

УДК 539.124

Использование представлений спиральной электромагнитной модели электрона для объяснения свойств электрона проводимости

*Часть III. Взаимодействие электрона проводимости с тепловыми колебаниями атомов кристаллической решетки. Участие в теплопроводности. Виды энергетических щелей**

Т. А. Гришина, В. И. Креопалов
ФГУП «НПО «Орион»», Москва, Россия

В. Ю. Гришина
ИЯИ РАН, Москва, Россия

Д. В. Креопалов
МГТУ им. Баумана, Москва, Россия

Продолжен начатый в работах [1, 2] анализ на основе представлений спиральной электромагнитной модели электрона (СЭМЭ) процесса взаимодействия электронов проводимости (ЭП) с полем кристаллической решетки (КР), состоящей из колеблющихся атомов. Рассмотрены взаимодействие ЭП с тепловыми колебаниями атомов КР и влияние температуры на характер поведения ЭП.

3.1. Введение

В предыдущих статьях цикла [1, 2] представления СЭМЭ использованы для анализа условий превращения атомного электрона (АЭ) в ЭП и

влияния, которое трансляционная анизотропия КР оказывает на характер поведения ЭП. Рассмотрены идеальная решетка (строго периодическая, состоящая из неподвижных атомов) и реальная (состоящая из колеблющихся атомов).

По результатам анализа выполнено построение энергетической шкалы. Характер расположения энергетических границ на этой шкале на-

Часть I данной статьи опубликована в журнале «Прикладная физика № 2 за 2004 г., а часть II — в № 3 за 2004 г.

ходится в соответствии с особенностями поведения ЭП и меняется при переходе от идеальной решетки к реальной и при изменениях температуры.

Для идеальной и реальной решеток при трех фиксированных температурах выполнено построение энергетической шкалы, на которую нанесены соответствующие пары энергетических границ. Каждая пара границ делит энергетическую шкалу на три диапазона. Электроны, принадлежащие к разным диапазонам, отличаются друг от друга по степени участия электрона в связанном состоянии.

Нижнюю часть шкалы занимает диапазон энергий, при которых электрон находится в устойчивом связанном состоянии (УСС) в составе одного и того же атома. Среднюю часть шкалы занимает диапазон энергий, при которых ЭП способен участвовать в кратковременных актах неустойчивого связанного состояния (НСС) с разными атомами решетки (эти акты названы "релаксациями"). Такой электрон движется в пространстве решетки по траекториям с резкими поворотами, зигзагами и петлеобразными участками.

ЭП, занимающий уровень энергии в самой верхней части шкалы, находящейся выше верхней границы, не испытывает кратковременных переходов в НСС (не подвержен "релаксациям"). Он перемещается в пространстве решетки по плавным траекториям, не имеющим резких поворотов и петлеобразных участков. Диапазон энергий, соответствующий верхней части энергетической шкалы, назван диапазоном отсутствия связанных состояний (ОСС) или диапазоном "безрелаксационных" ЭП. Интервал энергетической шкалы, заключенный между верхней и нижней границами, назван диапазоном НСС (или диапазоном "релаксаций").

В данной статье эта энергетическая шкала использована для анализа взаимодействия АЭ с колебаниями атомов КР в полном диапазоне температур, в пределах которого существует данная кристаллическая модификация материала. Разработана также модель электронной структуры твердого тела, альтернативная моделям, использующим представление о решеточных возбуждениях.

Установлено, что воздействие колебаний решетки на состояние АЭ можно описать как воздействие на положение на энергетической шкале верхней и нижней границ диапазона "релаксаций". Показано, что увеличение амплитуды колебания атомов действует как фактор, под влиянием которого верхняя граница диапазона "релаксаций" смещается вверх по энергетической шкале, а нижняя граница, которая отделяет диапазон "релаксаций" от диапазона УСС, смещается вниз по этой шкале, расширяя с двух сторон диапазон энергий, характеризующий участие электрона в "релаксациях".

