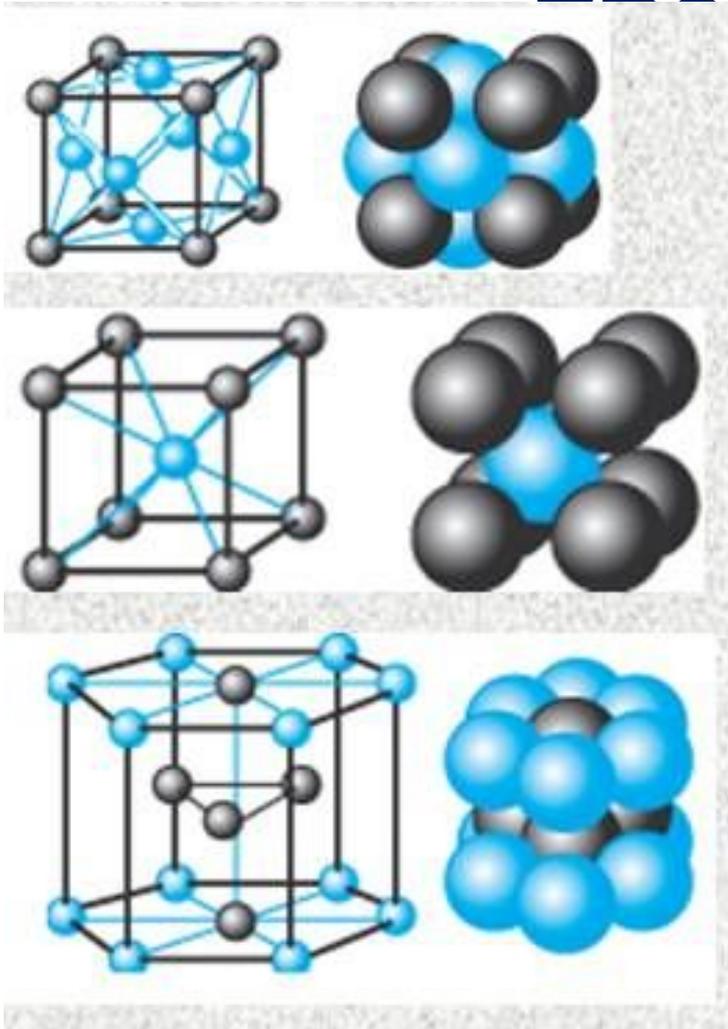


Элементы физики

Твердого тела



1. Кристаллическое состояние **Твердые** **тела**

АМОРФНЫЕ

Атомы расположены
беспорядочно

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ

Атомы образуют
кристаллическую решетку

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА
ХАРАКТЕРИЗУЕТСЯ ОПРЕДЕЛЕННЫМ ТИПОМ
СИММЕТРИИ
ТИПЫ**

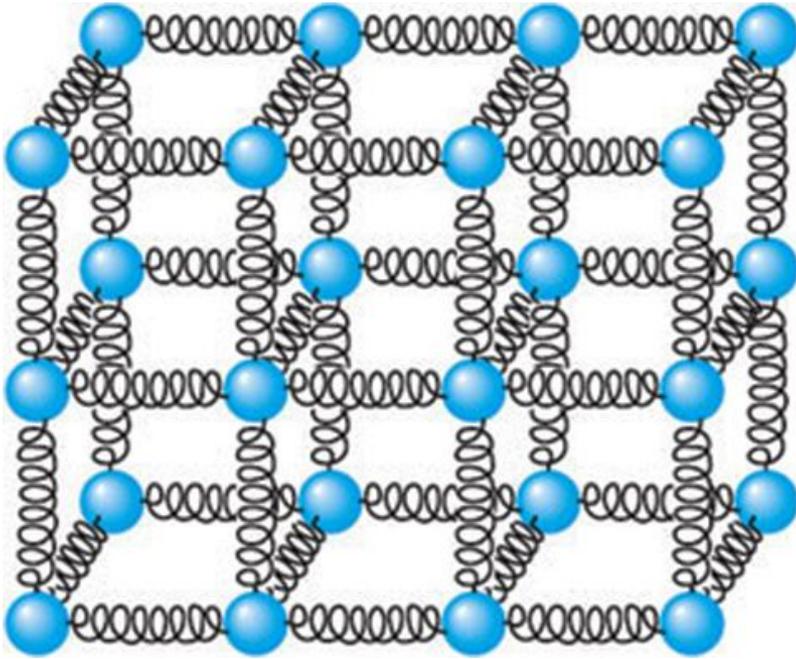
1. Ионные кристаллы NaCl

2. Атомные кристаллы (в узлах находятся нейтральные атомы, связанные ковалентной связью)

