

Физика твердого тела.

1. Модели Фрэнкля и Зоммерфельда.
2. Виды кристал. реш.
3. Кристаллическая решетка.
4. Фононы.

Введение ФТД - физика металлов.

10^4 раз: $H^+ e^- \rightarrow k_B T \sim 1 eV$

газ: $H^+, 2e^- \rightarrow He \rightarrow Z_{eff}$; $k_B T \gg E_{взвм.}$

4.2 K - жидкость He - жидк.

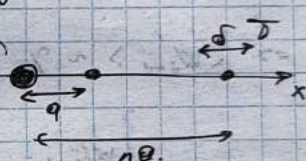
жидкость (длинный порядок.)

0 K

Если уменьшать темп. металл жидк., назыв. длинный порядок. (кристалл)

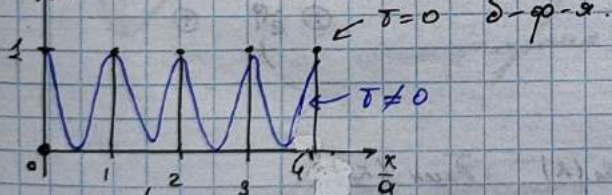
Если я знаю координ. x атома. Тогда другие с вер-но ~ 1 могу знать/реш. других. (длинный порядок.)

$$a \sim 1 \div 3 \text{ \AA}$$

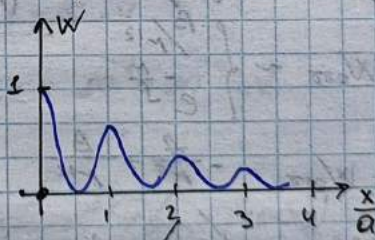


Под действием T атомов будет колебаться. Для этого необход. $k_B T \ll E_{взвм.}$ (атом. коор. $\delta \ll a$.)

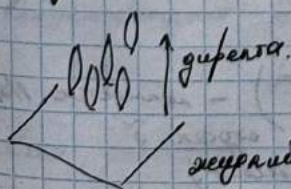
$W \leftarrow$ м-го вер-ти



Кристалл (длинный порядок.)



Аморфное тело (а-тел-ое среднее расст-е.) Длинный порядок.



жидкий кристалл (что-то среднее.)

Энергия связи

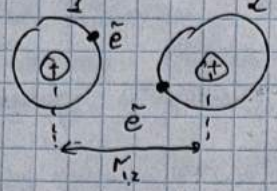
$E_{взвм.} \equiv E_{связи}$

В основе такой энергии много для взаимодействия.

Два взаимовзаимодействия;

1) Ван-дер-Ваальса ($He_2 \rightarrow \text{гидр} He$) - взаим. между молекулами
 $N_2 \rightarrow \text{атом} N$ (молекулярные силы)
 В атом. м.в. есть дип. моменты.
 Но в формуле: $\langle \vec{p}(t) \rangle = 0$

Возьмем 2 атома:



$\langle \vec{p}_{1,2}(t) \rangle = 0$
 $p_i(t) \rightarrow E_i \sim \frac{A_i(t)}{r_{i,2}^3}$

$W_{1-2}(t) \sim p_2(t) \cdot E_1(t) = \frac{p_1(t) p_2(t)}{r_{12}}$

$\langle W_{1-2}(t) \rangle = \left\{ \begin{array}{l} \text{если считать} \\ \text{св. незав.} \end{array} \right\} = \frac{\langle p_1 \rangle \langle p_2 \rangle}{r_{12}} = 0$

Но! 2-й атом находясь в поле 1-го поляризуется. $\rightarrow$ дип. момент второго меняется:

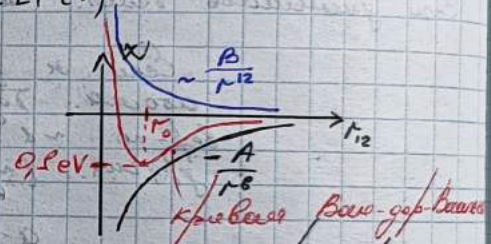
$p_2'(t) = p_2(t) + \chi \cdot E_1(t)$

тогда:

$W_{1-2} \sim p_2'(t) E_1(t) = p_2(t) \cdot E_1(t) + \chi E_1^2(t)$

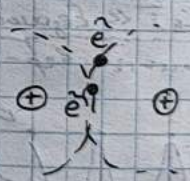
$\Rightarrow \langle W_{1-2} \rangle \sim \chi \langle E_1^2(t) \rangle \sim \chi \cdot \frac{1}{r_{12}^6}$

$\left\{ W_{1-2} = W_{прив} = - \frac{A}{r_{12}^6} \right\}$



Каждое, что атомам выгодно сближаться. Но при приближении e^- отбрасывается / прерыв. и возникает сильное отталкивание + есть функция запрета Паули.

$W_{отт} \sim \left\{ \begin{array}{l} B/r_{12} \\ e^{-\frac{r}{\rho}} \end{array} \right.$



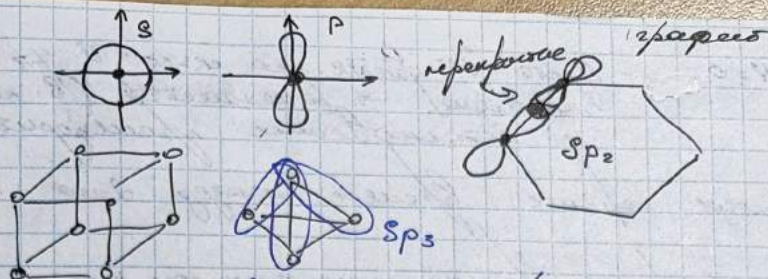
$W_{прив} + W_{отт} = - \frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}$

Характере диссоц.	He	$T_{пл.в.} (K)$	$T_{кип.} (K)$
	He	1,8	4,2
	Ne	6,3	27

2) Ионная связь. (например $NaCl = Na^+ + Cl^-$) - полностью Na отдает e^-
 $W \sim \frac{e^2}{r_n}$ (самая сильная)

$NaCl$: $T_{кип.} = 1463 K$
 $T_{пл.в.} = 1074 K$

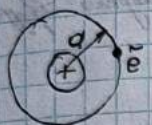
3) Ковалентная связь: As_2, P_5 (и др. группы) $\sim e^-$ отбрасывается совместно (слабее ионной)
 Энергия $(C) 132, 232, 2P_2$



Графит: $T_{\text{пл}} = 4473 \text{ K}$.

Алмаз: более прочные связи.
Тплвн: - сублимация.

1) Квантовая связь. - имеет $\tilde{\epsilon}$ привязанности к атомам, имеет свободу. $\tilde{\epsilon}$ - общее для всех кристаллов.



Почему такая иррациональная энергия? Ограничен $\tilde{\epsilon}$ от атома $\rightarrow$ увелич. энергии.

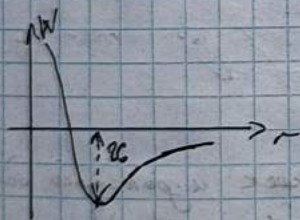
Из принципа неопределенности: $p \sim \frac{h}{a} \rightarrow W_k \sim \frac{p^2}{2m_e}$

Если $\tilde{\epsilon}$ общается на весь объем: $p_L \sim \frac{h}{L} \rightarrow W_k^L \sim \frac{p_L^2}{2m_e} \ll W_k$

Na: $T_{\text{плвн}} 371 \text{ K}$; $T_{\text{пл}} \sim 830 \text{ K}$.

W: $T_{\text{плвн}} \sim 3690 \text{ K}$; $T_{\text{пл}} \sim 6000 \text{ K}$.

Приводит к разд св-в: 1) теплопроводность
2) электропроводность
3) блеск.



Полное, собственное значение: $W_0 \sim 10 \text{ eV}$

Алмаз: $W_0 \sim 1-10 \text{ eV}$

Монокристалл: $W_0 \sim 10^{-2} - 10^{-3} \text{ eV}$

Шорел свободных электронов Дирак (1900)
(независимых)

Концентрация $\tilde{\epsilon}$ в металле: $n_e \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$
 $n_e \sim 1-2 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$

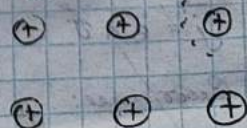
расст-е между $\tilde{\epsilon}$



разное поведение

Если сравнить с газом: $T = 300 \text{ K} \rightarrow n \sim \frac{N_A}{V^{28,41}} \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$
 $\rho = 1 \text{ г/см}^3$

Предполагается, что теория для газов можно применить к металлам. Пренебрегаем $\tilde{\epsilon}$ взаимодействием! (незав. $\tilde{\epsilon}$) в курсе не будем идти глубже, или можно проигнорировать. Свободные $\tilde{\epsilon}$: не учитывать их полное взаимодействие.



$E = H = 0$. Пусть $\vec{v}$ — фазов. со к-по $\vec{v} \rightarrow$ левый поворот
на атом. $\rightarrow$ рассеивается. (в лоб. столкн. $\langle \vec{v} \cdot \vec{v} \rangle = 0$)
и столкновение происходит хаотично.

Возвращая хар-ное время между двумя послед. столкновениями τ .

τ — $\left\{ \begin{array}{l} \text{хар-ное время между двумя посл. сток.} \\ \text{время релаксации} \\ \text{время свободного пробега} \end{array} \right.$
тепловая.

$$\frac{m v_T^2}{2} \approx \frac{3}{2} k_B T ; \quad \ell = v_T \tau \quad \text{длина свободного пробега. (средн. длин. пути Физм.)}$$

Если $T \approx 300 \text{ K}$. $\rightarrow v_T \sim 10^5 \frac{\text{см}}{\text{с}}$

Уравнение Фоккера-Планка

Пусть в произв-то t известен импульс $\vec{p}$: $\vec{p}(t)$; $\vec{F}(t)$
Рассм-м время $t+t$: $\vec{p}(t+t) = ?$ или
 τ вер-ть: $\sim e^{-\frac{t}{\tau}}$, что $\vec{p}$ исполняет условие

Если δ не исполняется:

$$\vec{p}(t+t) = e^{-\frac{t}{\tau}} (\vec{p}(t) + \vec{F}(t)t + (t)^2) \quad dt \ll \tau$$

$$\vec{p}(t+dt) \approx (1 - \frac{dt}{\tau}) (\vec{p}(t) + \vec{F}(t)dt) \approx \vec{p}(t) - \frac{\vec{p}(t)}{\tau} dt + \vec{F}(t)dt + \dots$$

$$\frac{\vec{p}(t+dt) - \vec{p}(t)}{dt} + \frac{\vec{p}(t)}{\tau} = \vec{F}(t)$$

$$\Rightarrow \left\{ \frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{\vec{p}}{\tau} = \vec{F}(t) \right\}$$

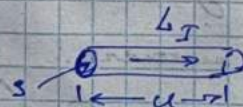
Если $\vec{F} = 0 \Rightarrow \vec{p}(t) \sim e^{-\frac{t}{\tau}} \sim$ затухает как и должно быть.

Если учесть силу Лоренца: $\left\{ \vec{F} = e(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v} \times \vec{H}]) \right\}$

Задача. Статическая проводимость металла и з-н Ома.

Пусть: $\vec{E}$; $\vec{H} = 0$

З-н Ома: $U = R \cdot I$



$$I = j \cdot S ; \quad U = E \cdot L$$

$$\Rightarrow E \cdot L = R \cdot j \cdot S$$

$$\Leftrightarrow \vec{E} = \left(\frac{RS}{L} \right) \vec{j}$$

$$\text{где } R = \rho \frac{L}{S}$$

или $\boxed{\vec{j} = \sigma \vec{E}}$

$$\vec{j} = \tilde{e} n \vec{v} \quad (1) = \frac{\tilde{e} n}{m} \vec{p}$$

Сила/масс:

маленькое
модуль $\langle \vec{v} \rangle = 0$
сильно,
суперпозиции

$$\frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{\vec{p}}{\tau} = e\vec{E} \quad (2)$$

$$\Rightarrow \vec{p} = e\tau\vec{E}$$

$$\Rightarrow \vec{j} = \frac{e n \tau}{m} \vec{E}$$

Тогда полев. дрейфов. $\rightarrow$ скорость в среднем
не меняется. $\Rightarrow \frac{d\vec{p}}{dt} = 0$

$$\left. \begin{aligned} v_0 &= \frac{e n \tau}{m} \end{aligned} \right\} \text{норматив. электрофиз. металлов.}$$

Оценки: при $T = 300 \text{ K}$, $\rho \sim 1 \text{ мкОм} \cdot \text{см} \sim 10^{-8} \text{ О} \cdot \text{см}$ [ср.]

$$\left. \begin{aligned} \text{Типичный металл при комнат. темпер.} \\ \Rightarrow \sigma \sim 10^{18} \text{ е}^{-1} \\ n_e \sim 10^{23} \text{ см}^{-3} \\ \tilde{e} = 4,8 \cdot 10^{-10} \text{ см}^{1/2} \cdot \text{е}^{1/2} \cdot \text{е}^{-1} \\ m = 9,1 \cdot 10^{-28} \text{ г} \end{aligned} \right\}$$

$$\tau \sim 10^{-14} \text{ с}$$

$$v_d \sim 10^7 \frac{\text{см}}{\text{с}} \Rightarrow \vec{v} \sim v_d \cdot \tau \sim 10^7 \text{ см} = 10 \text{ Å}$$

Вывод: ВЧ проводимость. Составить $\vec{v}$ - ? Если $H=0$, а $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\omega t} + \text{к.с.}$

$$\vec{E}(t) = \text{Re} \{ \vec{E}_0 e^{i\omega t} \} \Rightarrow \vec{p}(t) = \text{Re} \{ \vec{p}_0 e^{i\omega t} \}$$

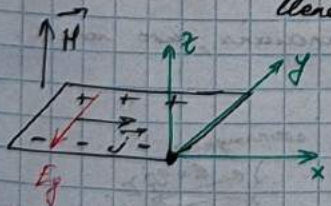
$$\Rightarrow i\omega \vec{p}_0 + \frac{\vec{p}_0}{\tau} = e\vec{E}_0 \Rightarrow \vec{p}_0 (i\omega + \frac{1}{\tau}) = e\vec{E}_0$$

$$\vec{j} = \frac{en}{m} \vec{p}_0 = \frac{en}{m} \frac{e\tau\vec{E}_0}{1+i\omega\tau} = \frac{\frac{en^2\tau}{m}}{1+i\omega\tau} \vec{E}_0 = \frac{\vec{j}_0}{1+i\omega\tau} \vec{E}_0$$

Комплексная проводимость: $\vec{j} = \frac{\vec{j}_0}{1+i\omega\tau}$

Эффект Холла. Если проводник, по которому течет ток, помещен в магнитное поле, то возникает поперечная ЭДС.

12.09.23



$$\vec{j} = j_x \cdot \vec{x}_0$$

$$[\vec{v} \times \vec{H}] = \begin{vmatrix} \vec{x}_0 & \vec{y}_0 & \vec{z}_0 \\ v_x & v_y & v_z \\ 0 & 0 & H \end{vmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{dp_x}{dt} + \frac{p_x}{\tau} = eE_x + \frac{e}{m} p_y H \\ \frac{dp_y}{dt} + \frac{p_y}{\tau} = eE_y - \frac{e}{m} p_x H \end{cases}$$

$$j_x = \frac{en}{m} p_x = \frac{en}{m} \frac{em}{H} E_y$$

$$\Rightarrow E_y = \frac{H}{en} j_x = \left(\frac{1}{en} \right) H j_x$$

$R_H \sim$ коэф-т Холла.

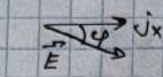
Для измерения n можно использовать коэф-т Холла с помощью холла

R_H зависит от знака носителей заряда.
Во многих материалах носителями явл.
электроны.

Иногда вводят угол Холла:

т.к. возникает рел. поле, то
суммарное поворачивается.

$$\Rightarrow \tan \varphi = \frac{E_y}{E_x} = \frac{H}{4\pi n e} \cdot \frac{E_x}{E_x} = \frac{H}{4\pi n e}$$



Направлении $\vec{E}$ отн. поля.

$j_x = \sigma_0 E_x$ — в экстр-те
Холла сбалансировано.

$\Rightarrow \tan \varphi = \frac{E_y}{E_x} = \omega_c \tau$

частоты вращающего по окружн. под
действием магн. поля.

Что если частота бесконечнобольшая? $\tau \gg 1$.

$\Rightarrow \tan \varphi \rightarrow \infty \Rightarrow \varphi = \frac{\pi}{2}$

$\rho = \frac{1}{\sigma}$ — магн. сопротивление.

Но парам. джурз, габарит, к-то
по в. жизни не так!



В ферромагн. материалах, магн. поле
будет влиять на поле.

т.е. когда было вращение — магн. поле
должно было считаться (уже и влиять)

Дж: Есть масса и электрич. поля $\vec{E}, \vec{H}$. Связь с полем
описывается тензором:



$j_i = \sigma_{ik} E_k$

какой тензор проводимости σ_{ik}

как будет влиять $\vec{E}$ в ферромагн. полях?

Дизъюнкционная проводимость
металлов.

(*) $\frac{d\vec{p}}{dt} + \vec{F} = \vec{f}(\vec{r}, t)$ — всё что мы делали — фазовые, что поле
диффузно.

$\vec{f} = e(\vec{E} + \frac{1}{c}[\vec{v} \times \vec{H}])$ — в общем виде можно.

Можно рассматривать уравнение диффузии.

L — характерный масштаб. Если выполняется

$L \gg L$ — можно уменьшить поле преобразованием.

магн. поле, поле.

Пусть есть плоская волна.

$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\vec{r} - i\omega t}$

$\vec{H} = \vec{H}_0 e^{i\vec{k}\vec{r} - i\omega t}$

$\kappa = \frac{2\pi}{\lambda}$

Можно показать, что в
свободном пр-ве амплитуда
 $E_0 = H_0$.

