

Южно-Уральский государственный
гуманитарно-педагогический университет
(ЮУрГГПУ)

ФИЗИКА ТВЁРДОГО ТЕЛА

(ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ ВЕЩЕСТВА)

ЛЕКЦИЯ №6

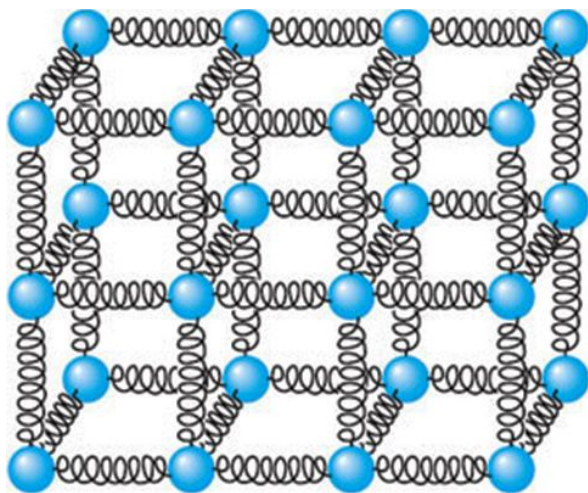
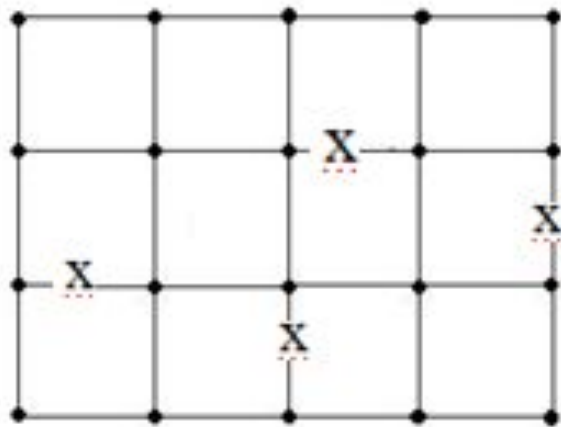
Свирская Л.М., доцент кафедры физики и методики обучения
физике, кандидат физико-математических наук

Тема № 3

«ДИНАМИКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ»

1. Квантование колебаний кристаллической решетки. Метод квазичастиц. Фононы.
2. Затруднения классической теории теплоёмкости кристаллов.
3. Квантовая теория теплоёмкости твердых тел по Эйнштейну.
4. Квантовая теория теплоёмкости твёрдых тел по Дебаю.

В кристаллах атомы совершают малые колебания около узлов кристаллической решетки. Узлы решетки соответствуют не мгновенным положениям атомов, а усреднённым.



$T \neq 0$ (тепловые колебания)

$T = 0$ (нулевые колебания)

Квантовый параметр де Бура, характеризующий нулевые колебания:

$$\Lambda = \left(\frac{a_0}{a} \right)^2$$

Обычно: $\Lambda \ll 1$, $a_0 \ll a$

Квантовый кристалл: ${}^3_2\text{He}$

$$\Lambda = 0.49$$

1. Квантование колебаний кристаллической решетки. Метод квазичастиц. Фононы.

В классической механике малые колебания системы со многими степенями свободы описываются с помощью нормальных (или независимых) координат.

Каждая нормальная координата меняется по гармоническому закону. С помощью нормальных координат задача о свободных колебаниях S -мерной механической системы сводится к исследованию колебаний совокупности S независимых линейных гармонических осцилляторов.

$$E = \sum_{k=1}^S E_{k,\text{ЛГО}}$$

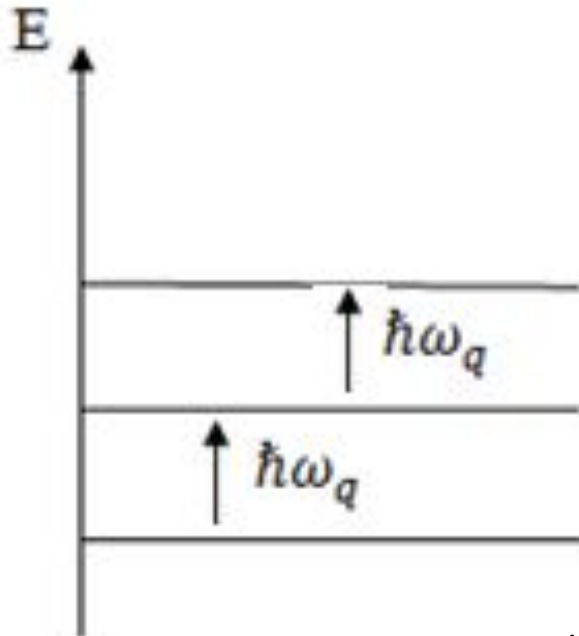
Переход к квантовой теории:

$$E_{\text{крист}} = \sum_{k=1}^{3N} \hbar \omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right), n_q = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Квант энергии колебаний кристаллической решетки называется **ФОНОНОМ** (И.Е. Тамм, 1930 г.). Кристалл можно рассматривать как «ящик», заполненный газом фононов.

