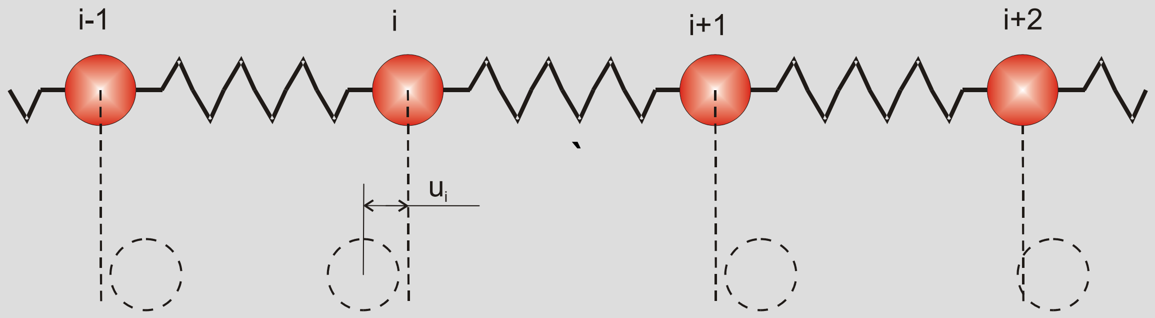
Квантовая макрофизика.

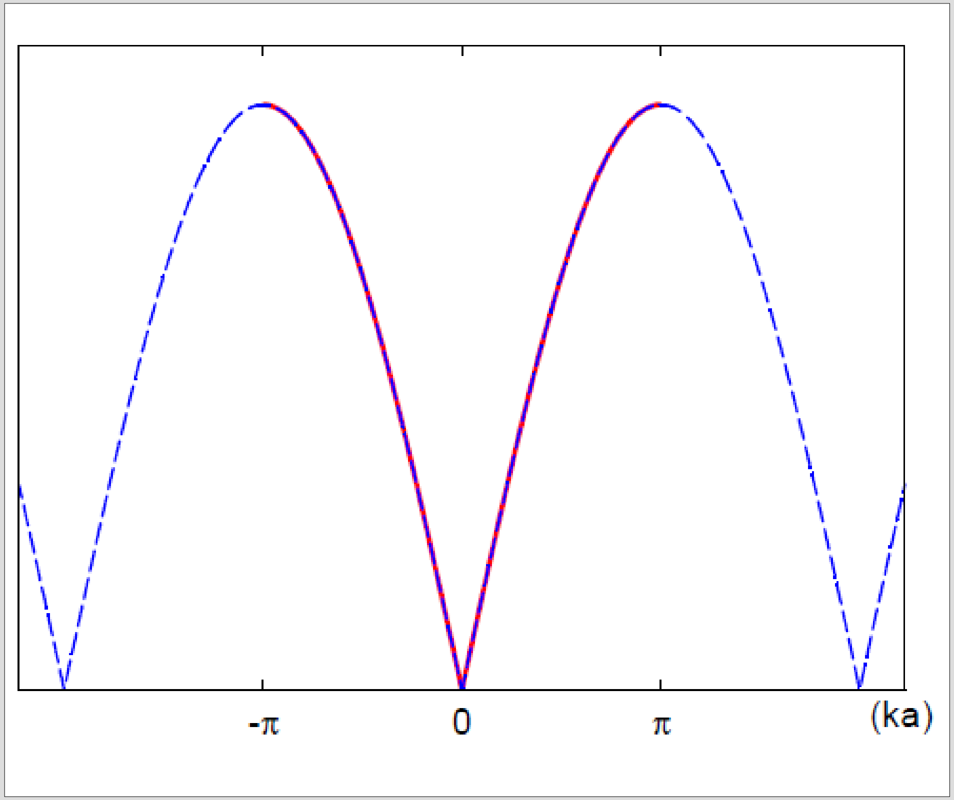
Лекция 2. Теплоёмкость твёрдых тел. Квантование колебаний решётки. Фононы.

Часть 1: Спектр упругих волн в кристалле

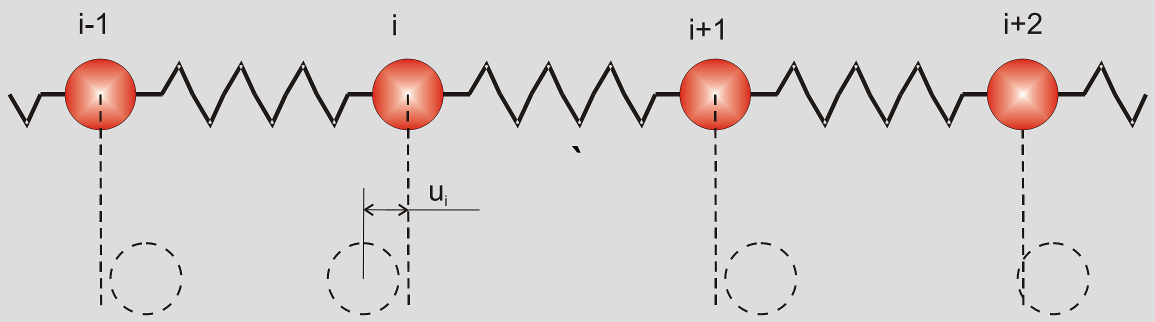
Напоминание: Продольные колебания в однородной цепочке



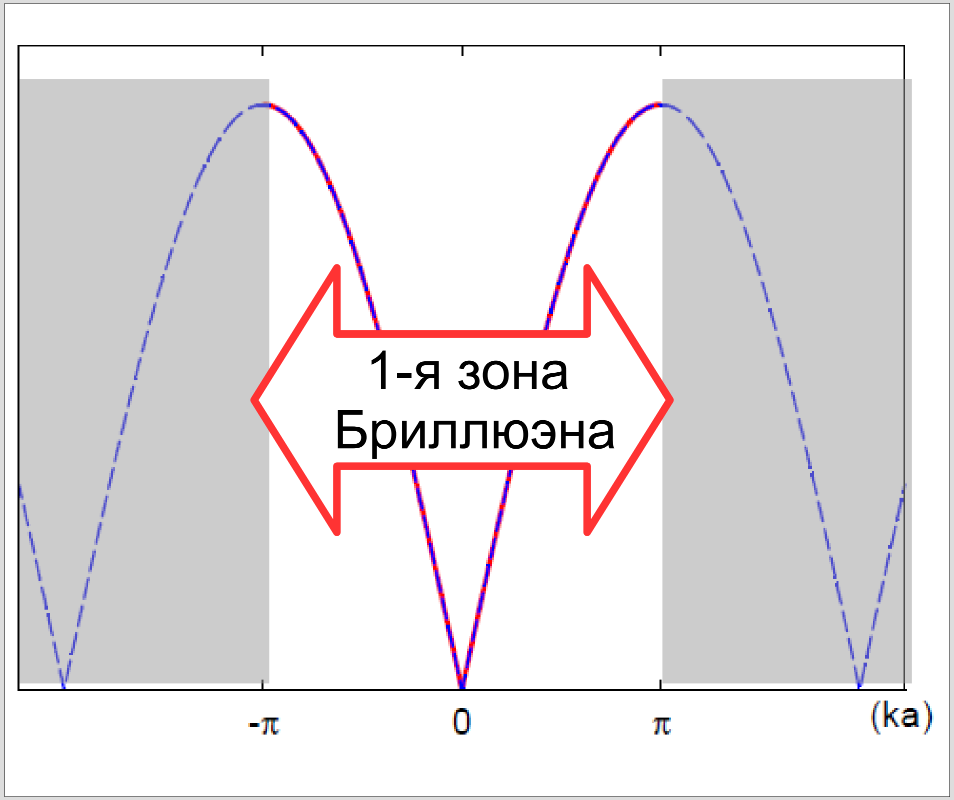
$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin\left(\frac{k\,a}{2}\right) \right| = \frac{2\,s}{a} \left| \sin\left(\frac{k\,a}{2}\right) \right|$$



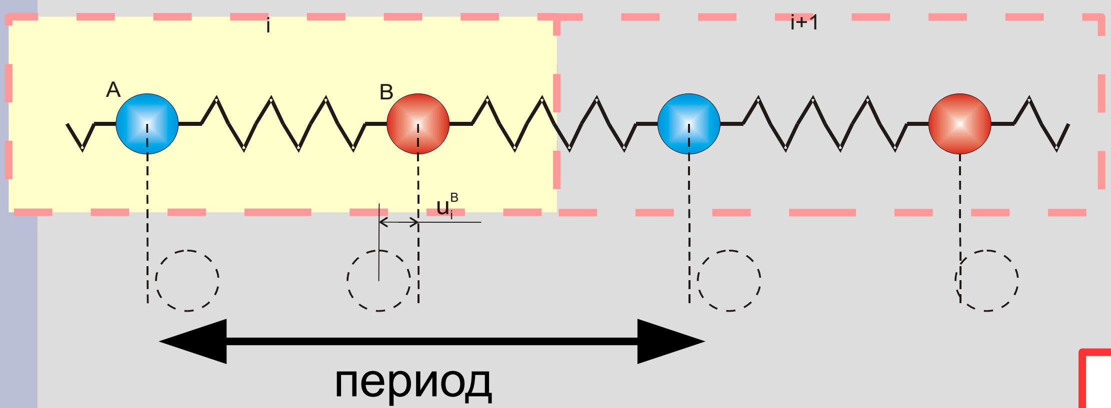
Напоминание: Продольные колебания в однородной цепочке

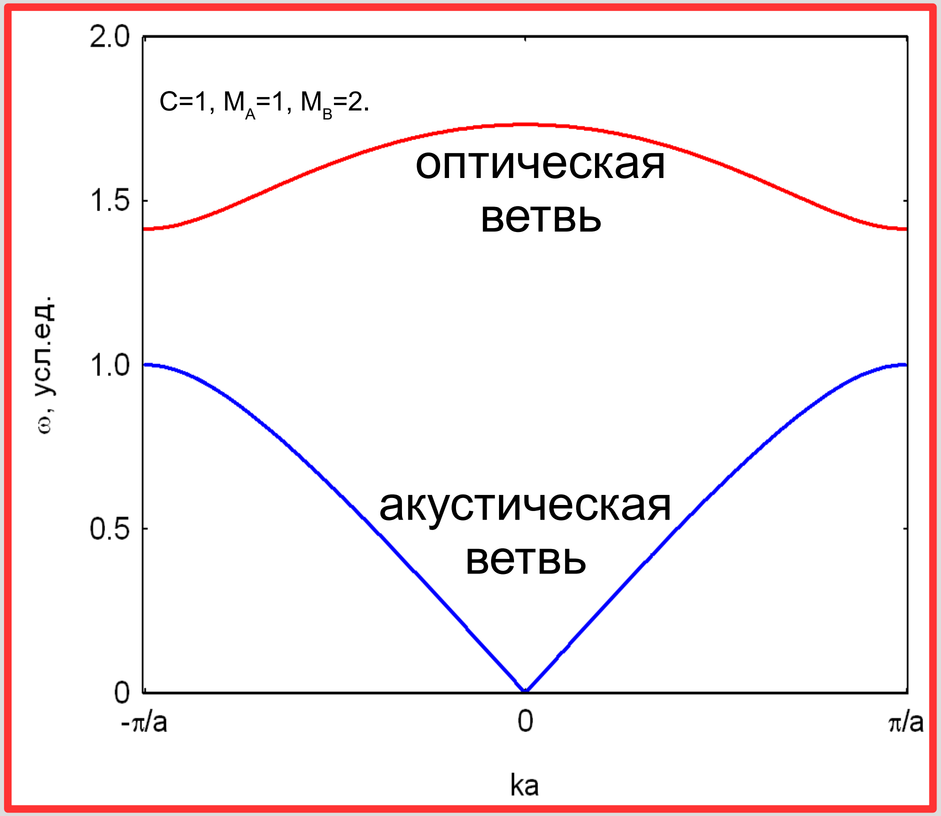


$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}}\left|\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right| = \frac{2\,s}{a}\left|\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right|$$

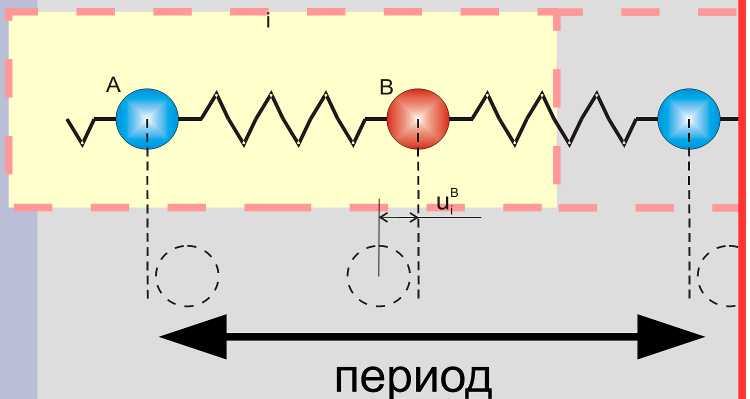


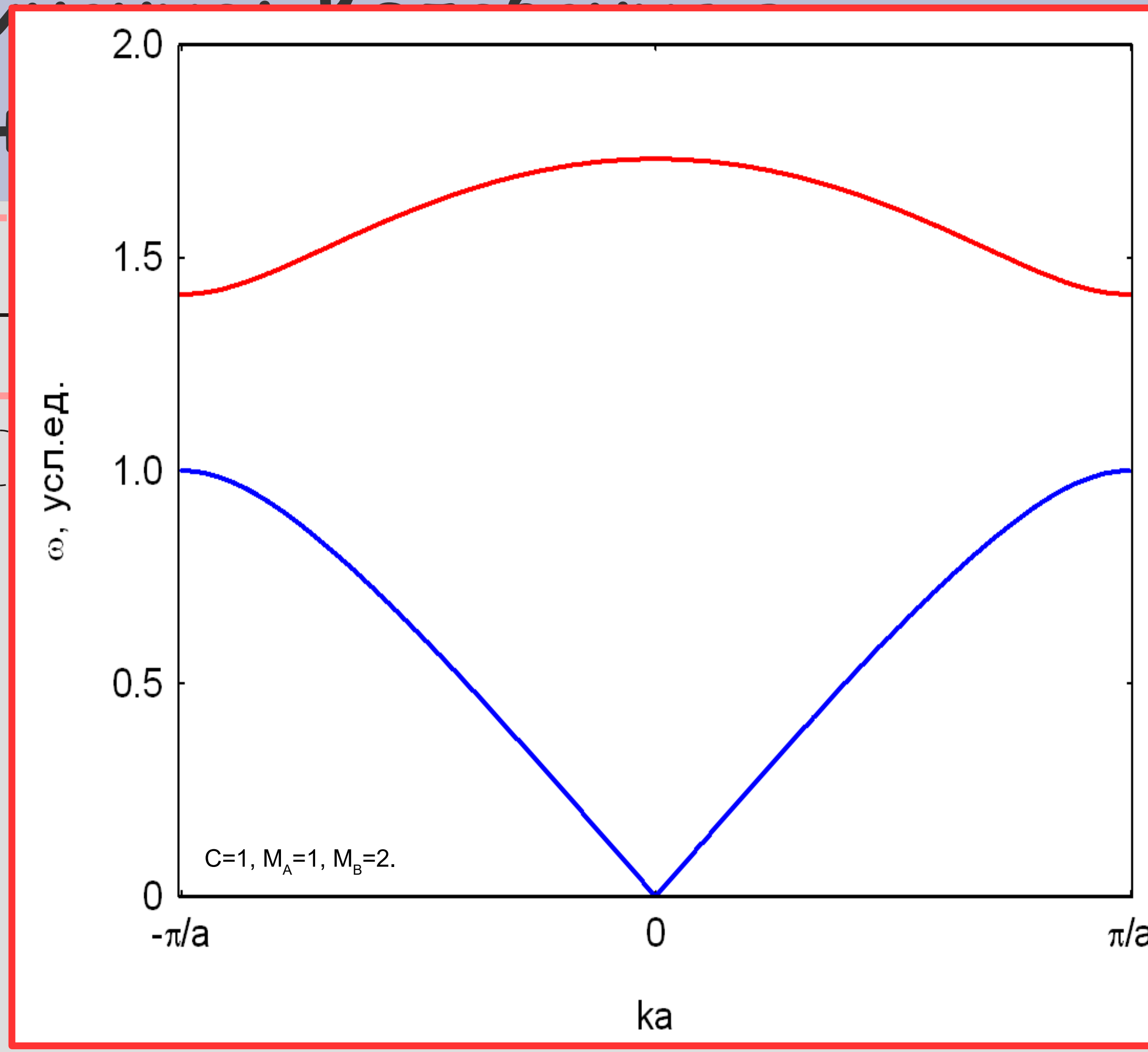
Напоминание: Колебания в неоднородной цепочке.