Установлено, что процесс взаимодействия ЭП с колебаниями решетки и его участие в теплопроводности могут осуществляться только через посредство "релаксаций". Электрон, не испытывающий их, не участвует и в теплопроводности.

Установлено также, что способность энергетических границ к изменениям своего положения на энергетической шкале усложняет схему расположения диапазонов на этой шкале, становится причиной появления двух диапазонов с пороговым (щелевым) характером температурного хода проводимости. Реальной решетке, состоящей из колеблющихся атомов, соответствует энергетическая шкала, разделенная на пять диапазонов. Друг от друга они отличаются характером изменений проводимости, сопровождающих изменения температуры.

3.2. Воздействие колебаний решетки на импульс электрона проводимости. "Релаксации" как форма участия электрона проводимости в процессе теплопроводности

Если решетку, состоящую из колеблющихся атомов, можно аппроксимировать решеткой, состоящей из неподвижных атомов, смещенных из своих узлов [1], то воздействие теплового колебания атомов на электрон в такой решетке следует описывать как скачкообразное изменение импульса электрона, которое происходит при попадании электрона в область локальной флуктуации плотности пространственного распределения атомов, обусловленной тепловыми колебаниями. Рассмотрим примеры таких скачкообразных изменений импульса электрона.

Пример 1. ЭП, перемещавшийся перед этим по прямолинейному отрезку траектории, попадает в область локального разрежения атомов, где для локального мгновенного межатомного расстояния $a_{loc.inst}$ и длины волны ЭП λ выполняется условие

$$\lambda < \pi a_{loc.inst} \quad (3.1)$$

Для электрона в этом межатомном промежутке начинает выполняться условие (1.8) из [1]. Электрон испытывает превосходящее воздействие со стороны поля одного атома и огибает последний. Траектория электрона делает в этом месте петлю или резкий поворот. Электрон испытывает кратковременный акт НСС с этим атомом ("релаксацию").

Пример 2. Из-за того, что по мере повышения температуры амплитуда колебаний атомов, описываемая соотношением (1.12) из [1], возрастает, в области какого-либо локального сгущения атомы сблизилась до такой степени, что для одного из связанных электронов, входившего до этого в состав одного из атомов, начинает вы-

полняться условие (1.9) из [1], поскольку для его длины волны становится справедливым соотношение

$$\lambda > \pi a_{loc.inst.min} \quad (3.2)$$

Очутившись в этом минимальном межатомном промежутке, электрон будет испытывать сравнимые по величине воздействия полей двух атомов. Получив от этих атомов сравнимые по величине приращения импульса, электрон перестает огибать атом, с которым был связан, покидает его и превращается в ЭП.

В уравнениях (3.1) и (3.2) характер перемещения электрона и его импульс меняются скачкообразно под влиянием флуктуации пространственной плотности атомов, но это не единственный результат воздействия теплового колебания на электрон.

В первом примере: кратковременное НСС электрона с атомом равносильно задержке электрона на некоторое время там, где атомы решетки раздвинуты. Задержка ЭП в области локального разрежения атомов, приводя к возникновению в этом месте решетки избыточного отрицательного заряда, способствует последующему сближению атомов и перемещению разрежения в соседний участок решетки.

Во втором примере: после ухода связанного электрона из области локального сгущения атомов в этой области возникает избыток положительного заряда. Он способствует последующему раздвиганию атомов и перемещает тем самым сгущение атомов в соседний участок решетки.

В обоих примерах воздействие на импульс ЭП со стороны флуктуаций плотности пространственного расположения атомов оказывается взаимным и вполне детерминированным. Электрон, испытывая изменения импульса, одновременно способствует возврату смещенных атомов в узлы решетки и тем самым распространению теплового колебания по решетке. В колеблющейся решетке акты кратковременного НСС (“релаксации”) оказываются участниками процесса теплопроводности.