+ В ферромагн. случае можно преобразовать $\vec{E}[\vec{v}, \vec{H}]$

$$\Rightarrow \frac{\sigma}{c} \ll 1 \quad \text{и} \quad \lambda \gg L = v\tau$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div} \vec{E} = 4\pi\rho \\ \operatorname{div} \vec{H} = 0 \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow i\vec{k}\vec{E}_\omega = 4\pi\rho_\omega$$

$$i\vec{k}\vec{H}_\omega = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

$$\vec{j} = \tilde{\sigma} n \vec{v} = \frac{\tilde{\sigma} n}{m} \vec{p}$$

$$\operatorname{rot} \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$$

$$-i\omega\rho_\omega + i\vec{k}\vec{j}_\omega = 0$$

$$\vec{j}_\omega = \frac{\tilde{\sigma} n}{m} \vec{p}_\omega$$

$$[i\vec{k} \times \vec{H}_\omega] = \frac{4\pi}{c} \vec{j}_\omega - \frac{i\omega}{c} \vec{E}_\omega$$

$$[i\vec{k} \times \vec{E}_\omega] = \frac{i\omega}{c} \vec{H}_\omega \quad / \cdot [i\vec{k} \times]$$

$$-i\omega\rho_\omega + \frac{\rho_\omega}{\tau} = \tilde{\sigma} E_\omega$$

$$\rho_\omega (*) :$$

$$\Rightarrow \rho_\omega = \frac{\tilde{\sigma}}{1 - i\omega\tau} E_\omega$$

В итоге получаем:

$$\vec{k}(\vec{k} \cdot \vec{E}_\omega) - \kappa^2 \vec{E}_\omega = -\frac{4\pi\omega}{c^2} \rho_\omega \vec{E}_\omega - \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}_\omega$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{k}(\vec{k} \cdot \vec{E}_\omega) - \left[\kappa^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + \frac{4\pi i \tilde{\sigma} \tau}{\omega} \right) \right] \vec{E}_\omega = 0}$$

Рассмотрим два случая:

$$1) \vec{k} \perp \vec{E}_\omega \Rightarrow \kappa^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + \frac{4\pi i \tilde{\sigma} \tau}{\omega} \right)$$

поперечные волны

$$\vec{v}_\omega = \frac{\tilde{\sigma}}{1 - i\omega\tau}; \quad \vec{v}_0 = \frac{\tilde{\sigma} n \tau}{m}$$

$$\text{Если } \omega\tau \gg 1: \kappa^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right)$$

~ бесстокновительная плзма

$$\text{где } \omega_p^2 = \frac{4\pi \tilde{\sigma}^2 n}{m}$$

$$\omega < \omega_p: \kappa = \pm i \frac{\omega_p}{c}$$

~ чисто мнимый

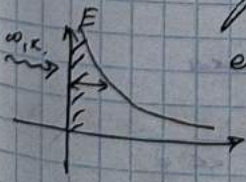
=> волны в металле не распространяются

$$\text{Например: } n = 10^{23} \text{ см}^{-3} \Rightarrow \omega_p \sim 10^{16} \text{ с}^{-1} \Rightarrow f_p = \frac{\omega_p}{2\pi} = 10^{15} \text{ Гц}$$

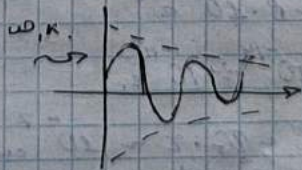
$$\text{Если } \omega \approx \omega_p \Rightarrow \lambda \sim 10^8 \text{ см}$$

~ рентгеновское излучение

=> Свет не проникает в металл, т.е. отражается



если κ - мнимый



$$2) \vec{k} \parallel \vec{E}_\omega$$

$$\Rightarrow \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + \frac{4\pi i \tilde{\sigma} \tau}{\omega} \right) = 0$$

Аналогично рассмотрим высокие частоты: $\omega\tau \gg 1$

$$\frac{\omega^2}{c^2} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right) = 0 \Rightarrow \omega = \omega_p \sim \text{плазменные колебания. (колеблется как упругое)}$$

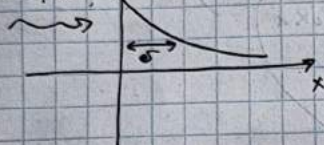
т.е. колеблется гармонично.

Скин-эффект.

Получили:

$$\kappa^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right) \quad \omega \ll \omega_p \Rightarrow \kappa = \pm i \frac{\omega_p}{c}$$

ω, κ металл



$\Rightarrow$ Поле затухает в металле. Но есть пробка. Это непонятно уравнение:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{\vec{p}}{\tau} = e\vec{E} \quad \leftarrow \text{работает если поле ден. на вышр. максимуме.}$$

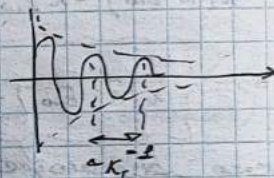
т.е. необходимо $\delta \gg l$ - длиной свободного пути электрона.

1) Нормальная скин-эффект.

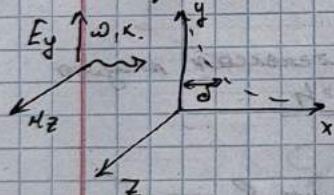
$$\kappa^2 = \frac{4\pi i \gamma \omega}{c^2} \quad (\text{где } \gamma = \frac{\gamma_0}{1 - i\omega\tau} \gg \omega)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{4\pi i \gamma \omega}{c^2}} (1 + i) = \kappa_1 + i\kappa_2$$

$$\Rightarrow \delta = \kappa_2^{-1} \sim \text{глубина скин-слоя.}$$



Поверхностный ток.



$$\chi = \frac{E_y(0)}{\int_0^\infty dx j_y(x)} = \frac{1}{c} \frac{E_y(0)}{H_z(0)} = \frac{1}{c} \frac{\omega}{\kappa}$$

Для вычисления ток. ур-я Максвелла. $\frac{dH_z}{dx} = \frac{1}{c} \frac{dE_y}{dt}$

Поверхностный ток можно найти

$$\text{Оценки: } \omega \tau \gg 1; \quad \delta = \kappa_2^{-1} = \sqrt{\frac{c^2}{4\pi \omega \gamma_0}} = \frac{c}{\omega_p} \sqrt{\frac{2}{\omega \tau}}$$

$$\omega_p = \frac{\omega_p}{2\pi} \sim 10^{15} \div 10^{16} \text{ с}^{-1}$$

$$\lambda = 3 \text{ см} \rightarrow \omega \sim 8 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$$

$$\tau \sim 10^{-14} \div 10^{-15} \text{ с.}$$

$$\Rightarrow \delta \sim 2 \cdot 10^{-7} \text{ см} \sim 2 \text{ нм}$$

Есть формула: $l \sim v_F \cdot \tau \sim 10^{-7} \text{ см.}$ ($T = 300 \text{ К.}$)

То есть при температуре T :

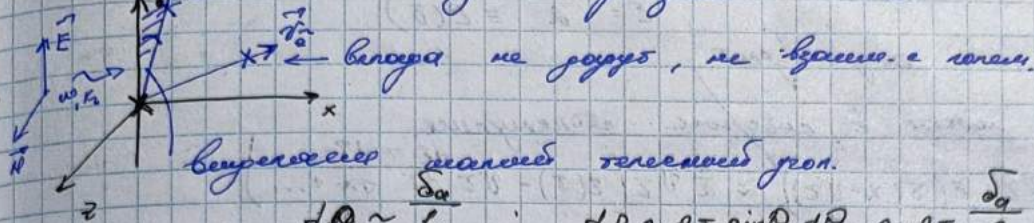
$$R = \left| \frac{n - s}{n + s} \right|^2, \quad n = \sqrt{\epsilon}$$

коэф-т отражения:
 $|R| \rightarrow 1$

2) $\delta = \sqrt{\frac{c^2}{2\pi\omega\epsilon}} \sim \sqrt{\frac{1}{\omega\epsilon}}$, если $T \downarrow \rightarrow \epsilon \uparrow$
 если $\omega \uparrow \rightarrow \delta \downarrow$ нормальный.

Рассмотрим $l \gg \delta_n$ - атомарный слой - эффект.

Предположим $\vec{E}$ соприкасается фазой на фазовую
 в этой точке фазовый фронт.



векторный элемент телесного угл.

$d\Omega \sim \frac{\delta_a}{l}$; $d\Omega \sim 2\pi \sin\theta d\theta \sim 2\pi \frac{\delta_a}{l}$

эффективная плотность заряда:

$\rho_{эф} \sim n \frac{dQ}{dV} \sim n \frac{e}{\delta_a}$
 $\vec{r}_{эф} = \frac{e^2 \rho_{эф} \vec{r}}{m} = \frac{e}{\delta_a} \frac{r}{r_0}$
 $\delta_a^2 = \frac{e^2}{2\pi\omega\epsilon_0} = \frac{e^2}{2\pi\omega\epsilon_0} \cdot \frac{l}{\delta_a}$

плотность телесн. угл. $\Rightarrow \delta_a^3 = \delta_n^2 l \Rightarrow \delta_a = \sqrt[3]{\delta_n^2 l}$

$Z_a \sim \frac{\epsilon_0 \omega}{e^2} \kappa$; $\kappa \sim \frac{1}{\delta_a} \Rightarrow Z_a \sim 2 \left(\frac{2\pi\omega}{c} \right)^{2/3} \left(\frac{l}{r_0} \right)^{1/3}$

Нужно потребовать $\delta_a \ll l$, т.е. телесный угл. афр. $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta = l$
 т.е. $\theta \sim \frac{\pi}{2}$

$\frac{c^2 l}{2\pi\epsilon_0 \omega} \ll l^3 \Rightarrow \omega \gg \frac{e^2 \rho}{2\pi\epsilon_0 c^2 l^3}$

Пример: $v \sim \frac{p}{m} \sim 10^8 \frac{см}{с}$

$l \sim 1 \text{ нм}$

$n \sim 10^{22} \text{ см}^{-3} \rightarrow \omega_p \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$

$\omega \gg 10^{10} \text{ с}^{-1} \ll \omega_p \Rightarrow Z \sim 10^{-12} \text{ с} \Rightarrow \omega Z \sim 10^{-2} \ll 1$

т.е. наша рассуждения не совсем корректны.

Электронная теплопроводность
металла
Закон Вирьева-Франца

3-й Фурье

$\vec{q} = -\kappa \nabla T$ - закон теплопроводности / при $\nabla T \ll T$ (температура не должна меняться резко)

Экспериментально было получено:
 $\frac{\kappa}{T_0} \sim T$ и $\frac{\kappa}{T_0 T} \sim \text{const}$ (число Лоренца)

Как это объяснить?

Усреднявание:

- 1) Мерное тело только за сесс. $\bar{e}$.
здесь сполнулось в макс. раз.
- 2) Кин. энергия получ. $\bar{e}$ при сполн. сп-ств
только T .

$S = I - \text{eq. money}$

q_+ и q_- потоки $\vec{e}$, которые столкнулись.

q_+ и q_- — потоки ε , проходящие соответственно.

$$q_+ z = \frac{\gamma}{2} \sqrt{z} \cdot \varepsilon(\tau(x - \sqrt{z})) \approx \frac{\gamma}{2} \sqrt{z} \left(\varepsilon(\tau) - \sqrt{z} \frac{d\varepsilon}{d\tau} \cdot \frac{d\tau}{dx} + \dots \right)$$

$$g \cdot x = \frac{1}{2} v x \cdot e(T(x + vx)) \approx \dots$$

$$\Rightarrow q_x = q_+ + q_- = -n v_x \sum \frac{de}{dT} \cdot \frac{dT}{dx}$$

E - энергия $\sim \epsilon / 0.1$

расширяется

$$E = \varepsilon \cdot n = \varepsilon \cdot \frac{N}{V} \quad \text{ср. эк-ва по х.} \quad \text{в выпр. жирня. в др. объектах}$$

$$E = \frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle$$

$$\frac{dE}{dT} = C_v = \frac{d \ln \mathcal{E}}{dT}$$

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle$$

$$n \cdot \frac{dE}{d\sigma} = \frac{1}{v} \frac{dE}{d\sigma} = C_v$$

$$\Rightarrow \vec{g} = \underbrace{\frac{1}{3} v^2 \tau_{ev}}_{\partial t} (-\nabla \phi)$$

$$\frac{\mathcal{E} = \frac{1}{3} v^2 C_V}{\vec{v}_i = \frac{\vec{\mathcal{E}} \cdot n \cdot \tau}{m}} \Rightarrow \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_0} = \frac{1}{3} \frac{v^2 T C_V m}{\tilde{e}^2 n \tau} = \frac{2}{3} \frac{3}{2} k_B T \cdot \frac{3 n k_B}{\tilde{e}^2 \lambda n} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{\tilde{e}} \right)^2 \tau$$

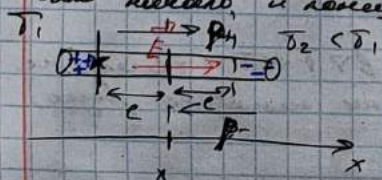
$$\frac{C_k}{n} = \frac{3}{2} K_0 \sim \text{вклад } L_{20} \text{ в теплоемкость}$$

Если считать: $\frac{3}{2} \left(\frac{K_B}{\bar{\epsilon}} \right) = 1,24 \cdot 10^{-13} \frac{\text{эВ}}{\text{см} \cdot \text{К}^2} \leftarrow \text{применяет в 2-й раз}$

~~11 - exp. 35~~

Термодис. Эрдфакс Вебела.

Рассел-излов и охотился на него. Французский, чтобы
было понятно и ясно.



$$P_+ = \langle \psi(x-vz) \rangle$$

$$\rho \sim \langle v(\delta(x + v z)) \rangle$$

$$j \sim p_+ - p_-$$

Считаем, что $\text{выраво} \rightarrow \text{лето} \rightarrow \text{мелкое} \rightarrow \text{или} \rightarrow \text{Брево} \rightarrow$
 $\text{Поддерживая} \rightarrow \text{ссылка} \rightarrow \text{раздвиги} \rightarrow \text{защита} \rightarrow \text{повторение} \rightarrow \text{вероятно} \rightarrow \text{Е}$

$$F = -Q \nabla \phi$$

дифференциальная форма 94 е.

Классическая электродинамика:

$$V_Q = \frac{1}{2} [v(x-vt) - v(x+vt)] = -vt \frac{dv}{dx} = -v \frac{d}{dx} \left(\frac{v^2}{2} \right)$$

$$\vec{V}_Q = -\frac{e}{8} \frac{dv^2}{dt} \nabla T \quad ; \quad \vec{V}_E = \frac{e \vec{E} \tau}{m}$$

$$\rightarrow \vec{V}_Q + \vec{V}_E = 0 \Rightarrow -\frac{e}{8} \frac{dv^2}{dt} \nabla T + \frac{e \vec{E} \tau}{m} = 0$$

$$\Rightarrow \vec{E} = \frac{1}{8} \frac{m}{e} \frac{dv^2}{dt} \nabla T = \frac{1}{8e} \frac{d}{dt} \left(\frac{m v^2}{2} \right) \nabla T = \frac{1}{8e} \frac{dE}{dt} \nabla T =$$

$$= \frac{1}{8e n} \frac{dE}{dt} \nabla T$$

$$\rightarrow \vec{E} = \frac{C_v}{8e n} \nabla T$$

Экспериментально возникает другой знак зарядов $\rightarrow$ д.е. другие носители.

Плотность и масса и др. др.

① проводимость металла. — м. газ свободных независимых частиц.
 τ — ср. время столкнов. ; $l = v_{\text{ср}} \cdot \tau$

Кинетическое уравнение: $\frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{\vec{p}}{\tau} = \vec{F}$

Ф-я распределения $\vec{p}$ -электронов по скоростям. (М-Б):

$$f_{\text{МБ}}(\vec{v}) = n \cdot \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2T}}, \quad \text{где } E = \frac{mv^2}{2}$$

$$\bar{E} = \frac{m \bar{v}^2}{2} = \frac{3}{2} k_B T ; \quad C_v = \frac{3}{2} n k_B$$

$\frac{C_v}{n} = \frac{3}{2} k_B$ $\rightarrow$ экспериментально такого вида τ не обнаружено.

② "Независимый $\vec{E}$ ", делаем оценку:

$$n_{\text{мет}} \sim 1000 \text{ н.м.м.м.}$$

$\rightarrow$ скорее неустойчивость, чем газ

③ "Получили 3-н Ома."

④ 3-н Вульфсона-Франца. $\frac{E}{v} \sim \tau$

Время τ в модели Друэ.

Вероятность того, что в теч. τ $\vec{E}$ не испоган столкновением:

$$P = e^{-\frac{t}{\tau}}$$


Рассмотрим небольшое отклонение δv . С какой вер-но на $t + \delta t$ есть столкновение?

$$\Rightarrow 1 - p(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Если $t \ll \tau$

$$1 - p(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \approx \frac{t}{\tau}$$

За данный интервал времени: по формуле такое количество фотонов $p(t) (1 - p(t)) = p(t) \cdot \frac{t}{\tau} = e^{-\frac{t}{\tau}} \frac{t}{\tau}$

Рассмотрим среднее время столкновения:

$$\langle t \rangle = \int_0^{\infty} t \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} \frac{t}{\tau} dt = \tau \int_0^{\infty} x e^{-x} dx = \tau$$

удобно в том, что ранее вводили интуитивно.

Вопрос: какой же свет при $\vec{E}$ и $\vec{e}$ поглощается и посылает некоторую энергию.

Рассчитаем энергию: $\frac{\partial E}{\partial t} = v(t)$

$$E_{кин} = \frac{mv(t)^2}{2} = \frac{me^2 E^2 \tau^2}{2m^2} = E_{кин}(t)$$

$$\langle E_{кин} \rangle = \int_0^{\infty} E_{кин}(t) \frac{dt}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}} = \left\{ \text{среднее} \right\} = \frac{(\vec{E} \vec{E} \tau)^2}{m}$$

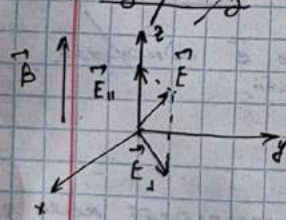
~ происходящая из $\vec{E}$

Сколько в ср. объеме будет находиться фотонов и в ср. времени:

$$\frac{\langle E_{кин} \rangle}{\tau} \cdot n = \frac{ne^2 \tau^2}{\tau} E^2 = \epsilon_0 E^2 \quad \text{и добавим } g\text{-н Дие - Ландау}$$

ДЗ* Движение в средине поля

19.09.23, Работы ДЗ



$$\vec{j} = \sum \vec{v}_i E_j$$

$$\vec{j} = \frac{en}{m} \vec{p}$$

Уравнения:

$$x: eE_x + \omega_c p_y - \frac{p_x}{\tau} = 0$$

$$y: eE_y - \omega_c p_x - \frac{p_y}{\tau} = 0 \quad (*)$$

$$z: eE_z - \frac{p_z}{\tau} = 0$$

$$\Rightarrow \vec{j}_z = \vec{v}_0 E_z$$

$$\begin{cases} p_x(1 + \omega_c^2 \tau^2) = e\tau(E_x + \omega_c \tau E_y) \\ p_y(1 + \omega_c^2 \tau^2) = e\tau(E_y - \omega_c \tau E_x) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \vec{j}_x = \frac{\vec{v}_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} (E_x + \omega_c \tau E_y) \\ \vec{j}_y = \frac{\vec{v}_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} (E_y - \omega_c \tau E_x) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \vec{j} = \frac{\vec{v}_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau & 0 \\ -\omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_c^2 \tau^2 \end{pmatrix}$$

Модель Зоммерфельда

Распределение Ферми и Бозе:

ф-я распр-я масс. газа по состояниям (1900г.)

$$f_{MB} = n \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{3/2} e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}}$$

$$\epsilon = \frac{mv^2}{2}$$

$$n = \int f_{MB}(\vec{v}) d\vec{v} \sim \text{константа}$$

Будем считать, что $k_B = 1 \rightarrow T$ - в ф. энергии (для простоты)
квантовая механика:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i\alpha} \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \Rightarrow \alpha = 0, \pi \Rightarrow e^{i\alpha} = \pm 1$$

$\alpha = 0$: $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \sim$ бозон - спин целый

$\alpha = \pi$: $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \sim$ фермион - спин полуцелый

$\psi_{\vec{k}1} = e \Rightarrow$ Принцип запрета Паули: (фермионы)
в квант. л.б. состоянием может находиться только одна частица.