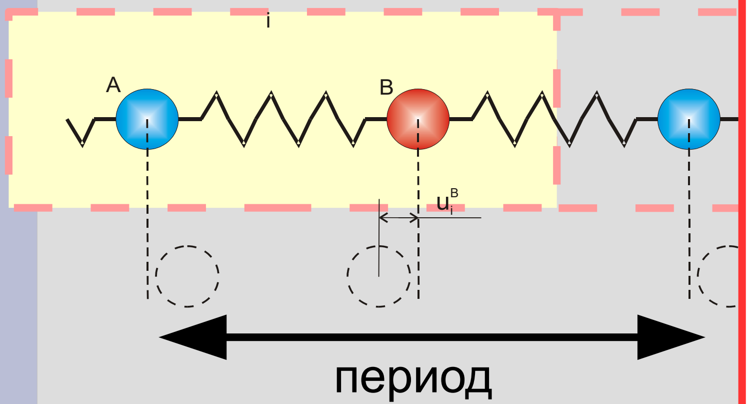


Напоми…
неодн…

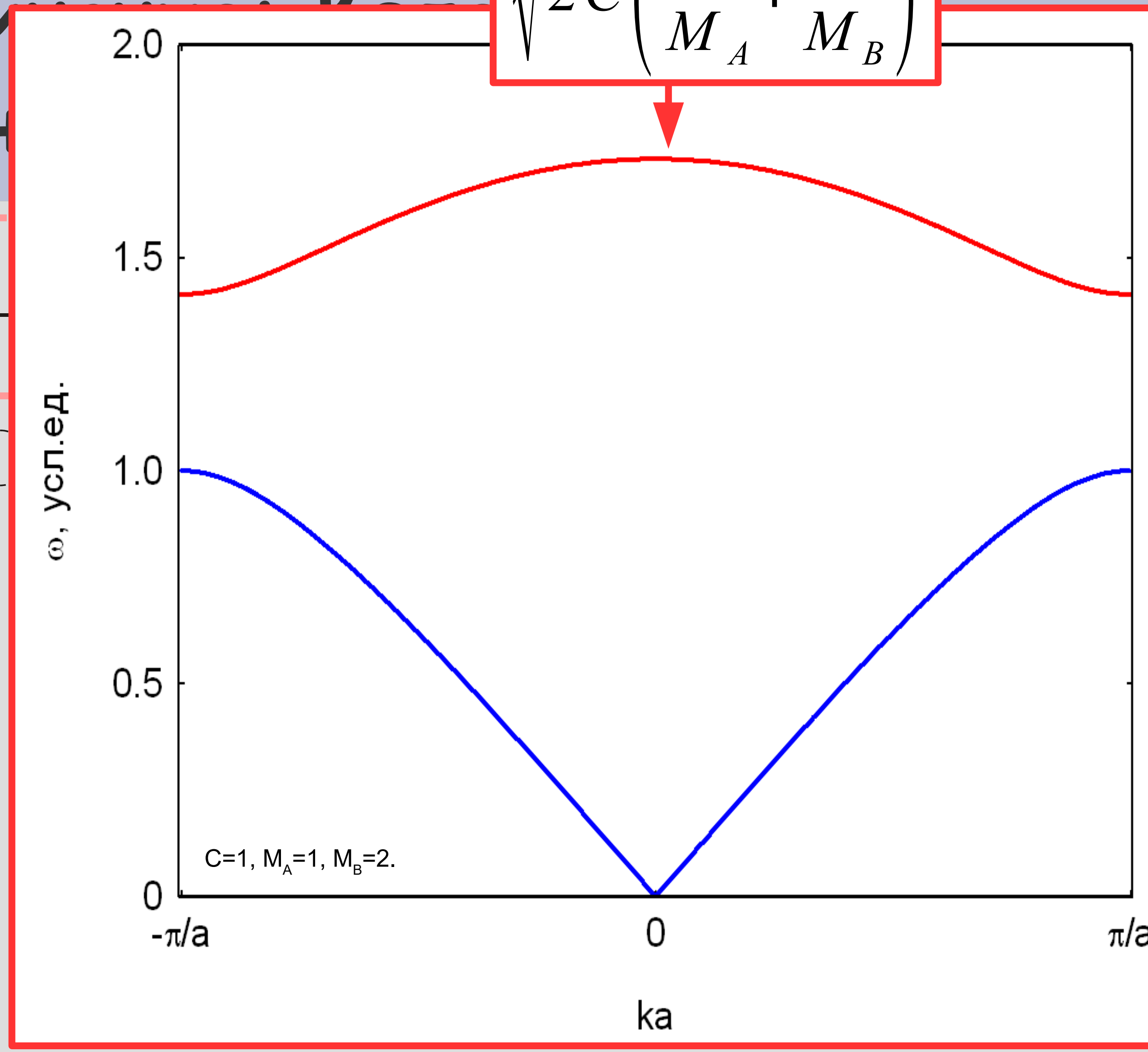




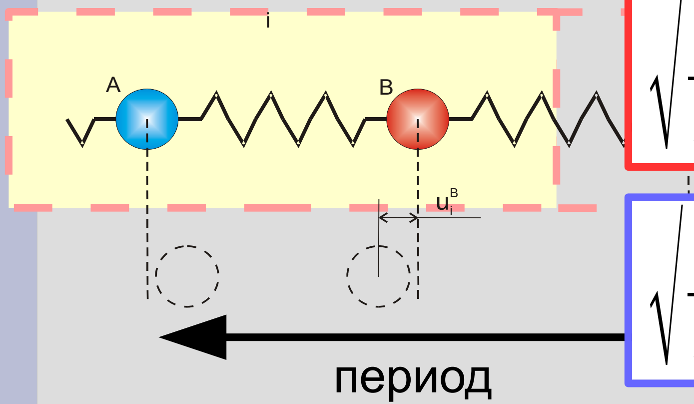
Напоми… Кол… неодн…

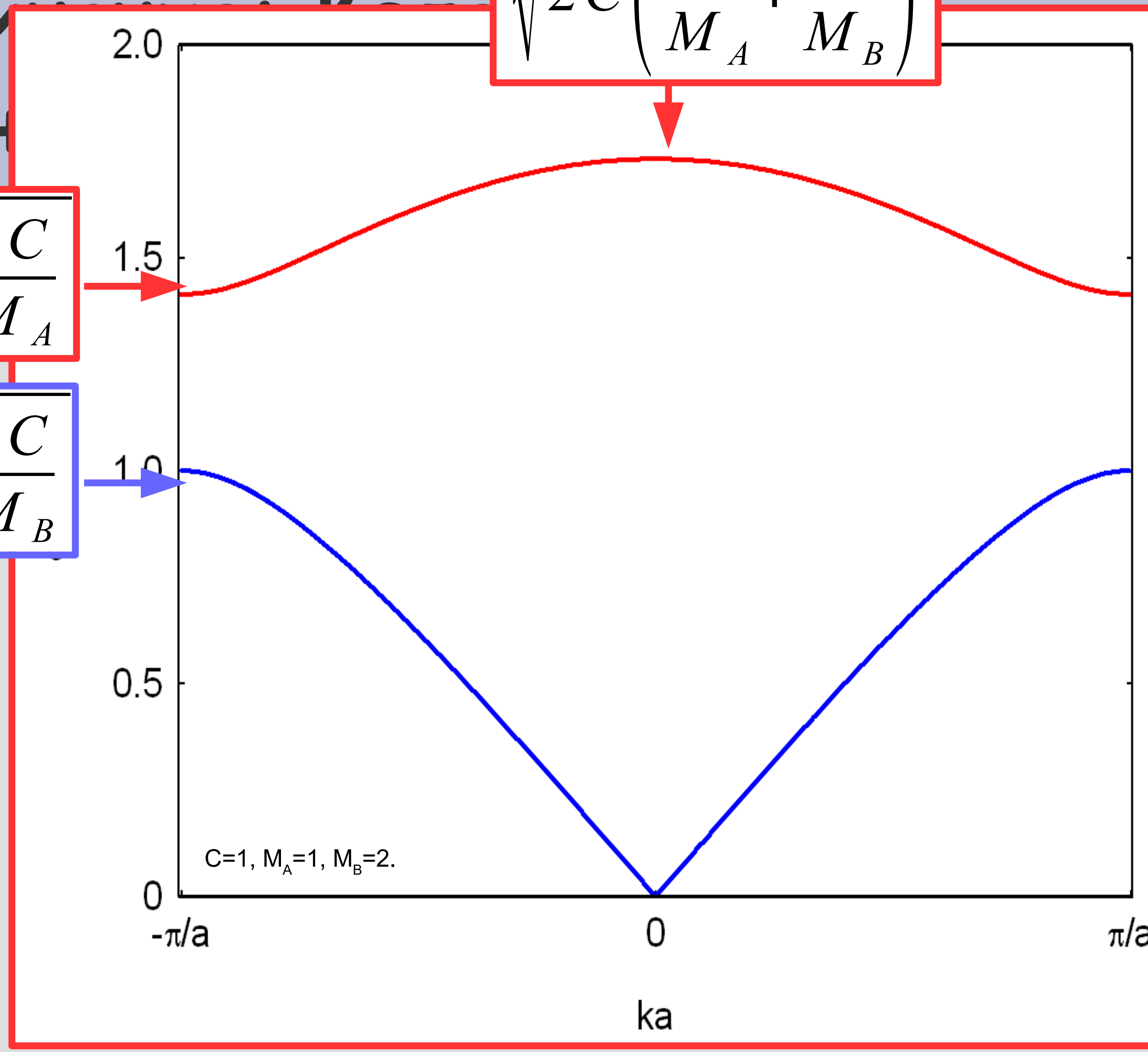


$$\sqrt{2C\left(\frac{1}{M_A}+\frac{1}{M_B}\right)}$$



Напоми... Кол...
неодн...



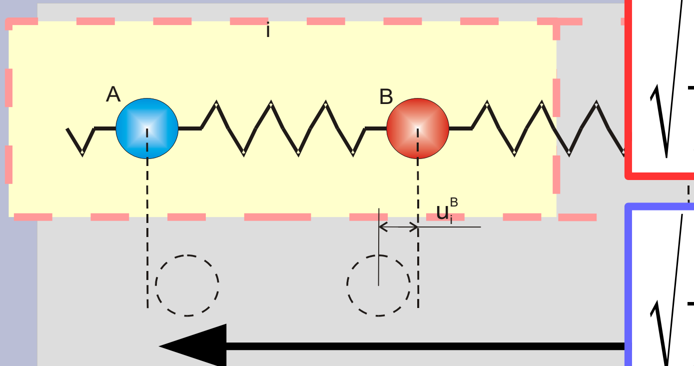


$$\sqrt{2C\left(\frac{1}{M_A}+\frac{1}{M_B}\right)}$$

$$\sqrt{\frac{2C}{M_A}}$$

$$\sqrt{\frac{2C}{M_B}}$$

Напоми... Коле...
неодн...



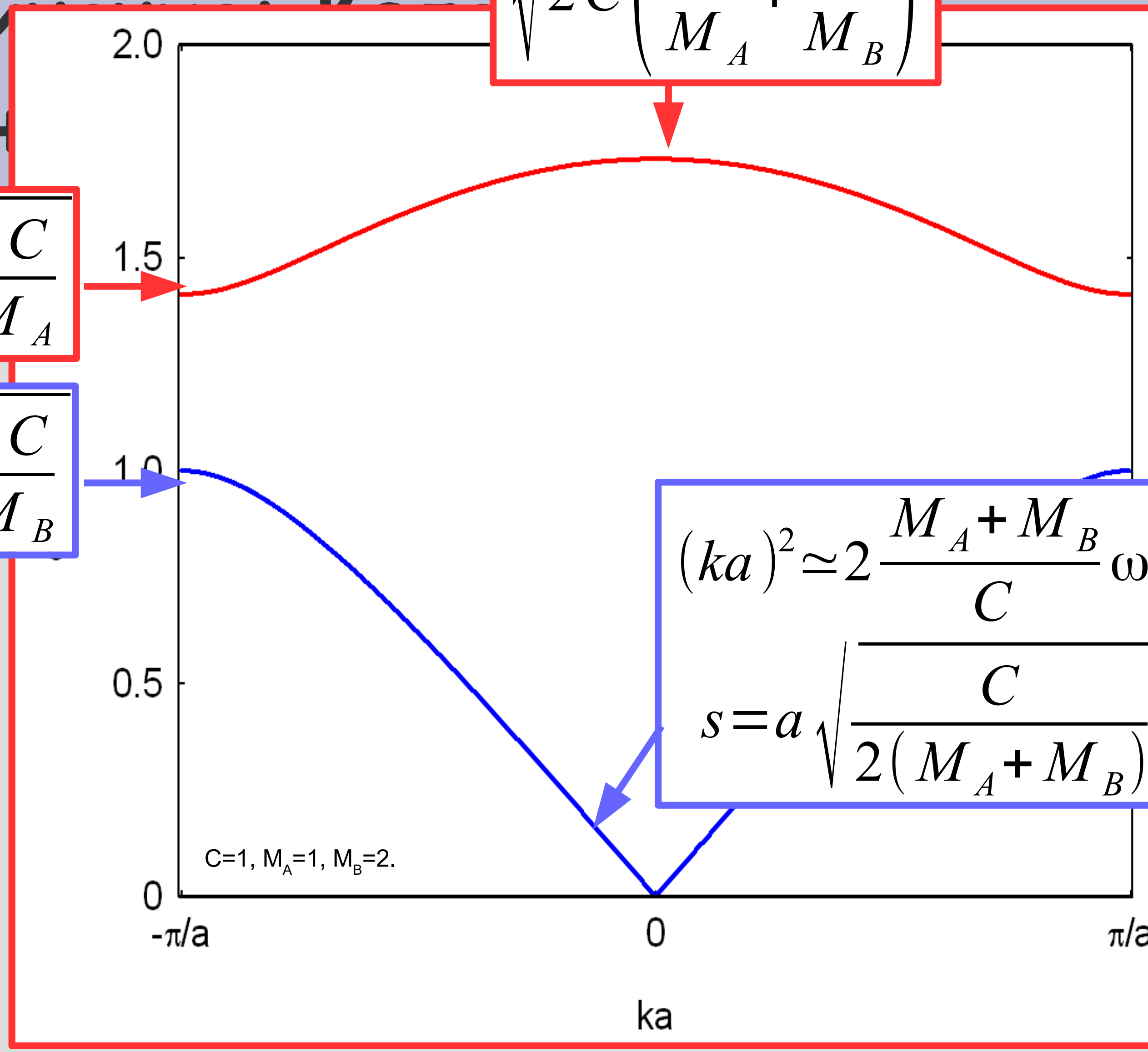
$$\sqrt{2C\left(\frac{1}{M_A}+\frac{1}{M_B}\right)}$$

$$\sqrt{\frac{2C}{M_A}}$$

$$\sqrt{\frac{2C}{M_B}}$$

$$(ka)^2 \simeq 2\frac{M_A+M_B}{C}\omega^2$$

$$s = a\sqrt{\frac{C}{2(M_A+M_B)}}$$



Несколько общих утверждений о колебаниях.

- В 3D твёрдых телах возможно три поляризации (продольная и две поперечных), скорости звука (силовые постоянные) вообще говоря не обязаны совпадать.

$$s_l > \frac{2}{\sqrt{3}} s_t$$ (теория упругости, для изотропного тела)

- 1 атом в примитивной элементарной ячейке: 3 типа (поляризации) акустических колебаний;
- 2 атома в примитивной элементарной ячейке: 3 акустических, 3 оптических
- N атомов в примитивной элементарной ячейке: 3 акустических, 3(N-1) оптических, всего 3N.

Что это даёт?

Колебания атомов — это форма теплового движения в кристалле. Если описание колебаний на языке волн окажется удобным...

...мы сможем описать термодинамику кристаллов, в частности - теплоёмкость

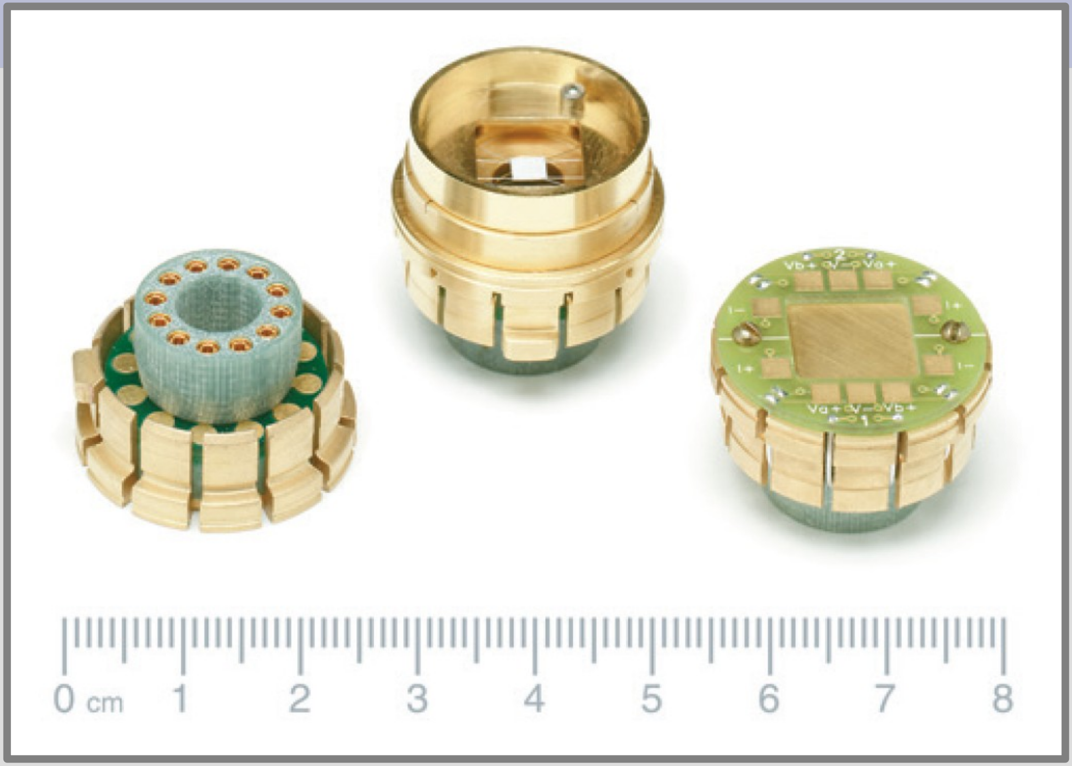
Колебательное движение атомов может нарушать идеальность регулярной кристаллической решетки, мешать движению электронов в проводниках...

...нужно уметь описывать это движение, оценивать вносимую им степень беспорядка

Часть 2. Теплоёмкость твёрдых тел: способ измерения.

Методы измерения теплоёмкости.

Фотография системы PPMS. Слева - стойка электроники, справа - дьюар.



Примеры стандартных вставок в установку PPMS. Слева и справа вставка для электрических измерений (в перевёрнутом и нормальном виде), по центру - калориметрическая вставка.

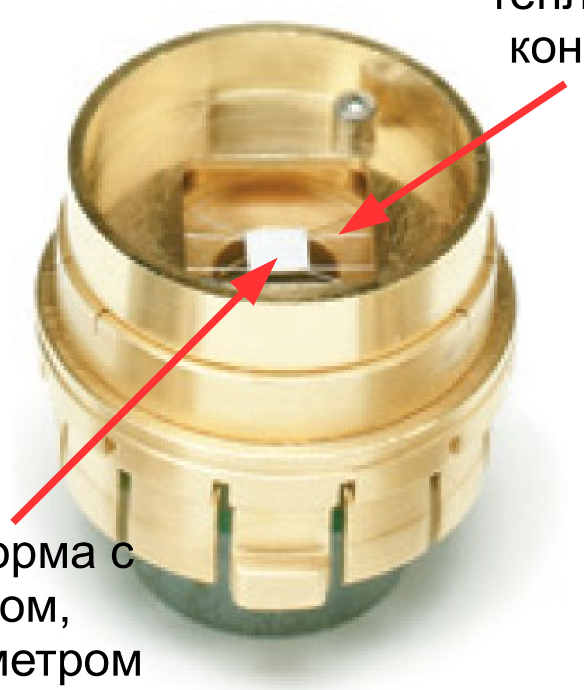
Из брошюры PPMS: Physical Property Measurement System

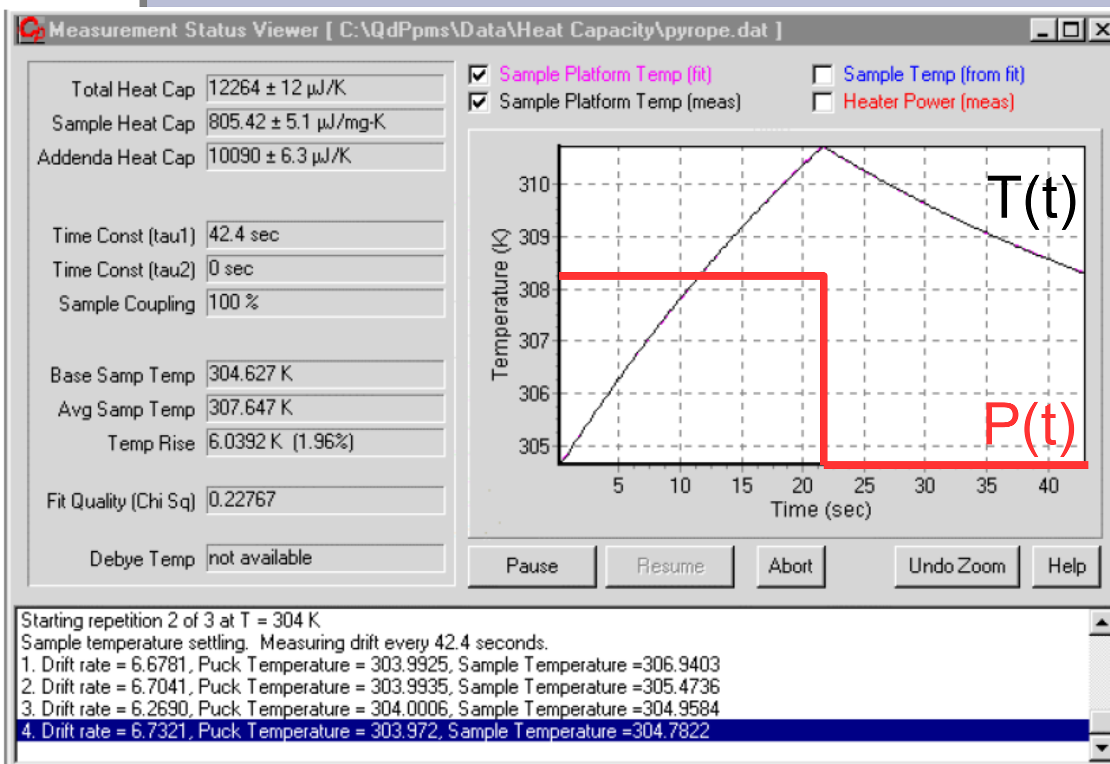
Релаксационный метод измерения теплоёмкости.

Релаксационный метод измерения теплоёмкости.

$$C_{tot}\frac{dT_p}{dt}=-K_w\left(T_p-T_b\right)+P\left(t\right)$$

Релаксационный метод измерения теплоёмкости.





