де β - коефіцієнт квазіпружної сили. Через те, що сила $F_n = -\partial U / \partial u_n$, то для потенційної енергії $U = -\int F_n du_n$ можна записати:

$$U = U_0 + \beta \sum_{n=1}^N (2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})^2.$$

Нехтуючи U_0 і замінюючи $(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$ на x , отримаємо:

$$U = U_0 + \beta x^2. \quad (4.2)$$

Наближення (4.2) називається гармонічним!

В ангармонічному наближенні

$$U(x) = U_0 + \beta x^2 - \gamma x^3, \quad F = -dU/dx = -2\beta x + 3\gamma x^2. \quad (4.3)$$

Згідно розподілу Больцмана ймовірність відхилення атома від положення рівноваги на величину x дорівнює:

$$f(x) = A e^{-\frac{U(x)}{k_B T}}. \quad (4.4)$$

У цьому випадку відстань між атомами (тобто середнє зміщення $\langle x \rangle$), що коливаються треба знаходити як:

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx}$$

Знехтуючи U_0 в (4.2) і (4.3), для гармонічних коливань маємо

$$\langle x \rangle = \frac{A \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{\beta x^2}{k_B T}} dx}{A \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta x^2}{k_B T}} dx} = 0,$$

тому що у чисельнику інтегрується добуток непарної функції x та

парної функції $f(x) = A e^{-\frac{\beta x^2}{k_B T}}$.

Нехай до циліндра з поперечним перерізом S_0 і довжиною l_0 прикладена сила, що розтягає, яка змінює відстань між сусідніми атомними площинами на x , викликаючи тим самим видовження стрижня на Δl . Ця сила буде урівноважена внутрішньою силою

$$FN = 2\beta xN, \quad N = ZS/a^2 - \quad (4.5)$$

кількість частинок, які перебувають в атомному шарі площею S і товщиною a – стала ґратки, Z – кількість атомів в елементарній комірці об'ємом a^3 (для ОЦК ґратки $Z = 2$). Механічні напруги σ , які виникнуть у розтягнутому стрижні, дорівнюватимуть

$$\sigma = \frac{2\beta xN}{S} = kx, \quad (4.6)$$

де $k = 2\beta N/S$. Помноживши і поділивши праву частину (4.6) на відстань між атомними площинами a , одержимо

$$\sigma = ka \frac{x}{a} = Y\varepsilon, \quad Y = ka = \frac{2\beta Na}{S} - \quad (4.7)$$

модуль пружності або модуль Юнга, $\varepsilon = x/a$ – відносна деформація. Формула (4.7) виражає відомий закон Гука.

Знехтуючи U_0 в (4.2) і (4.3) для ангармонічного наближення можна використати розкладення в ряд Тейлора, та наближення високим температурам $U(x)/k_B T \ll 1$:

$$e^{\gamma x^3/k_B T} \approx 1 + \gamma x^3/k_B T, \quad f(x) \approx A e^{-\beta x^2/k_B T} \left(1 + \gamma x^3/k_B T\right),$$

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta x^2}{k_B T} \left(x + \frac{\gamma x^4}{k_B T}\right)} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta x^2}{k_B T} \left(1 + \frac{\gamma x^3}{k_B T}\right)} dx} = \frac{\frac{\gamma}{k_B T} \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{k_B T}{\beta}\right)^{\frac{5}{2}}}{\left(\frac{\pi k_B T}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}} = \frac{3\gamma k_B T}{4\beta^2} > 0.$$

Лінійне теплове розширення визначається формулою:

$$l_T = l_0 (1 + \lambda_T T), \quad (4.8)$$

де λ_T - подовження твердого стрижня на одиницю довжини і на 1°K .

Тоді

$$\lambda_T = \frac{1}{a} \frac{d\langle x \rangle}{dT} = \frac{3k_B \gamma}{4a\beta^2}, \quad (4.9)$$

де a – стала ґратки.