Фермионы:

- 1) полуцелый спин
- 2) принцип запр. Паули

$$3) f_{FB}(\epsilon_k) = \frac{e^{-\epsilon_k - \mu}}{e^{-\epsilon_k - \mu} + 1} = n_k$$

$$4) p, \tilde{e}, n, \mu \Rightarrow \text{фермион имеет заполненный аналог. ф-ш распр.}$$

$$\left\{ \sum_k n_k = N \right\}$$

Бозоны:

- 1) целый спин
- 2) + много частиц в л.б. соот.

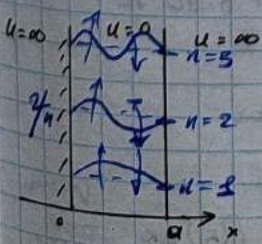
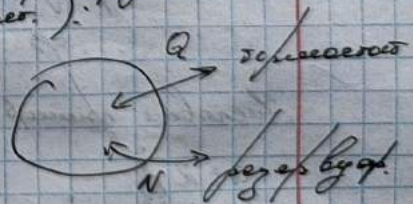
$$3) f_{BE}(\epsilon_k) = \frac{e^{-\epsilon_k - \mu}}{e^{-\epsilon_k - \mu} - 1} = n_k = \langle N_k \rangle$$

4) фотон, фонон, H_c^+

μ - химический потенциал (г/г ф-я вещества, энерг-я излучения г/г лос-в при добавлении 1 квант.):

$$dF = -p dV - S dT + \mu dN \quad F(T, V, N)$$

$$p = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T, V}$$



Энергия сепарированного электрона $\tilde{e}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + U(x) = \epsilon \psi$$

$$\psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

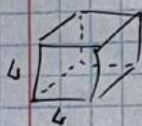
$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x$$

$$\epsilon_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

$$k = \frac{\pi}{a} n, n = 0, \pm 1, \dots$$

N $E_F \rightarrow$ при $T=0$ окр-е свобод-ые уровни об-заточены.

Дано: V, N : конфигурация - куб



$$V = L^3, \quad n = \frac{N}{V}$$

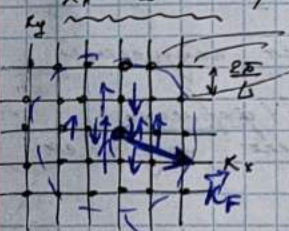
Положим на ось координ. x, y, z :

$$\begin{cases} \psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z) \end{cases} \rightarrow \text{з.у. Борна - Кармана,}$$

$$\text{У.Ш.: } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi; \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \quad \psi = e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$\vec{k} = \{k_x, k_y, k_z\}; \quad \vec{r} = \{x, y, z\}$$

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x; \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y; \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z; \quad n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$



распредел. состояний.

внутри окр-го - все занято, вне окр-го - пусто.

На по-то - округленность

В 3D - сфере Ферми

$\vec{k}_F$ - вектор Ферми

$$V_F = \frac{4}{3} \pi k_F^3 - \text{объем сферы Ферми в } k\text{-пространстве}$$

$$V_{\text{окр}} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 - \text{объем, занимаемый одним состоянием.}$$

$$\frac{V_F}{V_{\text{окр}}} = 2 = N \rightarrow \text{число состояний.}$$

↳ элемент объема

$$N = \frac{4\pi k_F^3 L^3}{3 \cdot 8\pi^3}$$

$$\rightarrow k_F^3 = 3\pi^2 n$$

$$\Rightarrow v_F = \frac{p_F}{m} \sim \text{скорость Ферми.}$$

Числовой пример:

$$n = 2 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$$

$$\rightarrow k_F \sim 10^8 \text{ см}^{-1}$$

$$\rightarrow p_F = \hbar k_F \sim 6 \cdot 10^{-24} \text{ г} \cdot \text{см} \cdot \text{с}^{-1}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \sim 3 \text{ эВ} \rightarrow 3 \cdot 10^4 \text{ К}$$

$$v_F = \frac{p_F}{m} \sim 10^8 \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$$

Для кл. газа:

$$v_F \sim 10^8 \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$$

Разница на порядок

Как функция распределения?

$$T=0: F(\vec{k}); \quad \sum_{\vec{k}} F(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}} F(\vec{k}) \left(\frac{V}{(2\pi)^3} \Delta \vec{k} \right) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k}} F(\vec{k}) \Delta \vec{k} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \int F(\vec{k}) d\vec{k}$$

= 1. ↳ об-ем в k пр-ве на одно состояние

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} F(\vec{k}) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} F(\vec{k}) \quad \rightarrow \text{переход к конт. интегралу}$$

$$n = 2 \cdot \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} F(\vec{k}) \quad \Rightarrow F(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{для энергии.}$$

$$n = 2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\kappa_F} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} k^2 \sin\theta \, dk \, d\theta \, d\varphi = \frac{4\pi}{4\pi^2} k^3 \cdot \frac{1}{3} \Big|_0^{\kappa_F} = n$$

$$\Rightarrow n = \frac{\kappa_F^3}{3\pi^2}$$

Плотность $\frac{1}{\hbar^3} n^2$

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

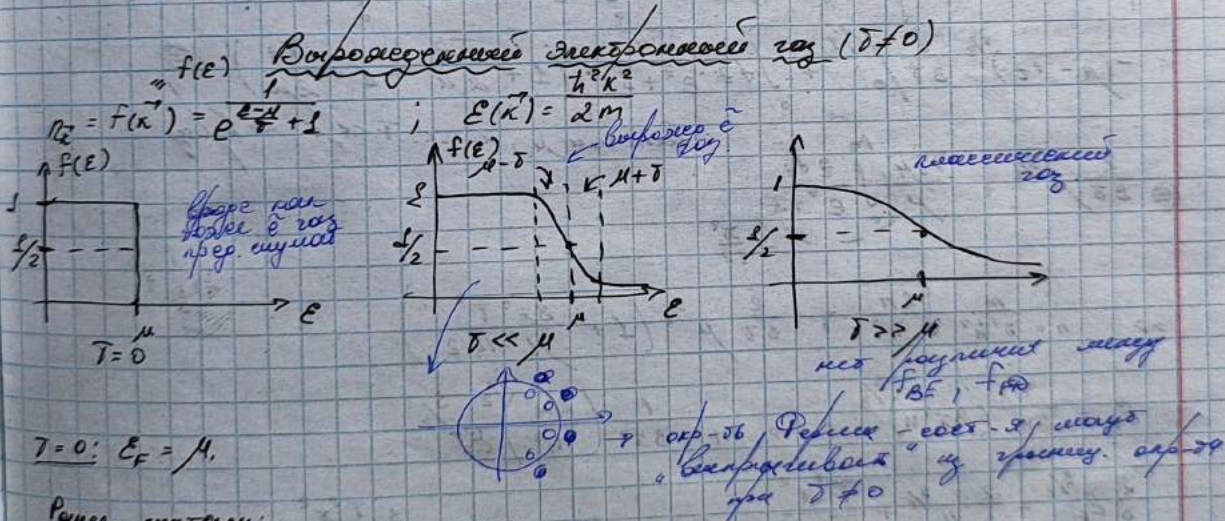
$$\bar{E}(k) = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}) \rightarrow$$

$$\vec{p}(k) = \sum_{\vec{k}} \vec{p}(k) \rightarrow \text{если умножить несколько раз, то получится формула}$$

Энергия основного состояния E_0

$$E = 2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\kappa_F} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \cdot k^2 \sin\theta \, dk \, d\theta \, d\varphi = \dots = \frac{\hbar^2 \kappa_F^5}{10m\pi^2}$$

$$\bar{E} = \frac{E}{N} = \frac{F(k)}{n} = \frac{\hbar^2 \kappa_F^5 / 10\pi^2 m}{\kappa_F^3 / 3\pi^2} = \frac{3}{5} E_F \quad \sim ?$$



Ранее считали:

$$n = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\kappa_F} d\vec{k} \quad \text{теперь} \quad n = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} d\vec{k} f(\vec{k})$$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} d\vec{k} E(k) f(\vec{k})$$

$$\Rightarrow n = 2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{T}} + 1} = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} dk \cdot k^2 \cdot \frac{f(E(k))}{e^{\frac{E - \mu}{T}} + 1} = \left\{ \begin{array}{l} \text{переходим к интегр-лу по энергии, чтоб не скучать} \\ \text{3D интеграл} \end{array} \right\} =$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{4\pi k^2}{\hbar^3} \cdot \frac{1}{2m} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{T}} + 1} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} = \int_0^{\infty} k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \int_0^{\infty} dE =$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{4\pi \cdot 2m \cdot \hbar}{\hbar^3 \cdot \hbar^2} \cdot E \cdot \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{T}} + 1} dE = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{8\pi m}{\hbar^3} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{T}} + 1} dE =$$

Энергия $\bar{v} = 0$:

$$n = \int_0^{\infty} dE \cdot \frac{m}{h^2 x^2} \sqrt{\frac{2mE}{h^2}} = \frac{m \sqrt{2m}}{\pi^2 h^2} \cdot \frac{2}{3} \mu^{3/2}$$

$$\mu = \frac{\hbar^2 K_H}{2m} ; K_H^2 = 3\pi^2 n$$

$$\left(\frac{F}{N} \right)_{V, T} = \mu$$

$$\mathcal{R}(\bar{\sigma}, V, \mu) = -p\bar{V} - S\bar{\sigma} - N\bar{\mu}$$

(с/г. получат Ланграз)

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V}$$

Температурная зависимость
химической потенции.

$$n = \int_0^\infty dE g(E) f(E) = \int_0^\infty dE \cdot \frac{n}{2\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{T}} + 1} = \int_0^\infty dz = \frac{E-\mu}{T}; \quad dz = \frac{dE}{T} \int_0^\infty =$$

$$= T \int_0^\infty dz \cdot \frac{n^{3/2} \sqrt{z}}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{e^z + 1} = \frac{n^{3/2}}{\hbar^2} \int_0^\infty dz \frac{\sqrt{4-\tau z}}{e^z + 1} = \frac{n^{3/2}}{\hbar^2} \int_0^\infty dz \frac{\sqrt{4-\tau z}}{e^z + 1} + \int_0^\infty dz \frac{\sqrt{4-\tau z}}{e^{-z} + 1} =$$

$$= \int_0^\infty \frac{1}{e^z + 1} dz = \int_0^\infty \frac{1}{e^z + 1} dz = \int_0^\infty \frac{\sqrt{4-\tau z}}{e^z + 1} dz - \int_0^\infty \frac{\sqrt{4-\tau z}}{e^z + 1} dz + \int_0^\infty \frac{\sqrt{4-\tau z}}{e^z + 1} dz =$$

$$= -(\mu - \tau z)^{3/2} \frac{z}{3\tau} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty dz \cdot \frac{\sqrt{4-\tau z}}{e^z + 1} \cdot \left(1 + \frac{\tau z}{2\mu} - 1 + \frac{\tau z}{2\mu} \right) \ominus$$

внесем μ , μ т.к. $T \ll \mu \rightarrow \beta \mu \gg 1$

$$\textcircled{5} \quad \frac{2}{30} u^{5/2} + \frac{1}{\sqrt{u}} \int_0^u \frac{2 dz}{e^z + 1} \quad \quad \quad = \frac{2}{12}$$

$$\Rightarrow n = \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2N}{\hbar^2}} \cdot \hbar \cdot \frac{2}{3\hbar} \mu^{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{g \hbar^2 T^2}{\mu^2 \cdot 12 \cdot 2} \right)$$

$$\mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \rightarrow n = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mathcal{E}_F^{3/2}$$

$$\frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2} = \frac{2}{5} \mu^{3/2} + \frac{T^2 \pi^2}{\sqrt{\mu \cdot 12}} \Rightarrow \epsilon_F \approx \mu \left(1 + \frac{5}{2} \frac{T^2 \pi^2}{12 \mu^2} \right)$$

$$\Rightarrow \mu(T) = \mathcal{E}_F \left(1 - \frac{\bar{x}^2}{12} \cdot \frac{\bar{\sigma}^2}{\mathcal{E}_F^2} \right) \rightarrow \mu \rightarrow \mathcal{E}_F, \text{ т.к. } \frac{\bar{\sigma}}{\mu} \ll 1$$

$T=0 \rightarrow \mu = E_F$
 $T \uparrow \rightarrow \mu \downarrow$

число ρ $\frac{\text{плотность}}{\text{объема}}$ $\frac{\text{соединений}}{\text{соеб-а}}$ в границах ам-и энергии в д.

$$\mathcal{L}(\vec{\kappa}) = \frac{\frac{1}{2} \kappa^2}{2m} ;$$

$$\begin{cases} n = 2 \sum_{\vec{k}} f(\epsilon(\vec{k})) \rightarrow \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} f(\epsilon(\vec{k})) \\ E = 2 \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) f(\epsilon(\vec{k})) \rightarrow \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \epsilon(\vec{k}) f(\epsilon(\vec{k})) \\ \rightarrow 2 \int \frac{d\vec{k}}{8\pi^3} F(\epsilon(\vec{k})) \sim \int d\epsilon g(\epsilon) F(\epsilon) \end{cases}$$

$\Rightarrow g(\epsilon)$ - плотность состояний.

$$g(\epsilon) = \begin{cases} \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{2m\epsilon}, & \epsilon \geq 0 \\ 0, & \epsilon < 0 \end{cases} \leftarrow \text{в 3D случае}$$

$$n = \int d\epsilon g(\epsilon) F(\epsilon)$$

плотность вероятности
в $[\epsilon, \epsilon + d\epsilon]$

$$Q_n(\vec{k}); \quad Q = \sum_{n, \vec{k}} Q_n(\vec{k}); \quad Q_n = Q_n(\epsilon(\vec{k}))$$

n - некоторое квантовое число

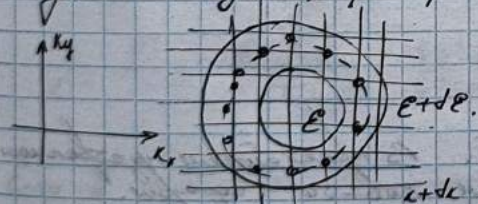
Q - некоторая физ. величина

$$g = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{Q}{V} \rightarrow 2 \sum_{\vec{k}} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} Q_n(\vec{k}) \rightarrow g = \int d\epsilon g(\epsilon) Q(\epsilon)$$

$$g(\epsilon) = \sum_n g_n(\epsilon) \Rightarrow \left\{ g_n(\epsilon) = 2 \delta(\epsilon - \epsilon_n(\vec{k})) \right\} \leftarrow \text{плотность состояний}$$

Суть графа интерпретация: $\epsilon \leq \epsilon(\vec{k}) \leq \epsilon + d\epsilon$

$$g_n(\epsilon) d\epsilon = 2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \begin{cases} 1, & \epsilon(\vec{k}) \in [\epsilon, \epsilon + d\epsilon] \\ 0, & \epsilon(\vec{k}) \notin [\epsilon, \epsilon + d\epsilon] \end{cases}$$



$$\text{В 3D: } \int d\epsilon g(\epsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{\vec{k}} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi k^2 \sin\theta = \frac{k^3 d\epsilon}{\pi^2}$$

$\hookrightarrow$ г/з: соотношение между состоянием $g(\epsilon)$ аналогично в 2D и в 1D

Решение г/з:

$$1D: 2 \sum_{\vec{k}} Q(\vec{k}) = 2 \sum_{\vec{k}} Q(k) \cdot \frac{L}{2\pi} \cdot dk$$

$$L \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{1}{\pi} \int Q(k) dk$$

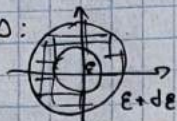
$$\Rightarrow g(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{\pi} \int dk = \frac{dk}{\pi} = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{d\epsilon}{\hbar \sqrt{\epsilon}}$$

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar} \Rightarrow dk = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon}} d\epsilon$$

$$\Rightarrow g(\epsilon) = \begin{cases} \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\pi \hbar \sqrt{\epsilon}}, & \epsilon(k) \in [\epsilon, \epsilon + d\epsilon] \\ 0 \end{cases}$$

в 2D.

8.10.23. 2D:



$$S_{\text{disk}} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$$

$$S_F = \pi k_F^2$$

$$\sum_k F(k) = \sum_k F_k \left(\frac{S}{(2\pi)^2} \Delta k \right)$$

$$\lim_{S \rightarrow \infty} \frac{1}{S} \sum_k F(k) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} F(k)$$

$$g_{2D}(\epsilon) d\epsilon = 2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_F+\Delta k} k dk \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{1}{2\pi} (k_F^2 + 2k_F \Delta k + \Delta k^2 - k_F^2)$$

$$g_{2D} = \frac{1}{\pi} \frac{m}{\hbar^2} = \text{const} ; \quad g_{2D} d\epsilon = \frac{k dk}{\pi}$$

Для 1D:

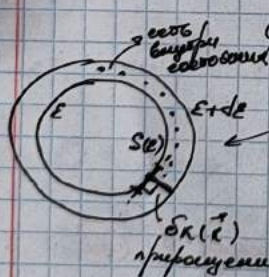
спиновое вырождение $\rightarrow 2 \int \frac{dk}{2\pi} \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2E}}$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow dE = \frac{\hbar^2}{m} k dk \rightarrow dk = \frac{m dE}{\hbar^2 k} = \left\{ k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \right\} = \frac{m dE}{\hbar \sqrt{2mE}}$$

$g(\epsilon) \sim$ число состояний (уровней) в ср. объеме и в ср. интервале энергий.

$$g(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{V} \int_0^{\epsilon} \text{число ст. ур. в ср. объеме } [\epsilon, \epsilon+d\epsilon]$$

$$g(\epsilon) = \sum_k 2\delta(\epsilon - \epsilon_k) = \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k) \leftarrow \text{если ввести спиновую дегенерацию } 2\delta \text{ с против. спином}$$



Свойства Ван Хофа.

Поверхности энергий. В простейшем случае пов-ща - сфера.

$\Rightarrow$ Объем элементарной ячейки не зависит от энергии.

$$\epsilon + d\epsilon = \epsilon + |\nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})| \delta k(\vec{k}) + \dots$$

$$\Rightarrow \delta k(\vec{k}) = \frac{d\epsilon}{|\nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})|}$$

$$d\epsilon g(\epsilon) = \int_{S(\epsilon)} \frac{dS}{4\pi^3} \delta k(\vec{k}) = \int_{S(\epsilon)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{d\epsilon}{|\nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})|}$$

$$g(\epsilon) = \int_{S(\epsilon)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{|\nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})|}$$

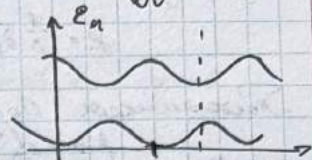
если знаменатель = 0 $\rightarrow$ особенность Ван Хофа.

$$\Rightarrow |\nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})| = 0$$

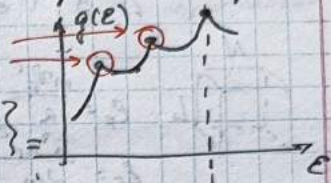
Для обобщенного вырожденного эл-ого газа такого типа не
 имеет $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Поставив g_n и - номер зоны - приходим к следующему:

$$g_n(E) = \int_{S(E)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{|\nabla E_n(\vec{k})|}$$



Коэффициент в аргументах.



Средняя энергия вырожденного газа свободных и мезонов.