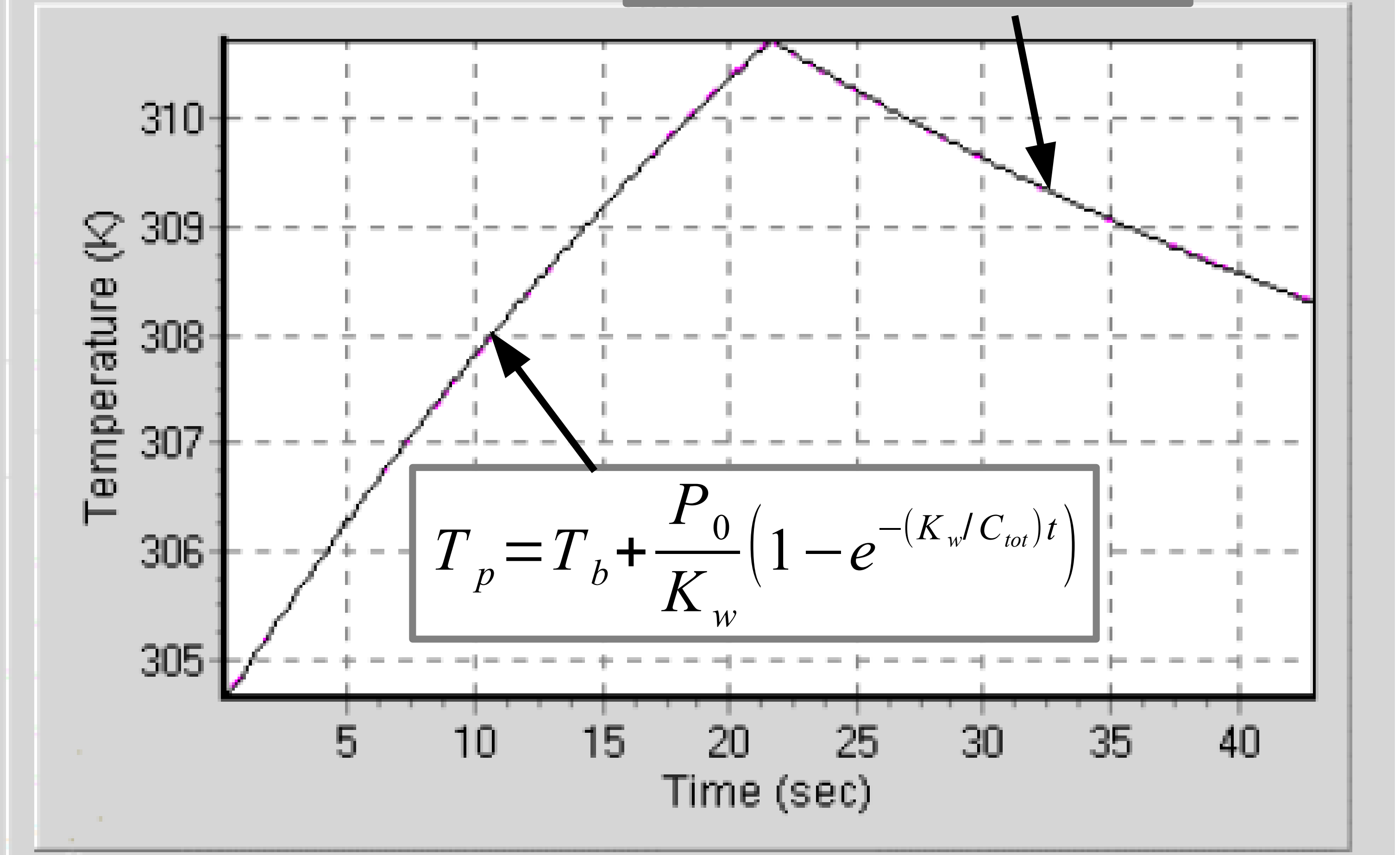
$$\boxed{C_{tot}\frac{dT_p}{dt} = -K_w(T_p - T_b) + P(t)}$$

Пример кривой отклика термометра при измерении теплоёмкости. Из руководства Quantum Design, PPMS Heat Capacity Option User's Manual, Quantum Design, 11-th edition, 2004

Релаксационный метод

$$T_p = T_b + \Delta T\, e^{-(K_w / C_{tot})\, t}$$

платформа с образцом, термометром и нагревателем



$$T_p = T_b + \frac{P_0}{K_w}\left(1 - e^{-(K_w / C_{tot})\, t}\right)$$

$$C_{tot}\frac{dT_p}{dt} = -K_w\left(T_p - T_b\right) + P(t)$$

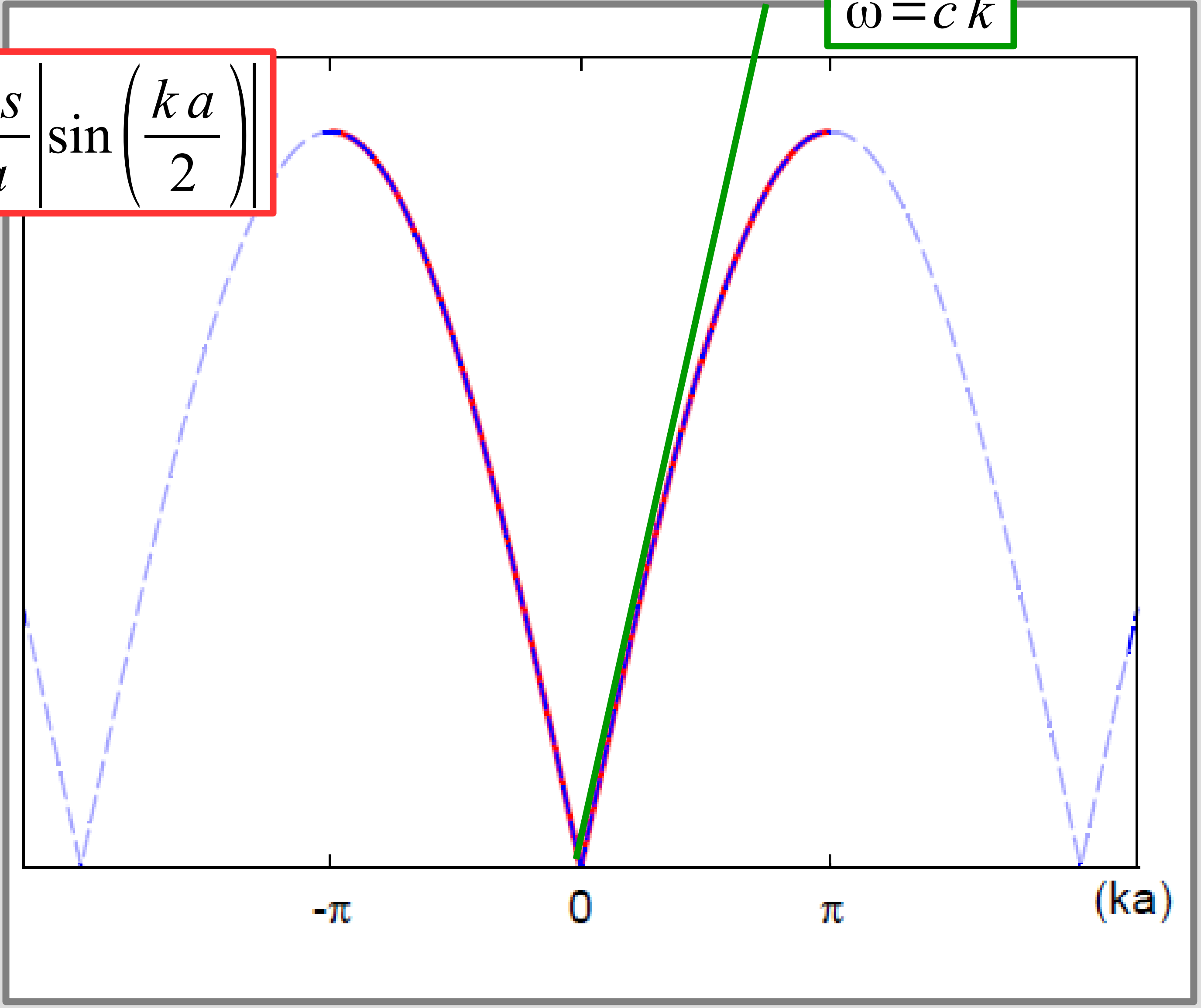
Пример кривой отклика термометра при измерении теплоёмкости. Из руководства Quantum Design, PPMS Heat Capacity Option User's Manual, Quantum Design, 11-th edition, 2004

Часть 3: Теплоёмкость твёрдых тел: Энергия тепловых колебаний решётки.

Напоминание: аналогия с АЧТ

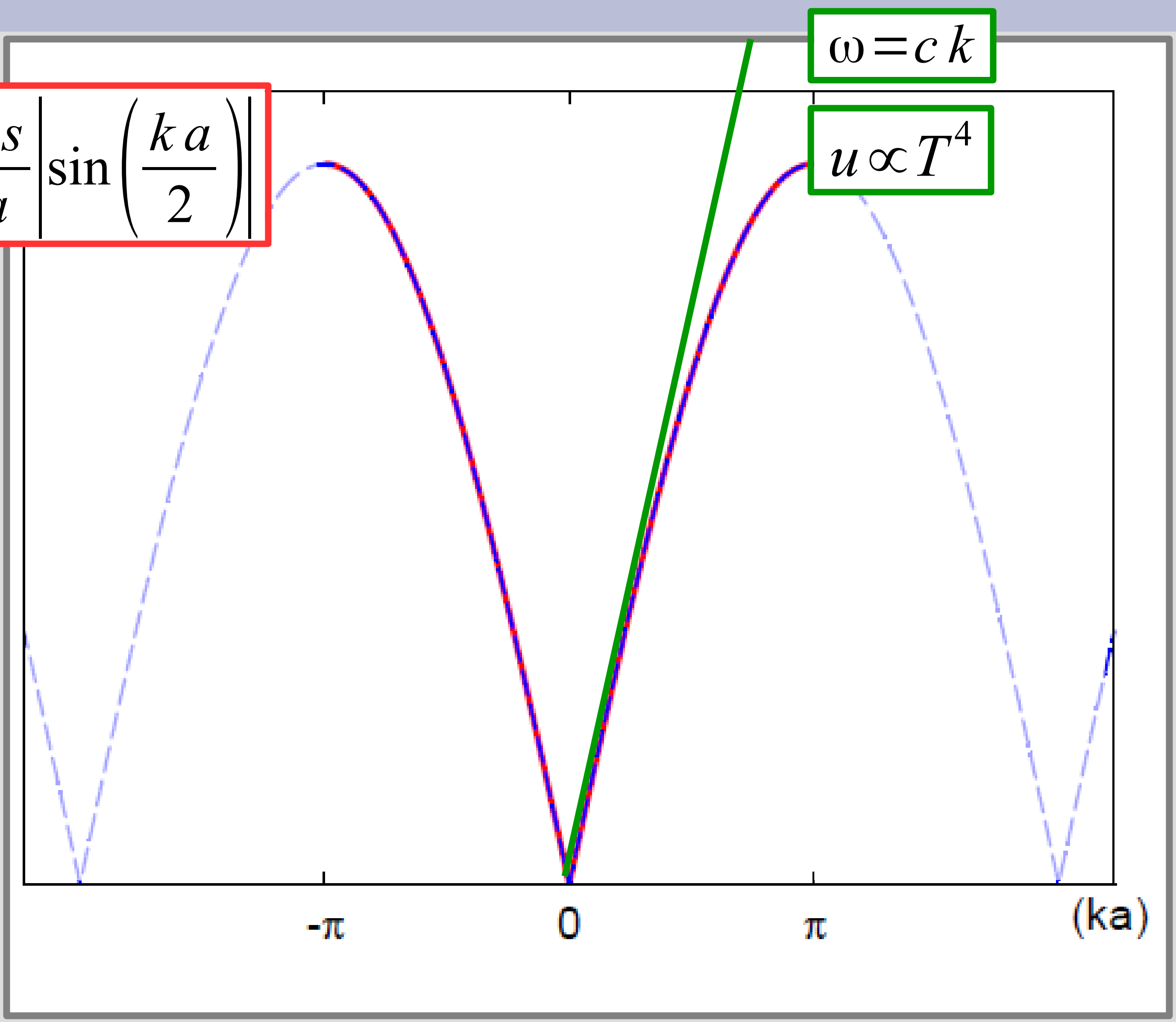
$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}}\left|\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right| = \frac{2\,s}{a}\left|\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right|$$

$$\omega = c\,k$$

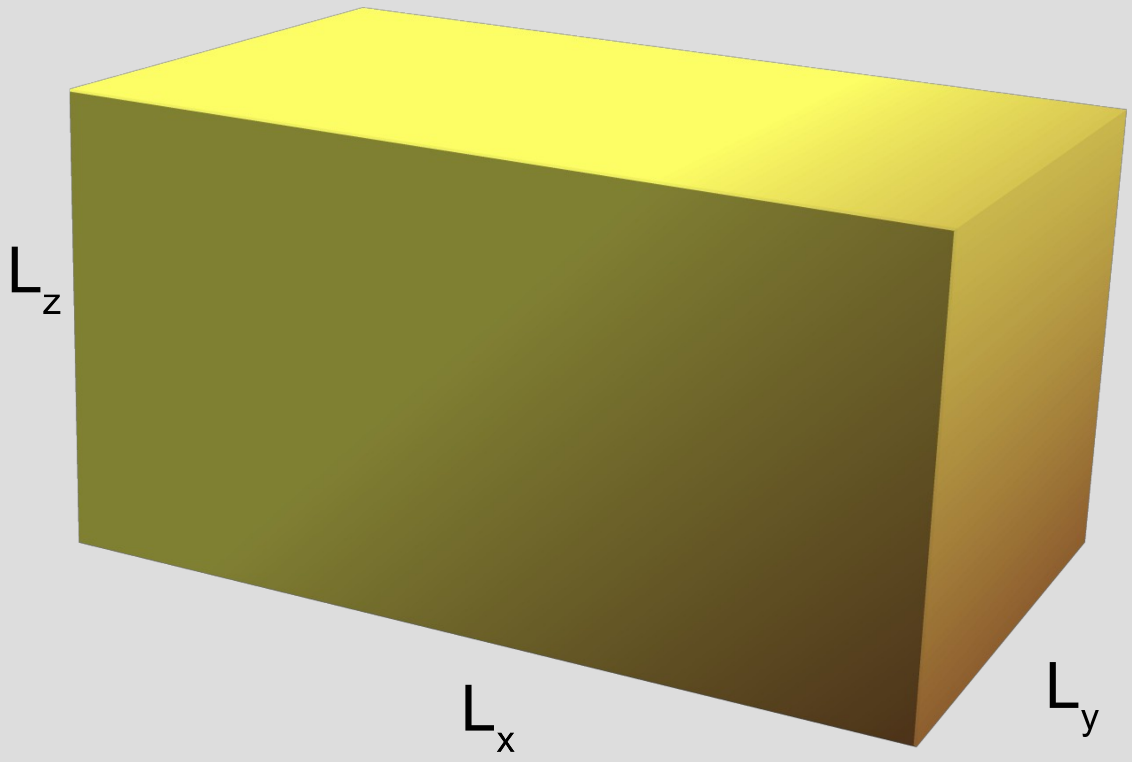


Напоминание: аналогия с АЧТ

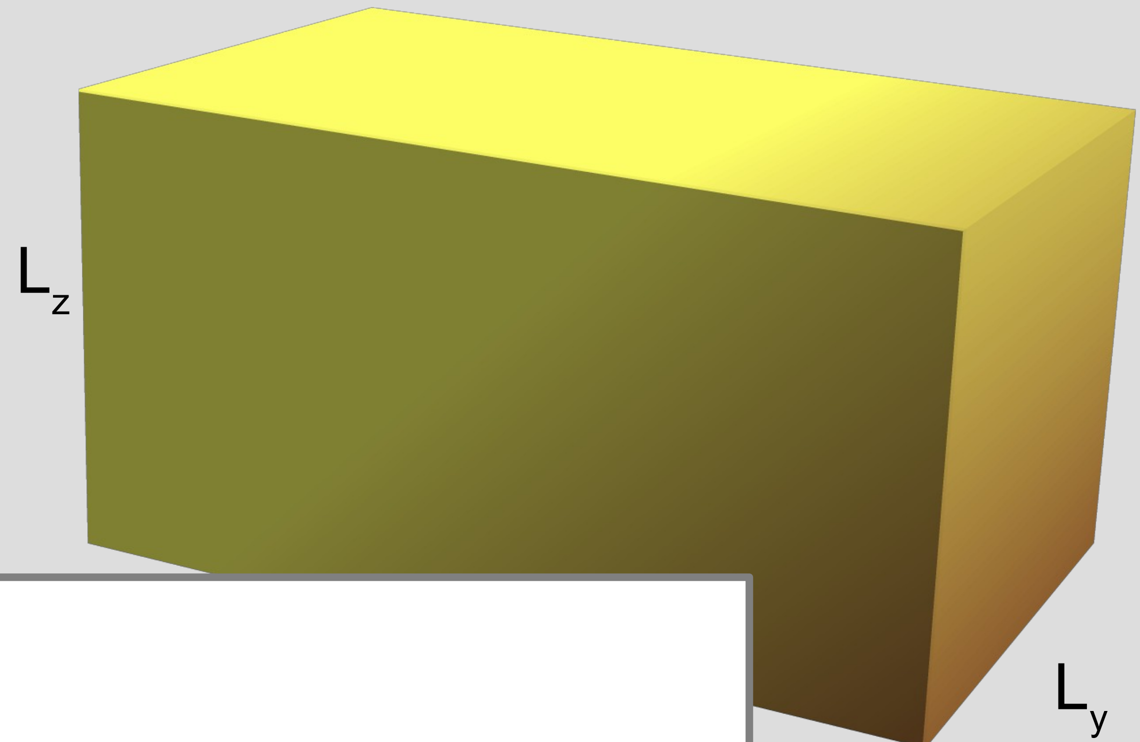
$$\omega=\sqrt{\frac{4C}{M}}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|=\frac{2s}{a}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$$



Шаг 1: Подсчёт числа колебаний.



Шаг 1: Подсчёт числа колебаний.