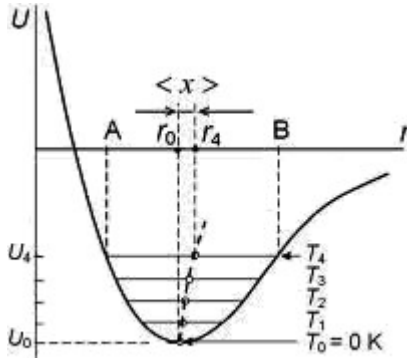


Рисунок 4.2 (аналогічний рис. 2.1 б) – Парний потенціал (між двома атомами у твердому тілі), r – відстань між атомами. Потенціал асиметричний, тому вправо атому зручніше зміститися, ніж уліво

На рис. 4.2 можна прослідити, що зі збільшенням температури середня відстань між атомами збільшується.

4.2 Завдання

1 У відповідності з температурною залежністю електричного опору $R_T = R_0(1 + \alpha_R \Delta T)$ з даних табл. 4.1 знайти середнє значення коефіцієнта α_R .

Залежність електричного опору від температури задається виразом

$$R_T = R_0(1 + \alpha_R \Delta T) = \rho_T \frac{l_T}{S_T}, \quad \rho_T = \rho_0(1 + \alpha_\rho \Delta T), \quad R_0 = \rho_0 \frac{l_0}{S_0}, \quad (4.10)$$

де ρ_T, l_T, S_T – температурно-залежні питомий опір, висота та площа основи стовпчика вольфрама, відповідно; $\rho_0 = 5,5 \cdot 10^{-8}$ Ом · м – питомий опір вольфраму при $T_0 = 273$ К,

Таблиця 4.1 – Залежність опору вольфрамового циліндра висотою $l_0 = 10$ мм і діаметром $D_0 = 10$ мм (при $T_0 = 273$ К.) від температури (стала ґратки $a = 0,3165$ нм, тип ґратки – ОЦК)

$T, \text{К}$	$R_T, 10^{-6} \text{ Ом}$	$\alpha_R, \text{К}^{-1}$
$T_0 = 273$	6,37	–
293	6,99	Далі заповнити
300	7,20	
400	10,26	
500	13,46	
600	16,85	
700	20,49	

2 Одержати вираз для α_ρ в (4.10) і розрахувати для вольфраму величину α_ρ , якщо коефіцієнт лінійного розширення [див. (4.8)] $\lambda_T \approx 4,5 \cdot 10^{-6} 1/\text{K}$.

На прикладі куба з ребром L : залежність його об'єму V від температури задається

$$V_T = V_0(1 + \alpha_V \Delta T), \quad V_T = S_T L_T,$$

де α_V – об'ємний коефіцієнт теплового розширення, S – площа. З хорошою точністю $\alpha_V = 3\lambda_T$, а

$$S_T = S_0(1 + 2\lambda_T \Delta T), \quad \lambda_T = \alpha_V / 3. \quad (4.11)$$

Вважаємо, що (4.11) відповідає і циліндру. Підставляючи (4.11) в (4.10), одержимо:

$$\frac{l_T}{l_0} = \frac{S_T \rho_0}{S_0 \rho_T} (1 + \alpha_R \Delta T), \quad l_T \approx l_0 \left[1 + (\alpha_R - \alpha_\rho + 2\lambda_T) \Delta T \right]. \quad (4.12)$$

Тепер, порівнюючи (4.12) і (4.8), маємо

$$\alpha_R - \alpha_\rho + 2\lambda_T = \lambda_T, \quad \alpha_\rho = \alpha_R + \lambda_T,$$

3 Визначити коефіцієнти гармонічного β [див. (4.5) (4.7)] і ангармонічного γ [див. (4.9)] наближення в (4.2) і (4.3), які характеризують теплові властивості матеріалу, якщо пружний модуль $Y = 350$ ГПа.

4.3 Контрольні питання

1. Закон Гука.
2. Причини теплового розширення твердих тел.
3. Вивести вираз для середньої міжатомної відстані.
4. Чи залежить коефіцієнт лінійного розширення твердих тіл від температури?