Нужно рассчитать энергию: (3D):

$$\bar{E} = \int_0^\infty dE \cdot E \cdot g(E) \cdot f(E) = \left\{ E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; 3\pi^2 n = k_F^3 \right\}$$

$$= \frac{3}{2} \frac{n}{E_F} \int_0^\infty dE \cdot E \cdot \frac{E^{3/2}}{e^{E/kT} + 1} = \left\{ 2 - \frac{E_F}{T} \right\} \Rightarrow E = \mu + 2 \cdot T$$

= аналогично с расчетами хим. потенциала в полупроводниках.

Тепл-е выпр. в газе: $\mu \gg T$

$$\Rightarrow \frac{3}{2} \frac{n}{E_F} \cdot T \left[\frac{2}{5} \frac{\mu^{5/2}}{T} + 3 \sqrt{\mu} \frac{T}{12} \right]$$

$$\text{Но! } \mu = \mu(T) = E_F \left[1 - \frac{5}{12} \left(\frac{T}{E_F} \right)^2 \right]$$

$\Rightarrow$ В итоге получим:

$$\bar{E} = \frac{3}{5} n E_F \left[1 + \frac{5}{12} \left(\frac{T}{E_F} \right)^2 \right] \sim \text{средн. энергия на эр.}$$

$$\bar{E} = \frac{E}{n} = \frac{3}{5} E_F \left[1 + \frac{5}{12} \left(\frac{T}{E_F} \right)^2 \right]$$

Если в размерных величинах (СИ):

$$\bar{E} = \frac{3}{5} E_F n \left[1 + \frac{5}{12} \left(\frac{T}{E_F} \right)^2 \right]$$

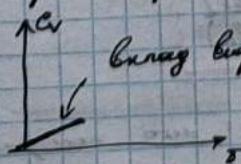
Теплоемкость вырожден. э-го газа: ($T \ll E_F$)

$$C_V = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right) = \frac{5}{2} n k_B \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)$$

Классич. газ (теория Дюроу): $C_V = \frac{3}{2} n k_B$

В металлах!

Вклад вырожден. эл. газа.



К закону Виралиса - Франка:

$$\frac{E}{E_0} \sim T \rightarrow \text{для металла - атомов}$$

Можно брать формулу из теории Дюроу: $E = \frac{1}{5} n^2 C_V T$

Всё же это и-то Фирми:

т.е. $\mu = \frac{1}{3} v_F^2 C_V \tau$

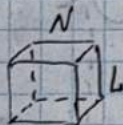
Всё представлено в температур-х: $v_0 = \frac{e \hbar \tau}{m}$

$$\mu = \frac{1}{3} v_F^2 C_V \tau = v_0^2 \tau \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2$$

Полученная поренко:

$$\frac{\mu}{v_0^2 \tau} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \quad \text{и. Друда}$$

$$\frac{\mu}{v_0^2 \tau} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \quad \text{и. Золмиффелд}$$



$$E_F = \frac{m v_F^2}{2}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

Можно ли выразить в общем виде другие хар-ки? Например μ .
 (задание поведено: $\mu \rightarrow \mu(T)$ при произвольном $g(E)$)
 2°: $g(E)$ при произвольном $g(E)$
 3°: Найти $\mu(T)$ при произвольном зав-ти μ -то состояния $g(E)$:

$\mu \gg T$: $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{T}} + 1}$; $z = \frac{E-\mu}{T} \rightarrow E = \mu + T \cdot z$

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot g(E) f(E) = T \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dz \cdot g(\mu + Tz) \cdot \frac{1}{e^z + 1} =$$

$$= T \int_{-\infty}^{\infty} dz \cdot g(\mu - Tz) - T \int_{-\infty}^{\infty} dz \cdot \frac{g(\mu + Tz) - g(\mu - Tz)}{e^z + 1} \quad (*)$$

$$g(\mu \pm Tz) \approx g(\mu) \pm g'(\mu) \cdot Tz$$

$$(*) \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot g(E) + \frac{T^2}{6} g'(\mu) = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot g(E)}_{=n} + \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot g(E) + \frac{T^2}{6} g'(E_F) \quad (**)$$

и так же применяем $|\mu - E_F| \ll \mu, E_F \Rightarrow$ для 2го члена
 иеп-м берем формулу о сдвиге

$$(**) n + (\mu - E_F) g(E_F) + \frac{T^2}{6} g'(E_F) = 0$$

$$\Rightarrow (\mu - E_F) g(E_F) + \frac{T^2}{6} g'(E_F) = 0$$

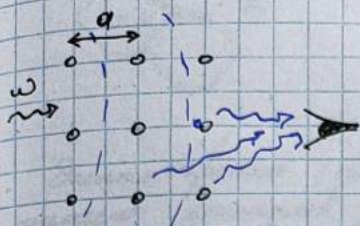
$$\Rightarrow \boxed{\mu = E_F - \frac{T^2}{6 E_F} \frac{g'(E_F)}{g(E_F)}}$$

Решимость задачи Золмиффелда, но получена при $T \rightarrow 0$

Кристаллическая решётка.

1913г. - Брэгг. кристаллы устройства отраж. экран. Эксперимент по рентгеновской дифракции.

Шаг решётки: $a \sim 1 \div 3 \text{ \AA} \sim 10^{-8} \text{ см}$.



Условие Брэгга: $a \sim \lambda$

$$\lambda \sim a \rightarrow h\nu = a \cdot \frac{c}{\lambda} \sim 12 \text{ КэВ}$$

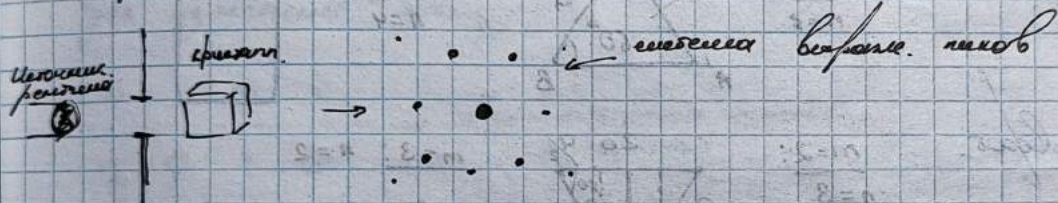
диапазон рентгеновского излучения.

Решётка - $\begin{cases} \text{металл} & 0,1 \text{ \AA} \div 10 \text{ \AA} \\ \text{магнит} & 10 \text{ \AA} \div 300 \text{ \AA} \\ \text{упорядоченный} & 300 - 1000 \text{ \AA} \end{cases}$

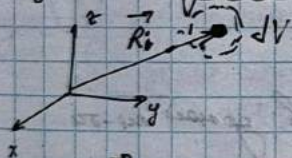
$$\lambda = 0,5 \div 0,7 \text{ нм} = 5 \div 7 \cdot 10^{-9} \text{ см}$$

свет.

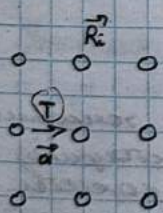
Эксперимент:



Введём функцию плотности:



$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_i} \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad \sim \text{м.д. концентратора } \delta$$



$\rightarrow$ можно придумать такую ф-ю $\rho(\vec{r})$, что сама по себе $\rho(\vec{r})$ не будет. Концентр.

$\Rightarrow$ Ф-я плотности - ф-я, при которой ф-я плотность считается концентр.

$\vec{a}$ - вектор трансляции (их можно придумать много)

$$\rho(\vec{r} + \vec{a}) = \rho(\vec{r})$$

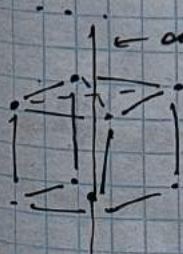
Простейшие симметричные отражения.

1) Поворот на $\frac{2\pi}{n}$, где $n=2, 3, 4, 6$ и n - порядок симметрии.



$n=2$

Поворот $n=2 \Rightarrow$ отражение



оси симметрии

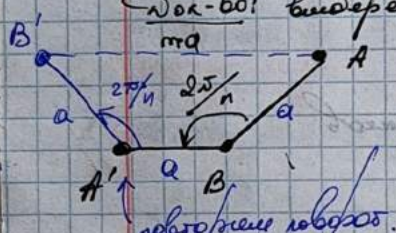
$\rightarrow$ плоскость отражения

Квар. решетка с двумя точками
 $\Rightarrow n=2$ можно составить π -молочко
 колеблющегося.
 $\Rightarrow$ Поворот $n=4$ + отражение

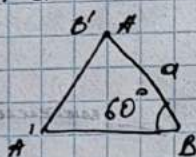
Инверсия: $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$

Бесконечная о симметрии кристалл.
 решетки относительно поворота

~ Кристалл может иметь поворотные оси, для которых
 $n=2, 3, 4, 6$.

Дал-во: выберем 2 узла A и B:

 повторение поворота.

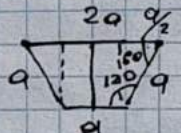
$m=0$:
 $n=6$



$m=1$:
 $n=4$



$m=2$:
 $n=3$



$m=3$: $n=2$



Решетка Браве

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

где $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ не лежат в одной пл-ти

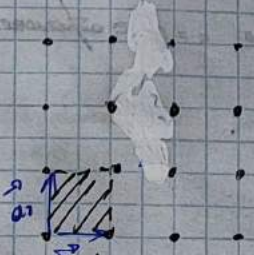
Определение:

I. ~ Это беск. периодич. структура, соф. диметрической точечной группой. абсолютно идентична, порождая и ориентацию, и зависимость от того какую точку выберем в качестве начальной.

II. ~ Это беск. периодич. структура, соф. линейное точечное:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

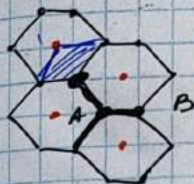
III. Директное мн-во векторов, не лежащих в одной пл-ти, которое явл. полным по отношению к операциям трансляции и инверсии.



$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2$$

III - решетка Браве

Элементарная ячейка:



~ не явл. решеткой Бравэ. ~ можно бы точку не выделали в лат. наклонной ~ д.б. доказат. решет. → не выполняется

Но если поместить в центр • → будет решетка Бравэ.

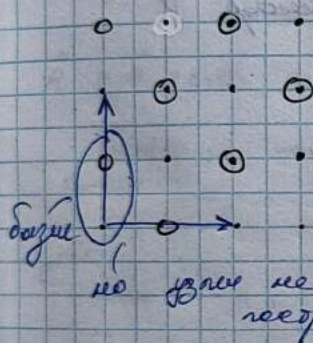
Элементарная (фундаментальная) ячейка решетки Бравэ - миним. элемент реш. Бравэ, который будучи повторенно примененный в пространстве

без перекрываний и пробелов.

Объем элементарной ячейки:

$$V = \vec{a}_1 [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]$$

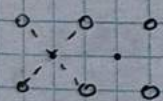
Чтобы изобразить ячейку:



→ Элементарная ячейка с базисом

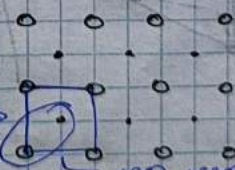
→ Такая решетка - решетка с базисом.

Условная элементарная ячейка:



Но тут потеряна информация об симметрии

элементарная ячейка.



можно было взять за элементар. ячейку.

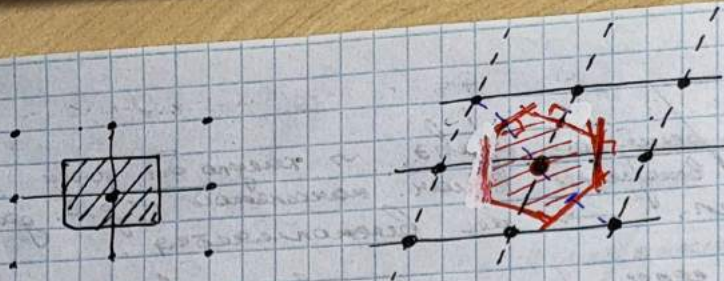
но мы несли потерю информации в центре.

и приращ. стр-по + " сохраняя информацию о симметрии"
- " - при сохранении симметрии решетки нужно ввести базис Бравэ.

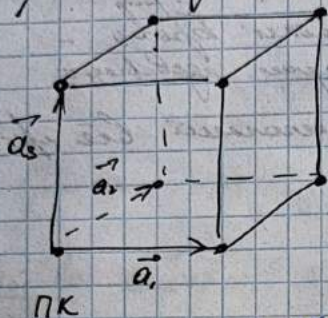
Ячейка Вигнера-Зейделя.

~ выбор. узел и накрыв. область ближайшую к нему.

Результат - ортогональная решетка:



Простая кубическая решетка:



ОЦК - объемно центриров. кубическая.



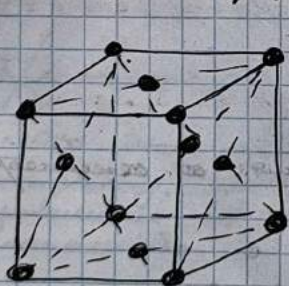
$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= a\vec{x} \\ \vec{a}_2 &= a\vec{y} \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{y} + \vec{z}) \end{aligned}$$

но это не ортонорм. базис.

можно выбрать векторы и базисные:

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{y} - \vec{z}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{z} - \vec{y}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(\vec{y} + \vec{z} - \vec{x}) \end{aligned}$$

ГЦК - face-centered кубическая



на гранях в центре узла

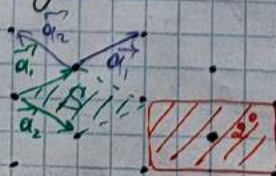
$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(\vec{y} + \vec{z}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{z}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{y}) \end{aligned}$$

10.10.23. Повороты:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

Нарисуем несколько примеров:

выбор векторов базиса



~ примитивная центрированная решетка. По этим векторам можно сост. элемент ячейки.

или - примитивная (элемент. ячейка)

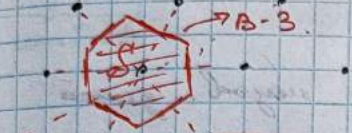
По логично из-за об симметрии трансляция см. в. на 180° .

Если выбрать ячейку $2^\circ \rightarrow$ она образует эту симметрично - условия элементарной ячейки.



~ ячейка Вилера-Зейтца

Можно рассмотреть на примере элементарной решетки



усл. период. реш. $\rightarrow$ сохр. дот. симметрично

Обратная решетка

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

Рассеивание на кристаллической решетке $\rightarrow$ условия на ней периодичности

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$



Если такие векторы $\vec{K}$ ~ имеют периодичность решетки Браве $\rightarrow$ такие векторы образуют обратную решетку. ~ это и есть решетка Браве (также и для 1D решетки) т.е. должны периодичности.

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}) \sim \text{закон периодичности}$$

$$e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{R})} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \Rightarrow \boxed{e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} = 1} \sim \text{такие } \vec{K} \text{ формируют обратную решетку}$$

Рассмотрим по аналогии:

$$\vec{K} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$$

Напишем усл-я на $\vec{b}_{1,2,3}$: $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ ~ много не записываем

$$\Rightarrow \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V} [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3], \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V} [\vec{a}_3 \times \vec{a}_1], \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V} [\vec{a}_1 \times \vec{a}_2]$$

где $V = \vec{a}_1 \cdot [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]$ ~ объем элементарной ячейки. (или удельный периодич. ~ по модулю не уменьшается)

$$\Rightarrow \vec{K} \cdot \vec{R} = \vec{a}_1 \cdot [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] \cdot \frac{2\pi}{V} (n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3) \Rightarrow m_1, m_2, m_3 - \text{целое}$$

целое N

Обр. решетка также является решеткой Браве (по III)

$$\vec{K} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3 \sim \text{Браве} \quad v_1 = \vec{b}_1 \cdot [\vec{b}_2 \times \vec{b}_3] \text{ объем обр. решетки}$$

УЗ: 1) Док-тв. что $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ — орт. базис ор. решётки

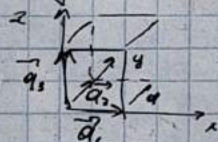
$$\vec{b}_k = \frac{(2\pi)}{V} \vec{r}_k$$
 — представить $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ и по определению.

2)
$$\vec{b}_k = \frac{(2\pi)}{V} \vec{r}_k$$

3) Решётка ортогональная к ортогональной $\rightarrow$ есть прямая решётка.
 $\vec{G} \sim \text{ор. к ор.} \Rightarrow e^{i\vec{G}\vec{r}} = 1$, но было $\Rightarrow \vec{G} = \vec{R}$
 $e^{i\vec{K}\vec{r}} = 1$

Функция Вигнера-Зейтца в ор. решётке период. зонной структуры.

Прямая кубическая решётка.



$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \vec{x}_0$$

$\rightarrow$ Ор. реш. зоны прямой кубич.

ГЧК.



Базисные векторы:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (\vec{y} + \vec{z})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\vec{x} + \vec{z})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\vec{x} + \vec{y})$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V} \left[\frac{a}{2} (\vec{x} + \vec{z}), \frac{a}{2} (\vec{x} + \vec{y}) \right] = \frac{2\pi a^2}{4V} [\vec{x} + \vec{z}, \vec{x} + \vec{y}] =$$

$$= \frac{\pi}{2a} (\vec{x} + \vec{y} - \vec{z})$$

Ор. реш. БЗР имеет вид ОЧК.

ОЧК.

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (\vec{y} + \vec{x} - \vec{z})$$

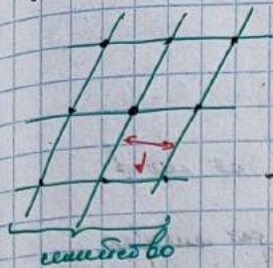
$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\vec{z} + \vec{x} - \vec{y})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\vec{z} + \vec{y} - \vec{x})$$

$\rightarrow$ УЗ: посчитать $\vec{b}_1$

Атомная плоскость

Выбираем 3 узла, соединяем их прямой → проводим пер-ть $\perp$ к ней. Кос. не перпенд. к ней $\equiv$ атомная плоск-ть.

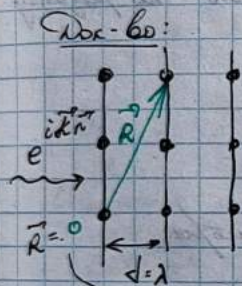


сетчат. пл-ти.

Оф. рис. помогает с массивными.

Д.л. Для любого семейства ат. пл-ей, кос. к ним $\perp$ от другого или расс-е. d сущ-т такие векторы сф. решетки, кос. перпенд. пл-ям, а величина, равная $d = \frac{2\pi}{K}$ из них.

Д.л. Для любого вектора сф. реш. K $\perp$ семейство ат. пл, кос. перпенд. K , кратнее расс-е сф. реш. $d = \frac{2\pi}{|K_{min}|}$ миним. вектор



Расс-е-е семейства ат. пл. и выбрано только макс. волну, что $\lambda = d \Rightarrow K = \frac{2\pi}{d}$

Возьмем 0 и соседний узел.

$$e^{iK \cdot R} = e^{iK \cdot d}$$

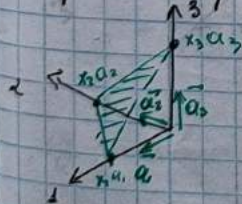
фаза одинак. на соседних фронтах. на соседних волнах.

$$\Rightarrow e^{iK \cdot d} = 1$$

Матрица Виллера

для нахождения способа упрощения плоскостей.

