Здесь представлены слайды, которые показывались на лекциях по курсу «Введение в квантовую физику». Представленные на слайдах материал не является исчерпывающим и не отражает полного содержания курса! Поэтому данные слайды не могут являться основой для подготовки к экзамену!!! На слайдах могут быть опечатки, будьте внимательны.

# Список литературы (часть 1 и 2):

- Вихман Э. Квантовая физика. (Берклеевский курс физики, т.4.) М: Наука. 1974.
- Иродов И.Е. Квантовая физика. Основные законы. М: Бином, 2004. 256 с.
- Матвеев А.Н. Атомная физика. М: Высшая школа, 1989. 439 с.
- Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике, т.8, М: Мир, 1967. 272 с.
- Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике, т.9, М: Мир 1967. 260 с.

## Излучение абсолютно черного тела

### Формула Планка:



Постоянная Планка:  $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$  Дж · с

Закон смещения Вина:

$$\lambda_{\max}T = b = 0.2014 \frac{2\pi\hbar c}{k} = 2,897 \cdot 10^{-3} \text{ M} \cdot K$$

### Закон Стефана-Больцмана:

$$\rho = \alpha T^4$$
  $\alpha = \frac{\pi^2 k^4}{15\hbar^3 c^3} = 7,57 \cdot 10^{-16} \ \text{Дж} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{K}^{-4}$ 

## Внешний фотоэффект



### Законы фотоэффекта:

1. Существует граничная частота света, ниже которой для данного материала катода фотоэффект отсутствует, независимо от интенсивности падающего света и продолжительности облучения катода.

2. Электроны покидают поверхность катода с кинетическими энергиями от нуля до максимальной энергии, которая не зависит от интенсивности падающего света и линейно зависит от частоты.

3. При фиксированной частоте излучения фототок насыщения прямо пропорционален интенсивности падающего света.

### Формула Эйнштейна:

 $\hbar\omega = T_{\rm max} + 1$ 

## Эффект Комптона



### Если электрон покоится:

$$\Delta \lambda = \lambda_{K} \left( 1 - \cos \theta \right)$$

$$\lambda_{K} = \frac{h}{mc} = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ M}$$

Если электрон движется:

$$\Delta \lambda = \lambda_0 \frac{\left(p_{e0} + \frac{h}{\lambda_0}\right)c}{\sqrt{\left(mc^2\right)^2 + \left(p_{e0}c\right)^2} - p_{e0}c} (1 - \cos\theta)$$

## Тормозное рентгеновское излучение



### Частица в прямоугольной бесконечно глубокой яме



### Частица в прямоугольной бесконечно глубокой яме

$$\Psi_1(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right) \qquad x \in (0,L) \qquad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

#### Вычисление среднего значения и дисперсии координаты:

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{x} \Psi dx = \frac{L}{2} \qquad \left\langle x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{x}^2 \Psi dx = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\right)$$
$$D_x = \left\langle x^2 \right\rangle - \left\langle x \right\rangle^2 = L^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}\right)$$

### Вычисление среднего значения и дисперсии импульса:

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{p} \Psi dx = 0 \qquad \left\langle p^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{p}^2 \Psi dx = \frac{\pi^2 \hbar^2}{L^2} \qquad D_p = \left\langle p^2 \right\rangle - \left\langle p \right\rangle^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{L^2}$$

Проверка соотношения неопределенностей Гейзенберга:

$$\delta x \delta p = \sqrt{D_x D_p} = \hbar \sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} \approx 0,57\hbar > \frac{\hbar}{2}$$

### Частица в прямоугольной бесконечно глубокой яме

### Переход к импульсному представлению:

$$\psi(p) = \langle p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^*(x) \psi(x) dx =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2}{L}} \int_{0}^{L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = \frac{2\hbar\sqrt{\pi L\hbar}}{\left(\pi^2\hbar^2 - p^2L^2\right)} \cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{pL}{2\hbar}\right)$$
$$\rho(p) = |\psi(p)|^2 = \frac{4\pi\hbar^3L}{\left(\pi^2\hbar^2 - p^2L^2\right)^2} \cos^2\left(\frac{pL}{2\hbar}\right)$$