5 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №5 ВИВЧЕННЯ СТАТИСТИКИ МАКСВЕЛЛА- БОЛЬЦМАНА

5.1 Теоретичні відомості

Будь-яке тверде тіло – це система, що складається з величезного числа мікрочастинок. Існує два способи опису стану такого колективу - термодинамічний і статистичний.

Термодинамічний опис колективу. При термодинамічному підході до опису властивостей колективу, що складається з великого числа частинок; його розглядають як макроскопічну систему. Таку систему називають термодинамічною. Стан системи, в якому вона може знаходитися як завгодно довго, називається рівноважним. Він визначається завданням сукупності незалежних фізичних параметрів - параметрів стану. Основними з них є об'єм системи V , тиск P і температура T .

Сукупність всіх видів енергії, укладених в ізольованій системі, називають внутрішньою енергією системи (E). Вона складається з кінетичної енергії частинок, потенційної енергії взаємодії частинок. В результаті взаємодії з навколишнім середовищем термодинамічна система може отримувати або віддавати деяку кількість теплоти dQ , може здійснювати роботу або над нею буде здійснюватись робота dA . За першим законом термодинаміки:

$$dE = dQ - PdV. \quad (5.1)$$

За другим законом термодинаміки кількість теплоти dQ , отримана системою в оборотному процесі, викликає збільшення ентропії

$$dS = dQ/T, \quad (5.2)$$

де T – температура, при якій система одержує теплоту. Підставляючи dQ з (5.2) в (5.1), одержимо

$$dE = TdS - PdV. \quad (5.3)$$

З (5.3) виходить, що внутрішня енергія системи може змінюватися за рахунок здійснення роботи й обміну теплотою. Однак

енергія системи може змінюватися також через зміну числа N частинок в ній, через те, що кожна частинка, що покидає систему, несе із собою певну енергію. Тому в загальному вигляді закон збереження енергії (5.3) необхідно записати в такий спосіб:

$$dE = TdS - PdV + \mu dN, \quad (5.4)$$

де dN – зміна числа часток у системі. Параметр μ називається *хімічним потенціалом* системи. Він виражає зміну енергії ізольованої системи постійного об'єму, викликану зміною в ній числа частинок на одиницю

$$\mu = \frac{dE}{dN}. \quad (5.5)$$

Розглянемо умову рівноваги системи, повна кількість частинок якої залишається незмінною, але частинки можуть переходити з однієї системи в іншу. Прикладом такої системи є два електронних провідники, наприклад два метали, приведені в контакт. Умова рівноваги

$$\mu_1 = \mu_2. \quad (5.6)$$

Статистичний спосіб опису системи частинок. Стан кожної частинки описується завданням трьох її координат x, y, z і трьох складових імпульсу p_x, p_y, p_z . Складаючи рівняння руху для часток і вирішуючи їх, можна, здавалося б, одержати повну інформацію про поведінку системи і передбачити її стан у будь-який момент часу. Для системи, що складається з N часток, відносно відхилення спостережуваної фізичної величини Ω від її середнього значення $\langle \Omega \rangle$:

$$\frac{\sqrt{(\Delta\Omega)^2}}{\langle \Omega \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (5.7)$$

Якщо $\Omega = n = N/V$ – концентрація частинок, то

$$\frac{\sqrt{(\Delta n)^2}}{\langle n \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

За характером поведінки в системі всі мікрочастинки можна поділити на ферміони і бозони.

До ферміонів відносять електрони, протони, нейтрони й інші частки з напівцілим спіном: $\hbar/2, 3\hbar/2, \dots$. Якщо даний квантовий стан уже зайнятий ферміоном, то ніякий інший ферміон з такими ж квантовими числами не може знаходитися в цьому стані. У цьому полягає відомий принцип **Паулі**, якому підпорядковуються ферміони.

До бозонів відносять фотони, фонони й інші частки, що мають цілочисельні спіни: $0, \hbar, 2\hbar, \dots$. Бозони, у відмінності від ферміонів, навпаки спроможні необмежено заселяти один і той же стан.