3. Металлические кристаллы (в узлах - ионы, между ними - свободные электроны)

4. Молекулярные кристаллы (в узлах - молекулы, взаимодействие между ними - Ван-дер-Ваальсовское)

2. Колебания кристаллической решетки. Фононы



Колебание
кристаллической
решетки –
основной вид движения
твёрдого тела
Амплитуда колебаний
зависит от температуры

При T_{max} решетка разрушается

Колебания происходят в виде упругих волн

$$\xi(x, y, z) = \xi_{max} \cos(\omega t - kx)$$

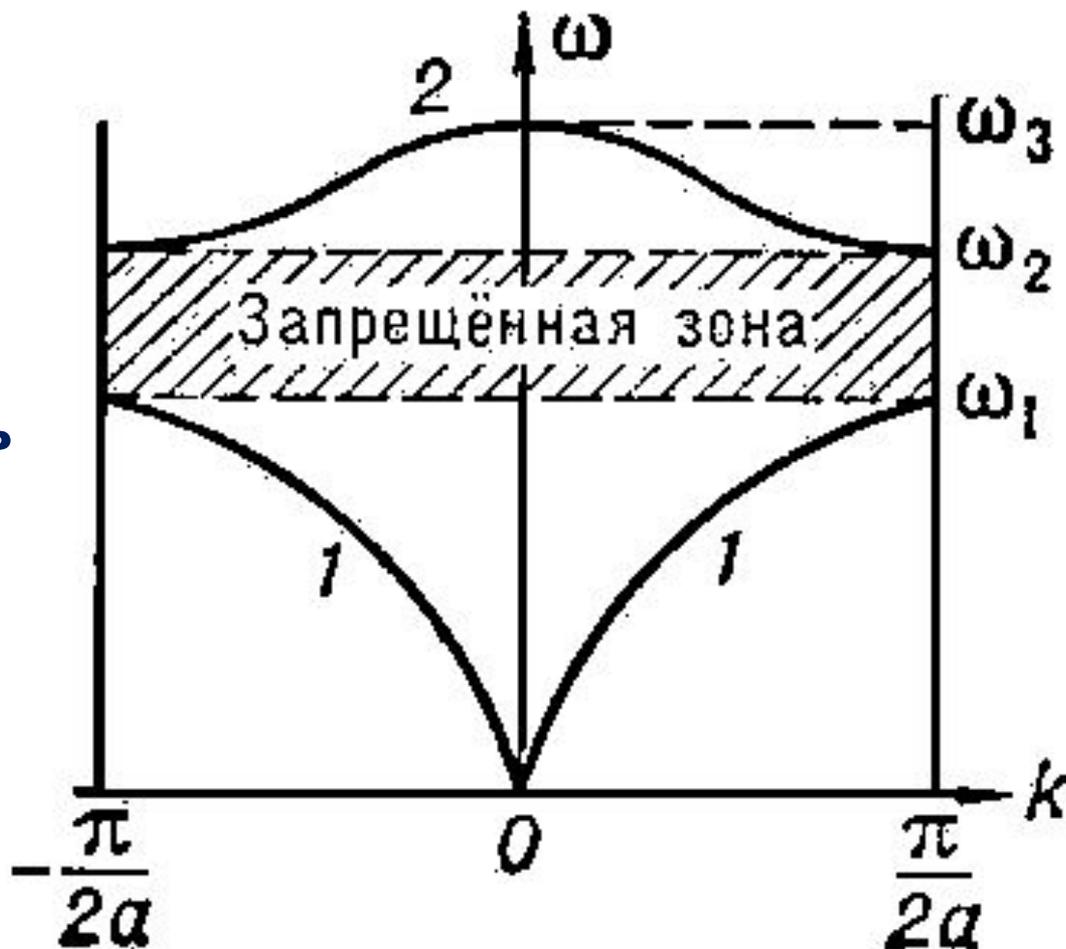
2. Колебания кристаллической решетки. Фононы

