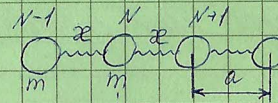


# Плотность фононов.



$\xi_n$  - смещение N-го атома от положения равновесия

система  
уравнений

$$\begin{cases} m\ddot{\xi}_n = -x(\xi_{n+1} - \xi_n) \\ m\ddot{\xi}_{n+1} = -x(\xi_n - \xi_{n+1}) \end{cases}$$

возникает бегущая волна

$$\xi_n = \xi_0 e^{i(\omega t - k_n \xi)}$$

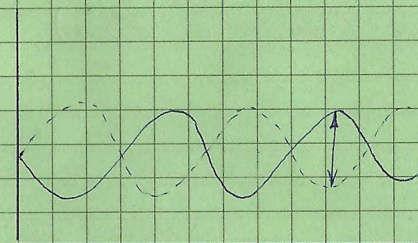
$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n}, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}$

если крайний атом закреплён, тогда по фазе равен нулю.

$$\xi_n = \xi_0 e^{i(\omega t + k_n \xi + \pi)}$$

- волна, идущая навстречу;

затемно в общем случае, когда крайний атом не закреплён и тогда по фазе равен  $\pi$ .



$$\omega = \sqrt{\frac{x}{m}} \sin \frac{ka}{2}$$

N - число атомов решётки,

$$k = \frac{\pi n}{Na} = \frac{\pi n}{L}$$

Возникают гармоничные стоячие волны

$$E_g = h\nu = \frac{h\omega}{2\pi} ; \quad \lambda = vT = \frac{v}{\nu}$$

$$\lambda_{\max} = \frac{L}{2}$$



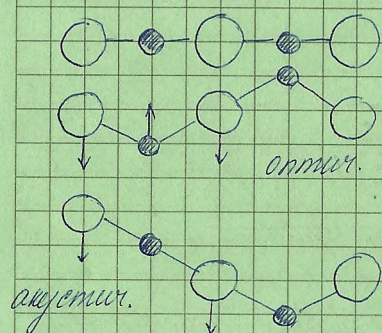
Возникнет бесконечно много безупречных волн, а старых волн будет второго сходящегося кол-ва.

Для каждой старой волны есть свой строго определенный набор частот.

Фононы классифицируют:

L-фононы - продольные;

T-фононы - поперечные.



Высокочастотные фононы называются оптическими, низкочастотные - акустическими.

Теплоемкость кристаллов.

1) Закон Дulonga и Пти (Дulonga - Пти)

$$E = \frac{1}{2} kT + \frac{1}{2} kT = kT$$

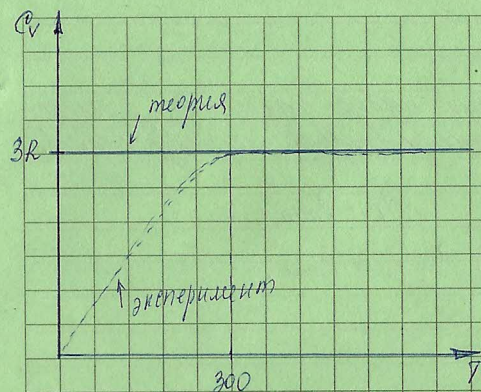
$3N$  осцилляторов

$$U = 3N \cdot kT$$

$N = N_A$ , т.е. взяли 1 моль вещ-ва,  $\Rightarrow$

$$U_M = 3N_A kT = 3RT$$

$$C_V = \left( \frac{\partial U_M}{\partial T} \right)_V = 3R$$

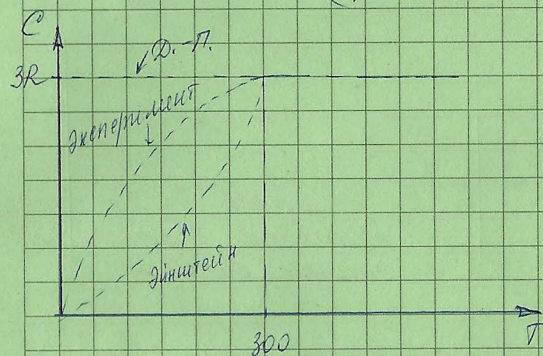


2) Теория теплоемкости Эйнштейна

Энергия кристалла рассматривается как энергия квантовых осцилляторов.