Граничные условия:

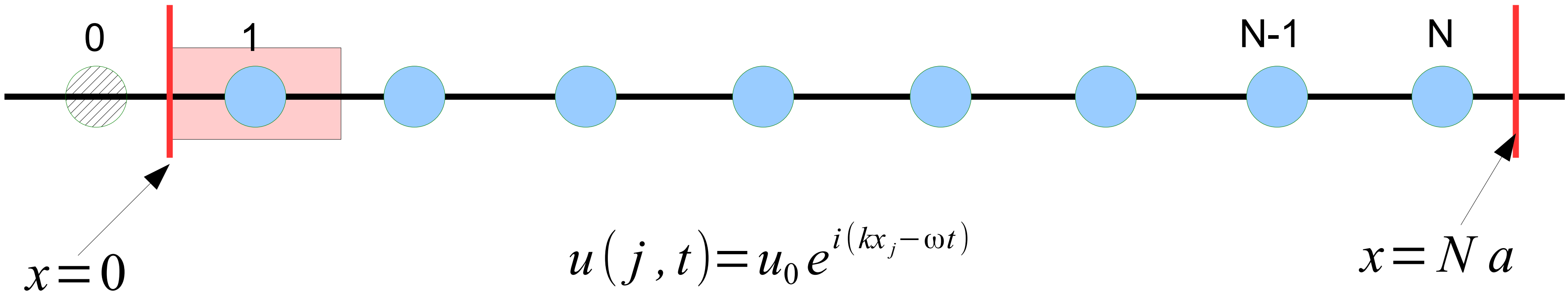
периодические

$$\vec{u}(x, y, z) = \vec{u}(x + L_x, y, z) = \\ = \vec{u}(x, y + L_y, z) = \vec{u}(x, y, z + L_z)$$

закреплённые

$$\vec{u}(0, y, z) = \vec{u}(L_x, y, z) = 0 \quad etc$$

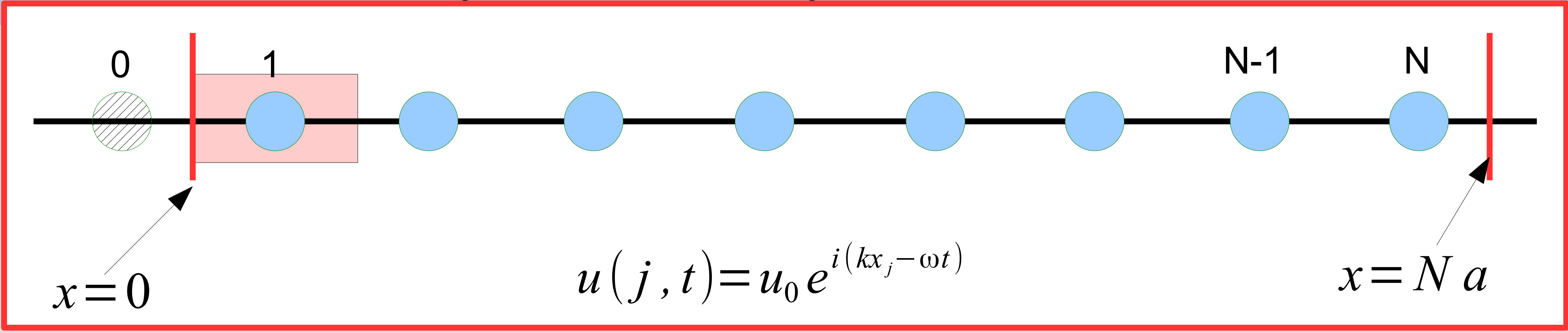
Число колебаний в 1D. Периодические граничные условия.



$$u(j,t)=u_0\,e^{i(kx_j-\omega t)}$$

$$\boxed{u(0,t)=u(N\,a,t)}$$

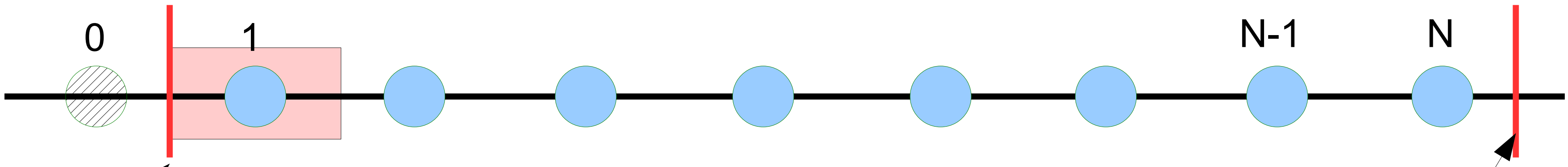
Число колебаний в 1D. Периодические граничные условия.



$$u(0,t)=u(N a,t)$$

$$1=e^{ikL}=e^{ikNa}$$
$$k a N=2\pi p$$

Число колебаний в 1D. Периодические граничные условия.



$x=0$

$$u(j,t)=u_0 e^{i(kx_j-\omega t)}$$

$x=N\,a$

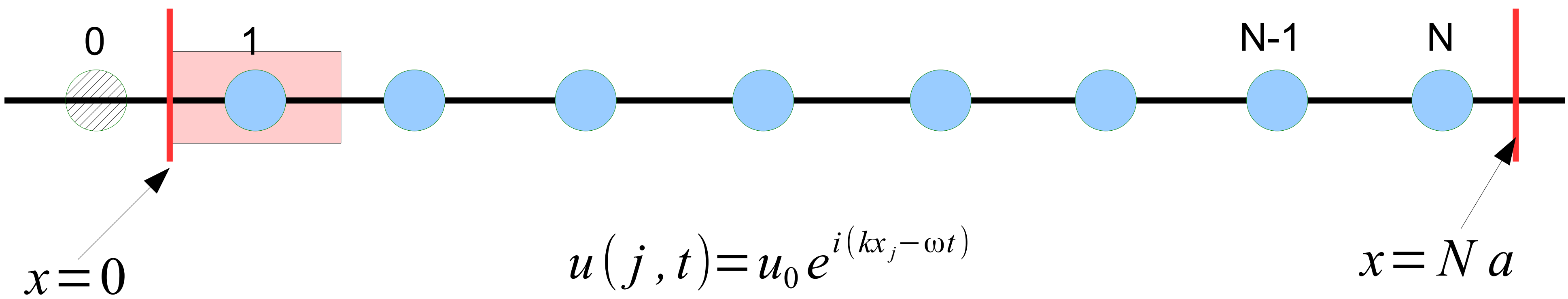
$$u(0,t)=u(N\,a,t)$$

$$1=e^{ikL}=e^{ikNa}$$
$$k\,a\,N=2\pi\,p$$

k в 1-ой зоне Бриллюэна:
p={0, 1,..., N-1}
или {-N/2,..., N/2}

$$k=0;\pm\frac{2\pi}{N\,a};\pm\frac{2\pi}{N\,a}\times 2;\pm\frac{2\pi}{N\,a}\times 3;\pm\frac{2\pi}{N\,a}\times 4;\ldots\pm\frac{2\pi}{N\,a}\times p;\ldots;\frac{\pi}{a};$$

Число колебаний в 1D. Периодические граничные условия.



$$u(0,t)=u(N a,t)$$

$$1=e^{ikL}=e^{ikNa}$$
$$k a N=2\pi p$$

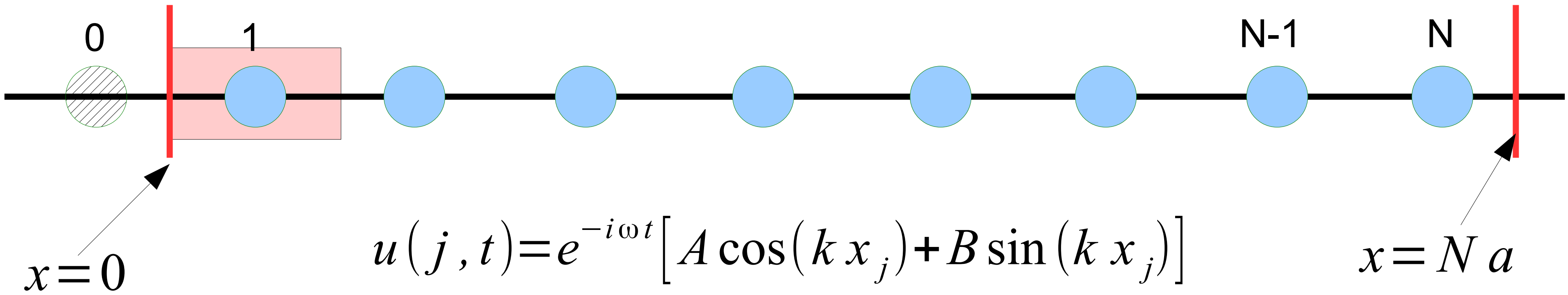
k в 1-ой зоне Бриллюэна:
p={0, 1,..., N-1}
или {-N/2,..., N/2}

$$k=0;\pm\frac{2\pi}{N a};\pm\frac{2\pi}{N a}\times 2;\pm\frac{2\pi}{N a}\times 3;\pm\frac{2\pi}{N a}\times 4;\ldots\pm\frac{2\pi}{N a}\times p;\ldots;\frac{\pi}{a};$$

число мод в интервале ΔK

$$\Delta N=\frac{\Delta K}{(2\pi/L)}=\frac{\Delta K\cdot L}{2\pi}$$

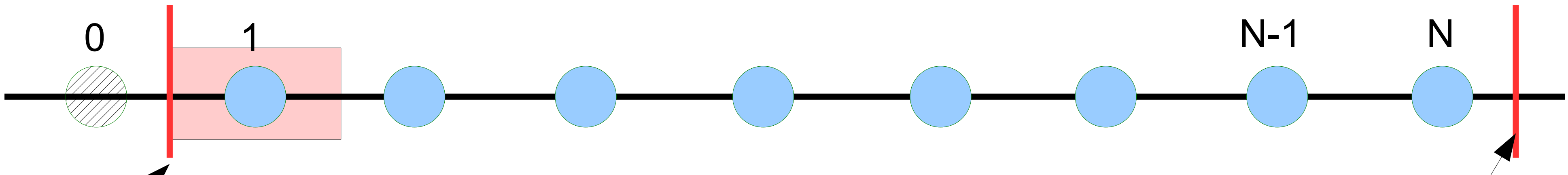
Число колебаний в 1D. Закреплённые граничные условия.



$$u(j,t)=e^{-i\omega t}\left[A\cos(k x_j)+B\sin(k x_j)\right]$$

$$\boxed{u(x=0,t)=u(x=N\,a,t)=0}$$

Число колебаний в 1D. Закреплённые граничные условия.

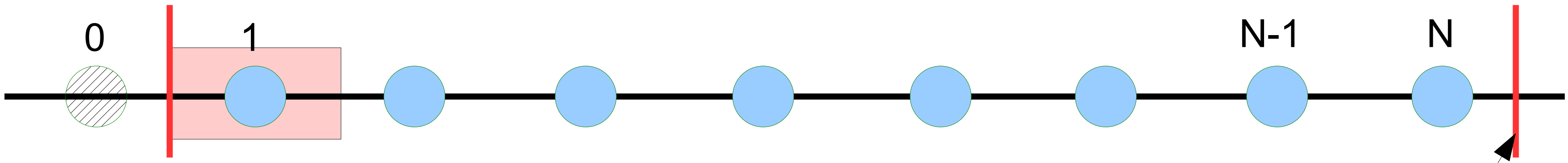


$$u(j,t)=e^{-i\omega t}\left[A\cos(k x_j)+B\sin(k x_j)\right]$$

$$u(x=0,t)=u(x=Na,t)=0$$

$$A=0$$
$$\sin(kNa)=0$$
$$kaN=\pi p>0$$

Число колебаний в 1D. Закреплённые граничные условия.



$x=0$

$$u(j,t)=e^{-i\omega t}\left[A\cos(k x_j)+B\sin(k x_j)\right]$$

$x=N a$

$$u(x=0,t)=u(x=N a,t)=0$$

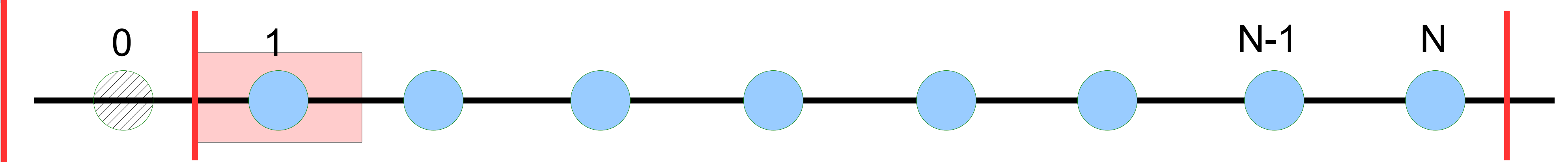
$$A=0$$
$$\sin(k N a)=0$$
$$k a N=\pi\, p>0$$

$$k=\frac{\pi}{N a};\ \frac{\pi}{N a}\times 2;\ \frac{\pi}{N a}\times 3;\ \frac{\pi}{N a}\times 4;\ \ldots \frac{\pi}{N a}\times p;\ \ldots;\ \frac{\pi}{a}$$

число мод в интервале ΔK

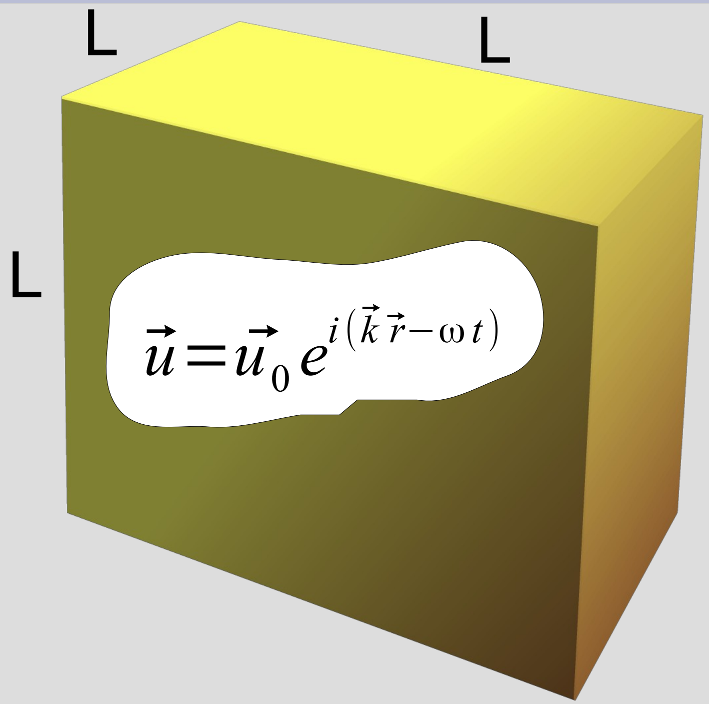
$$\Delta N=\frac{\Delta K}{(\pi/L)}=\frac{\Delta K\cdot L}{\pi}$$

Сравнение результатов для разных граничных условий в 1D.



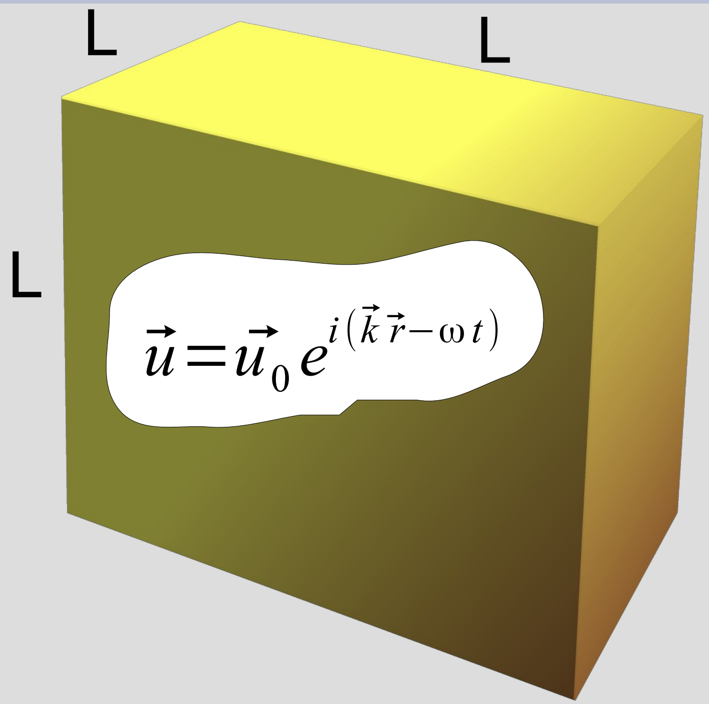
	периодические	закреплённые
• Число колебаний	$\boxed{N}$	
• Доступная область k-пространства	$\boxed{-\pi/a<k\leq\pi/a}$	$\boxed{0<k\leq\pi/a}$
• «Объём» k-пространства на одно состояние	$\boxed{2\pi/L}$	$\boxed{\pi/L}$

Число колебаний в 3D.



$$\vec{u} = \vec{u}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

Число колебаний в 3D.

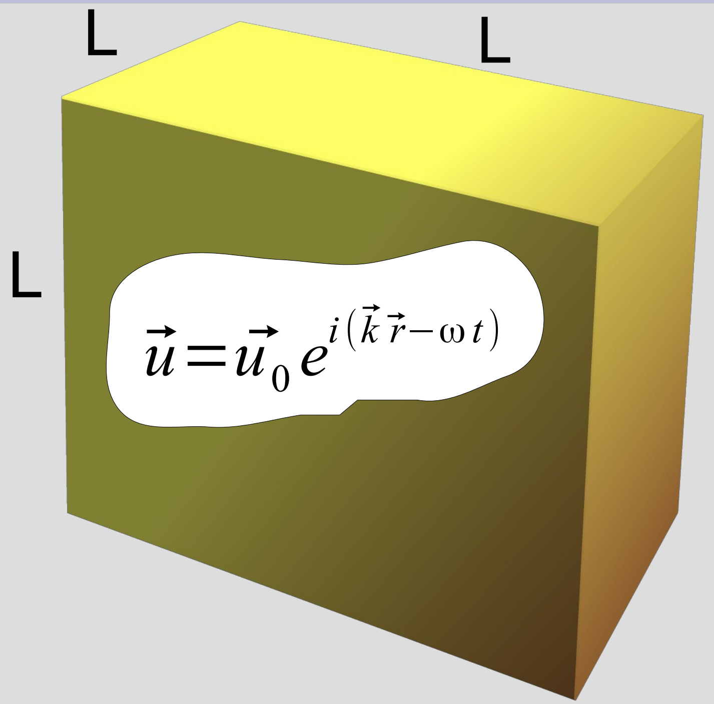


Периодические граничные условия (удобнее)

$$\boxed{\begin{aligned}&\vec{u}(x,y,z)=\vec{u}(x+L,y,z)=\\&=\vec{u}(x,y+L,z)=\vec{u}(x,y,z+L)\end{aligned}}$$

$$\boxed{k_{x,y,z}=0;\pm\frac{2\pi}{L};\pm\frac{2\pi}{L}\times 2;\pm\frac{2\pi}{L}\times 3;\pm\frac{2\pi}{L}\times 4;\ldots\pm\frac{2\pi}{L}\times p;\ldots;\frac{\pi}{a};}$$

Число колебаний в 3D.



Перио
(удобн

$\vec{u}$
$=\vec{u}$

На одно колебание объём k-пространства:

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3=\frac{(2\pi)^3}{V}$$

Число колебаний:

$$dN=\frac{d^3k}{(2\pi)^3/V}=\frac{V\,d^3k}{(2\pi)^3}$$

$$k_{x,y,z}=0;\pm\frac{2\pi}{L};\pm\frac{2\pi}{L}\times 2;\pm\frac{2\pi}{L}\times 3;\pm\frac{}{L}\times 4;\ldots\pm\frac{}{L}\times p;\ldots;\frac{}{a};$$

Шаг 2. Плотность состояний.

$$\boxed{dN = D(\omega)\, d\omega}$$

Шаг 2. Плотность состояний.

$$\boxed{dN = D(\omega)\, d\omega}$$

1D: спектр $$\omega = \omega_{max} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

периодич. гран. усл. $$dN = \frac{L\, dk}{2\pi}$$

Шаг 2. Плотность состояний.

$$dN = D(\omega)\,d\omega$$

1D: спектр $\omega = \omega_{max}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$

периодич. гран. усл. $dN = \frac{L\,dk}{2\pi}$

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = 2\frac{dN}{dk}\frac{1}{d\omega/dk}$$

Шаг 2. Плотность состояний.

$$\boxed{dN = D(\omega)\,d\omega}$$

1D: спектр $\omega = \omega_{max}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$

периодич. гран. усл. $dN = \frac{L\,dk}{2\pi}$

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = 2\frac{dN}{dk}\frac{1}{d\omega/dk} = 2\frac{L}{2\pi}\frac{1}{\omega_{max}\times(a/2)\times\cos(ka/2)}$$

Шаг 2. Плотность состояний.

$$dN = D(\omega)\, d\omega$$

1D: спектр $\omega = \omega_{max} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$