ФОТОС - свет; фотон.

ФОНОС – звук; фонон.



ЭКВИДИСТАНТНЫЙ энергетический спектр возбуждений кристалла.

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad p = \hbar q.$$

Статистика Бозе-Эйнштейна,
 $\mu = 0$

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_q}{kT}} - 1}$$

Метод квазичастиц

для описания систем из большого числа частиц. Сформулирован Л.Д.Ландау в 1941 г. при создании теории сверхтекучести.

1. Слабовозбужденное состояние макроскопического тела можно рассматривать как идеальный газ невзаимодействующих элементарных возбуждений. Эти возбуждения описывают не отдельные частицы, а движение всего коллектива частиц.
2. Каждое элементарное возбуждение ведёт себя как квазичастица с определенной энергией и импульсом (квазиимпульсом). Энергия слабовозбужденного состояния макроскопического тела есть сумма энергий квазичастиц:

$$E = \sum_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p}) n_{\vec{p}}$$

3. Основное состояние кристалла есть вакуум относительно квазичастиц.
4. Квазичастицы не существуют вне макроскопического тела. Они связаны с определенной структурой тела. При исчезновении этой структуры исчезают и соответствующие ей квазичастицы.

Элементарные возбуждения (квазичастицы) в твердых телах:

1. **Фонон** – квант энергии колебаний кристаллической решетки.
2. **Экситон** – электронное возбуждение в диэлектрике или полупроводнике, мигрирующее по кристаллу и не связанное с переносом электрического заряда и массы. Это связанное состояние электрона и дырки.
 - а) Экситон Френкеля, 1931 г. (малого радиуса). Радиус экситона соизмерим с периодом кристаллической решётки.
 - б) Экситон Ванье-Мотта, 1937 г. (большого радиуса). Радиус экситона превышает период решетки. Высокая диэлектрическая проницаемость ослабляет электростатическое притяжение электрона и дырки → большой радиус.
3. **Магнон** – квант энергии спиновых волн в магнитоупорядоченных системах (Блох, 1930 г.).
4. **Полярон** - «электрон в фононной шубе», электрон + упругая деформация решётки (Ландау, 1933 г.).
5. **Плазмон** – квант энергии плазменных колебаний (квантованные коллективные колебания электронной компоненты относительно малоподвижных ионов); Бом и Пайнс, 1951 г.

2. Затруднения классической теории теплоёмкости кристаллов.

1. Кристалл рассматривается как совокупность N независимых гармонических осцилляторов, имеющих $3N$ степеней свободы.
2. Выполняется теорема классической статистики о равномерном распределении энергии по степеням свободы:

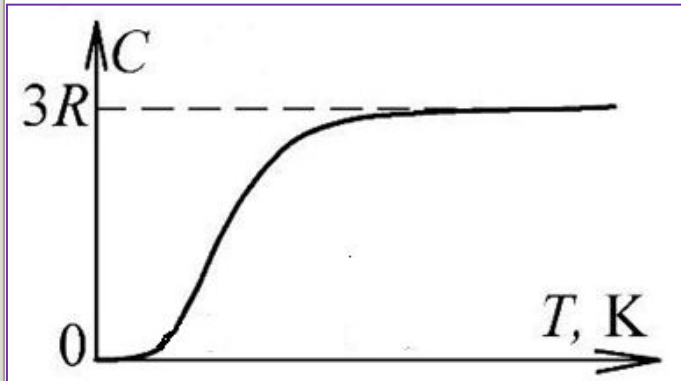
$$\bar{\varepsilon} = \frac{kT}{2}$$

Средняя энергия одного моля: $\bar{E} = 3N_A \left(\frac{kT}{2} + \frac{kT}{2} \right) = 3N_A kT = 3RT.$

$$c_V = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V = 3R = 6 \frac{\text{кал}}{\text{моль} \cdot \text{К}} = \text{const.}$$

(в согласии с экспериментальным законом Дюлонга и Пти, 1819 г.)