$$U^{ЭВ} = \frac{3N \cdot h\nu}{\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\} - 1}$$

$$\left( \frac{\partial U^{ЭВ}}{\partial T} \right)_V = C_V = \frac{3N \cdot kT \cdot \exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\}}{\left(\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\} - 1\right)^2} \cdot \left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2$$





### 3) Приближенные Дебай

$0 \leq N \leq \infty$ , разнообразный набор частот, учитывается взаимодействие осцилляторов между собой.

$$U = \sum_{i=1}^N g(\nu_i) \cdot \frac{h\nu_i \cdot 3N}{(\exp\{\frac{h\nu_i}{kT}\} - 1)} \quad \nu_1 = \nu_{\min}; \quad \nu_N = \nu_{\max}.$$

показывает, сколько осцилляторов с данной частотой имеется в кристалле

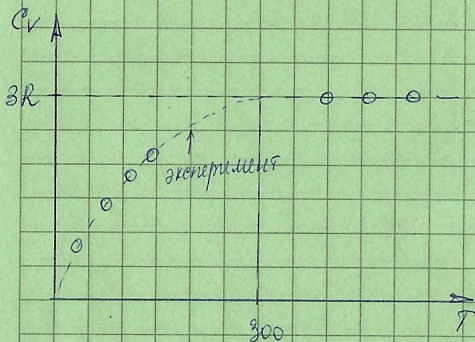
$$U \approx \int_0^{\nu_{\max}} \frac{3h\nu N}{(\exp\{\frac{h\nu}{kT}\} - 1)} d\nu \quad ; \quad \left[ \frac{h\nu}{kT} = x \right]$$

$$C_V^D = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 9Nk \left( \frac{T}{T_D} \right)^3 \int \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)} dx$$

температура Дебая

$$T \ll T_D \rightarrow C_V = Nk \left( \frac{T}{T_D} \right)^3$$

$$T \gg T_D \rightarrow C_V = 3R$$



○ — метод Дебая хорошо описывает зависимость в данных точках.

$$C_N = C_V^D + \gamma T - \text{металлическая теплоемкость}$$

зависит от энергии ионных оболочек, членов свободных е-нов, температуры и т.д.; различия в разных металлах.

### Дефекты в кристалле.

Дефекты бывают:

- макроскопические (царапины, трещины, сколы, дислокации).

Дислокации: а) винтовые;  
б) смешанные (краевые)

свинцовая нить (без дислокаций)  
 $\sigma = 1 \text{ мм}^2$

свинцовая нить с дислокациями выдерживает не более 100 кг.

$$m = 3m$$

- точечные (связанные с размерами отдельных атомов).

	+	-	+	-	+
	-	+	-	+	-
	+	-	+	-	+
A	+	-	+	-	
	+	-	+	-	K

✓ Валентные (катионные и анионные)  
катионная в. — центр захвата дырки; (V-центр)  
анионная в. — центр захвата электрона. (F-центр)

A + K — дефекты Шоттки (центр окраски)



$Al_2O_3$  →  $Al_2O_{3.9}$  (много междоузельных вакансий)  
 белый; чистый; полупроводник  
 прозрачный

$NaCl$  →  $NaCl_{0.9}$   
 прозрачный белый непрозрач.

✓ дефекты по Френкелю

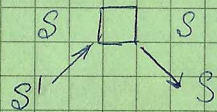
+ - + - +  
 - К - + -  
 + - + - +

катион покидает свое положение,  
 но не уходит из кристалла, а  
 размещается в междоузлии.  
 образуется катионная вакансия

✓ дефекты замещения

S S S

уходит атом, на его место при-  
 ходит другой.



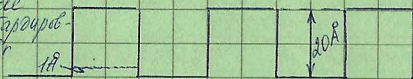
✓ дефекты внедрения

S S S  
M  
 S S S

инородный атом внедряется в  
 междоузлие

Концентрация дефектов сильно зависит от температуры.

после  
диффузионной  
обработки



Дефектов на хорошо отполи-  
 рованной, обработанной поверх-  
 ности кремния.

Нарушенный слой можно "собрать" в пленку арсенида  
 галлия.