### Частица в нестационарном состоянии:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_1t\right) + \frac{i}{\sqrt{2}}\psi_2(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_2t\right)$$

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{x} \Psi dx \qquad \overline{x}(t) = L \left[ \frac{1}{2} - \frac{16}{9\pi^2} \sin\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right) \right]$$

### Частица в прямоугольной яме конечной глубины



$w'' - a^2 w - 0$ $a = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{4m(U_0 - E)}$
$\psi_{1,3} - q \ \psi_{1,3} - 0 \qquad q \qquad \hbar$
$\psi_1(x) = C_1 e^{qx}$ $\psi_3(x) = C_3 e^{-qx}$
$\psi_2'' + k^2 \psi_2 = 0 \qquad \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{1}$
$\psi_2(x) = C_2 \sin(kx + \delta) \qquad \hbar$
$\psi_1(0) = \psi_2(0) \implies C_1 = C_2 \sin \delta$
$\psi_2(L) = \psi_3(L) \implies C_3 e^{-qL} = C_2 \sin(kL + \delta)$
$\psi'_1(0) = \psi'_2(0) \implies qC_1 = kC_2 \cos \delta$
$\psi'_2(L) = \psi'_3(L) \implies -qC_3e^{-qL} = kC_2\cos(kL + \delta)$
$\cos \xi = \pm \gamma \xi$ $\xi \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \cup \left[\pi, \frac{3\pi}{2}\right] \cup \dots$
$\sin \xi = \pm \gamma \xi$ $\xi \in \left[\frac{\pi}{2}, \pi\right] \cup \left[\frac{3\pi}{2}, 2\pi\right] \cup \dots$
$\xi = \frac{kL}{2} \qquad \gamma = \frac{\hbar}{L} \sqrt{\frac{2}{mU_0}} \qquad E_n = \frac{2\hbar^2 \xi_n^2}{mL^2} \qquad n = 1, \dots, n_{\text{max}}$

### Частица в прямоугольной яме конечной глубины

Предельный случай бесконечно глубокой ямы:

$$U_0 \to \infty \implies \gamma \to 0 \implies \xi_n \to \frac{\pi n}{2} \implies E_n = \frac{2\hbar^2 \xi_n^2}{mL^2} \to \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

Предельный случай «мелкой» ямы:



Единственный уровень энергии:

$$E \approx U_0 \left( 1 - \frac{mL^2}{2\hbar^2} U_0 \right)$$

### Частица в прямоугольной яме конечной глубины



**Рис. 2.** Энергетические зоны на границе двух полупроводников – гетероструктуре.  $E^c$  и  $E^v$  – границы зоны проводимости и валентной зоны,  $E_g$  – ширина запрещенной зоны. Электрон с энергией меньше  $E_2^c$  (уровень показан красным цветом) может находиться только справа от границы



**Рис. 3.** Квантовая яма, сформированная в слое полупроводника с узкой запрещенной зоной, заключенном между двумя полупроводниками, обладающими более широкой запрещенной зоной



Рис. 6. Энергетическая схема лазера на квантовой яме



### Гармонический осциллятор



Сначала ищем асимптотическое решение при  $\xi \to \pm \infty$ 

$$\psi_{ass}''(\xi) = \xi^2 \psi_{ass}(\xi)$$

$$\psi_{ass}(\xi) = e^{-\xi^2/2}$$

Теперь ищем решение в виде

$$\psi(\xi) = \chi(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

$$\chi'' - 2\xi\chi' + 2n\chi = 0 \qquad 2n = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1$$

Это уравнение имеет решения в виде полиномов только если

$$n = 0, 1, 2, 3, ...$$
 Тогда  $E_n = \hbar \omega \left(\frac{1}{2} + n\right)$ 

### Гармонический осциллятор

### Основное состояние:

$$\chi_0(\xi) = a_0 = \text{const}$$
  $\left(\frac{2E_0}{\hbar\omega} - 1\right)a_0 = 0 \implies E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ 

$$\Psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2}$$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = a_0^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = a_0^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \implies a_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$
$$\psi_0(\mathbf{x}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right]$$
$$\rho_0(\mathbf{x}) = |\psi_0(\mathbf{x})|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right] - \mathbf{pacupe}_{\mathbf{z}} = \mathbf{pacupe}_{\mathbf{z}} = \frac{\pi}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