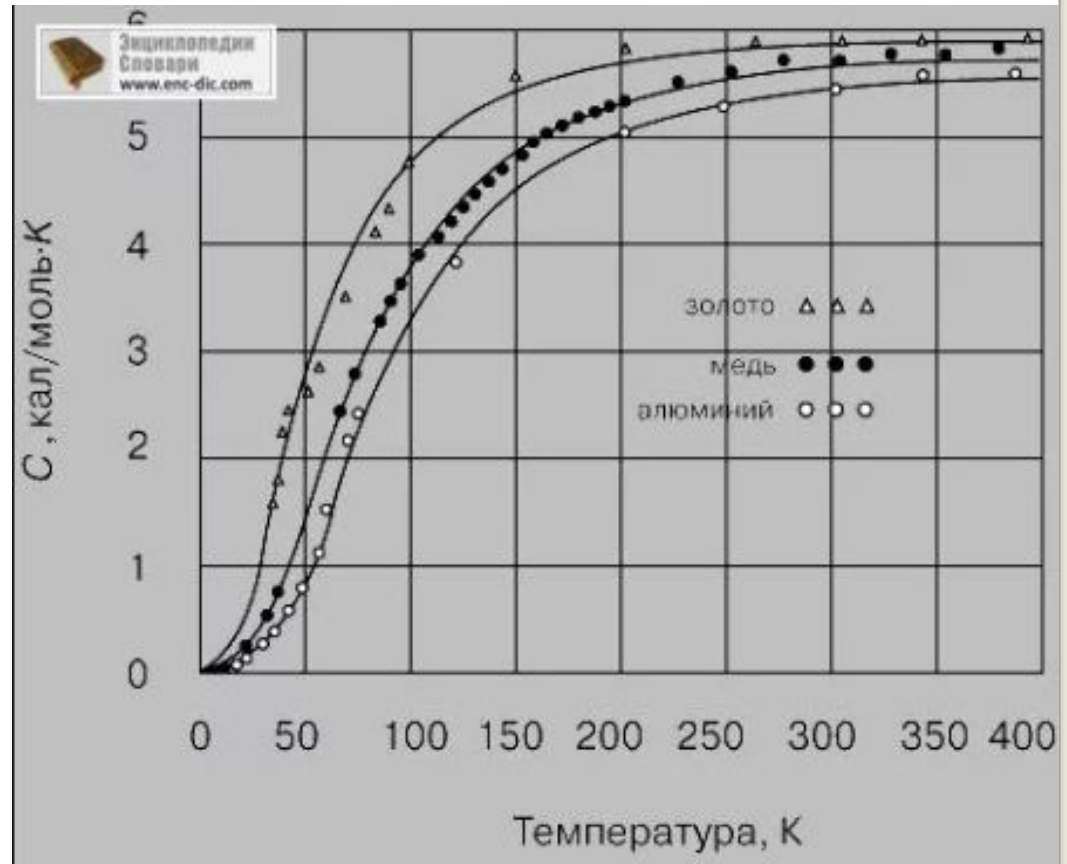
Эксперименты начала XX столетия:



При $T \rightarrow 0$

$$c_V \rightarrow 0$$

Казалось бы, гармоническое приближение особенно хорошо должно работать в области низких температур, и перестать выполняться при высоких.... Оказалось, всё наоборот...



(золото, медь, алюминий)

3. Квантовая теория теплоёмкости твердых тел Эйнштейна (1906 г.)

1. Кристалл рассматривается как совокупность независимых гармонических осцилляторов, колеблющихся с одной и той же частотой $\nu_{\text{Э}}$ (эйнштейновская частота). По существу – модель многострунного, но однотонного инструмента.

2. Энергия осциллятора описывается формулой Планка (отказ от классической теоремы о равномерном распределении энергии):

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h\nu_{\text{Э}}}{e^{\frac{h\nu_{\text{Э}}}{kT}} - 1} \quad \longrightarrow \quad \bar{E}_{\text{крист.}} = 3N \frac{h\nu_{\text{Э}}}{e^{\frac{h\nu_{\text{Э}}}{kT}} - 1}$$

а) Область высоких температур: $\frac{h\nu_{\text{Э}}}{kT} \ll 1$

$$\bar{E} = 3N \frac{h\nu_{\text{Э}}}{1 + \frac{h\nu_{\text{Э}}}{kT} - 1} = 3NkT \quad N \rightarrow N_A$$

$$\bar{E} = 3RT, \quad c_V = 3R = \text{const}$$

(предельный переход в классическую теорию и совпадение с законом Дюлонга и Пти при высоких температурах)