3.3. Сравнение двух трактовок взаимодействия электронов проводимости с колебаниями атомов в кристаллической решетке

В традиционной физике твердого тела [3, 4] взаимодействие ЭП с тепловыми колебаниями атомов реальной решетки описывают как взаимодействие с фононами — частицеподобными квантами акустического решеточного возбуждения, обладающими квазиимпульсом.

Выдвинутое в работе [2] новое представление о свойствах энергетических границ открывает возможность альтернативного способа представления информации о воздействии колебаний

решетки и температуры на поведение ЭП и других АЭ. Сопоставление положения на энергетической шкале фиксированных занятых уровней и границ, обладающих свойством изменять свое положение на энергетической шкале в ответ на изменения температуры, позволяет анализировать взаимодействие АЭ с полем реальной колеблющейся решетки, не прибегая к представлению о решеточных возбуждениях.

Именно такое сопоставление применено в следующих параграфах при разработке альтернативной модели электронной структуры материала, которая иллюстрирует изменения его проводящих свойств, сопровождающие изменения температуры. В основе разработки — анализ взаимного расположения на энергетической шкале четырех энергетических границ и спектра уровней энергии, занятых АЭ.

3.4. Температурный ход (пороговый и беспороговый характер) участия электрона в теплопроводности как основа классификации диапазонов на энергетической шкале

При заданной температуре T “релаксациям” подвержены все электроны, принадлежащие к диапазону,

$$E_{dr}^{up.lim}(T) > E > E_{dr}^{low.lim}(T), \quad (3.3)$$

где $E_{dr}^{up.lim}$ и $E_{dr}^{low.lim}$ определяются соотношениями (2.2, а') и (2.3, а') из [2]. Все электроны из диапазона (3.3) при температуре T участвуют: в кратковременных актах НСС с разными атомами, во взаимодействии с тепловыми колебаниями решетки, вносят свой вклад в теплопроводность, и с этой точки зрения неотличимы друг от друга. Однако с понижением температуры поведение этих электронов должно эволюционировать по-разному. Из всей совокупности электронов, принадлежащих при температуре T диапазону (3.3), только электроны, занимающие уровни в пределах диапазона

$$E_{dr}^{up.lim}(T=0) > E > E_{dr}^{low.lim}(T=0), \quad (3.4)$$

вплоть до 0 K , испытывают “релаксации” и осуществляют процесс теплопроводности. Только для электронов из минимального для реальной КР диапазона “релаксаций” (3.4) характер взаимодействия с колебаниями решетки не меняется принципиальным образом ни при каких температурах. Поэтому диапазон (3.4) можно назвать диапазоном беспороговых “релаксаций” или диапазоном беспорогового участия электрона в кратковременных актах НСС с разными атомами решетки. Этот диапазон энергий занимает на

энергетической шкале среднюю часть зоны проводимости.

Совсем не так ведут себя с изменением температуры ЭП, которые занимают энергетические уровни, находящиеся выше и ниже границ диапазона (3.4). Они отличаются пороговым (щелевым) характером участия в “релаксациях” и теплопроводности. Уровни энергии, соответствующие пороговому характеру участия электрона в “релаксациях”, отмечены на энергетической шкале рис. 3.1. Классификация энергетических диапазонов этой шкалы приведена на рис. 3.2. Диапазон (3.4) на этих рисунках обозначен римской цифрой III.