### Частица в б-образном потенциале

$$U(x) = A\delta(x) \qquad A = \text{const} < 0 \qquad E = -|E|$$

$$\psi'' + 2q\delta(x)\psi - k^{2}\psi = 0 \qquad k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \qquad q = \frac{m|A|}{\hbar^{2}}$$

$$x \in (-\infty, -\varepsilon) \cup (\varepsilon, \infty) \qquad \psi'' - k^{2}\psi = 0 \qquad \psi_{1}(x) = C_{1}e^{kx} \qquad \psi_{3}(x) = C_{3}e^{-kx}$$

$$\psi_{1}(0) = \psi_{2}(0) = \psi_{3}(0) \qquad C_{1} = C_{3} \equiv C \qquad \psi_{2}(0) = C$$

$$\frac{d\psi_{1}}{dx}\Big|_{x=-\varepsilon} = Cke^{-k\varepsilon} = \frac{d\psi_{2}}{dx}\Big|_{x=-\varepsilon} \qquad \frac{d\psi_{3}}{dx}\Big|_{x=\varepsilon} = -Cke^{-k\varepsilon} = \frac{d\psi_{2}}{dx}\Big|_{x=\varepsilon}$$

$$x \in (-\varepsilon, \varepsilon) \qquad \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi'' dx + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} 2q\delta(x)\psi_{2}(x) dx - \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} k^{2}\psi_{2}(x) dx = 0 \qquad k = q$$

$$E = -\frac{mA^{2}}{2\hbar^{2}} \qquad \psi(x) = Ce^{-q|x|} \qquad 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^{2} dx = 2|C|^{2} \int_{0}^{+\infty} e^{-2qx} dx = \frac{|C|^{2}}{q} = \frac{|C|^{2}\hbar^{2}}{m|A|}$$

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m|A|}}{\hbar} \exp\left(-\frac{m|A|}{\hbar^{2}}|x|\right)$$

### Рассеяние на прямоугольной ступеньке



### Рассеяние на прямоугольной ступеньке



### Рассеяние на прямоугольной ступеньке





### Рассеяние на прямоугольном барьере



Заметим, что T = 1 при  $k_2 L = \pi n$ , где n = 1, 2, 3...

### Рассеяние на прямоугольном барьере



#### α-распад ядра



### Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ)

Tip

Tunneling voltage

Sample

Piezoelectric tube with electrodes Control voltages for piezotube

Distance control

and scanning unit

Tunneling

current amplifier



#### Co islands on Cu(111)



42 x 42 nm<sup>2</sup>

Cu(001)

10 x 10 nm<sup>2</sup>



(a)



Data processing and display



## Рассеяние на б-образном потенциале A = const > 0E > 0 $U(x) = A\delta(x)$ $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \qquad q = \frac{mA}{\hbar^2}$ $\psi'' - 2q\delta(x)\psi + k^2\psi = 0$ $x \in (-\infty, -\varepsilon) \cup (\varepsilon, \infty) \qquad \psi'' + k^2 \psi = 0 \qquad \begin{cases} \psi_1(x) = e^{ikx} + A_{\text{отр}} e^{-ikx} & \text{при } x < -\varepsilon \\ \psi_3(x) = A_{\text{плош}} e^{ikx} & \text{при } x > \varepsilon \end{cases}$ при $x < -\varepsilon$ $1 + A_{\text{orp}} = A_{\text{прош}} = \psi_2(0)$ $\psi_1(0) = \psi_2(0) = \psi_3(0)$ $\psi'_{3}(+0) = ikA_{\text{прош}} = \psi'_{2}(+0)$ $\psi'_1(-0) = ik(1 - A_{orp}) = \psi'_2(-0)$ $\int_{0}^{\varepsilon} \psi'' dx - \int_{0}^{\varepsilon} 2q\delta(x)\psi_{2}(x)dx + \int_{0}^{\varepsilon} k^{2}\psi_{2}(x)dx = 0 \qquad 1 - A_{\text{orp}} = A_{\text{прош}} \left(1 - \frac{2q}{ik}\right)$ $A_{\text{прош}} = \left(1 + \frac{iq}{k}\right)^{-1}$ $T = \frac{1}{1 + \frac{mA^2}{2t^2 r}}$