$$\xi(x, y, z) = \xi_{max} \cos(\omega t - kx)$$

a – период кристаллической решетки

1 – акустическая ветвь

2 – оптическая ветвь



2. Колебания кристаллической решетки. Фононы

Звуковые волны в твердом теле

квантуются
Фонон – квант звуковых волн

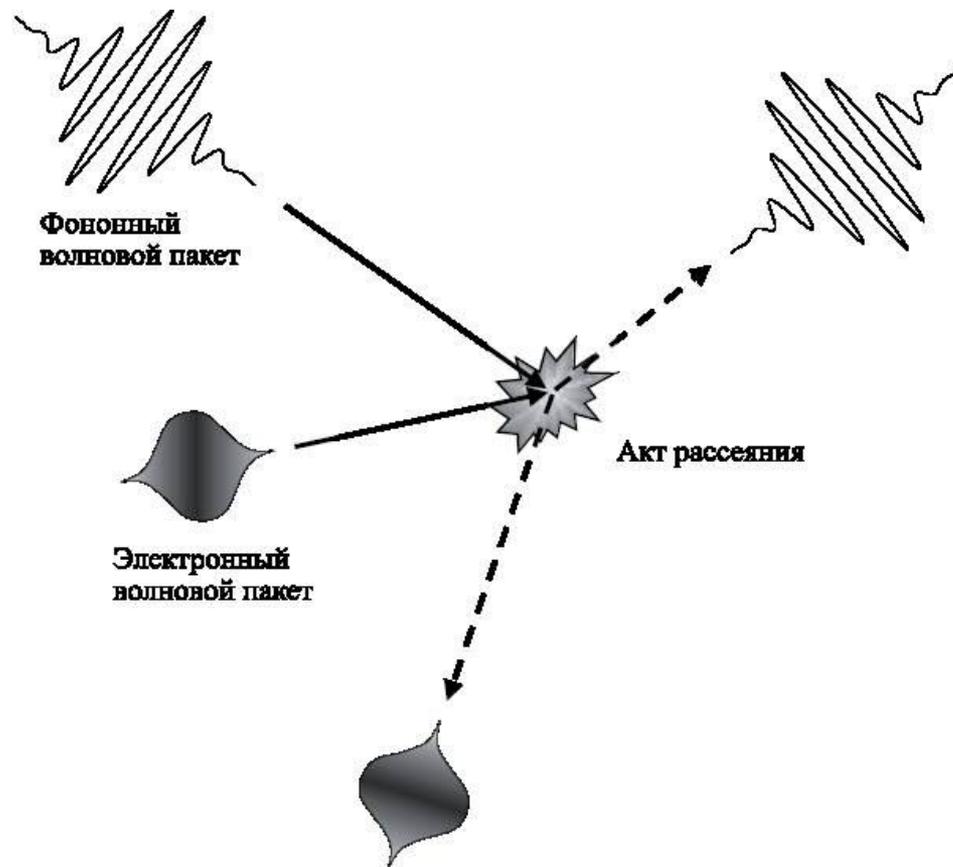
Энергия фонона

$$\varepsilon = h\nu$$

Импульс фонона

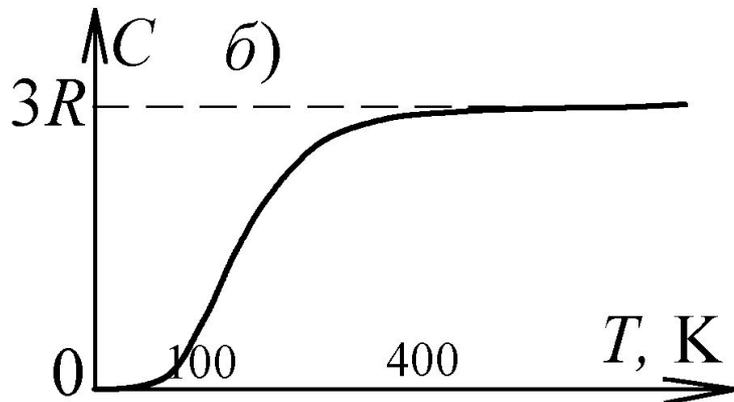
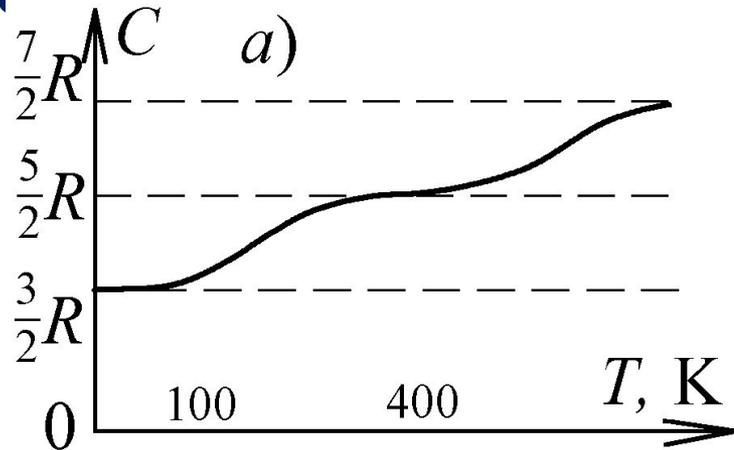
$$p = \hbar k$$