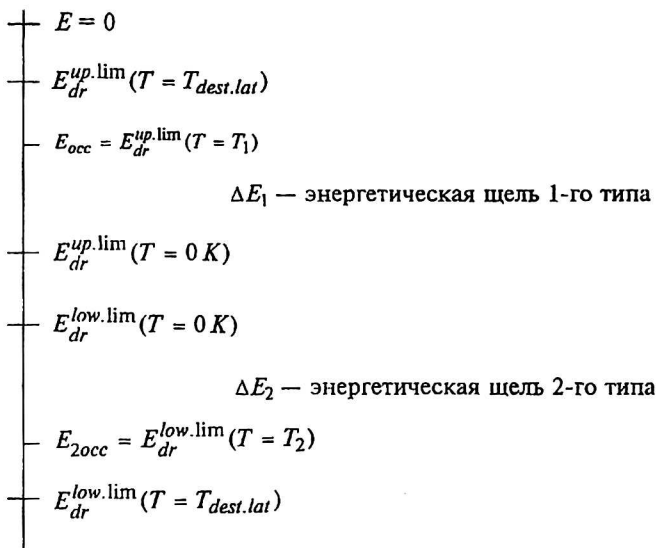


Рис. 3.1. Шкала с расположением энергетических границ и занятых уровней, демонстрирующим возможность существования в зоне проводимости колеблющейся решетки двух типов энергетических щелей ΔE_1 и ΔE_2 и соответствующих пороговых температур T_1 и T_2

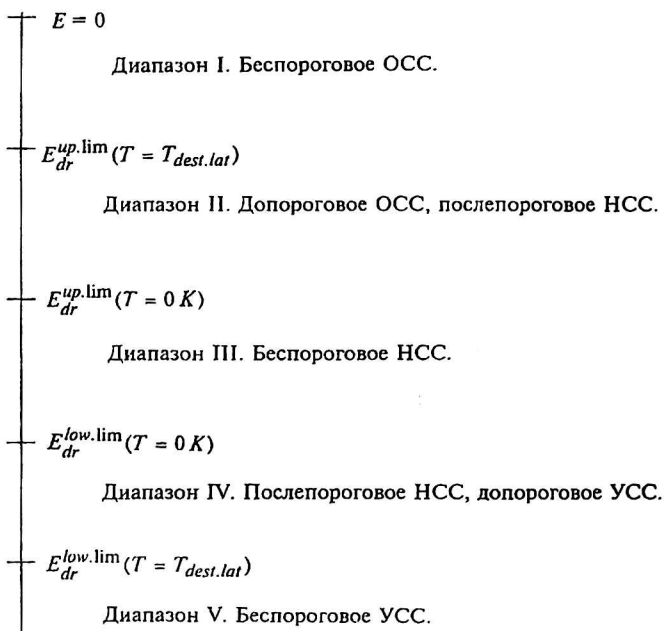


Рис. 3.2. Классификация энергетических диапазонов в колеблющейся решетке по степени участия атомного электрона в связанном состоянии

3.5. Энергетическая щель и пороговая температура первого типа

Пусть уровень энергии E_{1occ} , занятый электроном, располагается на энергетической шкале рис. 3.1 выше диапазона (3.4) и удовлетворяет условию

$$E_{1occ} = E_{dr}^{up.lim}(T = T_1) > E_{dr}^{up.lim}(T = 0), \quad (3.5)$$

где $T_1 < T_{dest.lat}$, $T_{dest.lat}$ — температура прекращения существования (расплавления, перестройки) данной кристаллической модификации материала.

При $T = 0$ К электрон, занимающий уровень (3.5), принадлежит диапазону “безрелаксионной” проводимости. В интервале температур $0 < T < T_1$ амплитуды смещений атомов из узлов решетки, определяемые соотношением (1.12) из [1]

$$|\delta a|(0) < |\delta a|(T) < |\delta a|(T_1), \quad (3.6)$$

так малы, что в пространстве колеблющейся решетки для ЭП, занимающего уровень E_{1occ} , не существует межатомных промежутков, где для него выполняется условие (1.8) из [1]. Это означает, что в решетке не существует межатомных промежутков, где этот ЭП подвергался бы преобладающему воздействию поля одного какого-то атома и направление его импульса резко менялось бы. Электрон не испытывает “релаксаций”. Он движется в КР проводника от одной ее границы до другой по плавной траектории без петель и резких поворотов (см. рис. 2.1, а [2]). Соответственно, этот электрон, проходя через решетку, никак не способствует распространению тепловых колебаний малой амплитуды (3.6) по решетке и не участвует в процессе теплопроводности.

