

ЛЕКЦИИ №24
Квантовая теория
теплоемкости твердых тел

(Для студентов элитного отделения ЭТО –II)



1) Твердые тела сохраняют форму и размеры.

2) Жидкости сохраняют объем, но не сохраняют форму. Жидкости текучи.

3) Газы не сохраняют форму и размеры.



ТИПЫ СВЯЗЕЙ В КРИСТАЛЛАХ

- 1) Ионная (гетерополярная) – в узлах расположены положительные и отрицательные ионы.
- 2) Ковалентная (гомеополярная) – в узлах нейтральные атомы.



ТИПЫ СВЯЗЕЙ В КРИСТАЛЛАХ

- 3) Металлическая - в узлах кристаллической решетки находятся положительные ионы, образуются они после отрыва от атомов свободных электронов

- 4) Молекулярные кристаллы - в них действуют ван-дер-ваальсовы силы притяжения и отталкивания



ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ

- 1) Атом может выйти из узла и занять положение между узлами (в междоузлии) – дефект по Френелю
- 2) Атом испаряется – уходит наружу – дефект по Шоттки
- 3) Примесные дефекты (атомы примеси в узлах)



КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ТЕПЛОЁМКОСТИ ТВЁРДЫХ ТЕЛ. ЗАКОН ДЮЛОНГА И ПТИ

Энергия трёхмерного классического осциллятора: $\varepsilon = 3kT$.

Тогда: $U = 3kT \cdot N_A = 3RT$, $C_V = \frac{dU}{dT} = 3R$.

Так как объем твердого тела при нагревании изменяется незначительно

$C_V \approx C_p$, отсюда $C = 3R$ – закон
Дюлонга и Пти



КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ТЕПЛОЁМКОСТИ ТВЁРДЫХ ТЕЛ ПО ЭЙНШТЕЙНУ

Модель Эйнштейна: кристалл рассматривается как система N атомов, каждый из которых является квантовым осциллятором. Колебания атомов происходят независимо друг от друга с одинаковой частотой.

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ТЕПЛОЁМКОСТИ ТВЁРДЫХ ТЕЛ ПО ЭЙНШТЕЙНУ

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \qquad U = 3N_A \bar{\varepsilon} = 3N_A \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

$$C = \frac{dU}{dT} = \frac{3kN_A \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1\right)^2} e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} = \frac{3R \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1\right)^2} e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}.$$

$$\hbar\omega \ll kT, C = 3R.$$

$$T \rightarrow 0, C = \frac{3R \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}} \rightarrow \frac{1}{T^2} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}.$$

ПОНЯТИЕ О ТЕОРИИ ТЕПЛОЁМКОСТИ ДЕБАЯ. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БОЗЕ- ЭЙНШТЕЙНА ДЛЯ ФОНОННОГО ГАЗА

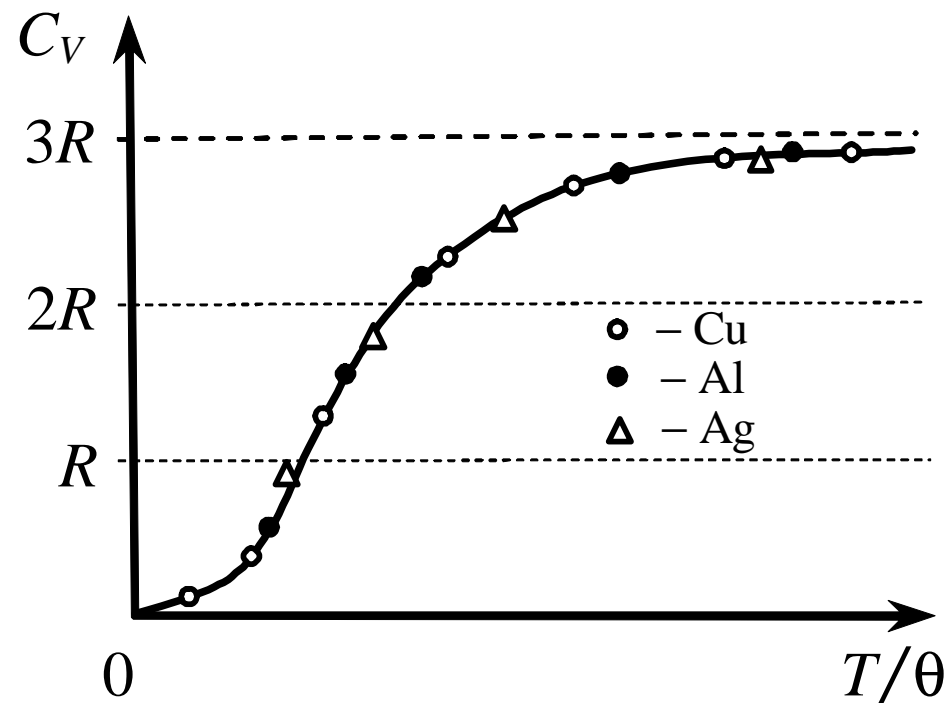
$$dn = \gamma f(\varepsilon) dZ \qquad dZ = \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} = \frac{4\pi v^2 dv}{v^3}.$$

$$dU = hv dn. \qquad f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1}. \qquad U = \int hv dn = \frac{12\pi h}{v^3} \int_0^{v_{\max}} \frac{v^3 dv}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1},$$

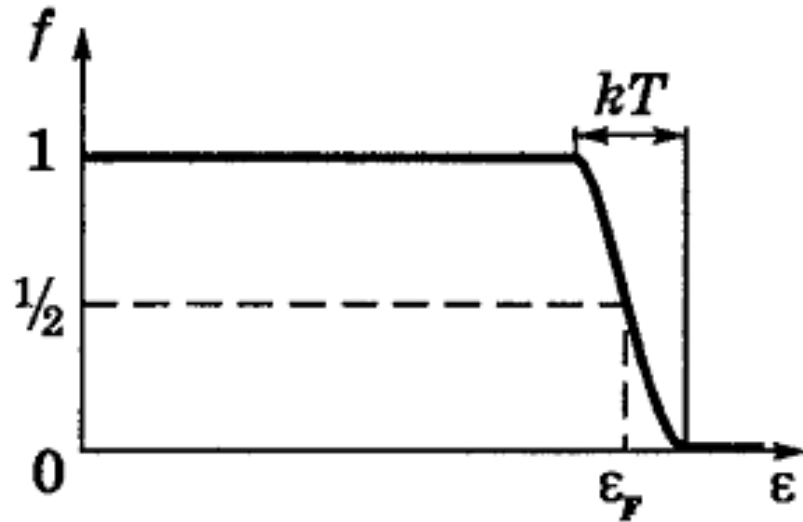
$$U = aT^4; \qquad a = \frac{3\pi^4 R}{5\theta_D^3}.$$

$$C = 4aT^3 = \frac{12\pi^4 R}{5\theta_D^3} T^3 \quad \text{— закон кубов Дебая}$$

Экспериментальная зависимость молярной теплоемкости твердых тел от температуры



Вклад электронного газа в теплоемкость твердого тела



$$C_{\text{реш}} = 3R.$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 \right]$$

$$C'_{\text{эл}} = N_A \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial T} = \frac{\pi^2}{2} \cdot \frac{kT}{\varepsilon_F} R.$$

$$\frac{C_{\text{эл}}}{C_{\text{реш}}} = \frac{\pi^2}{6} \cdot \frac{kT}{\varepsilon_F}$$

$$kT \ll \varepsilon_F$$