

Принцип Паули и вторичная структура кристаллов

Ю.И. Веснин

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск

E-mail: yu_vesnin@ngs.ru

В современной физике твердого тела одним из основных положений является принцип Паули, распространенный на электроны твердого тела [1]. В физике атома принцип Паули позволил глубже понять структуру периодической системы элементов Д.И. Менделеева, дал теоретическое обоснование классификации химических элементов.

Первоначально теоретическая физика твердого тела развивалась на основе классической электронной теории. Эта теория успешно объясняла некоторые экспериментальные закономерности (закон Ома, связь электропроводности с теплопроводностью металлов и др.) В то же время эта теория не могла объяснить многие факты (теплоемкость металлов, парамагнетизм, сопротивление металлов при низких температурах).

При дальнейшем развитии теоретическая физика твердого тела стала использовать принцип Паули, перенесенный на электроны кристалла. Этот подход, по-видимому, был недостаточно обоснован.

Принцип Паули для атома означает, что два электрона не могут иметь одинаковую энергию или одинаковую орбиту. В изолированном атоме структура и энергетика электронной оболочки формируется под действием только внутренних сил, в постоянном объеме, без влияния внешних сил.

Этот механизм обеспечивает выполнимость принципа Паули для атома.

Свободные электроны в кристалле (металл, полупроводник) являются принципиально открытой системой и находятся под действием внешних сил. Это отличие от электронной системы атома не позволяет установить механизм, обеспечивающий выполнение принципа Паули для свободных электронов кристалла. За счет какого механизма, каких сил два свободных электрона в кристалле не могут иметь одинаковую энергию? Энергетика свободных электронов кристалла формируется как внутренними, так и внешними силами. В открытой системе, какой является совокупность свободных электронов кристалла (концентрация $10^{20} - 10^{23}$ в см^3), по-видимому, не существует реального механизма, способного обеспечить выполнение принципа Паули. Это является принципиальным отличием от принципа Паули для атома. Следовательно, принцип Паули для свободных электронов кристалла нужно считать искусственным, формальным приемом. Вытекающие отсюда теоретические модели будут неадекватны действительности. Ссылки на то, что выводы из этих моделей совпадают с экспериментом, не вполне корректны. При достаточном развитии какой-либо системы взглядов (парадигмы), можно получить частичное или полное совпадение с фактами за счет введения различных допущений, предположений, гипотез. Классический пример — астрономическая система Птолемея. Она долгое время давала правильное положение планет Солнечной системы за счет гипотезы об эпициклах при совершенно неверной модели.

Современная физика твердого тела содержит множество таких положений («квантовых эпициклов»): переменная масса электрона, отрицательная масса, куперовские

пары, квантовая жидкость с дробно заряженными возбуждениями и т.д. Для их принятия необходимо лишь согласование в рамках основной парадигмы.

При этом возможно частичное или даже полное совпадение с экспериментом. При таком подходе физика твердого тела дает лишь формальное *ad hoc* описание опытных данных. Резко снижается возможность прогнозировать новые факты и явления, объяснять надежно установленные опытные факты (например, ферромагнетизм наночастиц) [3].

В свое время распространение принципа Паули на свободные электроны кристалла было вынужденным решением, так как классическая электронная теория не могла объяснить многие факты. Других возможностей не было. Теория вторичной структуры кристаллов (ВСК) дает возможность решить проблему свободных электронов кристалла на основе новых принципов.

Согласно теории ВСК, кристалл состоит из элементарных частиц – миков (мик – минимальный кристалл). Размер мика (экспериментальные данные) – около 30 нм [2]. Промежутки между миками (один атомный слой) образуют в кристалле единую связанную систему – Т-пространство кристалла. По Т-пространству осуществляется транспорт вещества (диффузия), электронный и ионный транспорт. Электроны движутся в кристалле в промежутках между миками. Для кубических металлических кристаллов (форма мика – куб) такое движение возможно по двум путям: 1) плоскость между гранями миков (дол); 2) линейное пространство на стыке четырех миков (лан). В Т-пространстве постоянно находятся атомы примесей и собственные атомы кристалла с максимальной концентрацией 10^{21} атом/см³ (дол) или 10^{19} атом/см³ (лан). Согласно [2], в Т-пространстве увеличены межатомные расстояния, а электронная плотность уменьшена. Поэтому можно принять, что электроны практически не взаимодействуют с атомами Т-пространства на длине мика (~ 30 нм). Далее на пути электронов находится линейная цепочка атомов (лан). При столкновении с этими атомами дрейфовая скорость электронов $V_d \rightarrow 0$. В постоянном поле процесс вновь повторяется и новое ускорение электронов происходит на расстоянии ~ 30 нм (рис. 1).