В решителе пл-ей. $\sim$ пусть ось пл-ей пересек. все 3 оси.



$K = h\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 + l\vec{a}_3$, который перпенд. $\perp$ пл-ти.

$\rightarrow$ упр-е пл-ти имеет вид:

$$\vec{r} \cdot \vec{K} = A \Rightarrow \vec{K} (x_i \vec{a}_i) = A$$

упр-е пл-ти

$$\vec{a}_i = \frac{1}{\sqrt{a_i^2 + b_i^2 + c_i^2}} [a_i \vec{a}_1 + b_i \vec{a}_2 + c_i \vec{a}_3] \dots$$

$$\Rightarrow K a_1 = 2\pi h ; K a_2 = 2\pi m ; K a_3 = 2\pi l$$

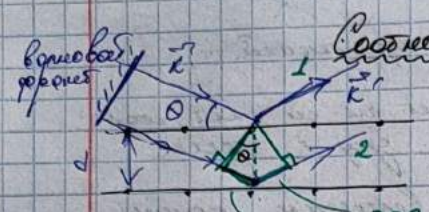
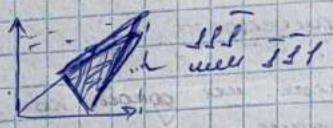
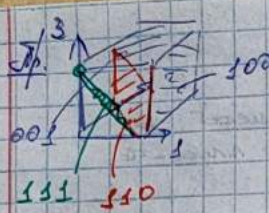
$$\Rightarrow x_1 = \frac{A}{2\pi h} ; x_2 = \frac{A}{2\pi m} ; x_3 = \frac{A}{2\pi l}$$

$$\{x\} \Rightarrow x_1 : x_2 : x_3 = \frac{1}{h} : \frac{1}{m} : \frac{1}{l}$$

$\sim$ эти индексы можно использовать для упрощения пл-ей

Вектора нужно выбирать согласно (*)

В кристаллографии " " не пишут. $\rightarrow$ пишут что-то типа $[111]$ с кр. скоб.



Состояние Брэгга

Предположим, что есть не-ти, ас кагор.
охране, ну.
Галих асрине. много.

доп. падеж фразы:

Разность хода между L и 2 :

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

n -порядок отражения ← условие Брэгга.

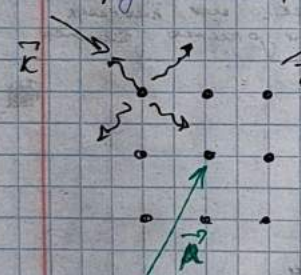
1) Атомные не-то фразы сами.

2) Разделение на атомн. не-то можно делать по-разному

$\frac{1}{2} : \frac{1}{2} \rightarrow$ амплитуда

Условие Рая

Предположим, что в узлах реш. есть не. рассеив. асрине.



Комплексное асрине. рассеив. асрине. волны
во все асрине

$$E(\vec{R}) = e^{i(\vec{k}\vec{R} - \omega t)}$$

Рассеянная волна:

$$E_{sc} = \frac{E(\vec{R})}{|\vec{R}' - \vec{R}|} e^{i\vec{k}'(\vec{R}' - \vec{R})}$$

то что пол. на фазе

$$\ominus \frac{E_0}{|\vec{R}'|} e^{i(\vec{k}'\vec{R}' + (\vec{k} - \vec{k}')\vec{R} - \omega t)}$$

Вплот с L и 2 рассеив. узла.

$$\Rightarrow E_{sc} = \sum_{\vec{R}} \frac{E_0}{|\vec{R}'|} e^{i(\vec{k}'\vec{R}' + (\vec{k} - \vec{k}')\vec{R} - \omega t)}$$

$\Rightarrow$ чтобы асрине. асрине

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G} \quad \text{равно вект. аср реш.}$$

$$\text{чтобы } e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{R}} = 1$$

$$\Rightarrow |\vec{k}'| = |\vec{k}|$$

Приравн. асрине. асрине

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G} \Rightarrow \vec{k} = \vec{k}' + \vec{G}$$

$$k^2 = |\vec{k}|^2 = |\vec{k}'|^2 + 2\vec{k}'\vec{G} + G^2 \rightarrow$$

Домашняя работа.

1) Докажем, что $V_k = \frac{(2\pi)^3}{V}$ — объем элементарной ячейки.

$$V_k = (\vec{b}_1, [\vec{b}_2, \vec{b}_3]) = \frac{(2\pi)^3}{V^3} ([\vec{a}_2, \vec{a}_3] \cdot [\vec{a}_1, [\vec{a}_2, \vec{a}_3]])$$

Отдельно:

$$[\vec{a}_2, \vec{a}_3] \cdot [\vec{a}_1, [\vec{a}_2, \vec{a}_3]] = [\vec{a}_1, [\vec{a}_2, \vec{a}_3]] = \vec{a}_1(\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3) - \vec{a}_2(\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_3) =$$

$$\vec{a}_1 = \vec{a}_1([\vec{a}_2, \vec{a}_3] \cdot \vec{a}_1) - \vec{a}_2([\vec{a}_2, \vec{a}_3] \cdot \vec{a}_1) = \vec{a}_1 V$$

$$([\vec{a}_2, \vec{a}_3], \vec{a}_1 \cdot V) = V(\vec{a}_1, [\vec{a}_2, \vec{a}_3]) = V^2$$

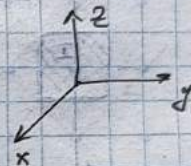
$$\Rightarrow V_k = \frac{(2\pi)^3}{V^3} \cdot V^2 = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

2) Для ОУК:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{y} + \vec{x} - \vec{z})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{z} + \vec{x} - \vec{y})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{z} + \vec{y} - \vec{x})$$



Образую решетку:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3} [\vec{a}_2, \vec{a}_3] = \frac{2\pi}{a^3} \cdot \frac{a^2}{4} [\vec{z} + \vec{x} - \vec{y}, \vec{z} + \vec{y} - \vec{x}] = \frac{2\pi}{a} (-\vec{x} - \vec{y} - \vec{y} + \vec{z} - \vec{x} + \vec{z}) =$$

$$= -\frac{2\pi}{a} (\vec{x} + \vec{y}) \cdot 2 = -\frac{4\pi}{a} (\vec{x} + \vec{y})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a^3} \cdot \frac{a^2}{4} [\vec{z} + \vec{y} - \vec{x}, \vec{y} + \vec{x} - \vec{z}] = \frac{2\pi}{a} (-\vec{x} + \vec{y} - \vec{z} - \vec{x} - \vec{z} - \vec{y}) =$$

$$= -\frac{4\pi}{a} (\vec{x} + \vec{z})$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a^3} \cdot \frac{a^2}{4} [\vec{y} + \vec{x} - \vec{z}, \vec{z} + \vec{x} - \vec{y}] = \frac{2\pi}{a} (\vec{x} - \vec{z} - \vec{y} - \vec{z} - \vec{y} - \vec{x}) =$$

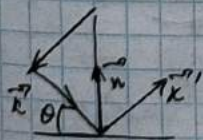
$$= -\frac{4\pi}{a} (\vec{z} + \vec{y})$$

→ получили ГСК.

Из условия Брэгга:

$$2d \sin \theta = n \lambda = n \cdot \frac{2\pi}{K} \Rightarrow 2K \sin \theta = n \frac{2\pi}{\lambda}$$

17.10.23.



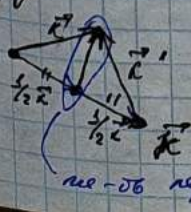
$$\Rightarrow \vec{K} - \vec{K}' = 2K \sin \theta \vec{n} = \vec{K} \cdot \vec{n} = \vec{K}'$$

$\frac{2\pi}{\lambda}$ — частота

— есть вектор $\vec{K}$ и его проекция на $\vec{n}$ — это $\vec{K}'$.
Величина проекции равна — это между векторами.

Брэгговская плоскость.

Предположим, что вектор обратный решетке



$$\vec{K} - \vec{K}' = \vec{K}$$

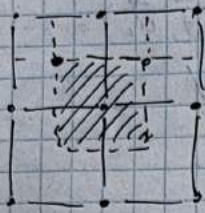
Увидим, что вектор $\vec{K}$ — это вектор, который равен сумме $\vec{K}'$ и $\vec{K}$.

$$\Rightarrow 2\vec{K} \cdot \vec{K}' = K^2$$

у-е м-ю в K-пространстве

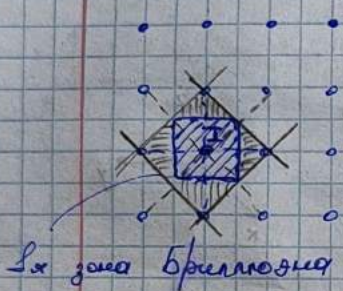
Брэгговская п-ть - п-ть перпен. вектору адр. решётки
 даёт вектор обратной решётки
 $\Rightarrow$ Брэгг. п-ти параллельны атомным п-ям.

Почему важно? Выделим ячею Вигнера-Зейтца $\rightarrow$ в к-пр-е
 это зона Бриллюэна.



$\Rightarrow$ Границы зоны Бриллюэна совпадают с брэгговскими п-ями.

Задача 1.

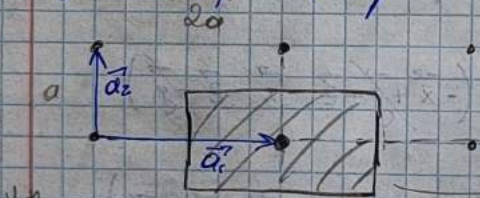


Как построить зону Бриллюэна 1 порядка.

1 порядка: взяли узел $\rightarrow$ центр, и сосед. $\rightarrow$ делим пополам $\rightarrow$ проводим границы.

2 порядка: выбер. другое центр. $\rightarrow$ и все соседние $\rightarrow$ получим ещё зоны. $\rightarrow$ до них дойд. узлы можно с 1-м перебр. 1 порядка.

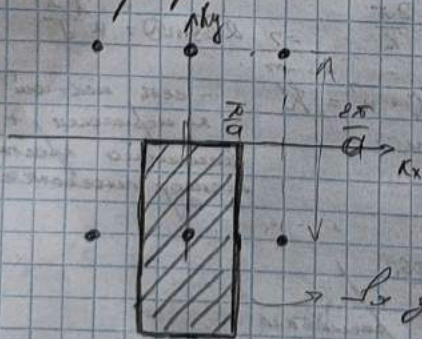
Задача 2 (прямоуг. решётка)



Построить 1-ю зону Бриллюэна 1 порядка. $\rightarrow$ выск в к-пр-е

$\rightarrow$ Это ячейка Вигнера-Зейтца!

прямоуг. решётка. Сложнее/нужно перейти в к-пространство
 Зеп-е адр. решётки: $e^{i\vec{R}\cdot\vec{k}} = 1 \rightarrow 2\pi$



$$|\vec{b}_1| = \frac{2\pi}{a_1} = \frac{2\pi}{a} = b_1$$

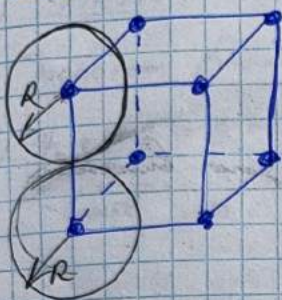
$$b_2 = \frac{2\pi}{a}$$

$\rightarrow$ 1-я зона Бриллюэна

Задача 3. ГПУ - гранецентрированная кубическая упаковка. Берём шары и заполняем пустое пространство.

← дальше класть в ямки. → упр., что это сферическая упаковка
 $\approx 0,7$ - коэффициент заполнения $\frac{S_{зан.}}{S_{общ.}}$

ПК:



В этом случае шары касаются попарно, чтобы (макс. заполн.)

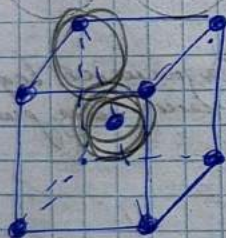
$$\frac{V_{ш}}{V_{к}} = ?$$

$$V_{ш} = \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3$$

$$V_{ш} = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3 \cdot \frac{1}{8} \cdot 8 = \frac{4 \pi a^3}{8 \cdot 3} = \frac{\pi a^3}{6}$$

$$\Rightarrow \frac{V_{ш}}{V_{к}} = \frac{\pi a^3}{6 \cdot a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0,524$$

Аналогично для ОЦК:



Рассчитываем радиус:

$$R = \frac{\sqrt{a^2 + a^2 + a^2}}{4} = \frac{\sqrt{3}a}{4}$$

$$\Rightarrow \frac{V_{ш}}{V_{к}} = \frac{\pi \sqrt{3}}{8} \approx 0,68$$

2/3 для ГЦК. можно посчитать, ответ: $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0,74$

Приближённое приближение.

Длина в. пробега: $l = \gamma \cdot \tau$
 $v_e \leftarrow \text{или} \rightarrow v_{ph}$

$a \sim 1 \div 3 \text{ \AA}$ - расстояние между ионами.

$v_F \sim 10^8 \frac{\text{см}}{\text{с}}$; $\lambda_F \sim \text{\AA}$ → п.е. импульс численно равен к в. волн.

электр. ионы $\vec{R}_i$, $i = 1 \div N$ электр. $\vec{r}_m$, $m = 1 \div M$

Гамильтониан:

$$\hat{H} = \hat{H}_i(\vec{R}_i) + \hat{H}_e(\vec{r}_m) + \hat{H}_{ie}(\vec{r}_m, \vec{R}_i)$$

для ионов для e^- взаимодействие ионов с e^-

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{r}_m} \nabla_{\vec{r}_m}^2 + \sum_{\vec{r}_m, \vec{r}_{m'}} \frac{e^2}{|\vec{r}_m - \vec{r}_{m'}|}$$

$e^- e^-$ взаимодействие

Решать в лоб нереально. Но! Есть малая хитрость

$$\frac{m}{M} \ll 1$$

масса $\tilde{e} \ll$ масса ядра $\rightarrow$ в.о. есть ионы
более интернальные $\rightarrow$ реш. на возмущение
энергией $\tilde{E}$.

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\psi = \psi(\vec{r}_e, \vec{R}_i) = \psi_e(\vec{r}_e, \vec{R}_i) \Phi(R_i)$$

(здесь много $\tilde{e}$ и янов)

всегда
используем
этот прием

$\tilde{E}$ - адiab. преобразование
при медл. перемещении
ионов

$$(\hat{H}_e + \hat{H}_{ei}(\vec{R}_i)) \psi_e(\vec{r}_e) = E \psi_e$$

запис. янов. янов. от. нек. членов и зано вынести

$$(\hat{H}_i + \underline{E_e(\vec{R}_i)}) \Phi(R_i) = E \Phi$$

Подробнее см. Зейман - функции теории ТД (стр. 130)
Масловский - теория ТД (стр. 17)

Далее будем предполагать, что в ТД есть уравнения Шредингера.
Решения. Будем считать периодическими потенциалом.

Зонная теория Феррового тела

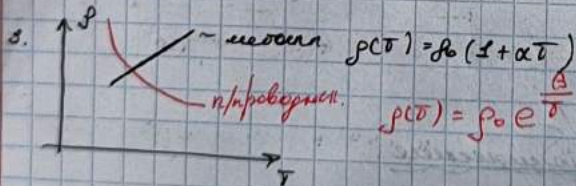
1. Металл - изолятор - п/проводник

св. $\tilde{e}$ $\rightarrow$ лоб $\tilde{e}$

$\rightarrow$ свод. зар. сев. много
проводимость мала

Возникает вопрос
с кем связь решетки

2. $R_H \approx \frac{1}{en_c}$



В рамках свободных
электронов объяснять невозможно

Электроны в периодич. потенциале.
Теория Блоха

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

- такая решетка формирует некий потенциал

$$(\hat{H}_e + V(\vec{r})) \psi(\vec{r}_m) = E \psi(\vec{r}_m)$$

$$V(\vec{r}_m + \vec{R}) = V(\vec{r}_m)$$

$$\hat{H}_e = -\sum_{\vec{r}_m} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}_m}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{r}_m, \vec{r}_{m'}} \frac{e^2}{|\vec{r}_m - \vec{r}_{m'}|}$$

Но!

сложно, как перейти от множества $\tilde{e}$ к одному
и упрощ. ситуацию.
Потом займемся в потенциале, и с большой вер-но будем
обсуждать периодичность.

$$V(\vec{r}) \rightarrow \bar{V}(\vec{r}) = \bar{V}(\vec{r} + \vec{R})$$

В итоге в гамильтониане только лине. зависимость:

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_m) = \prod_{m=1}^m \psi_m(\vec{r}_m)$$

$$\Rightarrow (\hat{H}_e + \bar{V}(\vec{r})) \psi_m(\vec{r}_m) = E \psi_m(\vec{r}_m)$$

$$\left\{ \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) &= E \psi(\vec{r}) \\ V(\vec{r} + \vec{R}) &= V(\vec{r}) \end{aligned} \right.$$

т.е. ф-ла задана.

Теорема Блоха:

$$1) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad , \quad \text{где } \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

связь с век. ф-ми гамильтониана

Канцеляр

2) связь с век. ф-ми гамильтониана с периодич. модулями.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Далее:

Введем оператор трансляции:

$$\hat{T}_{\vec{R}} f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$$

это не вектор аф. преобразования / фазовый вектор

$$\hat{T}_{\vec{R}} [\hat{H}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})]$$

$$\hat{T}_{\vec{R}} \hat{H} \psi = E \hat{T}_{\vec{R}} \psi$$

$$\hat{H}(\vec{r} + \vec{R}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) = E \psi(\vec{r} + \vec{R})$$

$$\Rightarrow \hat{H} \hat{T}_{\vec{R}} \psi = E \hat{T}_{\vec{R}} \psi$$

$$= \hat{H}(\vec{r}) \hat{T}_{\vec{R}} \psi(\vec{r})$$

в силу периодич.

$\Rightarrow \hat{H}$ и $\hat{T}_{\vec{R}}$ коммутируют $\rightarrow$ у них общий набор в. ф. м.

$$\hat{T}_{\vec{R}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R})$$

Поскольку мы знаем безразличия $\rightarrow$ при действ. оператора периодич. в. ф. не меняется:

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = c \cdot \psi(\vec{r}) = c(\vec{R}) \cdot \psi(\vec{r})$$

$$\text{а из } |\psi|^2 = |\psi(\vec{r} + \vec{R})|^2 \Rightarrow |c| = 1 \Rightarrow c = e^{i\varphi(\vec{R})}$$

Где φ и послед. трансляции:

$$\hat{T}_{\vec{R}_1 + \vec{R}_2} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R}_1 + \vec{R}_2) = c(\vec{R}_1 + \vec{R}_2) \psi$$

$$\Rightarrow \varphi(\vec{R}) = \vec{k} \cdot \vec{R}$$

$$\hat{T}_{\vec{R}_1 + \vec{R}_2} \psi = c(\vec{R}_1) \psi(\vec{r} + \vec{R}_2) = c(\vec{R}_1) c(\vec{R}_2) \psi$$

$$\Rightarrow \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

т.е. ф-ла из теор. Блоха

подчеркнем, что связь между вектор $\vec{k}$ и квантовое число

$$\Rightarrow \hat{H} \psi_{\vec{k}} = E_{\vec{k}}(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}$$

Будет ф. ф-ма теор. Блоха:

$$\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

→ проверка

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}(\vec{r} + \vec{R})} u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$

→ получается $u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$

Св-ва, вытекающие из Блоха

1. Квазиимпульс:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \sim \text{периодическая}$$

→ периодическая функция.