периодич. гран. усл. $dN = \frac{L\, dk}{2\pi}$

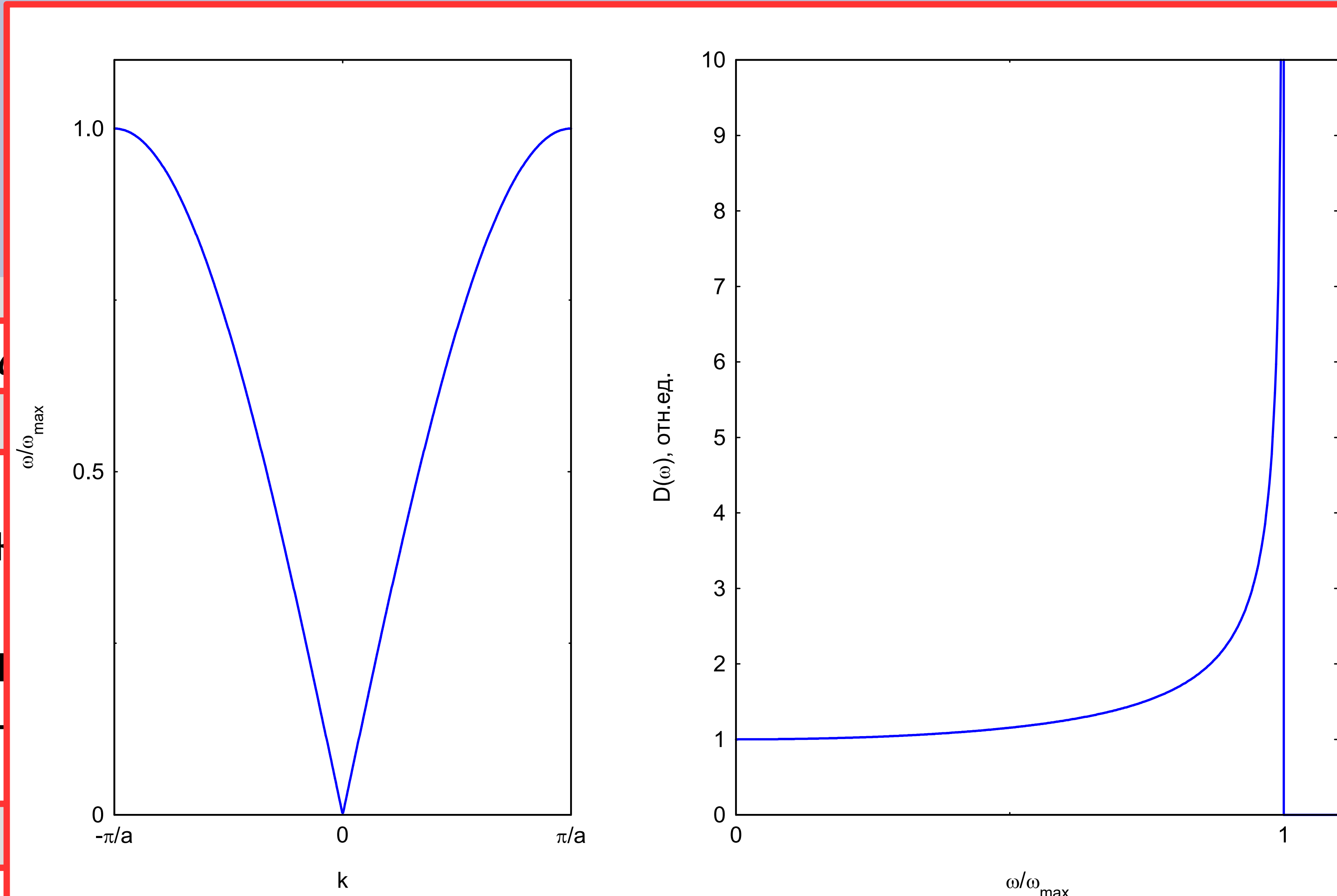
$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = 2\frac{dN}{dk}\frac{1}{d\omega/dk} = 2\frac{L}{2\pi}\frac{1}{\omega_{max} \times (a/2) \times \cos(ka/2)} =$$

$$= \frac{2L}{\pi a}\frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}}$$

$dN = D(\omega)\,d$

1D: спек

пер
гран



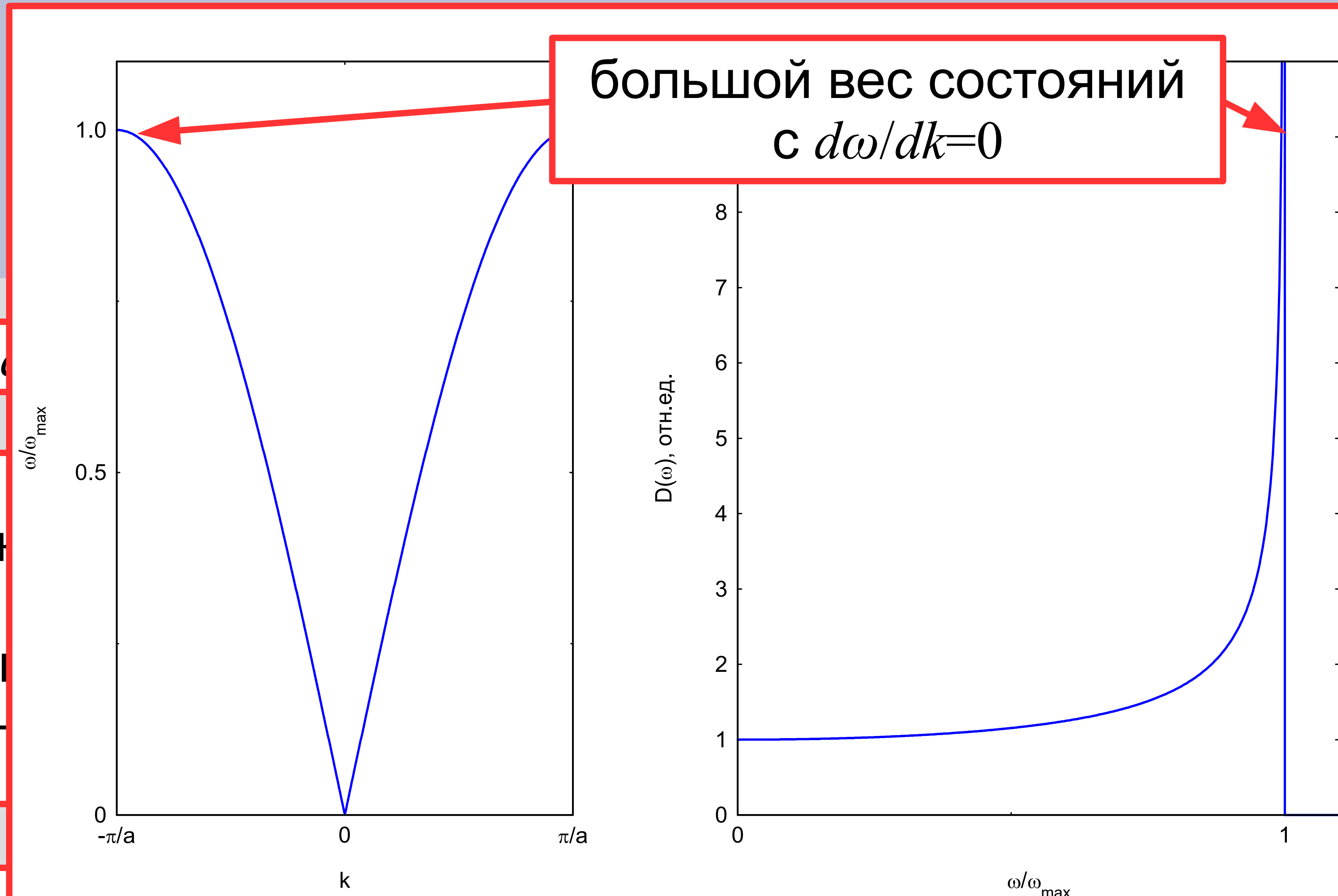
$$D(\omega)=\frac{dN}{d\omega}=2\frac{dN}{dk}\frac{1}{d\omega/dk}=2\frac{L}{2\pi}\frac{1}{\omega_{max}\times(a/2)\times\cos(ka/2)}=$$

$$=\frac{2L}{\pi a}\frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2-\omega^2}}$$

$dN = D(\omega)$...

1D: спе...

пер...
гра...



$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = 2\frac{dN}{dk}\frac{1}{d\omega/dk} = 2\frac{L}{2\pi}\frac{1}{\omega_{max}\times(a/2)\times\cos(ka/2)} =$$

$$= \frac{2L}{\pi a}\frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}}$$

Шаг 3. Энергия тепловых колебаний решётки.

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\overline{E} = \frac{\sum E_n e^{-E_n/T}}{\sum e^{-E_n/T}} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} = \left(\frac{1}{2} + n(\omega)\right)\hbar\omega$$

Шаг 3. Энергия тепловых колебаний решётки.

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

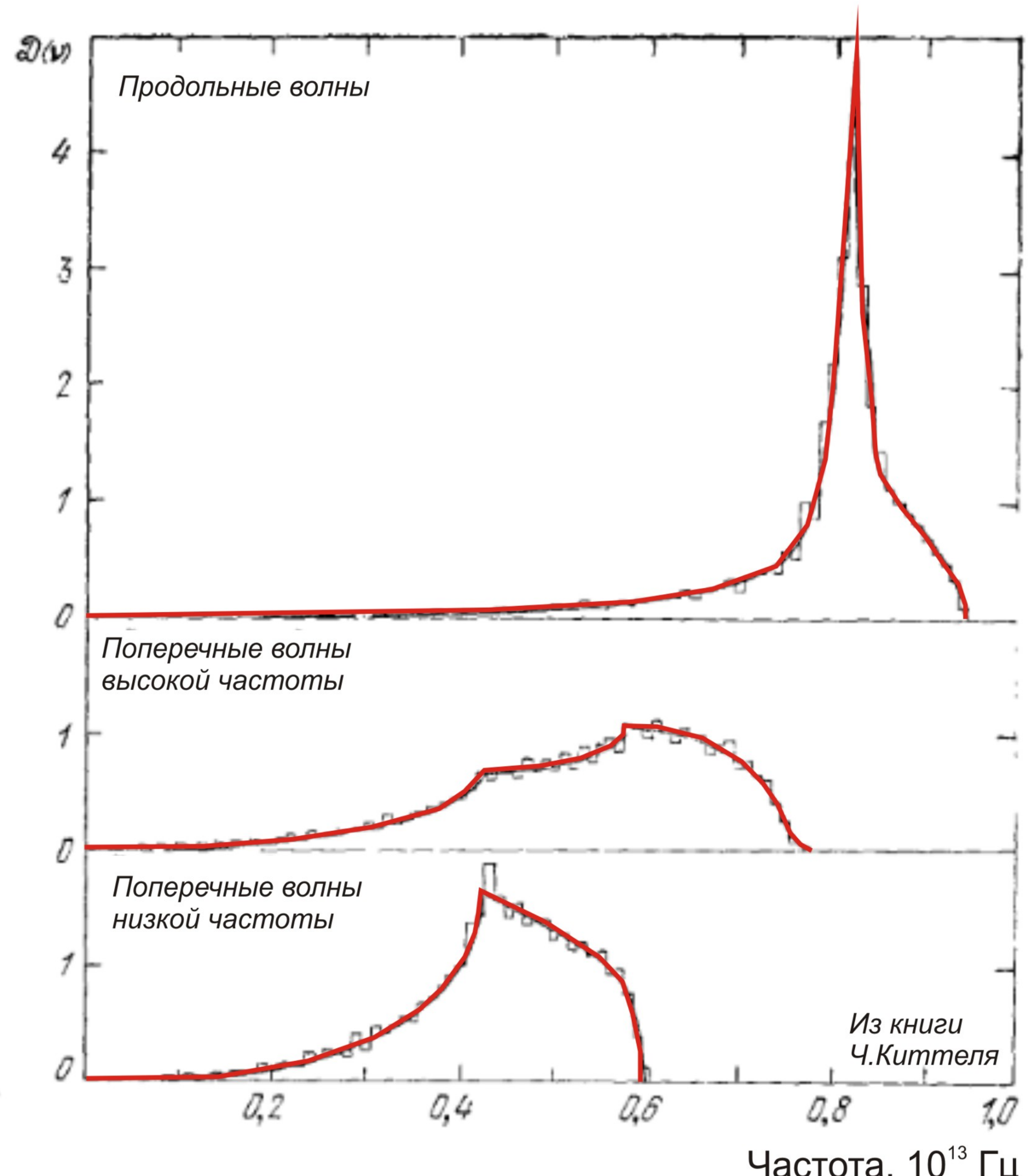
$$\overline{E} = \frac{\sum E_n e^{-E_n/T}}{\sum e^{-E_n/T}} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} = \left(\frac{1}{2} + n(\omega)\right)\hbar\omega$$

суммируем вклады всех колебаний:

$$E = \sum_i \int_{1\,з.Б.} \overline{E}(\omega_i(\vec{k}))\frac{Vd^3k}{(2\pi)^3}$$

$$E = \sum_i \int_0^\infty D_i(\omega)\left(\frac{1}{2} + n(\omega)\right)\hbar\omega\, d\omega$$

Плотность состояний для упругих колебаний в реальном кристалле.



Плотность состояний для упругих волн в кристалле алюминия. Вычисление по экспериментально измеренным спектрам упругих колебаний, распространяющихся в различных направлениях. Показаны отдельно вклады разных поляризаций.

Для каждой моды

$$\int_0^\infty D(\omega)\,d\omega = N$$

число *примитивных* элементарных ячеек

Часть 4. Модель Дебая и модель Эйнштейна

Модель Эйнштейна и модель Дебая.

Эйнштейн

$$\boxed{D(\omega)=N\,\delta(\omega-\omega_0)}$$

Все атомы колеблются на одной частоте, *N* — число примитивных элементарных ячеек.

Дебай

$$\boxed{\omega=s\,k}$$

Спектр заменяется изотропным линейным спектром.

Модель Эйнштейна и модель Дебая.

Эйнштейн

$$D(\omega) = N\,\delta(\omega - \omega_0)$$

Все атомы колеблются на одной частоте, N — число примитивных элементарных ячеек.

Дебай

$$\omega = s k$$

Спектр заменяется изотропным линейным спектром.

$$\int_0^\infty D(\omega)\,d\omega = N$$

по определению верно

необходимо ограничить доступные в модели частоты

Дебаевский волновой вектор, дебаевская частота. Одномерный случай.

$$\int_0^\infty D(\omega)\,d\omega = N$$

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} =$$

Дебаевский волновой вектор, дебаевская частота. Одномерный случай.

$$\int_0^\infty D(\omega)\,d\omega = N$$

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = 2\frac{dN}{dk}\frac{1}{d\omega/dk} = 2\frac{L}{2\pi}\frac{1}{s} = \frac{L}{\pi s}$$

Дебаевский волновой вектор, дебаевская частота. Одномерный случай.

$$\int_0^{\infty} D(\omega) d\omega = N$$

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = 2\frac{dN}{dk}\frac{1}{d\omega/dk} = 2\frac{L}{2\pi}\frac{1}{s} = \frac{L}{\pi s}$$

$$\omega_D \frac{L}{\pi s} = N$$

$$\omega_D = \frac{\pi s}{a} = \frac{\pi}{2}\omega_{max}$$

$$k_D = \frac{\omega_D}{s} = \frac{\pi}{a} = k_{Бр}$$

Дебаевский волновой вектор, дебаевская частота. Одномерный случай.

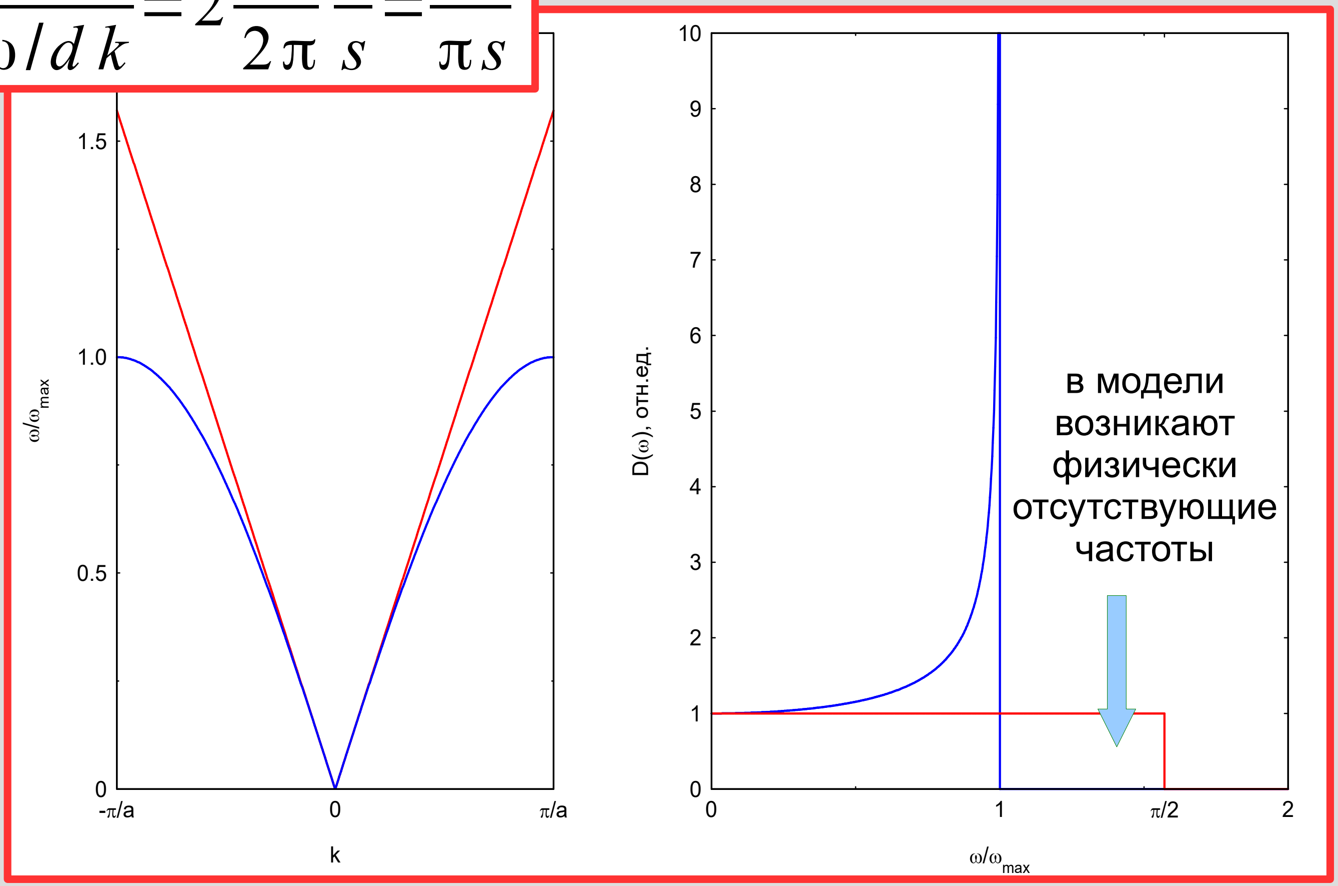
$$\int_0^\infty D(\omega)d\omega = N$$

$$D(\omega)=\frac{dN}{d\omega}=2\frac{dN}{dk}\frac{1}{d\omega/dk}=2\frac{L}{2\pi}\frac{1}{s}=\frac{L}{\pi s}$$

$$\omega_D\frac{L}{\pi s}=N$$

$$\omega_D=\frac{\pi s}{a}=\frac{\pi}{2}\omega_{max}$$

$$k_D=\frac{\omega_D}{s}=\frac{\pi}{a}=k_{Бр}$$



Дебаевская частота и дебаевский волновой вектор в трёхмерном случае.

$$\omega = s\,k$$

$$d\,N = \frac{V\,d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{V\,4\pi\,k^2\,d\,k}{(2\pi)^3}$$

Дебаевская частота и дебаевский волновой вектор в трёхмерном случае.

$$\omega = s\,k$$

$$d\,N = \frac{V\,d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{V\,4\pi\,k^2\,d\,k}{(2\pi)^3}$$

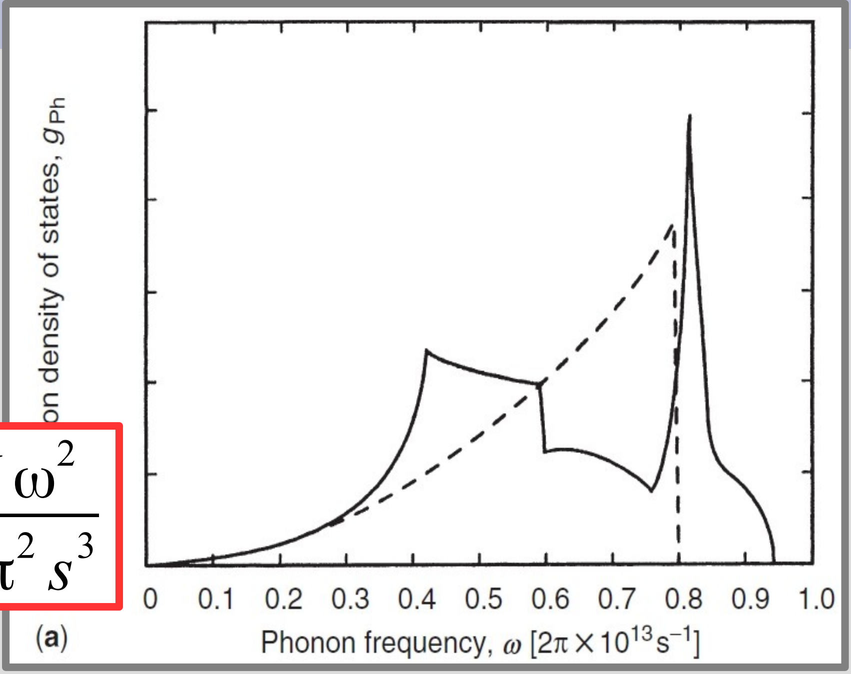
$$D(\omega) = \frac{d\,N}{d\,\omega} = \frac{d\,N}{d\,k}\,\frac{1}{d\,\omega / d\,k} = \frac{1}{s}\,\frac{V\,k^2}{2\pi^2} = \frac{V\,\omega^2}{2\pi^2 s^3}$$