Якщо ж число станів Z виявляється одного порядку з числом частинок N , тобто якщо виконується умова

$$N/Z \approx 1, \quad (5.8)$$

то питання про те, як заселяти стан, поодиночі чи колективно, стає дуже актуальним. У цьому випадку специфіка мікрочастинки істотно впливає на властивості колективу, як цілого. Такі системи називаються **виродженими**.

Функція розподілу. Щоб задати стан системи, наприклад, атомів газу, треба вказати його термодинамічні параметри P, V, T . Щоб задати стан часток, треба вказати значення їх координат x, y, z і складових імпульсу p_x, p_y, p_z або енергію часток, що визначається їх координатами й імпульсами.

Зв'язок між цими двома типами величин здійснює статистична функція розподілу $n(E, T)dE$, що виражає число частинок з енергією від E до $E + dE$ в системі одиничного об'єму, стан якої описується термодинамічними хімічним потенціалом μ і T . Таку функцію називають *повною статистичною функцією розподілу*.

Використовуючи $g(E)$ – густину станів, тобто число станів у одиниці інтервалу енергій для одиничного об'єму кристала

$$g(E) = dZ/dE,$$

$$n(E, T)dE = f(E, T)dZ = f(E, T)g(E)dE,$$

де $f(E, T)$ – ймовірність заповнення цих станів частинками.

Функція розподілу для виродженого газу бозонів (функція розподілу Бозе-Ейнштейна) має вигляд:

$$f_B(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1}. \quad (5.9)$$

Функція розподілу для виродженого газу ферміонів (функція розподілу Фермі-Дірака) має вигляд:

$$f_F(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}. \quad (5.10)$$

Електрони, що залишили метал в результаті термоемісії, вже не підкоряються принципу Паулі і їх поведження описується іншими статистичними законами. Якщо прийняти, що термоелектрони підкоряються розподілу Максвелла-Больцмана $f_M(E)$, частка електронів, швидкості яких у напрямку катод – анод (один напрямок!) укладені в інтервалі від v до $v+dv$, дорівнює

$$dn = n f_M(E) dv, \quad f_M(E) = \sqrt{\frac{m_e}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{E}{k_B T}}, \quad E = \frac{m_e v^2}{2}, \quad (5.11)$$

де n – концентрація термоелектронів у хмарі поблизу катода.

Значення струму може бути підраховане так:

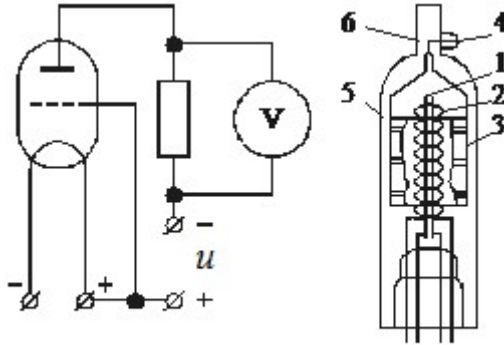
$$I = e \int_{v_{\min}}^{\infty} s v dn, \quad (5.12)$$

де s – площа катода, e – заряд електрона; v_{\min} – мінімальна швидкість, необхідна електрону для того, щоб він зміг досягти анода. Задаючи нижню межу інтегрування, можна перевірити розподіл електронів за швидкостями, тобто вигляд статистики. Для цього використовують затримуючий потенціал u (рис. 5.1). Таким чином, анода досягнуть лиш електрони, для яких

$$m_e v^2 / 2 \geq eu. \quad (5.13)$$

Переходячи від швидкостей під інтегралом до кінетичних енергій, з урахуванням (5.13), маємо

$$I = \frac{sen}{\sqrt{2\pi m_e k_B T}} \int_{eu}^{\infty} e^{-\frac{E}{k_B T}} dE = I_0 e^{-\frac{eu}{k_B T}}. \quad (5.14)$$



a – електрична схема для дослідження статистики термоелектронів; *б* – іонізаційний манометр ПМИ-2: 1 – катод; 2 – сітка; 3 – колектор; 4 – вивід колектора; 5 – балон; 6 – трубка для приєднання до вакуумної системи