Свободное пр-во: $\psi \sim e^{i\vec{k}\vec{r}}$

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla; \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Выводится ли такая своб. ф-я → ф-я опр. импульса?

$$\begin{aligned} \hat{p} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= -i\hbar \nabla [e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})] = -i\hbar \cdot i\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) - i\hbar e^{i\vec{k}\vec{r}} \nabla u_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= \hbar \vec{k} \cdot \psi_{\vec{k}} - i\hbar e^{i\vec{k}\vec{r}} \nabla u_{\vec{k}}(\vec{r}) \end{aligned}$$

добавка. → блочение своб. ф-ии не экв. ф-иии

Но $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ похоже на импульс. → квазиимпульс.

$$\hat{p} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

своб. ф-ии.

$$\hat{p} \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i(\vec{k} + \vec{K})\vec{R}} \psi_{\vec{k} + \vec{K}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{\vec{k} + \vec{K}}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \psi_{\vec{k} + \vec{K}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \sim \text{период на } \vec{K} \text{ решётки}$$

Было:

$$\hat{H} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}}(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

или их ортогональность.

$$\hat{H} \psi_{\vec{k} + \vec{K}}(\vec{r}) = E_{\vec{k} + \vec{K}}(\vec{k} + \vec{K}) \psi_{\vec{k} + \vec{K}}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow E_{\vec{k} + \vec{K}} = E_{\vec{k}}$$

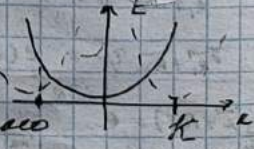
энергия зависит периодически от обратного решётки.

Свободное пр-во:

$$\psi \sim e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



Скор. из период. волны. кардинально меняется

2) Решётка в т. Блоха опр-н с точностью до вектора обратной решётки. (матрица всё время к Γ зоне)

- 2) Волновой вектор $\vec{k}$ - нек. квадратное / число, кот. кор-я уравнения со квалю симметрично при замене.
- 3) Свойств. / преддана сф. решетки. / φ -ий сф. энергии - период. φ -ий с

Номер волны.

$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$
Случай брэгга?

$$\hat{H} \psi_{\vec{k}} = E_n(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

$$E_n(\vec{k} + \vec{K}) = E_n(\vec{k})$$

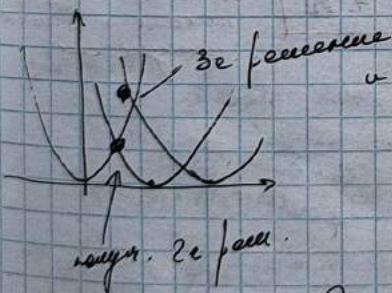
$$\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot U_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow e^{i\vec{k}\vec{r}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (-i\vec{\nabla} + \vec{k})^2 + V(\vec{r}) \right] U_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \cdot U_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

это энергия действ. волнового
тогда этот оператор брэгга

$$U_{\vec{k}}(\vec{r}) = U_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$

Решать можно решать задачу на решетке $[0, \vec{R}]$
То т. л. лог: если есть ур-е Шредингера с периодич. потенциалом на сф-ой решетке. $\rightarrow$ то решение имеет брэгг. Волновое кол-во $\rightarrow$ упрощает их и.

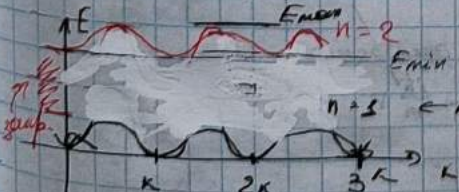


$$\begin{aligned} &E_2(\vec{k}) \\ &E_1(\vec{k}) \\ &E_0 \end{aligned}$$

Энергетическая зона.

Если св-во: $E_n(\vec{k} + \vec{K}) = E_n(\vec{k})$

тогда период φ -ий ограничен.



Внутри области и есть разрыв. совпадающая.

Зона где есть совпадающая - разрыв. зона. где нет - непрерыв.

$[E_{min}, E_{max}]$ - разрыв. зона. совк. ур-ий, кот. име. разн. состоят. $E_n(\vec{k})$ и совк. функции уравн. и (волн. вектора).

Все функции различные совпадающие имеют. в 1-й зоне брэггизма. (в 1-й зоне, в кот. есть брэгг. волновое кол-во.)

Волновой вектор

Почему $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ - обоснованное?

$\vec{r}_1, \vec{r}_2 \rightarrow \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ил.-м теорему Блоха.

$$\hat{T}_{\vec{R}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Пусть найдем перекресток двух групп ос групп $\rightarrow$ волн. ф-ции не перекрываются.

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) \cdot \psi_{\vec{k}_2}(\vec{r}_2)$$

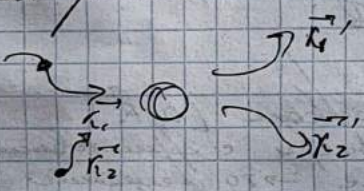
$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{R}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \hat{T}_{\vec{R}} \psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) \psi_{\vec{k}_2}(\vec{r}_2) \Rightarrow e^{i\vec{k}_1\vec{R}} \psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) \cdot e^{i\vec{k}_2\vec{R}} \psi_{\vec{k}_2}(\vec{r}_2) = \\ &= e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{R}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad \textcircled{=} \end{aligned}$$

$$\textcircled{=} e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{K})\vec{R}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Получили: $\vec{K} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{K}$

$\Rightarrow$ Вектор $\vec{K}$ ор-м в точн. р- волн. вект. ор. решетки.

Если рассм-м столкновение 2х частиц



Рассм-м, если сопр. углы:

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_1' + \vec{k}_2'$$

То теперь:

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_1' + \vec{k}_2' + \vec{K}$$

$\rightarrow$ то все концы покрывае с одинаков. амплитудой.

24.10.23.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi = E \psi ; \quad V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$$

теорема Блоха: $\begin{cases} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\ u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \end{cases}$

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\text{получили: } E_n(\vec{k} + \vec{K}) = E_n(\vec{k})$$

что было на фазе периодич.

Средняя сл-ть Блоховского уравнения

$$\psi = e^{i\vec{k}\vec{r}} ; \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} ; \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla ; \quad \hat{v} = -\frac{i\hbar}{m} \nabla$$

$$\langle \hat{v} \rangle = \int \psi^* \hat{v} \psi = \frac{\hbar k}{m} = \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \cdot \frac{1}{\hbar}$$

$$\vec{v} = \frac{\partial E}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$$

$$\hat{v} \psi_{n\vec{k}} = \left[\frac{\hbar}{m} (\vec{k} - i\nabla) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \right] e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\hat{H}_{\vec{k}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_{n\vec{k}} ; \quad \hat{H}_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - i\nabla)^2 - U(\vec{r})$$

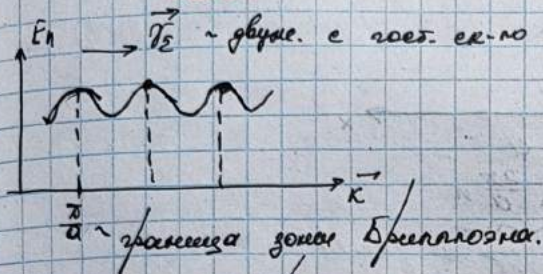
$$\hat{H}_{\vec{k} + \vec{q}} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\vec{k} + \vec{q} - i\nabla)^2}{(\vec{k} - i\nabla + \vec{q})^2} + U(\vec{r}) = \hat{H}_{\vec{k}} + \frac{\hbar^2}{m} \vec{q}(\vec{k} - i\nabla) + \dots$$

$$\hat{H}_{\vec{k}+\vec{q}} U_{n\vec{k}+\vec{q}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}+\vec{q}) U_{n\vec{k}+\vec{q}}$$

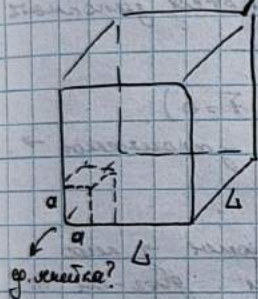
$$E_n(\vec{k}+\vec{q}) = E_n(\vec{k}) + \int dV U_{n\vec{k}}^* \frac{\hbar}{m} \vec{q} \cdot \nabla (\vec{k}-i\nabla) U_{n\vec{k}} = E_n(\vec{k}) + \hbar \vec{q} \cdot \underbrace{\int dV U_{n\vec{k}}^* \nabla U_{n\vec{k}}}_{\langle v \rangle}$$

$$E_n(\vec{k}+\vec{q}) = E_n(\vec{k}) + \vec{q} \cdot \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}} + \dots$$

$$\Rightarrow \langle \vec{v}_n \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}} \rightarrow \text{электрон в период. потенц. движется с постоянной ск-по.}$$



Граничные усл-я Борна-Кармана в кристалле.



$$V = L^3; N - \text{число ячеек.}$$

$$\psi = e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad \text{У.Ш.}$$

$$\text{Усл. периодичности: } \psi(x+L) = \psi(x)$$

$$\rightarrow k_n = \frac{2\pi}{L} n$$

$$\vec{R} = \vec{a}_1 n_1 + \vec{a}_2 n_2 + \vec{a}_3 n_3, \quad \text{где } n_{1,2,3} - \text{произвольны.} \rightarrow \text{т.е. д. что в кубе}$$

другое не целое число ячеек реализуется

$\rightarrow$ надо подобрать усл-е, чтоб граничные ячеек совп. с граничной куба.

Кристалл: $\{N_1 \vec{a}_1, N_2 \vec{a}_2, N_3 \vec{a}_3\}$

- число ячеек по a_1, a_2, a_3 .

$$N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 - \text{общ. число ячеек.}$$

$$\Rightarrow \text{Г.У. : } \psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = e^{i\vec{k} N_i \vec{a}_i} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$$e^{i N_i \vec{k} \vec{a}_i} = 1 \rightarrow \text{дискрет. зн-е } \vec{k} \Rightarrow \vec{k} - \text{дискр.!}$$

волн. вект.

$$N_i \vec{k} \vec{a}_i = 2\pi m_i, \quad m_i \in \mathbb{N}$$

$$\vec{k} = \sum_{j=1}^3 x_j \vec{b}_j; \quad \vec{b}_j = \frac{[\vec{a}_2, \vec{a}_3]}{V_R} 2\pi, \quad V_R = \vec{a}_1 [\vec{a}_2, \vec{a}_3]$$

$\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_3 \dots$

$$\vec{a}_i \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i$$

- разрешенные волн. векторы для ф-ции Блоха

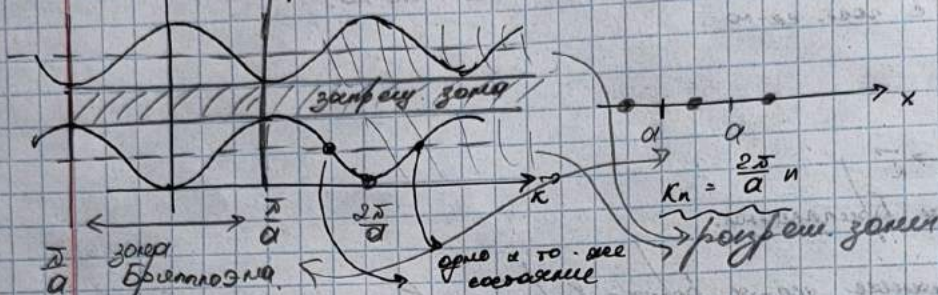
соответствуют Γ

Объём на 1 сайт: $\Delta V_k = \frac{\vec{v}_1}{N_1} [\frac{\vec{v}_2}{N_2}, \frac{\vec{v}_3}{N_3}] = \frac{1}{N} \vec{v}_1 [\vec{v}_2, \vec{v}_3]$

→ в зоне Бриллюэна находится N разрешённых состояний (создв. N - квант) ячеек реального крист.

объём яч. в k -пространстве (объём в зоне Бриллюэна)

$\left\{ \frac{V_k}{\Delta V_k} = N \right\} \sim$ число разреш. волн, вхо. в область 2π -й ячейки. ор. решётки (зона Бриллюэна) равно числу ячеек в кристалле.



→ если заполнить зону Бриллюэна ($\vec{e}$), то далее प्रदेशа заполнить не что слева и справа.

Пусть $n > 1$ частица заполн. $E_{max} = E_c$ (при $\vec{k} = 0$). Если хотя бы одна зона в кристалле полностью заполнена → это металл.

Если зоны пол-но заполн. есть пол-но пустые зоны → либо $\vec{e}$ - диэлектрик, либо металл, там где есть зоны для $\vec{e}$ → это диэлектрик.

Болупров. не рассматриваем (некое изометр.)

Необх. усл. диэлектрика:

для того, чтобы кристалл диэлектрик, значит св-ва (E_c д.б. в запр. зоне) необходимо, чтобы тело $\vec{e}$ в рас. на грани $2\pi/a$ или было меньше.

Метод спланирования

Если $U=0$, то $\psi = e^{i\vec{k}\vec{r}}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi = E \psi ; \quad U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$$

но пусть $U(\vec{r})$ - периодический потенциал (е. разл. от $2\pi/a$ + эквивалентно полн. об. $2\pi/a$)

$$f(\vec{r} + \vec{R}) = f(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} F_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

пот. период. зонит, ионов, взаимодейст. эффективный потенциал

$$F_{\vec{k}} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} f(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}}$$

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

вектор $\vec{k}$ решетки

$$u^*(\vec{r}) = u(\vec{r})$$

$$u_{\vec{k}} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} U(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} = \left(\frac{1}{V} \int d\vec{r} U(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)^* = u_{\vec{k}}^*$$

$$2) U(-\vec{r}) = U(\vec{r})$$

$$U_k^* = \frac{1}{V} \int d\vec{r} U^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} U(\vec{r}) e^{i\vec{k}(-\vec{r})} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} U(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = U_{-k}$$

$$U_k = \frac{1}{V} \int d\vec{r} U(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} U(-\vec{r}) e^{i\vec{k}(-\vec{r})} = U_{-k} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} U(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\Rightarrow U_{-k} = U_k^* = U_k$$

$$\psi = \sum_{\vec{Q}} C_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\vec{r}} \quad \vec{Q} - \text{некоторый вектор}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = \sum_{\vec{Q}} \frac{\hbar^2}{2m} Q^2 C_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\vec{r}}$$

$$U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \left(\sum_{\vec{k}} U_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \right) \left(\sum_{\vec{Q}} C_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\vec{r}} \right) = \sum_{\vec{k}, \vec{Q}} U_{\vec{k}} C_{\vec{Q}} e^{i(\vec{k}+\vec{Q})\vec{r}} =$$

$$= \sum_{\vec{k}, \vec{Q}} U_{\vec{k}} C_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}'\vec{r}} = \left\{ \vec{Q}' \text{ изобр. } \rightarrow \vec{Q} \right\} = \sum_{\vec{k}, \vec{Q}} U_{\vec{k}} C_{\vec{Q}-\vec{k}} e^{i\vec{Q}\vec{r}} = \left\{ \vec{Q}' = \vec{Q} + \vec{k} \right\} = \left\{ \vec{Q} = \vec{Q}' - \vec{k} \right\} =$$

$$= \sum_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\vec{r}} \left(\frac{\hbar^2 Q^2}{2m} C_{\vec{Q}} + \sum_{\vec{k}} U_{\vec{k}} C_{\vec{Q}-\vec{k}} \right) = E \sum_{\vec{Q}} C_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\vec{r}}$$

$$\Rightarrow \left\{ \sum_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\vec{r}} \left(\left(\frac{\hbar^2 Q^2}{2m} - E \right) C_{\vec{Q}} + \sum_{\vec{k}} U_{\vec{k}} C_{\vec{Q}-\vec{k}} \right) = 0 \right\}$$

$$\left\{ \left(\frac{\hbar^2 Q^2}{2m} - E \right) C_{\vec{Q}} + \sum_{\vec{k}} U_{\vec{k}} C_{\vec{Q}-\vec{k}} = 0 \right\}$$

$$\begin{array}{ccccccc} C_{\vec{Q}-\vec{k}} & C_{\vec{Q}} & C_{\vec{Q}+\vec{k}} & C_{\vec{Q}+2\vec{k}} \\ | & | & | & | \\ -\vec{k} & 0 & \vec{k} & 2\vec{k} \end{array}$$

Выводим:

$$\hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi = E\psi$$

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} U_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}; \quad U_{\vec{k}} = U_{\vec{k}}^* = U_{-\vec{k}} \\ U_0 = 0$$

$$\psi = \sum_{\vec{Q}} C_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\vec{r}} \sim \text{будем искать в виде некоторого разложения}$$

$$\Rightarrow \left\{ \left[\frac{\hbar^2}{2m} Q^2 - E \right] C_{\vec{Q}} + \sum_{\vec{k}} U_{\vec{k}} C_{\vec{Q}-\vec{k}} = 0 \right\}$$

$$\begin{array}{ccccccc} C_{-2} & C_{-1} & C_0 & C_1 & C_2 \\ \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 - E \right) & \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 - E \right) & \left(\frac{\hbar^2}{2m} 0^2 - E \right) & \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 - E \right) & \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 - E \right) \\ | & | & | & | & | \\ -\frac{2\pi}{a} & -\frac{\pi}{a} & 0 & \frac{\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} \end{array}$$

Видим, как-то в первую зону Брэгг-Релее.

Как решить?

3) Зн. волновое приближение: $C_0, C_{\pm 1} \neq 0$; $C_{|n| \geq 2} = 0$

пишем слоб. анал. ур-ие получим дис. соотношение:

$$E_n(q), \quad n=1, 2, 3.$$

Если достаточно, можно увеличить $n \rightarrow 5, 7$ и т.д.

Можно проверить ур-ие и т.Блоха $\psi = \sum_{\vec{Q}} C_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\vec{r}}$

Из соотношения, представим $\vec{Q}$ в свер. виде:

$$\vec{Q} = \vec{q} - \vec{k}$$

$\vec{k}$ - вектор др. решетки

Перепишем ур-е, с которыми будем работать:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{q} - \vec{k})^2 - E \right] C_{\vec{q}-\vec{k}} + \sum_{\vec{k}' = \vec{k} + \vec{k}'} U_{\vec{k}-\vec{k}'} C_{\vec{q}-\vec{k}'} = 0 \quad \sim \text{это ур-е проще писать}$$

В.ф. будет иметь вид:

$$\psi_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{q}-\vec{k}} e^{i(\vec{q}-\vec{k})\vec{r}} \rightarrow \text{проверим ур-е на т.б.нох.}$$

$$\psi_{\vec{q}} = e^{i\vec{q}\vec{r}} \sum_{\vec{k}} C_{\vec{q}-\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}}$$

мат. волна.
её модулация.