Фононы в твердом теле
наблюдались
в опытах по рассеянию
частиц на фононах



Колебания кристаллической решетки. Фононы

С помощью фононов объясняется зависимость **теплоемкости** твердых тел от **температуры**



Внутренняя энергия газа $dU = C dT$

Внутренняя энергия кристалла

$$U = \frac{3N h \nu}{\exp\left(\frac{h \nu}{k T}\right) - 1}$$

Формула Эйнштейна

Колебания кристаллической решетки. Фононы

Формула Эйнштейна

$$U = \frac{3N h \nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1}$$

Теплоемкость

$$C = \frac{dU}{dT} = \frac{3N h \nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \left(\frac{h\nu}{kT^2}\right) \exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)$$

1. Высокие температуры $kT \gg h\nu$: $C = 3Nk$
2. Низкие температуры

$$C = 3N \left(\frac{h^2 \nu^2}{kT^2}\right) \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)$$

Колебания кристаллической решетки. Фононы

Формула Эйнштейна

$$U = \frac{3N h \nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1}$$

Теплоемкость

$$C = \frac{dU}{dT} = \frac{3N h \nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \left(\frac{h\nu}{kT^2}\right) \exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)$$

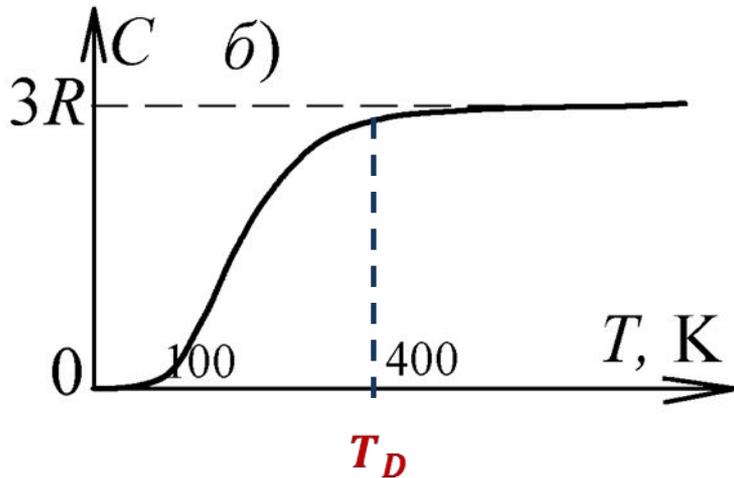
1. Высокие температуры $kT \gg h\nu$: $C = 3Nk$
2. Низкие температуры

$$C = 3N \left(\frac{h^2 \nu^2}{kT^2}\right) \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)$$

2. Колебания кристаллической решетки. Фононы

Для фононов в твердом теле существует максимальная частота, соответствующая *температуре Дебая* T_D

$$\varepsilon = h\nu_{max} = kT_D$$



T_D - температура при которой становится существенным квантование энергии колебаний

3. Квантовая теория электронов

В металле электроны движутся между ионами кристаллической решетки

Движение описывается уравнением Шредингера

Взаимодействием с ионами кристаллической решетки пренебрегаем

$$U(t) = \text{const} \quad \psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$$

$$E\varphi(t) = i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} \quad (10)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi(x) = 0 \quad (11)$$

$$\varphi(t) = C \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) \quad (12)$$