Промежуток энергетической шкалы, расположенный между границей $E_{dr}^{up.lim}(T = 0$ К), определяемой соотношениями (2.2, а) и (2.2, а') из [2], и уровнем энергии E_{1occ} , определяемым соотношением (3.5), представляет собой энергетическую щель первого типа

$$\Delta E_1 = E_{1occ} - E_{dr}^{up.lim}(T = 0$$
 К). \quad (3.7)

При повышении температуры до $T = T_1$ щель ΔE_1 перекрывается, поскольку граница $E_{dr}^{up.lim}$, сдвигающаяся по энергетической шкале вверх под влиянием возрастания амплитуды δa колебаний атомов в узлах решетки, достигает на энергетической шкале положения, совпадающего с уровнем энергии (3.5), на котором находится электрон. Последний, не поменяв своей энергии, оказывается в диапазоне “релаксаций”.

Он скачком меняет характер своего поведения, становится подверженным “релаксациям” и начинает двигаться по траектории, которая содержит не только плавные участки, но и резкие повороты и петлеобразные участки (см. рис. 2.1, б из [2]).

Используя при определении амплитуды смещения атома из узла решетки в диапазоне температур $0 < T < \Theta$, где Θ — температура Дебая, линейную интерполяцию по формуле

$$|\delta a|(T) = |\delta a|(0) + \frac{T}{\Theta} [|\delta a|(\Theta) - |\delta a|(0)] \quad (3.8)$$

и заменив в (3.8) T на T_1 , а также учитывая, что, согласно (1.12) из [1] $|\delta a|(\Theta) = 2\delta a(0)$, получим для пороговой температуры T_1 , разделяющей два различных состояния одного и того же электрона в одной и той же решетке

$$T_1 = \Theta \frac{|\delta a|(T_1) - |\delta a|(0)}{|\delta a|(0)}. \quad (3.9)$$

При повышении температуры до этого значения электрон, занимающий уровень (3.5), скачком меняет характер своего перемещения в пространстве решетки и свое поведение. Из электрона, двигавшегося по решетке, “не замечая” тепловых колебаний, он превращается в ЭП, взаимодействующий с тепловыми колебаниями, участвующий в “релаксациях” и осуществляющий теплопроводность.

Диапазон энергий, к которому принадлежит уровень (3.5)

$$E_{dr}^{up.lim}(T = 0 K) < E < E_{dr}^{up.lim}(T = T_{dest.lat}), \quad (3.10)$$

является диапазоном допорогового “безрелаксационного” состояния ЭП и послепороговых “релаксаций”. На рис. 3.1 и 3.2 он обозначен цифрой II.

Диапазон энергий, занимающий самую верхнюю часть энергетической шкалы

$$E_{dr}^{up.lim}(T = T_{dest.lat}) < E < 0, \quad (3.11)$$

является диапазоном беспорогового ОСС или беспорогового “безрелаксационного” состояния ЭП. На рис. 3.1 и 3.2 он обозначен цифрой I.

3.6. Энергетическая щель и пороговая температура второго типа

Уровень энергии E_{2occ} , занятый электроном, располагается на энергетической шкале рис. 3.1 ниже диапазона (3.4) и удовлетворяет условию

$$E_{2occ} = E_{dr}^{low.lim}(T = T_2) < E_{dr}^{low.lim}(T = 0) \quad (3.12)$$

при $T = 0 K$, этот электрон находится в УСС с одним из атомов решетки (принадлежит диапазону УСС). Интервал энергетической шкалы, отделяющий уровень E_{2occ} от границы $E_{dr}^{low.lim}(T = 0 K)$, является энергетической щелью второго типа.