Дебаевская частота и дебаевский волновой вектор в трёхмерном случае.

$$\omega = s\,k$$

$$d\,N = \frac{V\,d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{V\,4\pi\,k^2\,d\,k}{(2\pi)^3}$$

$$D(\omega) = \frac{d\,N}{d\,\omega} = \frac{d\,N}{d\,k}\,\frac{1}{d\,\omega/d\,k} = \frac{1}{s}\,\frac{V\,k^2}{2\pi^2} = \frac{V\,\omega^2}{2\pi^2\,s^3}$$

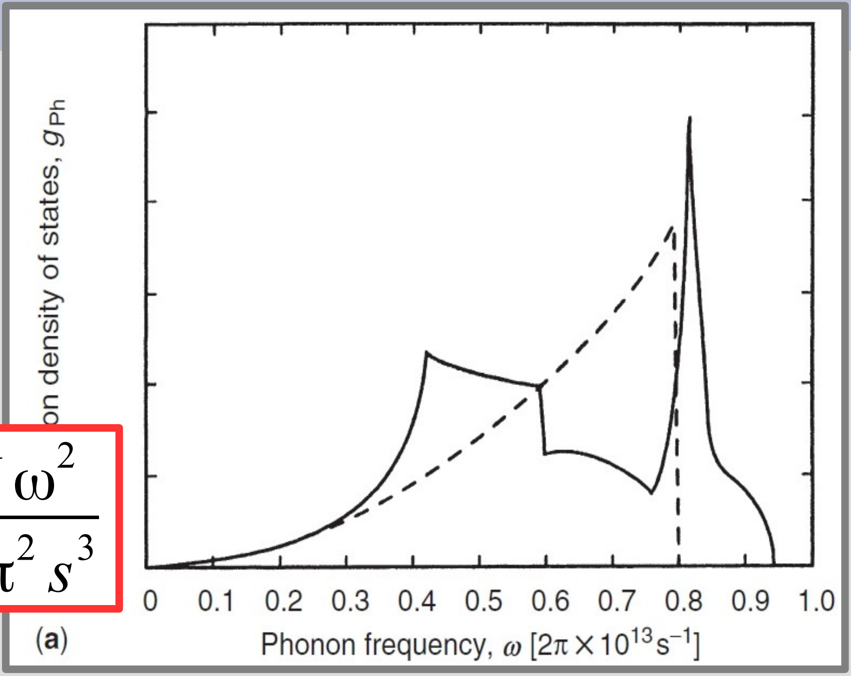


Дебаевская частота и дебаевский волновой вектор в трёхмерном случае.

$$\omega = s k$$

$$d N = \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{V 4\pi k^2 d k}{(2\pi)^3}$$

$$D(\omega) = \frac{d N}{d\omega} = \frac{d N}{d k} \frac{1}{d\omega / d k} = \frac{1}{s} \frac{V k^2}{2\pi^2} = \frac{V \omega^2}{2\pi^2 s^3}$$



$$N = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega = \frac{V}{6\pi^2} \frac{\omega_D^3}{s^3}$$

$$\Rightarrow$$

$$\omega_D = s \sqrt[3]{6\pi^2 \frac{N}{V}} = s \sqrt[3]{6\pi^2 n_{яч}}$$

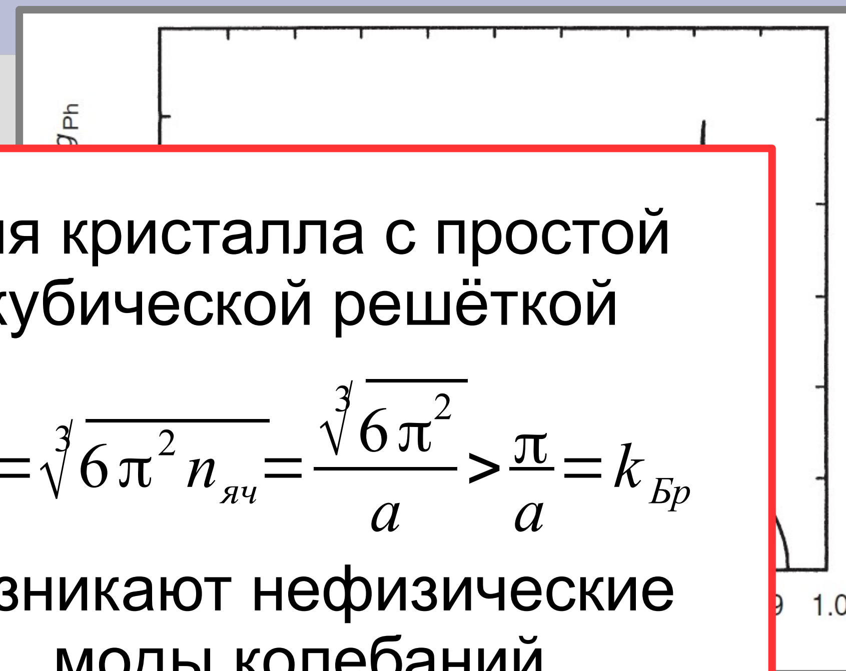
$$k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n_{яч}}$$

Дебаевская частота и дебаевский волновой вектор в трёхмерном случае.

$$\omega = s k$$

$$d N = \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{V 4\pi k^2 d k}{(2\pi)^3}$$

$$D(\omega) = \frac{d N}{d\omega} = \frac{d N}{d k}\frac{1}{d\omega/d k} = \frac{1}{s}\frac{V}{2}$$



Для кристалла с простой кубической решёткой

$$k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n_{яч}} = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} > \frac{\pi}{a} = k_{Бр}$$

возникают нефизические моды колебаний

$$N = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega = \frac{V}{6\pi^2}\frac{\omega_D^3}{s^3}$$

$$\omega_D = s\sqrt[3]{6\pi^2\frac{N}{V}} = s\sqrt[3]{6\pi^2 n_{яч}}$$

$$k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n_{яч}}$$

Теория теплоёмкости Дебая (3D)

$$E=\sum_i \int_0^{\infty} D_i(\omega)\left(\frac{1}{2}+n(\omega)\right)\hbar\omega\, d\omega$$

$$D(\omega)=\frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{s^3}, \quad \omega<\omega_D$$

Теория теплоёмкости Дебая (3D)

$$E=\sum_i \int_0^\infty D_i(\omega)\left(\frac{1}{2}+n(\omega)\right)\hbar\omega\, d\omega$$

$$D(\omega)=\frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{s^3},\quad \omega<\omega_D$$

$$E-E_0=3\times\frac{V}{2\pi^2 s^3}\int_0^{\omega_D}\omega^2\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T}-1}d\omega=T^4\frac{3V}{2\pi^2\hbar^3 s^3}\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3dx}{e^x-1}$$

$$\Theta=\hbar\omega_D/k_B=\frac{\hbar s}{k_B}\left(6\pi^2 n_{яч}\right)^{1/3}$$

!!! здесь вернули
!!! постоянную Больцмана

Теория теплоёмкости Дебая (3D)

$$E=\sum_i \int_0^\infty D_i(\omega)\left(\frac{1}{2}+n(\omega)\right)\hbar\omega\, d\omega$$

$$D(\omega)=\frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{s^3},\quad \omega<\omega_D$$

$$E-E_0=3\times\frac{V}{2\pi^2 s^3}\int_0^{\omega_D}\omega^2\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T}-1}d\omega=T^4\frac{3V}{2\pi^2\hbar^3 s^3}\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3\,dx}{e^x-1}$$

$$\Theta=\hbar\omega_D/k_B=\frac{\hbar s}{k_B}\left(6\pi^2 n_{яч}\right)^{1/3}$$

!!! здесь вернули
!!! постоянную Больцмана

$$E-E_0=9N\,k_B T\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\times\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3\,dx}{e^x-1}$$

Порядки величины дебаевской температуры

$$\Theta = \hbar\omega / k_B = \frac{\hbar s}{k_B}\left(6\pi^2 n_{яч}\right)^{1/3}$$

$$\Theta \sim \frac{3\hbar s}{k_B a} \sim \frac{3\times10^{-27}\times3\times10^{5}}{1.4\times10^{-16}\times3\times10^{-8}} \sim 2\times10^{2}\,K = 200\,K$$

вещество	Θ, К	вещество	Θ, К	вещество	Θ, К
Алмаз	2200	Ag	227	Si	645
Mg	400	Au	162	Ge	374
Cu	344	He	26	Ar	92
Fe	470	NaCl	275	Pb	105
Al	428	Pt	239		

Теория теплоёмкости Дебая (3D). Предельные случаи.

$$E-E_0=9Nk_BT\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\times\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3\,dx}{e^x-1}$$

$$T\gg\Theta\,,\quad \Theta/T\ll 1$$

$$\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3\,dx}{e^x-1}\approx\int_0^{\Theta/T}x^2\,dx=\frac{1}{3}\left(\frac{\Theta}{T}\right)^3$$

$$E-E_0=3Nk_BT$$

$$C=3Nk_B$$

Закон Дюлонга-Пти

Теория теплоёмкости Дебая (3D). Предельные случаи.

$$E-E_0=9Nk_BT\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\times\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3\,dx}{e^x-1}$$

$$T\gg\Theta,\quad \Theta/T\ll1$$

$$\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3dx}{e^x-1}\approx\int_0^{\Theta/T}x^2dx=\frac{1}{3}\left(\frac{\Theta}{T}\right)^3$$

$$E-E_0=3Nk_BT$$

$$C=3Nk_B$$

Закон Дюлонга-Пти

$$T\ll\Theta,\quad \Theta/T\gg1$$

$$\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3dx}{e^x-1}\approx\int_0^{\infty}\frac{x^3dx}{e^x-1}=\frac{\pi^4}{15}$$

$$E-E_0=\frac{3\pi^4Nk_B}{5}\frac{T^4}{\Theta^3}$$

$$C=\frac{12\pi^4Nk_B}{5}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3$$

Закон T^3 Дебая

Теория теплоёмкости Дебая (3D). Общий случай.

$$E-E_0=3\times\frac{V}{2\pi^2 s^3}\int_0^{\omega_D}\omega^2\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T}-1}d\omega$$

$$C=3\times\frac{V}{2\pi^2 s^3}\int_0^{\omega_D}\omega^2\frac{\hbar\omega\times e^{\hbar\omega/T}\times(\hbar\omega/T^2)}{\left(e^{\hbar\omega/T}-1\right)^2}d\omega=$$

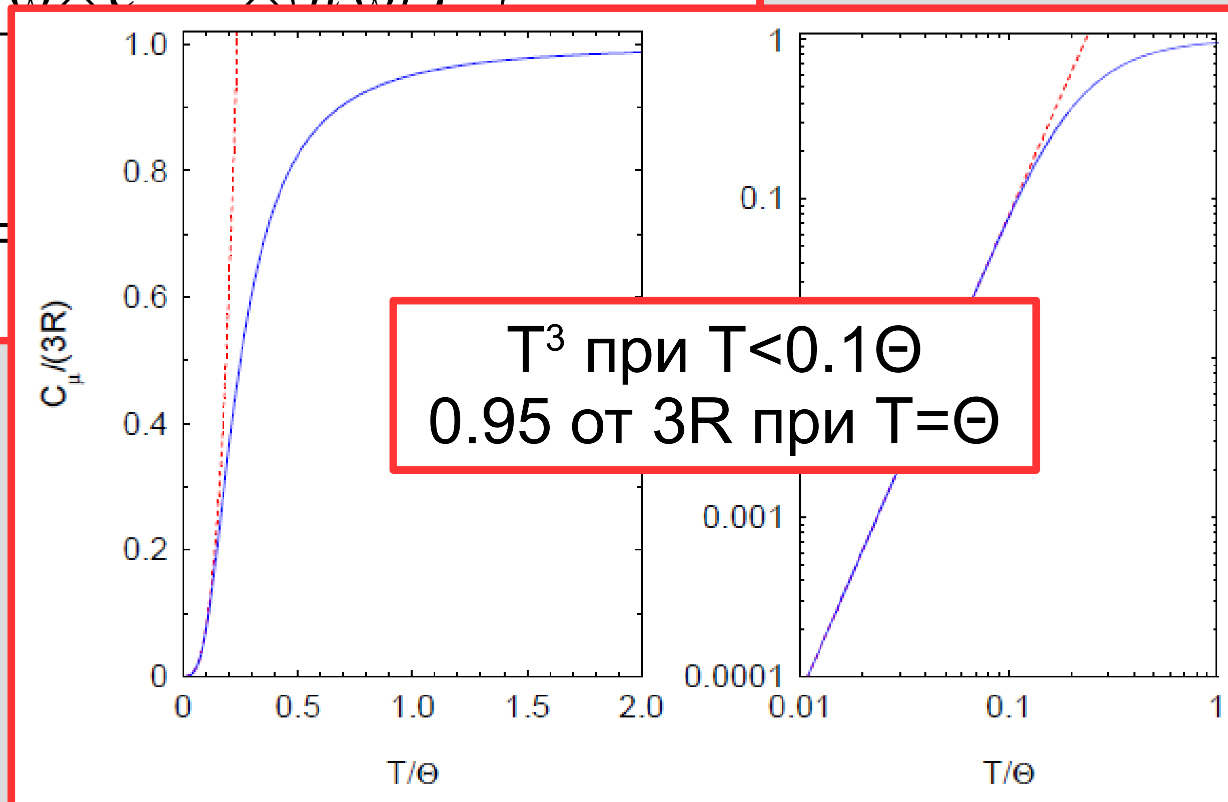
$$=\frac{3VT^3}{2\pi^2\hbar^3 s^3}\int_0^{\Theta/T}\frac{x^4e^x dx}{\left(e^x-1\right)^2}=9Nk_BT\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\times\int_0^{\Theta/T}\frac{x^4e^x dx}{\left(e^x-1\right)^2}$$

Теория теплоёмкости Дебая (3D). Общий случай.

$$E-E_0=3\times\frac{V}{2\pi^2 s^3}\int_0^{\omega_D}\omega^2\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T}-1}\,d\omega$$

$$C=3\times\frac{V}{2\pi^2 s^3}\int_0^{\omega_D}\omega^2\,\frac{\hbar\omega\times e^{\hbar\omega/T}\times(\hbar\omega/T^2)}{\ldots}$$

$$=\frac{3VT^3}{2\pi^2\hbar^3 s^3}\int_0^{\Theta/T}\frac{x^4e^x\,dx}{\left(e^x-1\right)^2}=\ldots$$



Теория теплоёмкости Эйнштейна.

$$\boxed{D(\omega) = N\,\delta(\omega - \omega_0)}$$

$$\boxed{E = \sum_i \int_0^\infty D_i(\omega)\left(\frac{1}{2} + n(\omega)\right)\hbar\omega\, d\omega}$$

$$\boxed{E - E_0 = \frac{N\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0/T} - 1}}$$

Теория теплоёмкости Эйнштейна.

$$\boxed{D(\omega)=N\,\delta(\omega-\omega_0)}$$

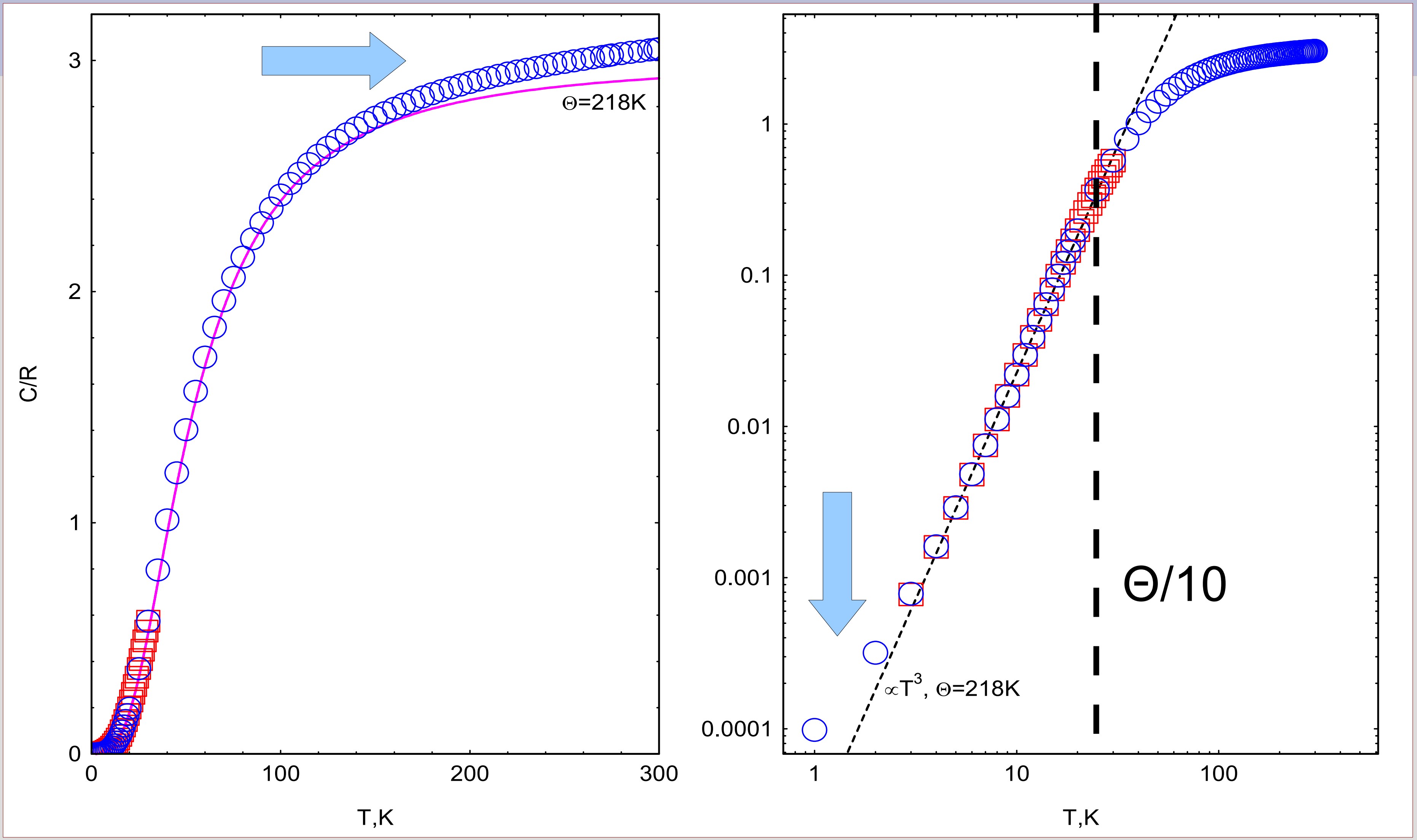
$$\boxed{E=\sum_i\int_0^\infty D_i(\omega)\left(\frac{1}{2}+n(\omega)\right)\hbar\omega\,d\omega}$$

$$\boxed{E-E_0=\frac{N\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0/T}-1}}$$

$$\boxed{C=N\,k_B\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2\frac{e^{\hbar\omega_0/(k_B T)}}{\left(e^{\hbar\omega_0/(k_B T)}-1\right)^2}=\begin{cases}\propto e^{-\hbar\omega_0/(k_B T)}, & k_B T\ll\hbar\omega_0\\ N\,k_B, & k_B T\gg\hbar\omega_0\end{cases}}$$