зависит по вектору др. решетки

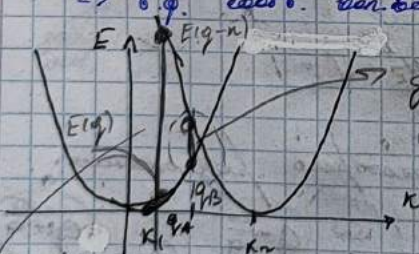
Симметрично период на решетке вращ.:

$$U_{\vec{q}}(\vec{r} + \vec{K}) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{q}-\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r} - i\vec{k}\vec{K}} = U_{\vec{q}}(\vec{r}) \rightarrow \text{все хорошо.}$$

Рассмотрим предельный случай $U_{\vec{k}} = 0$ - нет никакого потенциала.

$$\rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{q} - \vec{k})^2 = E_{\vec{q}-\vec{k}}$$

Пусть $C_{\vec{q}} = 1$, остальные $C_{\vec{q}-\vec{k}}$, $\vec{q} = \vec{k} = 0$
получим в.ф. мат. волн. вектору $\vec{q}$ т.р.



Здесь E близко - сильно зависит

A - неинвариант. случай

B - инвариант. случай

Энергия разнесена сильно $\rightarrow$

$\rightarrow$ мало влияния друг на друга $|E(q-k_1) - E(q-k_2)| \gg U_k$ - неинв.

$|E(q-k_1) - E(q-k_2)| \leq U_k$ - инвариант.

Не теряя общности, пусть $k_1 = 0$, тогда ур-е можно переписать:

$$[E - E_0(q)] C_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k} \neq 0} U_{\vec{k}} C_{\vec{q}-\vec{k}}$$

$$\text{ур-е } E_0(q) = \frac{\hbar^2}{2m} q^2$$

$$[E - E_0(q-k)] C_{\vec{q}-\vec{k}} = \sum_{\vec{k}' \neq 0} U_{\vec{k}'} C_{\vec{q}-\vec{k}-\vec{k}'} = \{ \text{выдел. или, когда } \vec{k} = -\vec{k}' \} =$$

$$= U_k C_{\vec{q}} + \sum_{\vec{k}' \neq 0, -\vec{k}} U_{\vec{k}'} C_{\vec{q}-\vec{k}-\vec{k}'} \rightarrow \text{покажем малое?}$$

оказывается, как малое значение.

$$\Rightarrow \begin{cases} [E - E_0(q)] C_q = \sum_{k \neq 0} U_k C_{q-k} \\ [E - E_0(q-k)] C_{q-k} = U_{-k} C_q \end{cases}$$

просто выиски
 $U_{-k} = U_k^*$
 $\rightarrow C_{q-k} = \frac{U_{-k}}{E - E_0(q-k)} C_q$

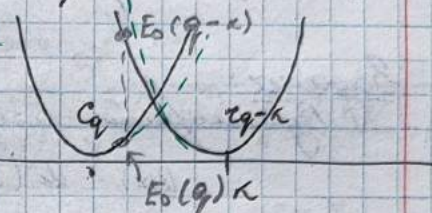
$$[E - E_0(q)] C_q = \sum_{k \neq 0} \frac{|U_k|^2}{E - E_0(q-k)} C_q$$

В результате получаем:

$$E = E_0(q) + \sum_{k \neq 0} \frac{|U_k|^2}{E_0(q) - E_0(q-k)}$$

замечено, т.е. порядок возмущения

из-за взаимод. фонов
 нелинейного измеш.
 отталкивание уровней



Симметричные вырожденные уровни:

$$[E - E_0(q)] C_q = U_k C_{q-k}$$

$$[E - E_0(q-k)] C_{q-k} = U_{-k} C_q$$

+ замеч. $U_{-k} = U_k^*$

$\det = 0$

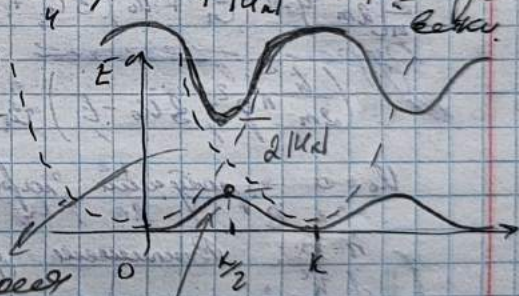
Решая, получим:

$$(E - E_0(q))(E - E_0(q-k)) - |U_k|^2 = 0 \quad \text{— квадратное уравнение}$$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{2} (E_0(q) + E_0(q-k)) \pm \sqrt{\frac{(E_0(q) - E_0(q-k))^2}{4} + |U_k|^2} \rightarrow \text{два ветки}$$

Возьмем $q = \frac{k}{2}$
 $E - E_0(\frac{k}{2}) = |U_k|$

среднее
 энергии
 уровней
 (зона фотонной)



В случае сильного
 взаимод. энергетическая
 щель — запрещенная зона

Решение для этого случая:

$$\psi = C_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} + C_{q-k} e^{i(\vec{q}-\vec{k}) \cdot \vec{r}}$$

здесь $\vec{r} = 0 \rightarrow$ т.е. $\vec{r}$ не
 меняется помер-ся $\rightarrow$ дифф.
 уравн. решают?
 берем какое-то q
 пусть $\vec{r} = 0$ в центре

$$E_0(\vec{q}) = E_0(\vec{q}-\vec{k})$$

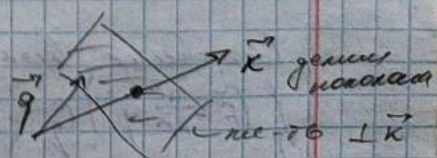
$$\frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (\vec{q}^2 - 2\vec{q} \cdot \vec{k} + \vec{k}^2)}{2m}$$

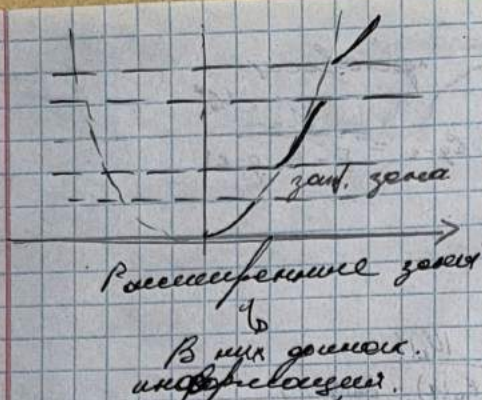
— это уравнение др-е брэгговского
 (или фотонной) дифракции

С-то эластона:

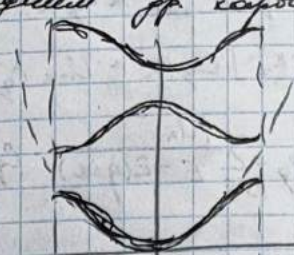
$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}$$

Вырожден. зона нагр. в зоне Бриллюэна





Можно было бы рассмотреть более подробно.



Рассеяние электрона

В яме потенциал: потенциал электрона.

Задача:

Одномерный потенциал в яме:

$$U(x) = U_0 \left(3 + 2 \cos \left(\frac{2\pi}{a} x \right) \right) \quad \text{где } |U_0| \ll 1.$$

Гамильтониан: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$

q — волновой вектор обратной решетки.

$$U(x) = U_0 \left(3 + 2 \cos \frac{2\pi}{a} x \right) = U_0 \left(3 + e^{i \frac{2\pi}{a} x} + e^{-i \frac{2\pi}{a} x} \right)$$

$k = \frac{2\pi}{a}$ — волновой вектор решетки.

Решение уравнения Шредингера в виде:

$$\psi = C_q e^{i q x}, \quad \hat{H} \psi = E \psi$$

$$\Rightarrow e^{i q x} \left[\frac{\hbar^2}{2m} q^2 C_q + (3C_q + C_{q-k} + C_{q+k}) U_0 \right] = E C_q e^{i q x}$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} q^2 - E + 3U_0 \right) C_q + U_0 C_{q-k} + U_0 C_{q+k} = 0$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (q \pm k)^2 - E + 3U_0 \right) C_{q \pm k} + U_0 C_q + U_0 C_{q \mp k} = 0$$

$$C_{q \pm k} = -\frac{U_0}{\frac{\hbar^2}{2m} (q \pm k)^2 - E} C_q$$

где $\tilde{E} = E - 3U_0$

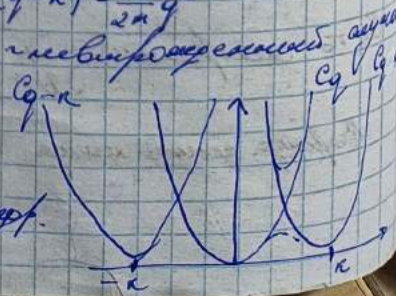
$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} q^2 - \tilde{E} \right) C_q + \frac{U_0^2 C_q}{\frac{\hbar^2}{2m} (q+k)^2 - \tilde{E}} + \frac{U_0^2 C_q}{\frac{\hbar^2}{2m} (q-k)^2 - \tilde{E}} = 0$$

Оставшиеся члены C_q и C_{q+k}

$$\left(\tilde{E} - \frac{\hbar^2}{2m} q^2 \right) C_q = U_0 C_{q+k}$$

$$\left[\tilde{E} - \frac{\hbar^2}{2m} (q-k)^2 \right] C_{q+k} = U_0 C_q$$

→ сводит к уравнению.

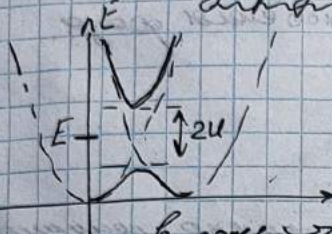


1) $q \approx \frac{\kappa}{2}$
 2) $q \approx \frac{\kappa}{2}$

$\psi = C_0 e^{i q x}$
 (вблизи зоны Брэгг-Рашба) $\psi_{\pm} = C_0 e^{i \frac{\kappa}{2} x} \pm C_0 e^{-i \frac{\kappa}{2} x}$

$\Rightarrow \psi_+ \sim \cos \frac{\kappa}{2} x$ "s"
 $\psi_- \sim \sin \frac{\kappa}{2} x$ "p"

Волновые ф-ии $\vec{e}$ с энергией в запрещенной зоне



Всп-ся сепарированным др-ем

$$E = \frac{1}{2} (E_0(\vec{q}) + E_0(\vec{q} - \vec{\kappa})) \pm \sqrt{\frac{(E_0(\vec{q}) - E_0(\vec{q} - \vec{\kappa}))^2}{4} + |U_{\kappa}|^2}$$

$$\approx E_0\left(\frac{\kappa}{2}\right) \pm \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{[q^2 - (q - \kappa)^2]^2 + 4\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 |U_{\kappa}|^2}$$

Обозначим $\Delta^2 = 4\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 |U_{\kappa}|^2$

$$\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - E_0\left(\frac{\kappa}{2}\right)\right) = \pm \sqrt{[q^2 - (q - \kappa)^2]^2 + \Delta^2}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} \left(\pm - E_0\left(\frac{\kappa}{2}\right)\right) = \varepsilon$$

$\Rightarrow \varepsilon^2 = [q^2 - (q - \kappa)^2]^2 + \Delta^2$

Если E лежит в запр. зоне это означает в др. слова: $\varepsilon < \Delta$

$\Rightarrow [q^2 - (q - \kappa)^2]^2 = \varepsilon^2 - \Delta^2 < 0$

качественное число.

$\Rightarrow q = \frac{\kappa}{2} \pm \frac{i}{2\kappa} \sqrt{\Delta^2 - \varepsilon^2} = q_1 + i q_2$

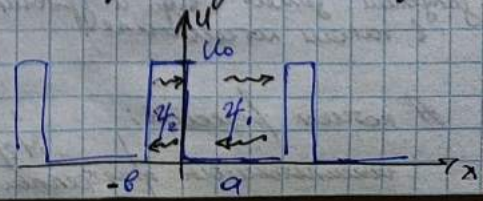
Тогда волн. ф-я:

$\psi \sim e^{i(q_1 + i q_2)x} = e^{i q_1 x} e^{-q_2 x} \sim \text{затухающ.}$

Получается, запрещенная зона не имеет в.ф. там где не и.д. запрещен? Равенство приравнивает компоненты в разностях? Иначе, соотношения на границах? Барьерная? самоопределение?

Модель Кронига-Ленни, подробно в Кайгородов ФТД стр. 152. «Толемур» - Загр. по ФТД гл. 12.5.

Потенциал внешнего электр. поля, $\varphi = \alpha + \beta$



$\psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + A_2 e^{-i\alpha x}$ где $\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$
 $\psi_2 = B_1 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}$

на границах нулевого слагаемого ф-ции:

$\psi_1(0) = \psi_2(0)$
 $\partial_x \psi_1(0) = \partial_x \psi_2(0)$

Комплексно сопряжены друг другу. Но! Потеряем блоховскую структуру — ролевую зарядовую симметрию.

$\psi_1(a) = \psi_1(a-b) = \psi_2(a-b) = \psi_2(-b) \cdot e^{ikd}$

идем по туннелю ГУ.

$\partial_x \psi_1(a) = \partial_x \psi_2(-b) e^{ikd}$

Всё представить и решить; в итоге можно получить:

$\cos ka = \cos \alpha d + \left(\frac{\beta^2 b}{2\alpha} \right) \sin \alpha d$

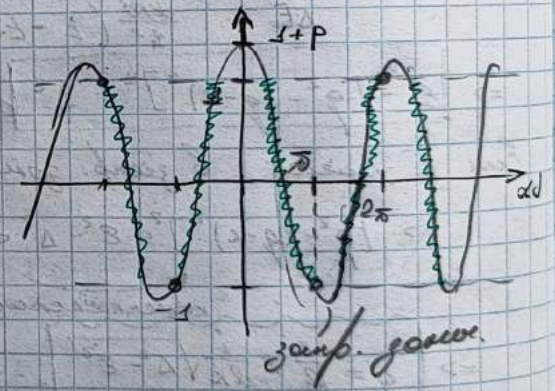
связь $\beta = \frac{\beta^2 b}{2\alpha}$

Еще приближение, что при $b \rightarrow 0$; $\hbar \omega \rightarrow \infty$ так, что $\hbar \omega_0 = \text{const}$

$\beta = \frac{\sqrt{2m\hbar\omega}}{\hbar}$ $\beta^2 b = \frac{2m\hbar\omega}{\hbar^2} b$

$\cos ka = \cos \alpha d + \frac{\beta^2 b d}{2\alpha} \sin \alpha d = \frac{2m\hbar\omega b d}{2} = p \neq 0$

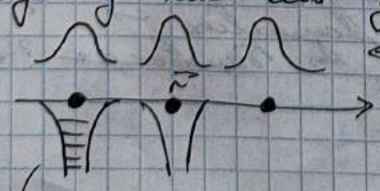
где p — параметр решетки (размер, длина)



Метод сильной связи.

Метод слабых св. → сваб. с в сильном потенциале.

Пусть у нас есть узлы:



б.р. приравняется слабо, так, что ψ в основном в окр-ти своего узла.

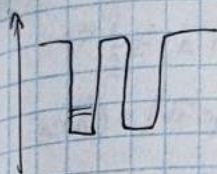
получили значения в.ф. и уровней в таком потенциале

Гораздо эффективнее с атомной решеткой.

$\hat{H}\psi = E\psi$ → через значения решетки

А можно решить;

$\hat{M}\psi = E\psi$



→ где ямы уровни расщепляются → ещё больше E_n →
 → ещё больше расщепляются.

Только в окрестности узла:

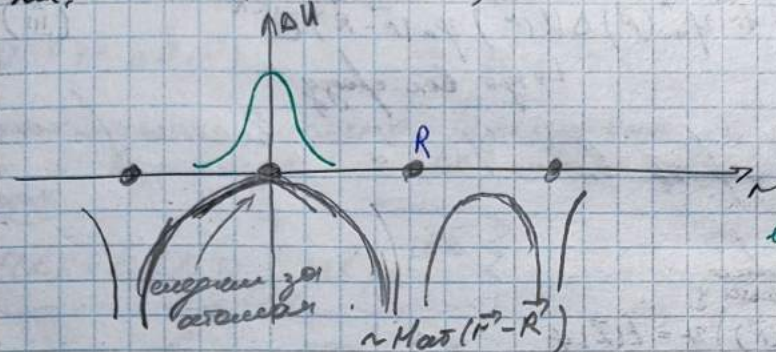
$$\hat{H} \approx \hat{H}_{\text{at}}(\vec{r})$$

Этот $\hat{H}$ расфас:

$$\hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}_{\text{at}}(\vec{r}) + \Delta U(\vec{r})$$

так, что $\hat{H}(\vec{r} + \vec{R}) = \hat{H}(\vec{r})$

мат-ая ф-я.
 (добавил, чтоб обеспечить периодичность)



$\mathcal{L}$ -в. ф-я

Характерный
 максимум локализу.
 в. ф. exp-0 где
 $\hat{H} \approx \hat{H}_{\text{at}}$

Есть N энергет. ямок и N узлов - будет N кратное
 расщепление. До этого уровня был N -кратное вырождение.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r} - \vec{R})$$

атомные в. ф.

г. Блоха

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{R}}$$

$$E(\vec{k}) = E_n = \text{const} \Rightarrow \vec{\nabla} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} = 0 \rightarrow \text{не меняется}$$

Будем искать в. ф. в ф. виде:

$$\psi_{\vec{k}} = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \Phi(\vec{r} - \vec{R})$$

новое ф-ия.

где $\Phi(\vec{r}) = \sum_m c_m \psi_m(\vec{r})$ - представим в виде разложения по
 собственным волновым ф-ям.

$$\psi_{\vec{k}} = \sum_{m, \vec{R}} c_m e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_m(\vec{r}) \rightarrow \text{представим в Гамильтоновом}$$

$$\sum_{m, \vec{R}} c_m e^{i\vec{k}\vec{R}} (\hat{H}_{\text{at}} + \Delta U) \psi_m = \sum_{m, \vec{R}} E c_m \psi_m e^{i\vec{k}\vec{R}} \quad \int \psi_n^* dV$$

$$\int \psi_n^* \psi_n dV = \delta_{nm}$$

$$\int \psi_n^* \hat{H}_{\text{at}} \psi_m dV = \int (\hat{H}_{\text{at}} \psi_n)^* \psi_m dV = E_n \delta_{nm}$$

$$\psi = \sum_{m, \vec{R}} c_m e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_m(\vec{r} - \vec{R})$$

→ учтем все это

$$(E(\vec{k}) - E_n) \int d\vec{r} \psi_n^* \psi = \int d\vec{r} \psi_n^* \Delta U \psi$$

здесь вернулось суммирование.