$$\Delta E_2 = E_{dr}^{low.lim}(T = 0 K) - E_{2occ}. \quad (3.13)$$

При повышении температуры от $0 K$ до $T = T_2$ нижняя граница диапазона “релаксаций”, согласно уравнениям (2.3, б) и (2.3, в) из [2], сдвигается вниз по энергетической шкале под влиянием возрастания амплитуды δa колебаний атомов в узлах решетки. Граница $E_{dr}^{low.lim}$ достигает на энергетической шкале положения, совпадающего с уровнем энергии (3.12), на котором находится электрон. Энергетическая щель (3.13) перекрывается, и электрон, занимающий уровень (3.12), скачком меняет свое поведение. Из электрона, находившегося в УСС, он превращается в ЭП, участвующий в “релаксациях” (актах кратковременного НСС с разными атомами) и в электронно-дырочной проводимости.

Применение к электронам (3.12) термина “электронно-дырочная проводимость” представляется целесообразным, поскольку свойственный им температурный ход проводимости типичен для полупроводников. Вакансию, которая при понижении температуры испытывает рекомбинацию с одним из ЭП, т. е. совершает пороговый переход от участия в кратковременных актах НСС с разными ЭП к УСС с одним из ЭП, здесь и в дальнейшем условимся называть “дыркой”. Рекомбинация происходит при пороговой температуре T_2 , которую можно определить, применив ту же процедуру, что и при получении соотношения (3.9)

$$T_2 = \Theta \frac{|\delta a|(T_2) - |\delta a|(0)}{|\delta a|(0)}. \quad (3.14)$$

Диапазон энергий

$$E_{dr}^{low.lim}(T = 0 K) > E > E_{dr}^{low.lim}(T = T_{dest.lat}), \quad (3.15)$$

где $T_{dest.lat}$ — та же температура, что и в (3.10), является диапазоном допорогового УСС АЭ и послепорогового превращения их в ЭП, испытывающие “релаксации”. На рис. 3.1 и 3.2 этот участок зоны проводимости обозначен цифрой IV. Электроны, которые занимают уровни энергии в диапазоне V и удовлетворяют условию

$$E < E_{dr}^{low.lim}(T = T_{dest.lat}), \quad (3.16)$$

в данной модификации материала остаются в связанном состоянии всегда. Диапазон V — это диапазон беспорогового УСС.

Классификация диапазонов энергетической шкалы, описанная выше и приведенная на рис. 3.2, представляет описание электронной структуры в твердом теле, принципиально отличающееся от традиционного.

3.7. Пороговая температура как функция энергетической щели

Соотношения (3.9) и (3.14) можно преобразовать, представив T_1 и T_2 в виде функций соответствующих энергетических щелей. Такое преобразование выполнено с применением уравнений (2.2) и (2.3) из [2]. После упрощений, учитывающих данные табл. 2.1 из [2], пороговые температуры T_1 и T_2 будут описываться выражениями

$$T_1 = \ominus \frac{E_{1occ} - E_{dr}^{up.lim}(T = 0K)}{E_{dr}^{up.lim}(T = 0K) - E_{dr.id.r}^{up.lim}} = \ominus \frac{\Delta E_1}{\delta E_{dr.z.osc}^{up.lim}}; \quad (3.9')$$

$$T_2 = \ominus \frac{E_{dr}^{low.lim}(T = 0K) - E_{2occ}}{E_{dr.id.r}^{low.lim} - E_{dr}^{low.lim}(T = 0K)} = \ominus \frac{\Delta E_2}{\delta E_{dr.z.osc}^{low.lim}}, \quad (3.14')$$

где $\delta E_{dr.z.osc}^{up.lim}$ и $\delta E_{dr.z.osc}^{low.lim}$ — смещения соответствующих энергетических границ, обусловленные нулевыми колебаниями.