б) Область низких температур: $\frac{h\nu_3}{kT} \gg 1$

$$c_V = - \frac{3N h \nu_3}{\left(e^{\frac{h\nu_3}{kT}} - 1 \right)^2} \left(- \frac{h\nu_3}{kT^2} \right) e^{\frac{h\nu_3}{kT}}$$

$$c|_{T \rightarrow 0} = \frac{3N (h\nu_3)^2}{kT^2 \left(e^{\frac{h\nu_3}{kT}} \right)^2} e^{\frac{h\nu_3}{kT}}$$

$$c|_{T \rightarrow 0} \sim \frac{e^{-\frac{h\nu_3}{kT}}}{T^2} \sim \frac{\infty^2}{1 + \infty + \infty^2 + \dots} \rightarrow 0$$

по экспоненциальному закону.

ВЫВОДЫ

1. Теория Эйнштейна позволила объяснить стремление теплоёмкости к нулю при $T \rightarrow 0$
2. Эйнштейн показал, что колебания механических осцилляторов квантуются так же, как и колебания осцилляторов электромагнитного излучения.

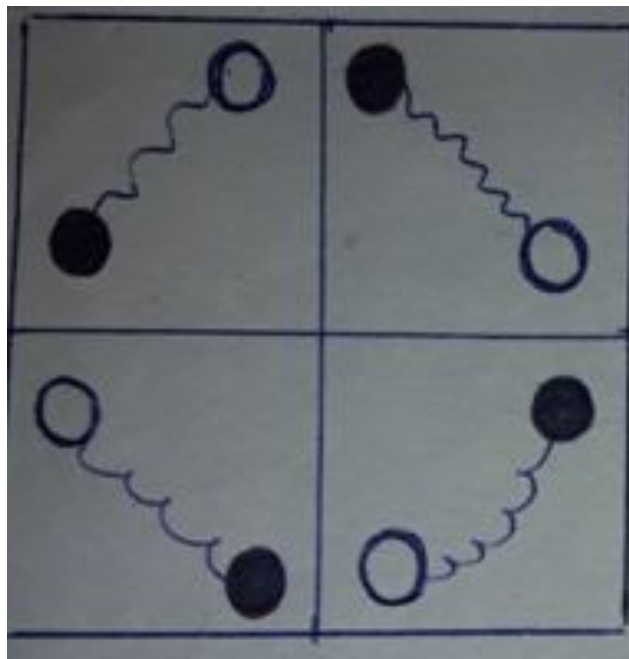
(Вот если бы квантовая теория началась с этой задачи, а не с проблемы АЧТ, то, возможно, она оказалась бы концептуально значительно проще!)



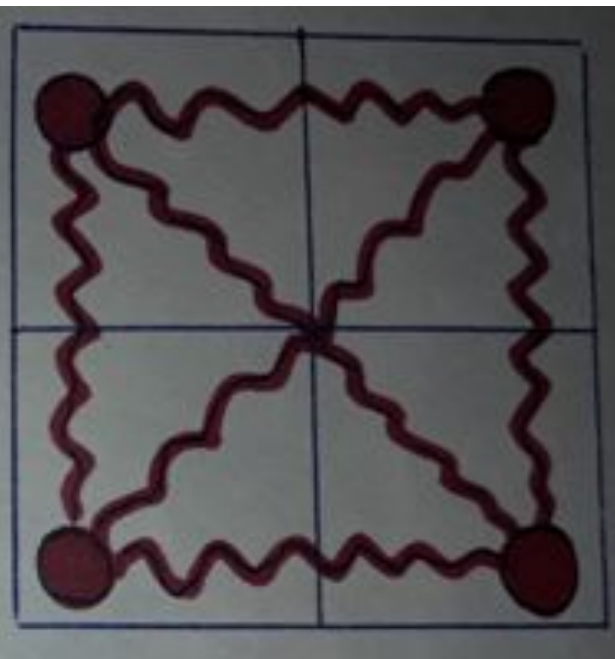
3. Недостатком теории является отсутствие учета коррелированного движения соседних атомов (нельзя объяснить, напр., распространение звука в кристалле).

4. Квантовая теория теплоёмкости твёрдых тел по Дебаю (1912 г.) .