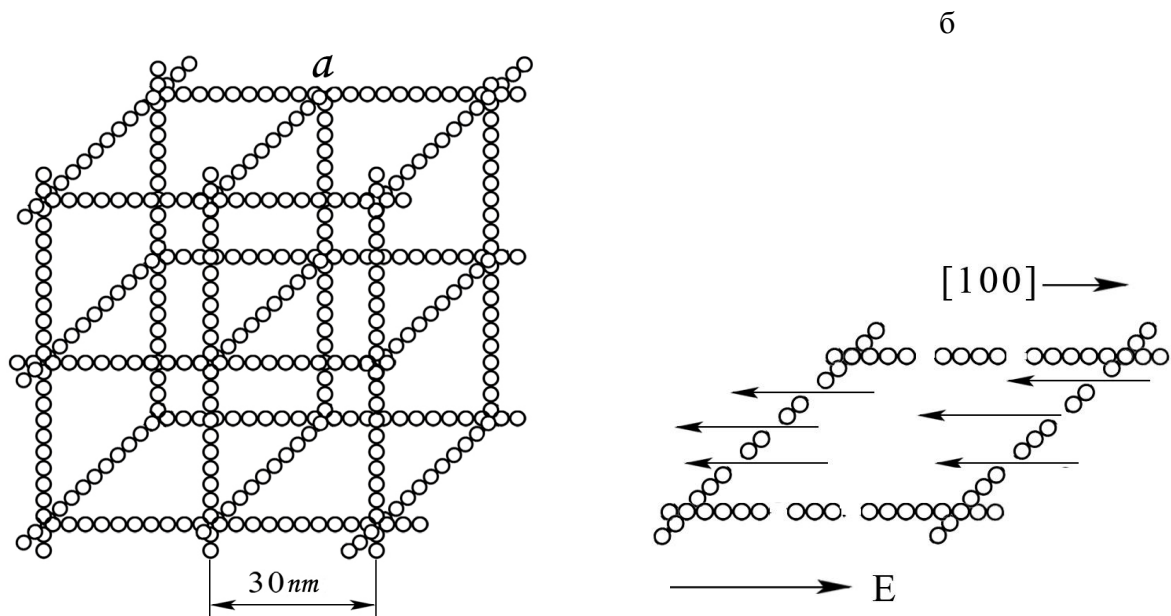


Рис. 1. а) Фрагмент пространственной структуры L-цепочек атомов.

б) Схема движения электрона в плоскости дола.

Таким образом, согласно теории ВСК, средняя длина свободного пробега электронов в металле при $T \approx 300$ К равна ~ 30 нм. Это согласуется с известными данными. Для одновалентных металлов при 0° С средняя длина пробега $l = 10 - 50$ нм [1]. При 0° С взаимодействие электронов с тепловыми колебаниями атомов решетки минимально и основное значение для сопротивления металла имеет вышеупомянутый механизм.

На основе ВСК и классической электронной теории получены следующие результаты.

1. Вывод закона Ома [2].
2. Значения скорости движения электронов в полупроводниковых кристаллах, согласующиеся к экспериментом [2].
3. Для эффекта Ганна впервые получена формула зависимости частоты колебаний от потенциала ионизации примеси. Результаты согласуются с опытом (кристаллы GaAs [2]).
4. Качественное объяснение зависимости $\rho(T)$ металлов при $T < 300$ К [3, 2010].
5. Предложен новый механизм сверхпроводящего перехода [3, 2010].
6. Предложен механизм нового явления – ферромагнетизма наночастиц [3, 2008].