3.8. Заключение

1. Проанализированы процесс взаимодействия АЭ с колебаниями атомов КР и условия участия ЭП в теплопроводности. Установлено, что для ЭП, описываемого спиральной электромагнитной моделью, процесс его взаимодействия с колебаниями КР и участия в теплопроводности может осуществляться только через “релаксации” — акты кратковременного НСС. Электрон, не участвующий в таких актах, не участвует и в теплопроводности.

2. Предложен способ описания взаимодействия ЭП с колебаниями атомов КР, альтернативный моделям, использующим представление о решеточных возбуждениях. В его основе лежит анализ поведения границ на энергетической шкале.

3. Разработана отличающаяся от традиционной модель электронной структуры твердого тела. В основе модели — энергетическая шкала с нанесенными на нее четыремя энергетическими границами. При расчете энергии, соответствующей границе, длину волны электрона приравни-

вают реальному межатомному расстоянию в решетке, в котором учтены обусловленные тепловыми колебаниями смещения атомов из узлов решетки. Для расчета взяты минимальное и максимальное межатомные расстояния при двух граничных температурах, обозначающих температурный диапазон, в пределах которого существует данная кристаллическая модификация материала. Соотношение положения на энергетической шкале уровней энергии, занятых АЭ, и четырех энергетических границ иллюстрирует проводящие свойства материала и изменения этих свойств, сопровождающие изменения температуры.

4. Энергетическую шкалу эти границы делят на пять диапазонов, которые отличаются друг от друга степенью участия АЭ в связанном состоянии и характером изменений поведения этого электрона, сопровождающих изменения температуры.

Самую нижнюю часть шкалы занимает диапазон беспорогового устойчивого связанного состояния АЭ. Над ним располагается диапазон допорогового устойчивого связанного состояния АЭ и послепорогового превращения их в ЭП, участвующие в кратковременных актах НСС (послепорогового превращения АЭ в ЭП, испытывающие “релаксации”). Выше находится диапазон ЭП, испытывающих беспороговые “релаксации”, еще выше — диапазон ЭП, испытывающих послепороговые “релаксации” и допороговое состояние “безрелаксационной” проводимости. В состоянии “безрелаксационной” проводимости ЭП перемещается в пространстве КР по плавным траекториям, не имеющим резких поворотов и петлеобразных участков, примерно так, как мог бы двигаться свободный электрон в свободном пространстве. Самую верхнюю часть шкалы занимает диапазон беспороговой “безрелаксационной” проводимости (полного отсутствия связанного состояния).

Литература

1. Гришина Т. А., Креопалов В. И., Гришина В. Ю., Креопалов Д. В. Использование представлений спиральной электромагнитной модели электрона для объяснения свойств электрона проводимости. Часть I. Обоснование возможности возникновения электронов проводимости на основе представлений спиральной электромагнитной модели электрона. — М.: ФГУП “ВИМИ”// Прикладная физика. 2004. № 2. С. 5.
2. Гришина Т. А., Креопалов В. И., Гришина В. Ю., Креопалов Д. В. Использование представлений спиральной электромагнитной модели электрона для объяснения свойств электрона проводимости. Часть II. Влияние трансляционной анизотропии кристаллической решетки на свойства электрона проводимости. Построение энергетической шкалы для атомных электронов в кристаллической решетке. — М.: ФГУП “ВИМИ”// Там же. № 3. С. 5.
3. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. — М.: Мир, 1969.
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. — М.: Наука, 1978.

Use of an electron spiral electromagnetic model for the explanation of conductivity properties

*Part III. Interaction of conductivity band electron with lattice atoms oscillations.
It's participation to the thermal conductance. Kinds of energetic gaps*

T. A. Grishina, V. I. Kreopalov
The State Unitary Enterprise "Orion", Moscow, Russia

V. Yu. Grishina
Institute for Nuclear Research, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

D. V. Kreopalov
Moscow State Technical University, Moscow, Russia

Interaction of the atomic electron with lattice atoms oscillations was analyzed. Conditions of the conduction electron participation to the thermal conductance were determined.