### Квазистационарное состояние



# Список литературы (часть 3):

- Иродов И.Е. Физика макросистем. Основные законы. М: Бином, 2001. 196 с.
- Матвеев А.Н. Молекулярная физика. М: Высшая школа, 1981. 400 с.
- Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике, т.9, М: Мир, 1967. 260 с.
- Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М: Наука, 1978. 792 с.

# Квантовое описание системы многих частиц

$$\hat{H}\psi(x_{1}, x_{2}) = E\psi(x_{1}, x_{2})$$
Hевзаимодейс  

$$\hat{H} = \hat{H}_{1} + \hat{H}_{2} + U(x_{1}, x_{2})$$

$$\psi(x_{1}, x_{2}) = \psi_{a}$$

$$\psi(x_{2}, x_{1}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_{a}(x_{1}, x_{2}) = \frac{1$$

энергия взаимодействия Невзаимодействующие частицы

$$U(x_1, x_2) = 0$$
  

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)$$
  

$$\psi(x_2, x_1) = \psi_a(x_2)\psi_b(x_1) \neq \psi(x_1, x_2)$$

$$\psi_{S}(x_{1}, x_{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{a}(x_{1})\psi_{b}(x_{2}) + \psi_{a}(x_{2})\psi_{b}(x_{1}) \right\}$$

$$\psi_A(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_a(x_2) \psi_b(x_1) \}$$

Фермионы S=1/2, 3/2,...

## Фермионы

<b>FERMIONS</b> matter constituents spin = 1/2, 3/2, 5/2,							
Leptons spin =1/2				Quark	<b>S</b> spin	=1/2	
Flavor	Mass GeV/c <sup>2</sup>	Electric charge		Flavor	Approx. Mass GeV/c <sup>2</sup>	Electric charge	
VL lightest neutrino*	(0−0.13)×10 <sup>−9</sup>	0		U up	0.002	2/3	
e electron	0.000511	-1		d down	0.005	-1/3	
𝔑 middle neutrino*	(0.009-0.13)×10 <sup>-9</sup>	0		C charm	1.3	2/3	
μ muon	0.106	-1		S strange	0.1	-1/3	
𝔥 heaviest neutrino*	(0.04-0.14)×10 <sup>-9</sup>	0		t top	173	2/3	
τ tau	1.777	-1		b bottom	4.2	-1/3	

## Бозоны

Unified Electroweak spin = 1						
Name	Mass GeV/c <sup>2</sup>	Electric charge				
<b>Y</b> photon	0	0				
W	80.39	-1				
W <sup>+</sup>	80.39	+1				
W bosons	91.188	0				
Z boson						



## Распределения Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна

Частицы с полуцелым спином (фермионы) подчиняются статистике Ферми-Дирака с распределением

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{(E_k - \mu)/kT} + 1} \qquad 0 \le \langle n_k \rangle \le 1 \qquad \mu > 0$$

Частицы с целым спином (бозоны) подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна с распределением

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{(E_k - \mu)/kT} - 1} \qquad \langle n_k \rangle \ge 0 \qquad \mu \le 0$$

µ - химический потенциал, находится из условия нормировки

$$\sum_{k} \frac{1}{e^{(E_k - \mu)/kT} \pm 1} = N$$
 где  $N$  - полное число частиц

## Свойства распределения Ферми-Дирака



$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{(E_k - \mu)/kT} + 1} \langle n_k (E = \mu) \rangle = \frac{1}{2} E_F = \mu (T = 0)$$