Рисунок 5.1 – Вакуумна лампа іонізаційного манометра ПМИ-2

5.2 Завдання

Залежність струму колектора I вакуумної лампи іонізаційного манометра ПМИ-2 (рис. 5.1) від замикаючої напруги u , прикладеної між катодом і колектором, задається таблицею

u , В	0	0,04	0,08	0,12	0,16	0,2	0,24	0,28
I , мкА	153	96	60	38	23,9	15	9,4	6

u , В	0,32	0,36	0,4	0,44	0,48	0,52	0,56
I , мкА	3,7	2,4	1,5	0,9	0,6	0,4	0,2

Поділимо ліву і праву частину у формулі (5.14) на I_0 і

прологарифмуємо, маємо $\ln(I/I_0) = -[e/(k_B T)]u$ і побудуємо графік $y(x) = -[e/(k_B T)]u$, де $y(x) = \ln(I/I_0)$, $x = u$. Тангенс кута нахилу буде дорівнювати $[e/(k_B T)]$.

2. Визначте вигляд функції розподілу, якому підкоряються термоелектрони і визначити температуру катода.

5.3 Контрольні питання

1. Способи опису стану макроскопічної системи.
2. Критерій виродження. Невироджені і вироджені системи.
3. Функція розподілу. Число станів мікрочастинок.
4. Функція розподілу Фермі-Дірака. Ферміони.
5. Функція розподілу Максвелла-Больцмана.
6. Функція розподілу Бозе-Ейнштейна. Бозони.

6 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 6 МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДИХ ТІЛ

6.1 Теоретичні відомості

Сумарний магнітний момент атомів, що знаходяться в одиниці об'єму, називають намагніченістю тіла \mathbf{M} .

Відношення намагніченості \mathbf{M} до напруженості магнітного поля \mathbf{H} називають магнітною сприйнятливістю χ .

Магнітна проникність μ , що показує у скільки разів підсилюється поле в речовині порівняно з вакуумом, пов'язана з магнітною сприйнятливістю співвідношенням

$$\mu = 1 + \chi.$$

В залежності від значення і знаку магнітної сприйнятливості всі тверді тіла за характером впливу на них магнітного поля поділяють на три основних групи:

- діамагнетики ($\chi < 0$, $\chi < 1$);
- парамагнетики ($\chi > 0$, $\chi < 1$);
- феромагнетики ($\chi > 0$, $\chi \gg 1$).

В діа- і парамагнетиків χ не залежить від H , тоді як у феромагнетиків $\chi = f(H)$. У діамагнетиків χ не залежить від температури. У парамагнетиків магнітна сприйнятливність спадає обернено пропорційно температурі. У феромагнетиків χ практично не залежить від температури до деякого значення останньої. При досягненні цієї температури магнітна сприйнятливність феромагнітних тіл різко спадає і феромагнітне тіло перетворюється у звичайний парамагнетик.

Температура, за якої феромагнетик втрачає свої феромагнітні властивості, називається *точкою Кюрі*. Для різних тіл температура Кюрі має різні значення.

Феромагнітні тіла (до них відносять залізо, нікель, кобальт, ряд сплавів і сполук) відрізняються від пара- і діамагнетиків більшим значенням магнітної сприйнятливності і залежністю останньої від напруженості зовнішнього магнітного поля. У феромагнетиках (і антиферомагнетиках) існують зони, в кожній з яких спінові магнітні моменти атомів орієнтовані паралельно (або антипаралельно) один одному. Ці зони спонтанного намагнічення називають *доменами*. Домени орієнтовані в феромагнетиках хаотично, їх сумарний момент дорівнює нулю.

6.2 Завдання

Дослідити залежність магнітної проникності μ від температури і визначити точку Кюрі феромагнетика (нікелеве осердя, феритове кільце або кільце із пермалою).

При нагріванні феромагнетика до температури, яка відповідає точці Кюрі, різко зменшується магнітна сприйнятливність феромагнетика. При підвищенні температури до точки Кюрі через тепловий рух атомів домени розпадаються. Це призводить до зникнення феромагнітних властивостей, і феромагнетик перетворюється у парамагнетик.