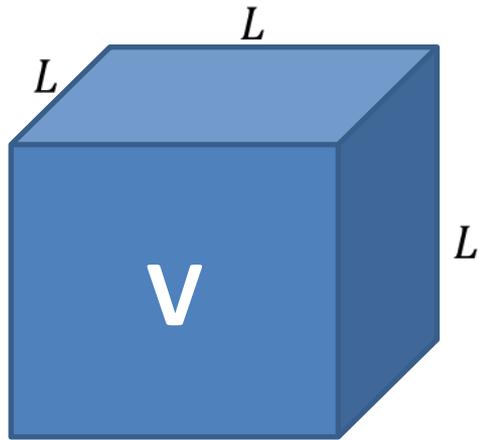
3. Квантовая теория электронов

Импульс электрона

$$p = \hbar k$$

Энергия

$$E = \frac{p^2}{2m}$$



$$dp = \psi \dot{\psi} dV$$

$$\int_V \psi \dot{\psi} dV = 1$$

или

$$\int_V \psi \dot{\psi} dV = \int_V C^2 dV = C^2 V = C^2 L^3 = 1$$

$$C = \sqrt{\frac{1}{L^3}}$$

$$\varphi(t) = C \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

3. Квантовая теория электронов

Движение электрона ограничено объемом металла, поэтому пси – функция на границе должна быть равна

нулю Квантование импульса частицы

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z$$

$$n_x, n_y, n_z = 0; \pm 1; \pm 2 \dots$$

Квантование энергии частицы

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{4m\pi} \frac{4\pi^2}{L^2} \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right)$$

Состояние электрона определяется тремя квантовыми числами и спином

3. Квантовая теория электронов

Одной и той же энергии могут соответствовать разные комбинация квантовых чисел – **уровни энергии вырождены**

Кратность вырождения - число вариантов n_x, n_y, n_z

Первому уровню энергии соответствует 12 вариантов

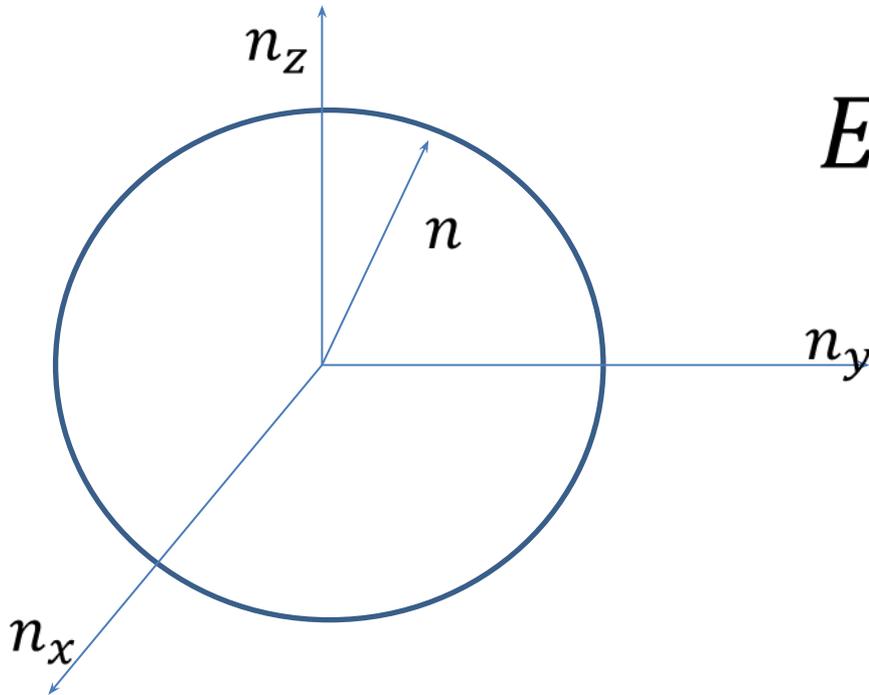
$$\begin{aligned}n_x &= \pm 1, \\n_y &= n_z = 0, \\n_s &= \pm \frac{1}{2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}n_y &= \pm 1, \\n_x &= n_z = 0, \\n_s &= \pm \frac{1}{2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}n_z &= \pm 1, \\n_x &= n_y = 0, \\n_s &= \pm \frac{1}{2}\end{aligned}$$