для электронного газа в металлах:

$$E_F \sim 5 \Im B >> kT_k = \frac{1}{40} \Im B$$

$$T_F = \frac{E_F}{k} \sim 200T_k \sim 60000K$$

## Свойства распределения Бозе-Эйнштейна



# Характеристики электронного газа в металле при T=0

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$$

$$n = 5 \cdot 10^{22} c M^{-3} \implies E_F = 5 \Im B$$

$$< E >= \frac{\int_{0}^{E_{F}} E\sqrt{E}dE}{\int_{0}^{E_{F}} \sqrt{E}dE} = \frac{3}{5}E_{F} = 3$$
 ЭВ  $T \sim 4 \cdot 10^{4} K$ 

$$\upsilon_{\max} \equiv \upsilon_F = \sqrt{2E_F / m} = 1.3 \cdot 10^3 \, \text{km} / \text{cek} \neq 0 \qquad \upsilon_F \ll c$$
$$\lambda_F = \frac{h}{p_F} = \frac{h}{m\nu_F} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \, \text{Дж} \cdot c}{1.3 \cdot 10^6 \, (\text{m} / c) 0.9 \cdot 10^{-30} \, \text{ke}} = 5.5 \cdot 10^{-10} \, \text{m} = 5.5 \, \text{A}^{0}$$

## Электронный газ в металле при $0 < T \ll T_{F}$

#### Асимптотическое разложение интегралов вида

I =

Химический потенциал

 $I = \int_{0}^{\infty} \frac{F(E)dE}{e^{(E-\mu)/kT}+1}$  при

$$kT \ll \mu$$
 имеет вид:  
 $\int_{0}^{\mu} F(E)dE + \frac{\pi^{2}}{6} (kT)^{2} F'(\mu) + \dots$   
 $\mu(T) = E_{F} \left[ 1 - \frac{\pi^{2}}{12} \left( \frac{kT}{E_{F}} \right)^{2} \right]$ 

 $\left\langle E\right\rangle = \frac{3}{5}E_F + \frac{\pi^2}{4}\frac{\left(kT\right)^2}{E_F}$ 



Средняя энергия

Теплоемкость

## Конденсация Бозе-Эйнштейна

При температуре  $T = T_{BEC}$  химический потенциал бозонов становится равным нулю.

Распределение бозонов по энергии принимает вид:

$$f(E) = (2s+1)\frac{1}{n}\frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\frac{\sqrt{E}}{\exp\left(\frac{E}{kT_{BEC}}\right) - 1}$$

Из условия нормировки получим:

$$T_{BEC} = \frac{3,31}{\left(2s+1\right)^{2/3}} \frac{\hbar^2}{mk} n^{2/3}$$

Концентрация конденсата при  $T < T_{BEC}$  равна

$$n_{BEC} = n \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_{BEC}} \right)^{3/2} \right]$$

## Фотонный газ

Для фотонов 2S+1=2 из-за поперечности электромагнитной волны

$$dN_{\rm cocr} = 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} \qquad dN = \langle n \rangle dN_{\rm cocr} \qquad \langle n \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

$$E = \hbar \omega = cp \Longrightarrow dE = cdp$$

$$dN_{\rm cocr} = 2\frac{4\pi E^2}{(2\pi\hbar)^3 c^3} dE = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega$$

Спектральная плотность энергии (для единицы объема):

$$\rho(\omega,T) = \hbar\omega \langle n \rangle \frac{dN_{\text{cocr}}}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

Формула Планка !

## Колебания цепочки из одинаковых шариков



## Колебания цепочки из шариков двух сортов



$$\begin{aligned} -\omega^2 M_1 \zeta &= \beta \eta \left( e^{iqa} + e^{-iqa} \right) - 2\beta \zeta \\ -\omega^2 M_2 \eta &= \beta \zeta \left( e^{iqa} + e^{-iqa} \right) - 2\beta \eta \end{aligned} \begin{vmatrix} 2\beta - \omega^2 M_1 & -2\beta \cos qa \\ -2\beta \cos qa & 2\beta - \omega^2 M_2 \end{vmatrix} = 0 \end{aligned}$$

$$\omega_{\pm}^{2} = \beta \left( \frac{1}{M_{1}} + \frac{1}{M_{2}} \right) \pm \beta \sqrt{\left( \frac{1}{M_{1}} + \frac{1}{M_{2}} \right)^{2} - \frac{4 \sin^{2} qa}{M_{1}M_{2}}}$$