!!! вернули постоянную Больцмана

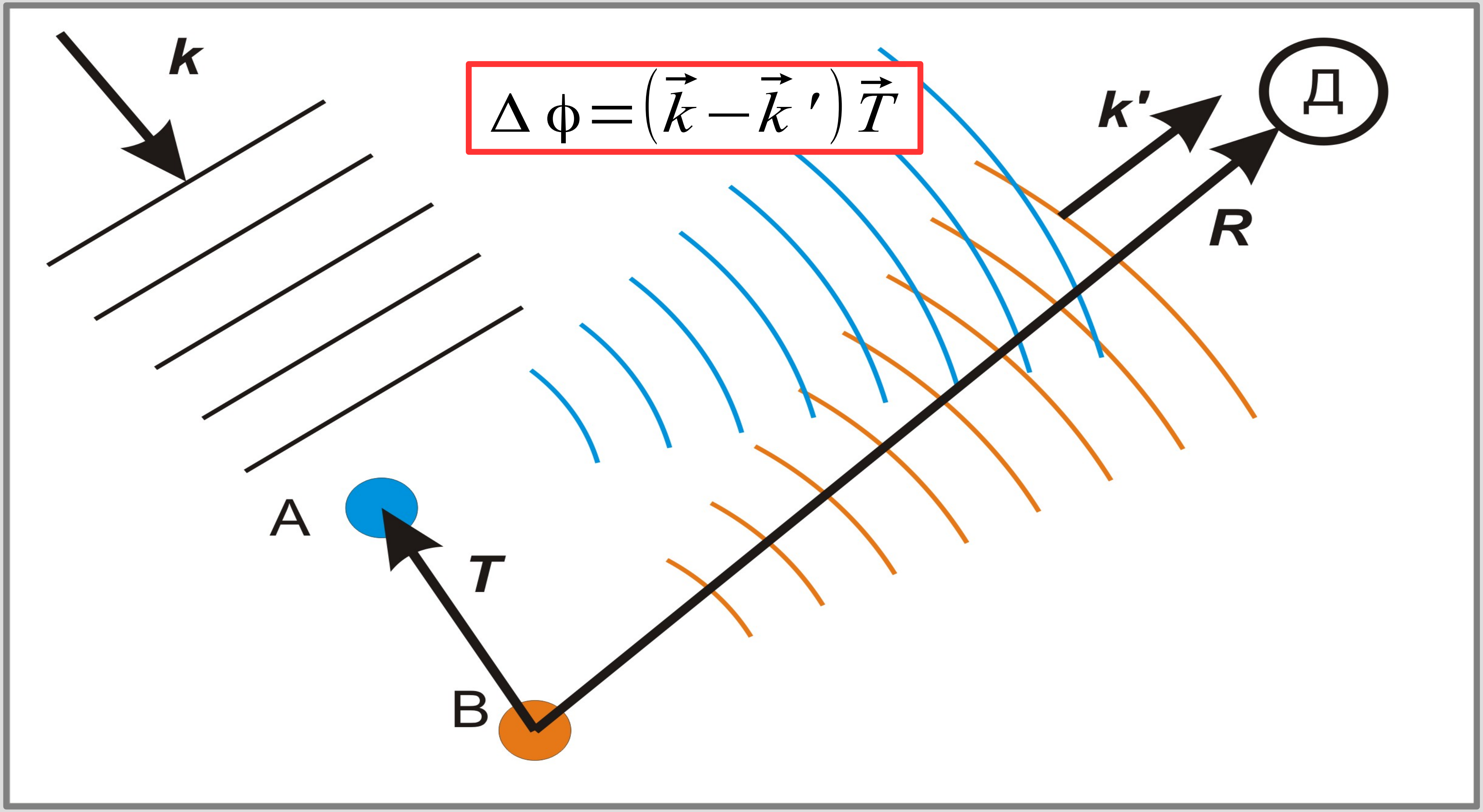
Эксперимент: Теплоёмкость серебра.



Данные: D.R.Smith and F.R.Fickett, Low-Temperature Properties of Silver ,Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology,100, 119(1995)

Часть 5. Квантование колебаний решётки. Фононы.

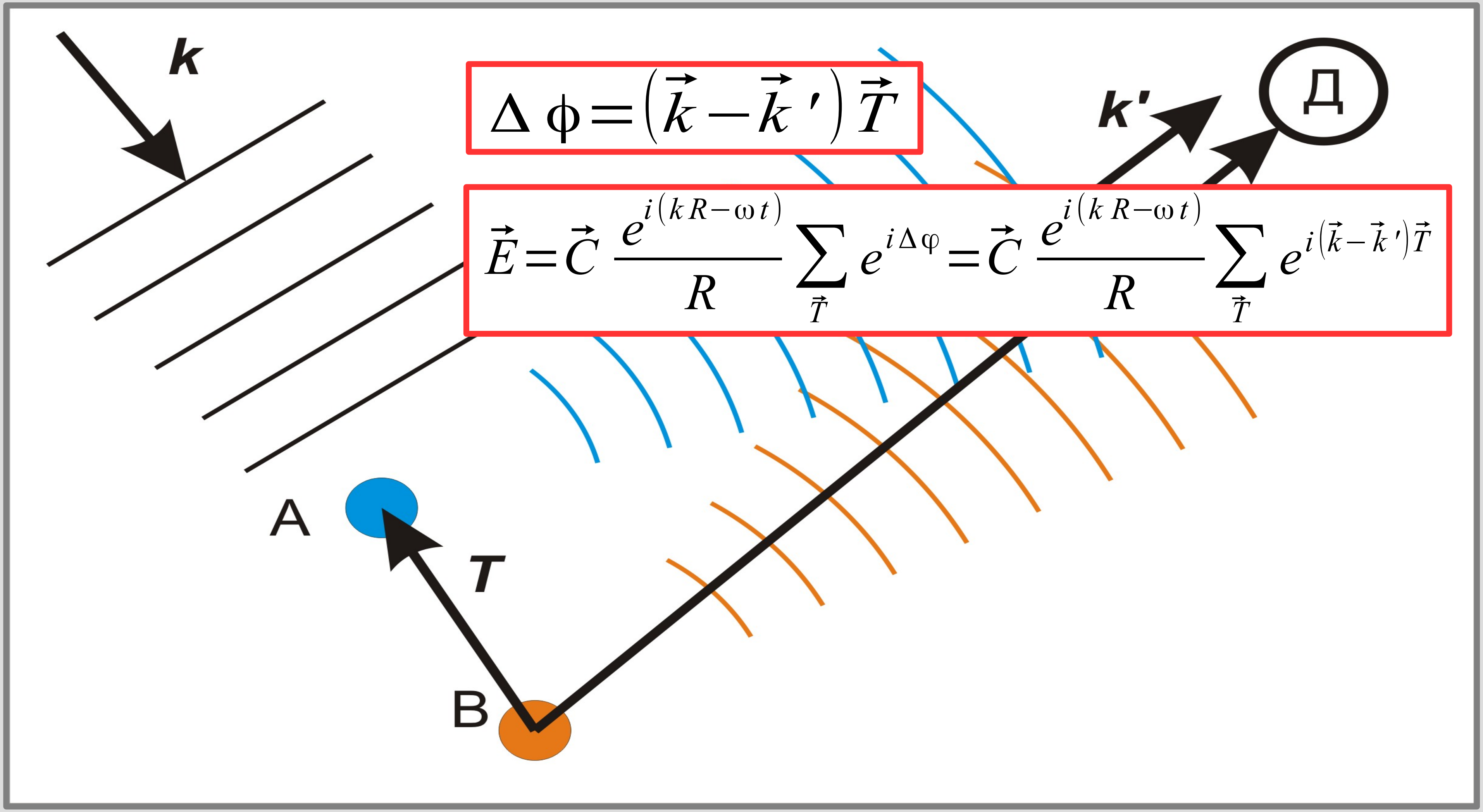
Напоминание: дифракция на кристалле



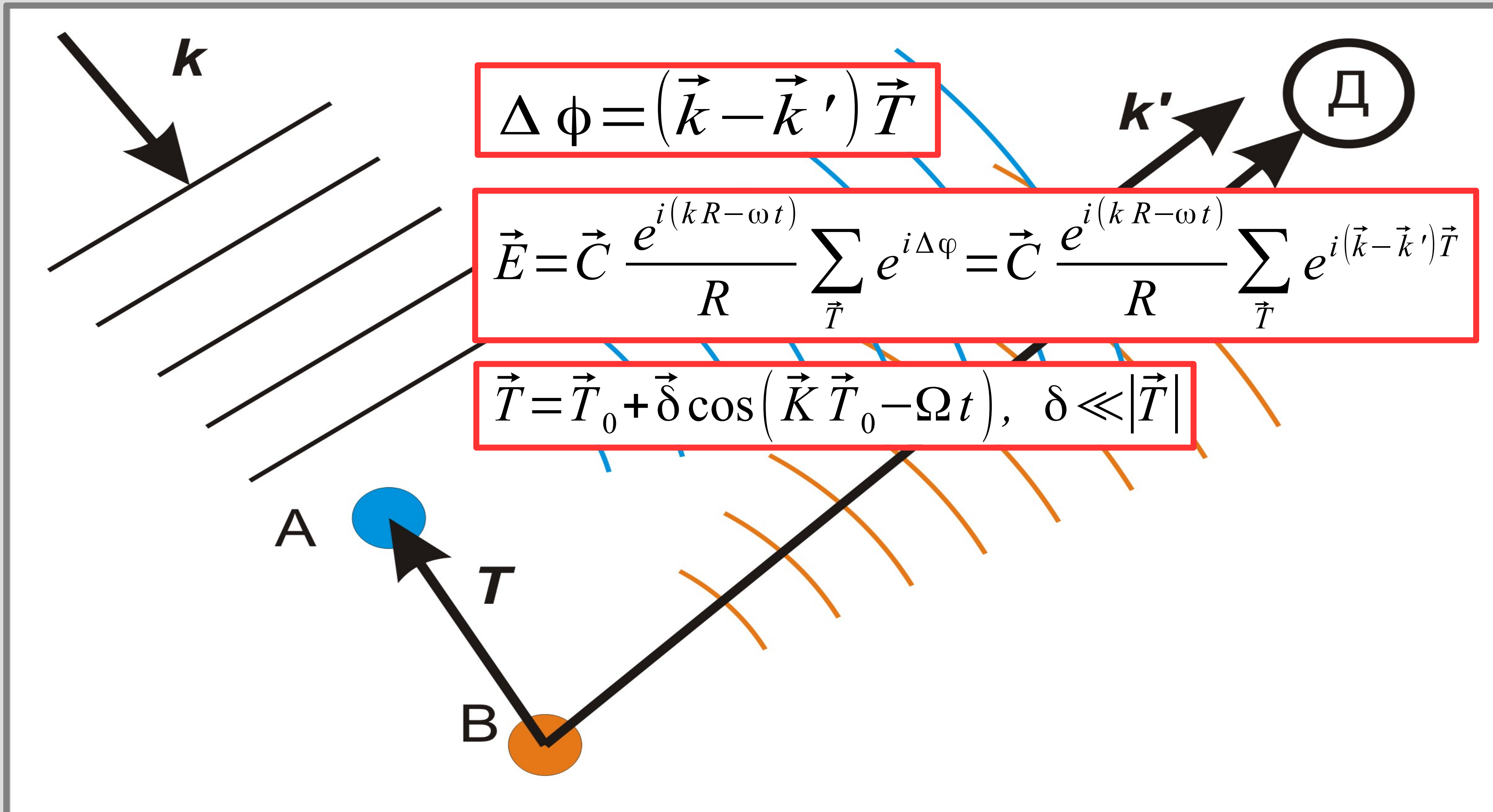
Напоминание: дифракция на кристалле

$$\Delta\phi = \left(\vec{k} - \vec{k}\,'\right)\vec{T}$$

$$\vec{E} = \vec{C}\,\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\Delta\varphi} = \vec{C}\,\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\left(\vec{k}-\vec{k}\,'\right)\vec{T}}$$



Учёт колебаний атомов.

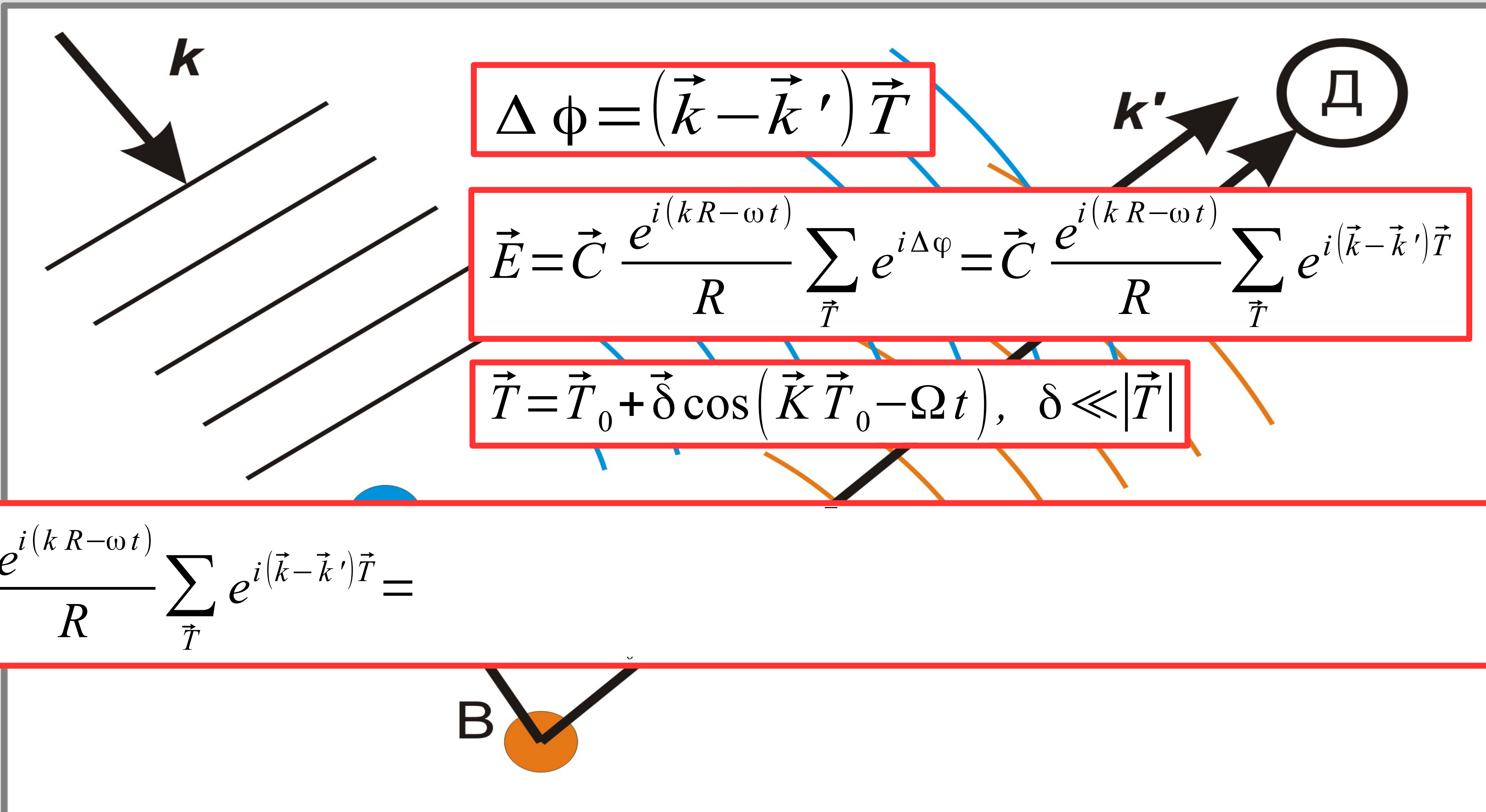


$$\Delta\phi = \left(\vec{k} - \vec{k}\,'\right)\vec{T}$$

$$\vec{E} = \vec{C}\,\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\Delta\varphi} = \vec{C}\,\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\left(\vec{k}-\vec{k}\,'\right)\vec{T}}$$

$$\vec{T} = \vec{T}_0 + \vec{\delta}\cos\left(\vec{K}\,\vec{T}_0 - \Omega t\right),\quad \delta \ll \left|\vec{T}\right|$$

Учёт колебаний атомов.



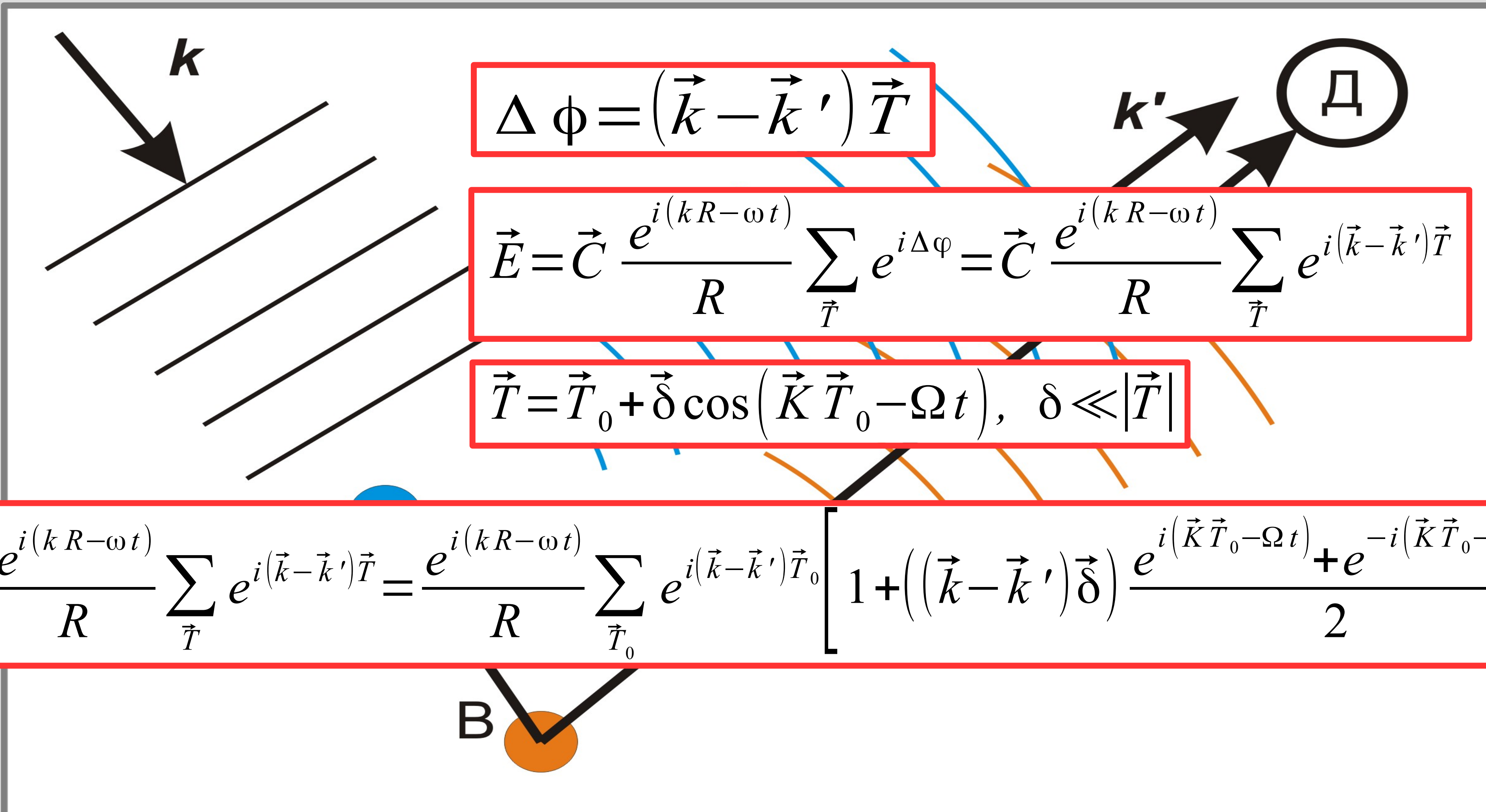
$$\Delta\phi = \left(\vec{k} - \vec{k}\,'\right)\vec{T}$$

$$\vec{E} = \vec{C}\,\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\Delta\varphi} = \vec{C}\,\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\left(\vec{k}-\vec{k}\,'\right)\vec{T}}$$

$$\vec{T} = \vec{T}_0 + \vec{\delta}\cos\left(\vec{K}\,\vec{T}_0 - \Omega t\right),\quad \delta \ll \left|\vec{T}\right|$$

$$\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\left(\vec{k}-\vec{k}\,'\right)\vec{T}} =$$

Учёт колебаний атомов.



$$\Delta \varphi = \left(\vec{k} - \vec{k}'\right)\vec{T}$$

$$\vec{E} = \vec{C}\,\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\Delta\varphi} = \vec{C}\,\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\vec{T}}$$

$$\vec{T} = \vec{T}_0 + \vec{\delta}\cos\left(\vec{K}\vec{T}_0 - \Omega t\right), \quad \delta \ll \left|\vec{T}\right|$$

$$\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\vec{T}} = \frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}_0} e^{i\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\vec{T}_0}\left[1 + \left(\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\vec{\delta}\right)\frac{e^{i\left(\vec{K}\vec{T}_0-\Omega t\right)} + e^{-i\left(\vec{K}\vec{T}_0-\Omega t\right)}}{2}\right]$$

...омов.