3. Квантовая теория электронов

Чем больше энергия, тем больше комбинаций квантовых чисел



$$E = \frac{h^2}{4m\pi} \frac{4\pi^2}{L^2} n^2$$

$$n = \frac{L}{h} \sqrt{2mE}$$

Число состояний энергия, которых не превышает \sqrt{E} равно удвоенному числу точек с целыми координатами, находящихся в сфере радиусом n

$$V_E = 2 \frac{4}{3} \pi n^3 = \frac{8}{3} \pi \left(\frac{L}{h} \right)^3 (2mE)^{\frac{3}{2}}$$

3. Квантовая теория электронов

Плотность числа состояний

$$g(E) = \frac{dV_E}{dE} = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{L}{h}\right)^3 (2m)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}$$

Заполнение энергетических уровней

Электроны стремятся занять состояния с наименьшей энергией, но в силу принципа запрета Паули: в одном состоянии может находиться только один электрон.

\tilde{n} - концентрация свободных электронов

$$V_E = \frac{8}{3} \pi \left(\frac{L}{h}\right)^3 (2mE)^{\frac{3}{2}} = \tilde{n}L^3$$

$$E = \frac{h^3}{16m\pi} (3\tilde{n})^{\frac{2}{3}}$$

3. Квантовая теория электронов

При абсолютной температуре равной нулю (отсутствие хаотического движения) электроны займут все состояния до некоторой энергии –

энергии Ферми
Для МЕТАЛЛОВ

$$E_F = 5\text{эВ}$$

Для электронов

$$E_{\text{ср}} = \frac{3}{5} E_F = 3\text{эВ}$$

$$E_{\text{ср}} = \frac{3}{2} kT = 3\text{эВ}$$

При абсолютном нуле средняя энергия электронов соответствует температуре 30000К.
Электроны заполняют все состояния до энергии Ферми

3. Квантовая теория электронов

Распределение электронов по энергетическим уровням подчиняется квантовой статистике Ферми – Дирака.

Вероятность заполнения энергетического уровня W при температуре T :

$$f_{II} = \frac{1}{e^{\frac{W_f - W}{kT}} + 1}$$

Уровень Ферми W_f – это средний энергетический уровень, вероятность заполнения которого электронами равен 0.5 при $T=0^0\text{K}$

3. Квантовая теория электронов

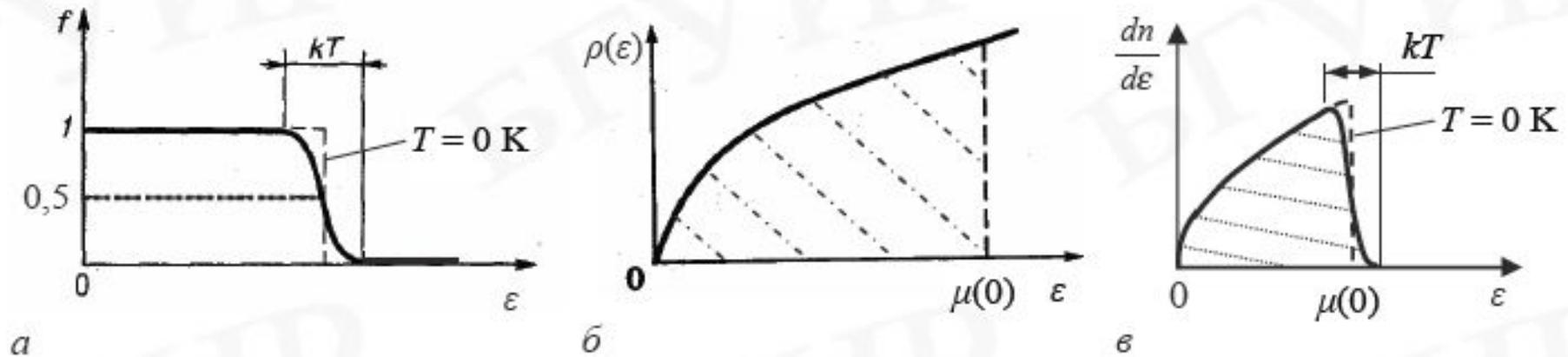


Рис. 30.6. К определению энергии Ферми:

- a* – зависимость функции распределения Ферми–Дирака от энергии электронов;
- б* – зависимость числа квантовых состояний на единицу энергии от энергии электронов;
- в* – функция распределения свободных электронов по энергиям