## Колебания цепочки из шариков двух сортов



# Переход от классического описания кристалла к квантовому. Фононы

Фононы – это квазичастицы со следующими характеристиками:

- 1) Энергия и импульс:  $E = \hbar \omega$   $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$
- 2) Macca: m = 0
- 3) Спин: *s* = 1
- 4) Объем квантового состояния:

$$\Delta p = \frac{\left(2\pi\hbar\right)^3}{V}$$

Тепловая энергия кристалла:

$$E_{\text{тепл}} = n_1 \hbar \omega_1 + n_2 \hbar \omega_2 + \ldots + n_N \hbar \omega_N$$

## Температура Дебая

Температура Дебая – это температура, при которой возбуждаются колебания на <u>всех</u> частотах:

$$k_{B}T_{D} = \hbar\omega_{\max}$$

Оценим температуру Дебая для фононов одной поляризации:

## Теплоемкость кристаллической решетки

Общий алгоритм вычисление теплоемкости



#### Классическая модель. Формула Дюлонга и Пти

TT – совокупность N независимых атомов, по 3 колебательных степени свободы на атом

$$E(T) = 3N_A \cdot k_B T$$



## Модель Эйнштейна

TT – совокупность 3N независимых *квантовых* осцилляторов, колеблющихся с *одинаковой частотой*  $\omega$  (или свободный газ фононов с законом дисперсии  $\omega$  = CONSt )

$$E = 3N_A \hbar \omega < n >= 3N_A \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1}$$



При высоких Т:  $k_B T >> \hbar \omega \Longrightarrow C = 3R$ 

При низких Т:  $k_B T \ll \hbar \omega$   $C \sim \frac{1}{T^2} e^{-\frac{\hbar \omega}{k_B T}} \rightarrow 0$ 

## Модель Дебая

Теплоемкость TT определяется как теплоемкость свободного газа фононов с *линейным законом дисперсии*  $\omega = c_{_{3B}}k$ 

Плотность состояний фононов равна

 $\frac{dn_{\text{сост}}}{d\omega} = \frac{3}{2}V \frac{\omega^2}{\pi^2 \overline{c}^3} \qquad \text{где } \overline{c} - \text{средняя скорость звука:} \\ \frac{3}{\overline{c}^3} = \frac{1}{c_{\parallel}^3} + \frac{2}{c_{\perp}^3}$ 

Число фононов в интервале частот (ω,ω+dω) на один атом кристалла:

$$f(\omega) = \frac{1}{N} \frac{dn_{\text{cocr}}}{d\omega} \langle n \rangle = \frac{3}{2n} \frac{\omega^2}{\pi^2 \overline{c}^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}$$

## Модель Дебая (продолжение)

Средняя энергия фононов на один атом кристалла

$$\langle E \rangle = \hbar \langle \omega \rangle = \int_{0}^{\omega_{\text{max}}} \omega f(\omega) d\omega = 9k \frac{T^4}{T_D^3} \int_{0}^{T_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$



При высоких Т:  $T >> T_D \rightarrow C = 3R$ 

При низких Т:  $T \ll T_D \rightarrow$ 

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

## Эффективная масса электрона

 $\omega = \omega(k)$  или E = E(p) вместо  $E = \frac{p^2}{2m}$ 



$$\left\{\frac{1}{m_{\rm spp}}\right\}_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}}$$

## Фермиевские электроны

Фермиевские электроны – это квазичастицы, описывающие движение электронов в периодической решетке, со следующими характеристиками:

1) Энергия и импульс:  $E = \hbar \omega$   $p = \hbar k$ 

- 2) Macca:  $m = m_{_{\Im \varphi \varphi}}$
- 3) Закон дисперсии:

$$E = \frac{p^2}{2m_{\rm solution}}$$

4) Спин: 
$$s = \frac{1}{2}$$

## Энергетические зоны в кристаллах

Одновалентные атомы: Li, Na, K, Cu ... - проводники



# Поверхность Ферми электронов в металлах





1-ая зона Бриллюэна

## Спиновые волны в одномерной цепочке

Гамильтониан Гейзенберга:

$$H = -\frac{2J}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{N} \mathbf{s}_n \mathbf{s}_{n+1} = -J \sum_{n=1}^{N} \left( \hat{P}_{n,n+1} - 1 \right)$$