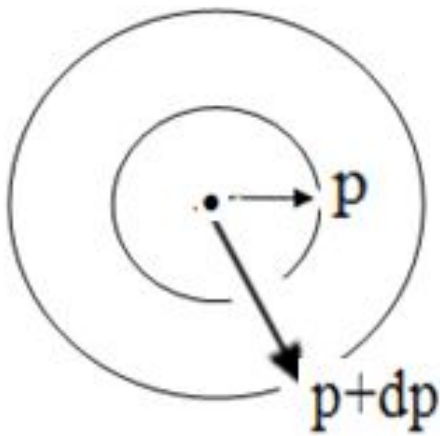
Модель упругого континуума (кристалл рассматривается как сплошная среда, в которой распространяются упругие волны со скоростью звука).



Модель Эйнштейна



Модель Дебая



$$\varepsilon = h\nu$$

$$p = \frac{h\nu}{u}$$

$$g(\nu) = \frac{4\pi\nu^2}{h^3}$$

$$g(\nu)d\nu = \frac{4\pi p^2 dp}{h^3}$$

$$g(\nu)d\nu = \frac{4\pi\nu^2 d\nu}{h^3}$$

Функция распределения по частотам



$$\nu_{\max} = \frac{u}{\lambda_{\min}} = \frac{u}{2a}$$

(дебаевская частота)



$$\lambda_{\min} = 2a$$

$$\int_0^{\nu_D} g(\nu) d\nu = 3N$$



$$\nu_D^3 = \frac{9Nu^3}{4\pi}$$

(полное число колебаний)

$$\bar{E} = \int_0^{\nu_D} \bar{\varepsilon} g(\nu) d\nu = \int_0^{\nu_D} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \frac{4\pi\nu^2}{u^3} d\nu = \frac{4\pi h}{u^3} \int_0^{\nu_D} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu$$

$$\frac{h\nu}{kT} = x$$

$$\bar{E} = \frac{4\pi k^4 T^4}{u^3 h^3} \int_0^{\frac{h\nu_D}{kT}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Интерполяционная формула Дебая.

$$\frac{h\nu_D}{k} = \Theta_D$$

(Температура Дебая)

а) Область высоких температур: $\frac{h\nu_D}{kT} \ll 1, \quad \frac{\Theta_D}{T} \ll 1$

$$\bar{E} = \int_0^{\nu_D} \bar{\varepsilon} g(\nu) d\nu = kT \int_0^{\nu_D} g(\nu) d\nu = 3NkT$$

$$N = N_A, \quad \bar{E} = 3RT, \quad c_V = 3R = \text{const}$$

(выполняется предельный переход к классическому результату и имеется согласие с опытом в области высоких температур)

б) Область низких температур: $\frac{h\nu_D}{kT} \gg 1, \frac{\Theta_D}{T} \gg 1$

При низких температурах возбуждаются низкие частоты колебаний, т.е. длинные волны. А длинная волна нечувствительна к дискретной структуре кристалла (так же как океанская волна не заметит песчинку на берегу...). Поэтому модель упругого континуума при низких температурах должна привести к хорошему согласию теории и эксперимента.

$$\int_0^{\frac{h\nu_D}{kT}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \rightarrow \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

$$\bar{E} = \frac{4\pi^5 k^4}{15u^3 h^3} T^4 \quad \rightarrow \quad c_V = \frac{16\pi^5 k^4}{15u^3 h^3} T^3$$

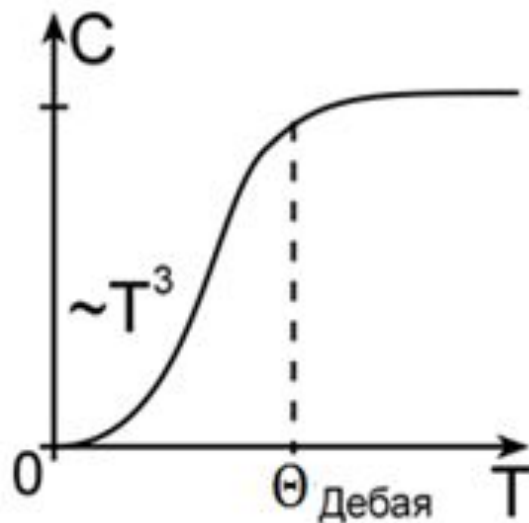
$$u^3 = \frac{4\pi\nu_D^3}{9N}$$



$$c_V = \frac{12}{5} \pi^4 kN \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$

$$c_V \sim T^3$$

При $T \rightarrow 0$ теплоёмкость стремится к нулю, что согласуется с опытными данными.



кристалл	Ne	K	Au	Ag	NaCl	Be	алмаз
Θ_D, K	63	100	170	215	280	1000	2000

Сравнение трёх теорий: классической, Эйнштейна и Дебая