Досліджуваний феромагнетик є осердям трансформатора з двома обмотками А1 і А2. Обмотка А1 підключається до ланцюга змінного струму, обмотка А2 замкнена на опорі міліамперметра мА. Коли по обмотці А1 протікає змінний струм I_1 , у феромагнетику виникає потік

$$\Phi_1 = \mu\mu_0 s N_1 H,$$

де s – площа витка первинної обмотки; n_1 – кількість витків первинної обмотки; H – напруженість магнітного поля, створюваного струмом I_1 ,

$$H \propto I_1.$$

Потік Φ_1 пересікає витки вторинної обмотки А2 й індукує в них ЕРС:

$$\varepsilon_2 = -\frac{d\Phi_1}{dt} \propto \mu\mu_0 s N_2 \frac{dH}{dt},$$

де n_2 – кількість витків вторинної обмотки.

Обмотка А1 розрахована так, що при проходженні через неї струму I_1 вона нагрівається і нагріває феромагнетик. Мілівольтметр показує ЕРС, пропорційну різниці температур феромагнетика і навколишнього середовища.

При досягненні феромагнетиком температури, відповідній точці Кюрі, μ різко і значно зменшується, а, отже, зменшується ε_2 , що, в свою чергу, зменшує I_2 , яке відмічається міліамперметром.

Отже, побудувавши залежність $I_2=f(T)$, можна визначити точку Кюрі (за початком спаду на кривій).

6.3 Контрольні питання

1. Що таке намагніченість тіла?
2. Що розуміють під магнітною сприйнятливістю?
3. На які групи поділяють тверді тіла за характером впливу на них магнітного поля?
4. Що таке точка Кюрі?
5. Що таке феромагнетик?
6. Що називають доменами?

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. М.О. Галушак, В.Г. Ральченко, А.І. Ткачук, Д.М. Фреїк. Методи вимірювання теплопровідності масивних твердих тіл і тонких плівок (огляд) // Фізика і хімія твердого тіла. – Т. 14, № 2, С. 317-344 (2013).
2. Болеста І.М. Фізика твердого тіла : навч. посіб. для студ. фіз. спец. вищ. навч. закл. / І.М.Болеста ; Львівський національний ун-т ім.Івана Франка.-Л. : Видавничий центр ЛНУ ім.Івана Франка,2003.-479 с.
3. Бібик В.В. Фізика твердого тіла : Навчальний посібник за загальною редакцією проф. Проценка І.Ю. / В.В. Бібик, Т.М. Гричановська, Л.В. Одноворець, Н.І. Шумакова.- Суми : Вид-во СумДУ, 2010.- 200с.
4. Пастушенко С.М. Фізика твердого тіла. Ядерна фізика : навч. посіб. / С.М. Пастушенко. – К. : Вид-во Нац. авіац. ун-ту «НАУ-друк», 2009. – 256 с.
5. Строїтелева Н.І., Кісельов Є.М. Фізика твердого тіла. Методичні вказівки до лабораторних робіт та самостійної роботи (для студентів ЗДІА спеціальності «мікро- та наноелектроніка» денної та заочної форм навчання) / Н.І.Строїтелева, Кісельов Є.М. Видавництво ЗДІА, 2013.- 55с.
6. Поплавко Ю.М. Електрофізика твердих тіл: навчальний посібник. Інтернет-видавництво Національного Технічного університету України, 2012. – 756 с.
7. Лучицький Р.М. Додатковий курс фізики. Фізика твердого тіла: мультимедійний супровід лекцій / Р.М.Лучицький, В.В.Нижникевич, - Івано-Франківськ : ІФНТУНГ, 2016. – 180с.
8. А.В. Коротун В. В. Погосов, Н. А. Смирнова. Методичні вказівки до лабораторного практикуму з дисципліни „Фізика твердого тіла “спеціальностей: 152 „Метрологія та інформаційно-вимірювальна техніка“ і 153 „Мікро- та наносистемна техніка“. Запоріжжя: ЗНТУ, 2019. – 42 с.