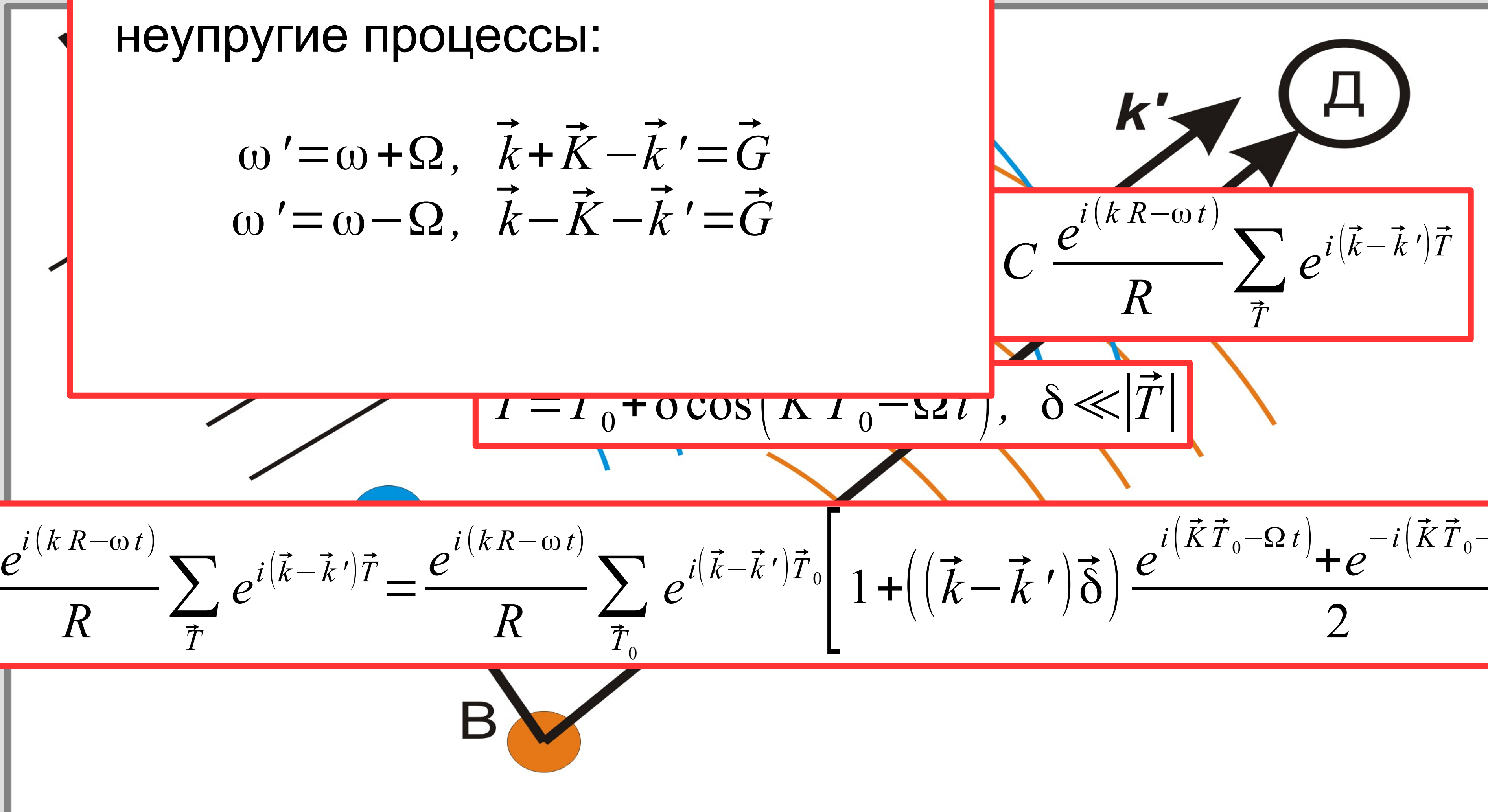
упругий процесс:

$$\omega'=\omega,\quad \vec{k}-\vec{k}'=\vec{G}$$

неупругие процессы:

$$\omega'=\omega+\Omega,\quad \vec{k}+\vec{K}-\vec{k}'=\vec{G}$$

$$\omega'=\omega-\Omega,\quad \vec{k}-\vec{K}-\vec{k}'=\vec{G}$$



$$C\,\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{T}}$$

$$\vec{T}=\vec{T}_0+\vec{\delta}\cos\left(\vec{K}\vec{T}_0-\Omega t\right),\quad \delta\ll\left|\vec{T}\right|$$

$$\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{T}}=\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}_0} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{T}_0}\left[1+\left(\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\vec{\delta}\right)\frac{e^{i\left(\vec{K}\vec{T}_0-\Omega t\right)}+e^{-i\left(\vec{K}\vec{T}_0-\Omega t\right)}}{2}\right]$$

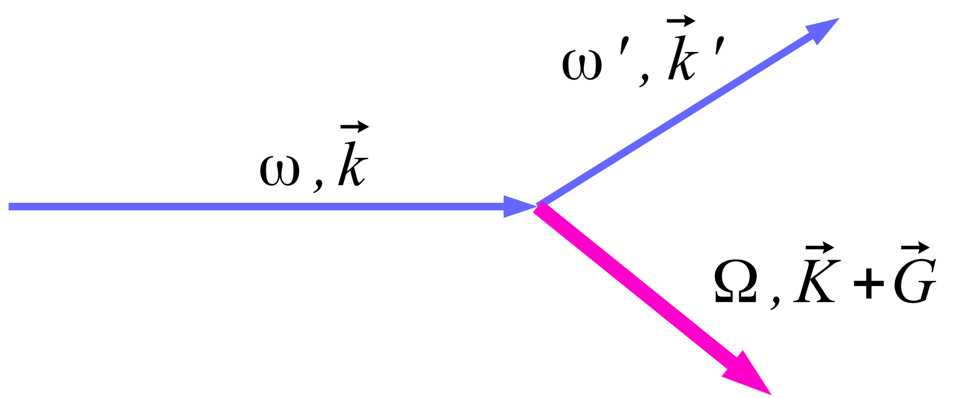
упругий процесс:

$$\omega' = \omega, \quad \vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}$$

неупругие процессы:

$$\omega' = \omega + \Omega, \quad \vec{k} + \vec{K} - \vec{k}' = \vec{G}$$

$$\omega' = \omega - \Omega, \quad \vec{k} - \vec{K} - \vec{k}' = \vec{G}$$



упругий процесс:

$$\omega'=\omega, \quad \vec{k}-\vec{k}'=\vec{G}$$

неупругие процессы:

$$\omega'=\omega+\Omega, \quad \vec{k}+\vec{K}-\vec{k}'=\vec{G}$$

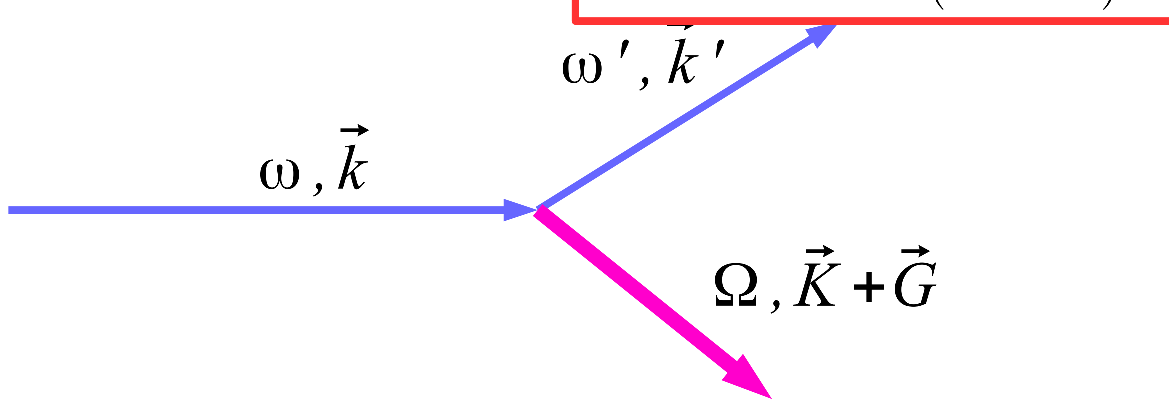
$$\omega'=\omega-\Omega, \quad \vec{k}-\vec{K}-\vec{k}'=\vec{G}$$

При взаимодействии с фотоном квант колебаний решётки ведёт себя как *квази*частица (*фонон*) с

- энергией
  $$\hbar\Omega$$
- *квази*импульсом
  $$\hbar(\vec{K}+\vec{G})$$

$$\frac{e^{i(kR-\omega t)}}{R}\sum_{\vec{T}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')}$$

$$e^{-i(\vec{K}\vec{T}_0-\Omega t)}$$



Статистика фононов

- бозе частицы
- нулевой химпотенциал

$$\overline{E} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1}$$

$$n = \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1}$$

Часть 6. А можно ли строго...

Квантовый подход к описанию колебаний атомов. Элементы вторичного квантования.

$\{\psi_k\}$ «привычные» волновые функции

N_k количество частиц в k-ом состоянии

$\{N_k\}$ эквивалентный способ задания состояния системы

Квантовый подход к описанию колебаний атомов. Элементы вторичного квантования.

$\{\psi_k\}$ «привычные» волновые функции

N_k количество частиц в k-ом состоянии

$\{N_k\}$ эквивалентный способ задания состояния системы

$$\hat{a}_n \left| N_1, N_2, \ldots, N_n, \ldots \right\rangle = \sqrt{N_n} \left| N_1, N_2, \ldots, N_n - 1, \ldots \right\rangle$$ уничтожение

$$\hat{a}_n^{+} \left| N_1, N_2, \ldots, N_n, \ldots \right\rangle = \sqrt{N_n + 1} \left| N_1, N_2, \ldots, N_n + 1, \ldots \right\rangle$$ рождение

Квантовый подход к описанию колебаний атомов. Элементы вторичного квантования.

$\{\psi_k\}$ «привычные» волновые функции

N_k количество частиц в k-ом состоянии

$\{N_k\}$ эквивалентный способ задания состояния системы

$$\hat{a}_n|N_1, N_2, \dots, N_n, \dots\rangle = \sqrt{N_n}|N_1, N_2, \dots, N_n - 1, \dots\rangle$$ уничтожение

$$\hat{a}_n^+|N_1, N_2, \dots, N_n, \dots\rangle = \sqrt{N_n + 1}|N_1, N_2, \dots, N_n + 1, \dots\rangle$$ рождение

Число частиц:

$$\hat{a}_n^+\hat{a}_n = N_n$$

Энергия: $\hat{H} = \sum_n \varepsilon_n N_n = \sum_n \varepsilon_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n$

взаимодействие: $\sum_{n,n',m,m'} H^{(2)}_{nn'mm'} \hat{a}_m^+ \hat{a}_n \hat{a}_{m'}^+ \hat{a}_{n'}$

Кван…
колебаний…

$\{\psi_k\}$ «привы…

N_k количе…

$\{\ldots$

$\hat{a}_n \left| N_1, N_2, \ldots, N \right.\ldots$

$\hat{a}_n^+ \left| N_1, N_2, \ldots, N \right.\ldots$

Если подобрать такое преобразование операторов исходных физических величин

$$\hat{a}_n = \hat{f}\left(\left\{\hat{x}_i\right\}, \left\{\hat{p}_i\right\}\right)$$

что гамильтониан примет вид

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n$$

то нам удалось переформулировать нашу задачу на задачу невзаимодействующих частиц

ε_n энергетический спектр этих частиц

Число частиц:

$$\hat{a}_n^+ \hat{a}_n = N_n$$

Энергия: $\hat{H} = \sum_n \varepsilon_n N_n = \sum_n \varepsilon_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n$

взаимодействие: $\sum_{n, n', m, m'} H^{(2)}_{nn'mm'} \hat{a}_m^+ \hat{a}_n \hat{a}_{m'}^+ \hat{a}_{n'}$

Вторичное квантование упругих колебаний «крупными мазками».

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2M} \hat{p}_j^2 + \frac{C}{2} \left(x_{j+1} - x_j\right)^2$$

$$x_r = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k X_k e^{ikr}$$

$$\hat{p}_r = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k P_k e^{-ikr}$$

$$\hat{H} = \sum_k \frac{1}{2M} P_k P_{-k} + C\left(1 - \cos(ka)\right) X_k X_{-k}$$

Вторичное квантование упругих колебаний «крупными мазками».

$$\hat{H} = \sum_k \frac{1}{2M} P_k P_{-k} + C\left(1 - \cos(ka)\right) X_k X_{-k}$$

$$a_k^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar M \omega_k}} \left(M \omega_k X_{-k} - iP_k\right)$$

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2\hbar M \omega_k}} \left(M \omega_k X_k + iP_{-k}\right)$$

$$\omega_k = \sqrt{\frac{2C}{M}\left(1 - \cos(ka)\right)} = \omega_{-k}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar \sum_k \omega_k \left(a_k a_k^+ + a_k^+ a_k\right) = \hbar \sum_k \omega_k \left(a_k^+ a_k + \frac{1}{2}\right) = \hbar \sum_k \omega_k \left(n_k + \frac{1}{2}\right)$$

Вторичное квантование упругих колебаний «крупными мазками».

$$\hat{H}=\sum_k \frac{1}{2M}P$$

Исходный гамильтониан взаимодействующих гармоническим потенциалом атомов преобразован в гамильтониан невзаимодействующих частиц (т.е. фононов!) со спектром *ω(k)*.

Преобразование *строгое* = в гармоническом приближении фононы не взаимодействуют друг с другом.

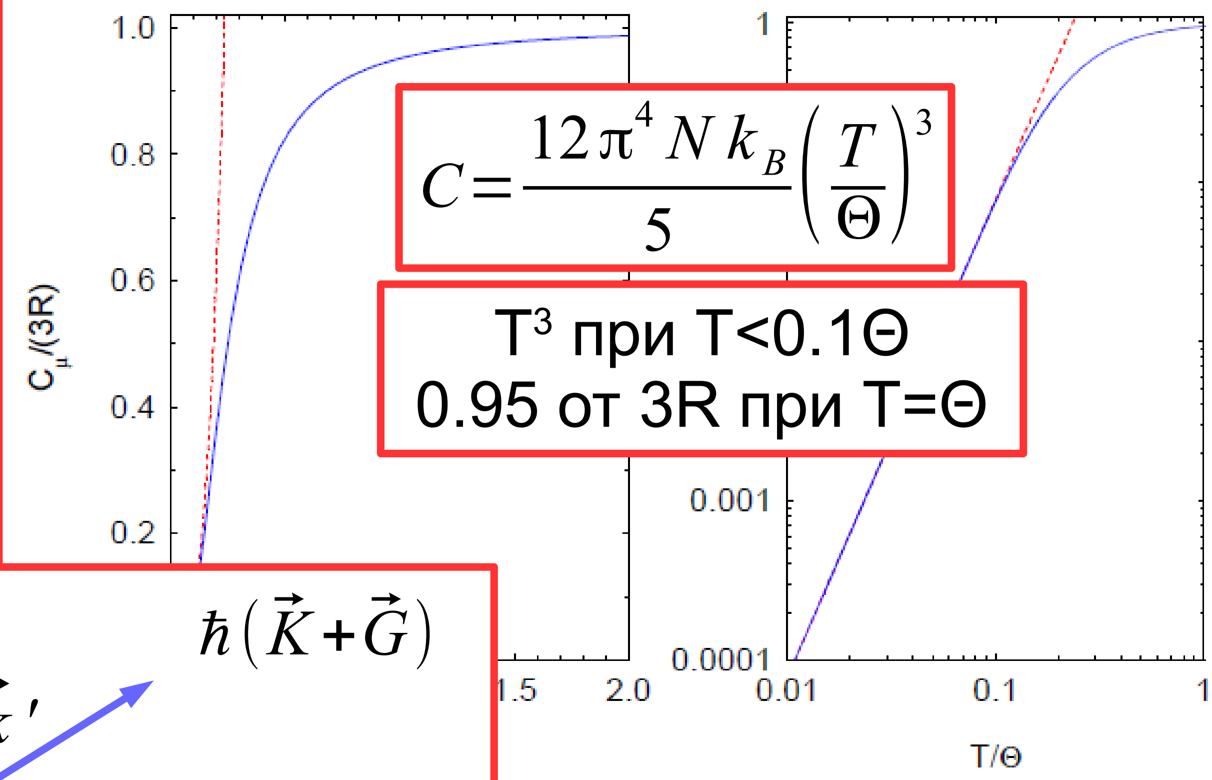
$a_k^+ =$

$(ka))=\omega_{-k}$

$a_k =$

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\hbar\sum_k \omega_k\left(a_k a_k^+ + a_k^+ a_k\right)=\hbar\sum_k \omega_k\left(a_k^+ a_k+\frac{1}{2}\right)=\hbar\sum_k \omega_k\left(n_k+\frac{1}{2}\right)$$

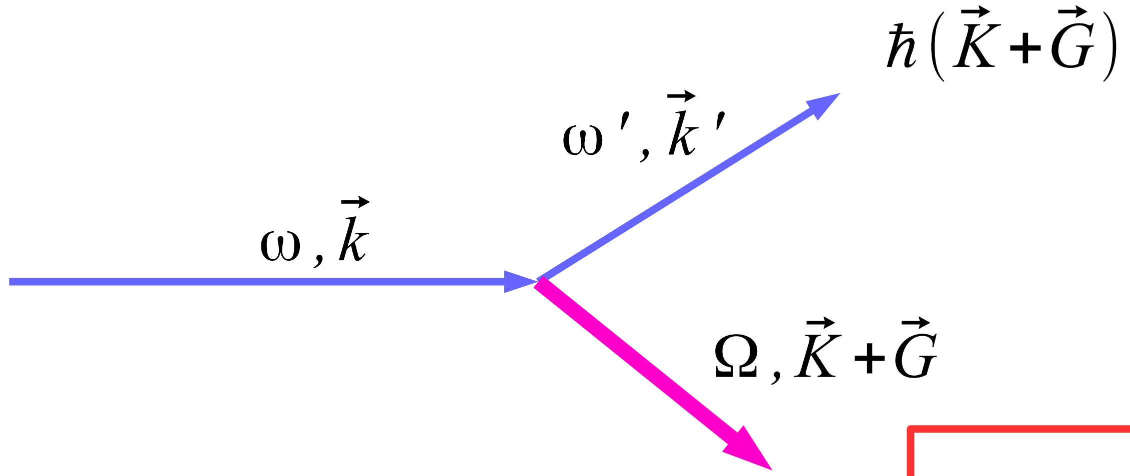
Главное в этой лекции.



$$C = \frac{12\pi^4 N k_B}{5}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3$$

T^3 при $T<0.1\Theta$

0.95 от 3R при $T=\Theta$



$$E = \sum_i \int_0^\infty D_i(\omega)\left(\frac{1}{2}+n(\omega)\right)\hbar\omega\, d\omega$$