Схема некоторых приложений теории ВСК дана на рис. 2 [4].

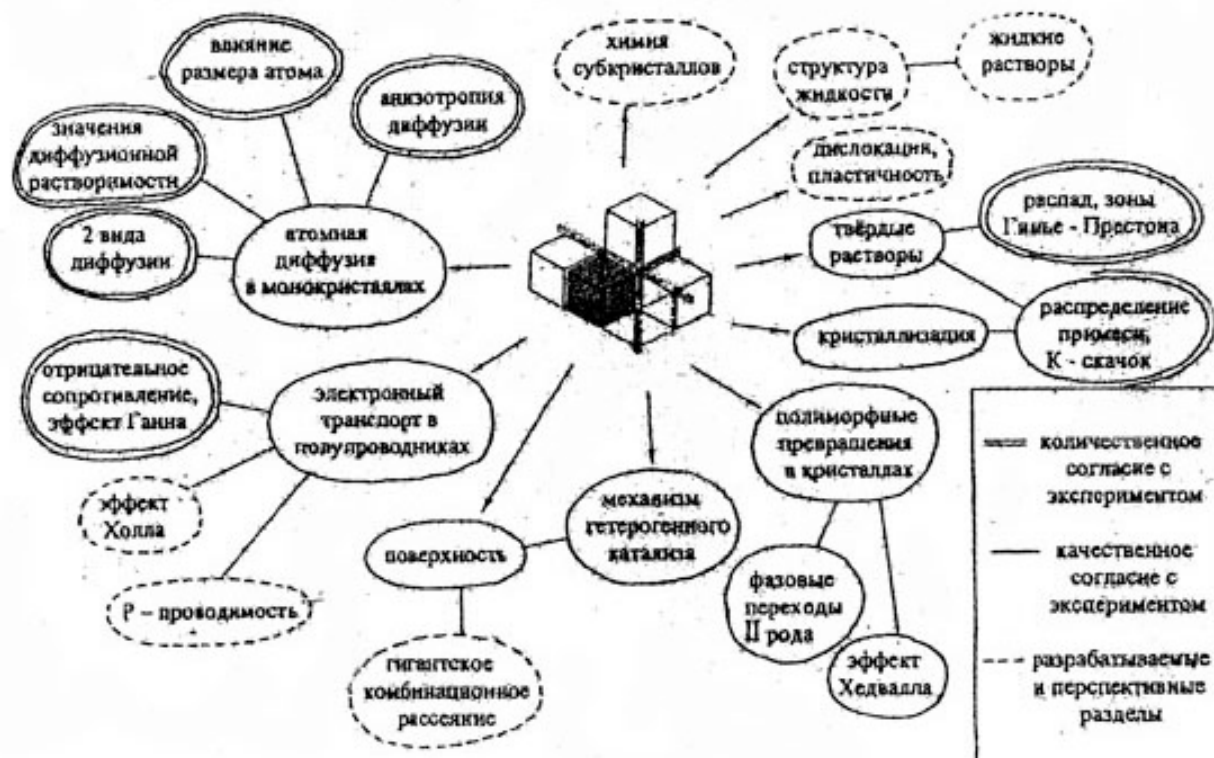


Рис. 2. Некоторые приложения теории вторичной структуры кристаллов

Наиболее успешные приложения получены в тех случаях, когда изучаемое свойство непосредственно зависит от вторичной структуры кристалла (электрические, механические, некоторые физико-химические свойства). Некоторые свойства кристаллов

зависят преимущественно от первичной атомно-молекулярной структуры (оптические, структурные свойства, электромагнитный резонанс, парамагнетизм и др.). В этих случаях применение теории ВСК требует специальных подходов с учетом первичной структуры кристалла.

Литература:

1. Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Физматлит; М., 1963.
2. Ю.И. Веснин. Вторичная структура и свойства кристаллов. Изд. СО РАН; Новосибирск, 1997.
3. Ю.И. Веснин. www.nanometer.ru (2008 – 2010 гг).
4. Ю.И. Веснин. Новое направление в науке о твердом теле. Наука в Сибири, 2006, № 42, с. 8.