Уравнение Шредингера в матричной форме:

$$i\hbar \frac{\partial a_n}{\partial t} = -Ja_{n-1} + 2Ja_n - Ja_{n+1}$$

Ищем решение в виде бегущей волны:

$$a_n(t) = Ce^{i(kan-\omega t)}$$

J > 0

Закон дисперсии спиновой волны:

$$E(k) = 2J \left[ 1 - \cos(ka) \right] \approx Ja^2 k^2$$

Эффективная масса спиновой волны:

$$m_{\rm spp} = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}$$

## Магноны в ферромагнетике

Магноны – это квазичастицы, описывающие распространение спиновых волн в ферромагнетике, со следующими характеристиками:

1) Энергия и импульс:  $E = \hbar \omega$   $p = \hbar k$ 



4) Спин: s = 0  $\mu = 0$ 

Магноны движутся в кристалле, как свободные бозоны с массой  ${\it m}_{
m sdd}$ 

## Плотность состояний магнонов



Число магнонов в интервале частот (ω,ω+dω) на один атом кристалла:

$$f(\omega) = \frac{1}{N} \frac{dn_s}{d\omega} \overline{n} = \frac{\sqrt{\omega}}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{Ja^2}\right)^{3/2} \frac{1}{n} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right) - 1}$$

# Намагниченность ферромагнетика при низкой температуре

При T = 0 К намагниченность кристалла равна:  $M_0 = \mu_B n$ 

А при температуре отличной от нуля:  $M = \mu_{B} n - 2 \mu_{B} n_{\text{маг}} = M_{0} - \left| \Delta M \right|$ 

Тогда

$$\frac{\left|\Delta M\right|}{M_{0}} = 2\frac{n_{\text{mar}}}{n} = 2\int_{0}^{\omega_{\text{max}}} f(\omega)d\omega = \frac{1}{2\pi^{2}n} \left(\frac{\hbar}{Ja^{2}}\right)^{3/2} \int_{0}^{\omega_{\text{max}}} \frac{\sqrt{\omega}d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{B}T}\right) - 1} \approx \frac{1}{2\pi^{2}} \left(\frac{\hbar}{J}\right)^{3/2} \left(\frac{k_{B}T}{\hbar}\right)^{3/2} \int_{0}^{\infty} \frac{\sqrt{x}dx}{e^{x} - 1} = \frac{1}{2\pi^{2}} \left(\frac{k_{B}T}{J}\right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$$

– закон Блоха

$$\frac{\left|\Delta M\right|}{M_0} \approx 0.118 \left(\frac{k_B T}{J}\right)^{3/2}$$

# Вклад магнонов в теплоемкость ферромагнетика при низкой температуре

Средняя энергия магнонов на один атом кристалла:

$$\overline{E} = \int_{0}^{\omega_{\text{max}}} \hbar \omega f(\omega) d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{Ja^2}\right)^{3/2} \frac{1}{n} \int_{0}^{\omega_{\text{max}}} \frac{\omega^{3/2}}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right) - 1} d\omega \approx$$
$$\approx \frac{\hbar}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{J}\right)^{3/2} \left(\frac{k_BT}{\hbar}\right)^{5/2} \int_{0}^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1} = \frac{k_B T^{5/2}}{4\pi^2} \left(\frac{k_B}{J}\right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \zeta\left(\frac{5}{2}\right)$$

$$\overline{E} = 0,045k_B \left(\frac{k_B}{J}\right)^{3/2} T^{5/2}$$

Тогда

$$C_{V} = N_{A} \frac{d\overline{E}}{dT} = \frac{5}{2} N_{A} \frac{\overline{E}}{T}$$

$$C_V = 0,113R \left(\frac{k_B T}{J}\right)^{3/2}$$