Можно переписать в др. виде. → малое из-за ΔU много ψ узла

$$R=0: (E(\vec{k}) - E_n) b_m = \sum_m b_m \int d\vec{r} \psi_n^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) \quad (I)$$

$$R \neq 0: -(E(\vec{k}) - E_n) \sum_m \sum_{\vec{R} \neq 0} b_m e^{i\vec{k}\vec{R}} \int d\vec{r} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}-\vec{R}) \Delta U(\vec{r}) \quad (II)$$

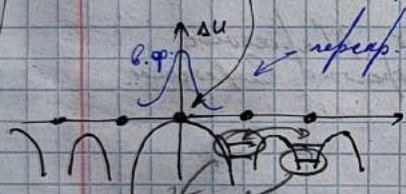
в.ф. слабо перекр. получили 3 значения

$$R \neq 0: + \sum_m b_m \sum_{\vec{R} \neq 0} \int d\vec{r} \psi_n^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}-\vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}} \quad (III)$$

→ все сразу

Нам нужно опр-ть b_m $\psi_n \Delta U$ - известные (можно считать)

2.11.232. В предыдущей серии $\hat{H}\psi = (\hat{H}_0 + \Delta U(\vec{r}))\psi = E(\vec{k})\psi$



перекр. между соседними ячейками.

$$\psi_n(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \Phi(\vec{r}-\vec{R})$$

по всем узлам реш. фазы

сдвиги из атомных фазовых

$\hat{H}_0 \psi_n \rightarrow \psi_n(\vec{r}) \sim \text{известно}$

функция из базиса

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_m b_m \psi_m(\vec{r})$$

знаем, а коэф-ты b_m не знаем

$$[E(\vec{k}) - E_n] b_m = + \sum_{\vec{R}} b_m \int d\vec{r} \psi_n^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}-\vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}} - [E(\vec{k}) - E_n] \sum_m \sum_{\vec{R} \neq 0} b_m e^{i\vec{k}\vec{R}} \int d\vec{r} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}-\vec{R}) \Delta U(\vec{r})$$

много

А детерминант системы даёт элемент $E(\vec{k})$

→ по этому методу алгебры ур-ий для b_m

Составим систему справа, тогда что-то слева должно быть

Система бр-го элементов (коэффициентов) для $\Phi(\vec{r})$? Если введём $\psi_m(\vec{r})$ в лев. выраж. или другие функции → от них ещё будет. Если взять разное ур-ие → тоже и ф-ии бр-го. и разное

1) s-уровень. $\rightarrow$ не вырожден. $\rightarrow$ берём 1 коэф-т $\rightarrow$ для него алгебраич. ур-е.

2) p-уровень $\rightarrow$ трёхкратное вырожд. $\rightarrow b_1, b_2, b_3$ (ψ_1, ψ_2, ψ_3)

3) d-уровень - пятикратное вырожд. $\rightarrow b_1 \div b_5$

Рассмотрим подробно s-уровень: $b_1 = b_2$

$$[E(\vec{k}) - E_s] b_s = - [E(\vec{k}) - E_s] \sum_{\vec{R}} \alpha(\vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}} - \beta - \sum_{\vec{R} \neq 0} \lambda(\vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}} \gamma b_s$$

$$\Rightarrow \left\{ E(\vec{k}) = E_s - \frac{\beta + \sum_{\vec{R} \neq 0} \delta(\vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}}}{1 + \sum_{\vec{R} \neq 0} \alpha(\vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}}} \right\}$$

$$\alpha(\vec{R}) = \int d\vec{r} \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}-\vec{R}) \quad ; \quad -\beta = \int d\vec{r} \psi_m^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \psi_n(\vec{r})$$

$$\delta(\vec{R}) = \int d\vec{r} \psi_m^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}-\vec{R})$$

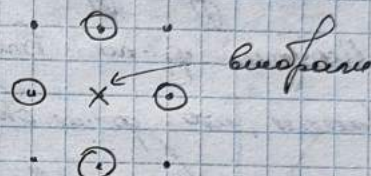
Как уже говорили. Если s -уровень. $\rightarrow \psi_s(\vec{r}) \in R$, т.е. сферическая φ -ф. $\Rightarrow \psi_s(-\vec{r}) = \psi_s(\vec{r}) \Rightarrow \alpha(-\vec{R}) = \alpha(\vec{R})$

Еще заметим - потенциал центра инверсии

$$\Delta U(-\vec{r}) = \Delta U(\vec{r}) \Rightarrow \delta(-\vec{R}) = \delta(\vec{R})$$

α, β, δ - малые, можно разложить в ряд
 α - мало и в знаменателе. $\rightarrow$ мы можем пренебречь малыми

$$\Rightarrow E(\vec{k}) = E_s - \beta - \sum_{\vec{R} \neq 0} \delta(\vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}}$$



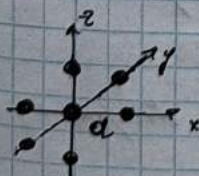
иногда больше перекрываем тем больше $\delta(\vec{R})$
 $\Rightarrow$ т.е. состоят из ближайших соседей

- 1) Метод сильной связи = метод линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО)
- 2) Если рассматривали - атом. не сосисов. $\rightarrow$ смешанн. мур. сосед
- 3) С-ть Блоховского $\vec{v}$: $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}$



$\cos kR \sim$ форма осн. для в.ф.

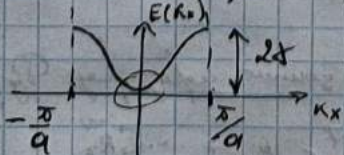
Задача 1. Рассчитать спектр, состоящий для кубич. решетки.



$$\vec{R} \begin{pmatrix} \pm a, 0, 0 \\ 0, \pm a, 0 \\ 0, 0, \pm a \end{pmatrix} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{учит в ближай. сосед} \end{array} \right.$$

$$E(\vec{k}) = E_s - \beta + 2\delta (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

Гранич. зав-ть:



для зоны шириной 4δ . $E_s \rightarrow$ нулю или по фазе δ фазе.

С-ть групп. v :

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x} \sim 2\delta$$

чем больше перекр. в.ф. тем выше δ тем выше v групп.

Зона шириной 4δ вблизи: $|k| \ll \frac{2\pi}{a}$

$$E(k) \approx E_0 - \beta - 2\delta \left[3 - \frac{1}{2}(k_x a)^2 - \frac{1}{2}(k_y a)^2 - \frac{1}{2}(k_z a)^2 \right] =$$

$$= E_0 - \beta - 6\delta + \delta a^2 k^2 \rightarrow \text{уравнение поверхности - сфера}$$

Функции Ванье.

Мы ставим в ф-лу вместо ψ по всем направлениям
хотим учесть макс. все ф-ии атомов. Но из соображений
можно ввести определенные функции.

$$\text{Если все } \psi_{nk}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \varphi_n(\vec{r}-\vec{R}) \quad (*)$$

ф-ия Ванье.

Зв. Беря каждую из функций ф-ию $\varphi_n \rightarrow$ она будет
будет удовл. уравнению блага.

1) Попробуем ф-ию блага записать в виде (*)

Знаем, что ф-ия блага:

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = \psi_{nk}(\vec{r}) = \psi_{nk}(\vec{r})$$

можно разл. в ряд Фурье по k .

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} f_n(\vec{r}, \vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}}$$

$$\text{где } f_n(\vec{r}, \vec{R}) = \frac{1}{V_k} \int d\vec{k}' \psi_{nk'}(\vec{r}) e^{-i\vec{k}'\vec{R}}$$

является
блуждающей (сдвиги $\vec{R}$ и $\vec{r}$)

Знаем, что сдвиги на вектор решетки блага:

$$\begin{aligned} f_n(\vec{r}+\vec{R}_0; \vec{R}+\vec{R}_0) &= \frac{1}{V_k} \int d\vec{k}' \psi_{nk'}(\vec{r}+\vec{R}_0) e^{-i\vec{k}'(\vec{R}+\vec{R}_0)} = \\ &= \frac{1}{V_k} \int d\vec{k}' e^{-i\vec{k}'\vec{R}_0} \underbrace{\psi_{nk'}(\vec{r}+\vec{R}_0)}_{\text{из блага } \psi_n(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_n(\vec{r})} e^{-i\vec{k}'\vec{R}} = \frac{f_n(\vec{r}, \vec{R})}{e^{i\vec{k}\vec{R}_0}} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ такое же, только сдвиги: $f_n(\vec{r}, \vec{R})$

2) Ф-ия Ванье удовл. уравнению блага.

Если взять сумму

$$\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} = N \delta_{\vec{R},0} \leftarrow \text{так-же как-то, т.е. ф-ия}$$

ф-ия блага, значит ф-ия.

Хотим проверить:

$$\begin{aligned} \int d\vec{r} \varphi_{n_1}^*(\vec{r}-\vec{R}_1) \varphi_{n_2}(\vec{r}-\vec{R}_2) &= \{ \text{запишем через ряд Фурье} \} = \\ &= \frac{1}{V_k} \int d\vec{r} \left[\int d\vec{k}_1 e^{-i\vec{k}_1(\vec{r}-\vec{R}_1)} \varphi_{n_1, \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \right] \left[\int d\vec{k}_2 e^{-i\vec{k}_2(\vec{r}-\vec{R}_2)} \varphi_{n_2, \vec{k}_2}(\vec{r}) \right] = \\ &= \text{или порядок слагаемых} = \\ &= \frac{1}{V_k^2} \int d\vec{k}_1 \int d\vec{k}_2 e^{+i\vec{k}_1\vec{R}_1 - i\vec{k}_2\vec{R}_2} \int d\vec{r} \varphi_{n_1, \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \varphi_{n_2, \vec{k}_2}(\vec{r}) = \end{aligned}$$

$$= \delta_{k_1 - k_2, 0} \delta_{n_1, n_2} \rightarrow \text{фотоническ.}$$

Исходя из знания как устроены кристаллы — можно вложить-то фотон. частицу $E_n(\vec{k})$. Но! тогда хотим узнать как движется $\vec{E}$.

Полумассовая модель диэлектрика.
диэлектрик электрон

Знаем $E_n(\vec{k})$, добавляем $\vec{E}$ и $\vec{H}$. Гамильтониан:

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{c} \hat{A} \right) + e\varphi + U(\vec{r})$$

придр. к электр. кристаллу.

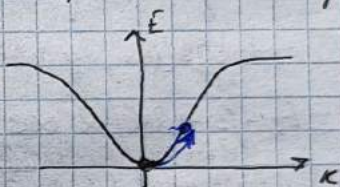
Можно описать классическим описанием:

$$\vec{F}: m\vec{a} = \vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = m \frac{d\vec{p}}{dt}; \quad \vec{F} = e\vec{E} + \frac{e}{c} [\vec{v}, \vec{H}] = e\vec{E} + me [\vec{p}, \vec{H}]$$

Хотим как-то связать со спектром $E_n(\vec{k})$

$$\vec{v} = \frac{\partial E}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}$$

$$\vec{R} = \vec{R}_0 + \int \vec{v} dt$$



Волновое поле $\rightarrow$ частота ω
импульс $\rightarrow$ волн. k

Модель Зоммерфельда.
(выражде. $\vec{E}$ из.)

- 1) $\vec{k}$ и импульс $\vec{p} = \hbar \vec{k}$
- 2) В.ф. $\sim e^{i\vec{k}\vec{r}}$ — волна де-Бройля

3) Кин. хар.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

4) Сл.об:

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}$$

маленький $\vec{E}$

5) $\vec{k}$ — оп-ся ГУ Борна-Карниона.

Блокование $\vec{E}$

- 1) Номер зоны n , $\vec{k}$, $\hbar \vec{k}$ — постоянны.
- 2) Блокование в.ф.
 $e^{i\vec{k}\vec{r}} u_n(\vec{r})$ где $u_n(\vec{r} + \vec{K}) = u_n(\vec{r})$

3) Нулевой элемент:

$$E_n(\vec{k}): E_n(\vec{k} + \vec{K}) = E_n(\vec{k})$$

4) $\vec{v}_n = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$

5) Г.У. Борна-Карниона + кристалл
N — число состояний

$\rightarrow$ Приближение не совсем, кроме пункта 4)

Домашняя работа

№2. Амплитуда зарядов 1, для ОУК
 $R = \frac{a\sqrt{3}}{2}$



Ближние соседи:

$$\begin{pmatrix} \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{a\sqrt{3}}{2} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{a\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{a\sqrt{3}}{2} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{a\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

$$E(\vec{k}) = E_s - \beta - \sum_{\vec{R} \neq 0} \chi(R) e^{i\vec{k}\vec{R}} =$$

$$= E_s - \beta - 2\chi \left(\cos\left[(k_x + k_y + k_z) \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] + \cos\left[(-k_x + k_y + k_z) \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] + \cos\left[(k_x - k_y + k_z) \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] + \cos\left[(k_x + k_y - k_z) \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] \right) =$$

$$= E_s - \beta - 2\chi \left(2 \cos\left[(k_y + k_z) \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] \cos\left[k_x \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] + 2 \cos\left[(k_x - k_z) \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] \cos\left[k_y \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] \right) =$$

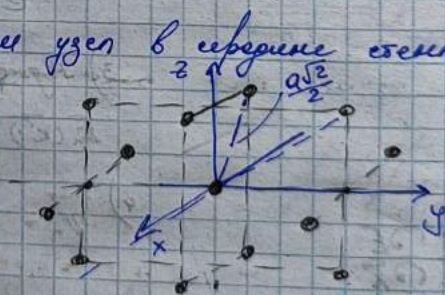
$$= E_s - \beta - 4\chi \cos\left(k_x \frac{a\sqrt{3}}{2}\right) \left(\cos\left[(k_y + k_z) \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] + \cos\left[(k_y - k_z) \frac{a\sqrt{3}}{2}\right] \right) =$$

$$= E_s - \beta - 4\chi \cos\left(k_x \frac{a\sqrt{3}}{2}\right) 2 \cos\left(k_y \frac{a\sqrt{3}}{2}\right) \cos\left(k_z \frac{a\sqrt{3}}{2}\right) =$$

$$= E_s - \beta - 8\chi \cos\left(k_x \frac{a\sqrt{3}}{2}\right) \cos\left(k_y \frac{a\sqrt{3}}{2}\right) \cos\left(k_z \frac{a\sqrt{3}}{2}\right)$$

Для ОУК:

Выберем узел в сферической сетке



$$\frac{a}{2} \quad \sqrt{\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4}} = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

Ближайшие узлы:

$$(x, y): \left(\frac{a}{\sqrt{2}}; \frac{a}{\sqrt{2}}; 0\right); \left(-\frac{a}{\sqrt{2}}; \frac{a}{\sqrt{2}}; 0\right); \left(\frac{a}{\sqrt{2}}; -\frac{a}{\sqrt{2}}; 0\right); \left(-\frac{a}{\sqrt{2}}; -\frac{a}{\sqrt{2}}; 0\right)$$

$$(y, z): \left(0; \frac{a}{\sqrt{2}}; \frac{a}{\sqrt{2}}\right); \left(0; -\frac{a}{\sqrt{2}}; \frac{a}{\sqrt{2}}\right); \left(0; \frac{a}{\sqrt{2}}; -\frac{a}{\sqrt{2}}\right); \left(0; -\frac{a}{\sqrt{2}}; -\frac{a}{\sqrt{2}}\right)$$

$$(x, z): \left(\frac{a}{\sqrt{2}}; 0; \frac{a}{\sqrt{2}} \right); \left(-\frac{a}{\sqrt{2}}; 0; -\frac{a}{\sqrt{2}} \right);$$

$$\left(\frac{a}{\sqrt{2}}; 0; -\frac{a}{\sqrt{2}} \right); \left(-\frac{a}{\sqrt{2}}; 0; \frac{a}{\sqrt{2}} \right)$$

$$E(\vec{k}) = E_s - \beta - 2\Delta \left(\cos[(k_x + k_y) \frac{a}{\sqrt{2}}] + \cos[(k_x - k_y) \frac{a}{\sqrt{2}}] + \right.$$

$$+ \cos[(k_y + k_z) \frac{a}{\sqrt{2}}] + \cos[(k_y - k_z) \frac{a}{\sqrt{2}}] +$$

$$\left. + \cos[(k_x + k_z) \frac{a}{\sqrt{2}}] + \cos[(k_x - k_z) \frac{a}{\sqrt{2}}] \right) =$$

$$= E_s - \beta - 4\Delta \left(\cos(k_x \frac{a}{\sqrt{2}}) \cos(k_y \frac{a}{\sqrt{2}}) + \cos(k_y \frac{a}{\sqrt{2}}) \cos(k_z \frac{a}{\sqrt{2}}) + \cos(k_x \frac{a}{\sqrt{2}}) \cos(k_z \frac{a}{\sqrt{2}}) \right)$$

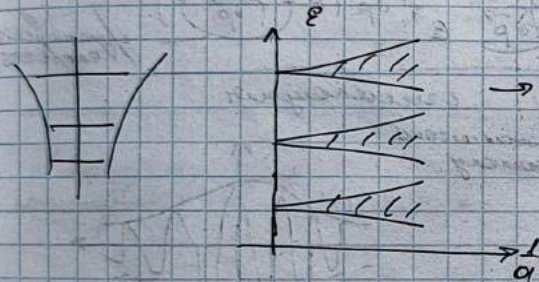
ответы к 9/3.

ДУК:

$$E(\vec{k}) = E_s - \beta - 8\Delta \cos k_x \frac{a}{2} \cos k_y \frac{a}{2} \cos k_z \frac{a}{2}$$

ГЧК:

$$E(\vec{k}) = E_s - \beta - 4\Delta \left(\cos k_x \frac{a}{2} \cos \frac{a}{2} k_y + \dots \right)$$



→ Суммарное ур-ние обобщается, формируя зоны.

Движение $\vec{e}$ будем описывать как в классич. механике:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} = \vec{e} \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \nabla \vec{r} \cdot \vec{B} \right) \rightarrow \text{под действием } \vec{F} \text{ меняется}$$

$$\vec{k} \text{ и } \vec{p}$$

$$\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}); \quad \vec{B} = \vec{B}(\vec{r})$$

Мы хотим получить дифференциальное ур-е: (для зонной структуры)

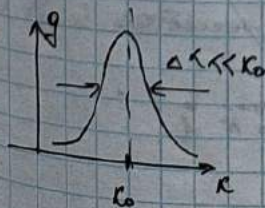
$$E_n(\vec{k}) \rightarrow \hbar \omega = \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}} \cdot \frac{1}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}} \sim \text{как } \vec{k}$$

Если фазирован импульс → фазовая координата:

$$\Delta x \Delta k_x \geq \hbar \sim \text{ф. неопр-ти Гейзенберга} \quad \Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) - \text{волновая ф-ция}$$

для того чтобы сп-ть координату не дост. $\hbar$ линейной величиной, нужен целый набор волн.



Забудем пока про волновую ф-цию и будем говорить о волновых пакетах.

$$\text{Свободное ф-во: } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{E}{\hbar} t)} \quad \text{или} \quad \sim \frac{\hbar k^2}{2m} t$$

гармонич. формулу импульса

Рекомендуем проверить

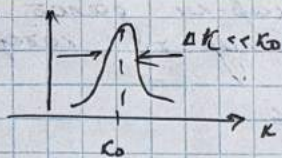
14.11.23.

$$\begin{aligned}
 \kappa' &= \kappa_0 + \delta \kappa \\
 &= \sum_{\delta \kappa} g(\kappa_0 + \delta \kappa) e^{i(\kappa_0 r - \frac{\hbar \kappa_0^2}{2m} t)} e^{i(\delta \kappa \cdot r - \frac{\hbar \kappa_0 \delta \kappa}{m} t)} = \\
 &= e^{i(\kappa_0 r - \frac{\hbar \kappa_0^2}{2m} t)} \sum_{\delta \kappa} g(\kappa_0 + \delta \kappa) e^{i(r - \frac{\hbar \kappa_0}{m} t) \delta \kappa}
 \end{aligned}$$

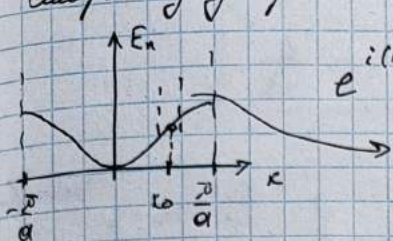
Становится понятно, что такое $\bar{F}$, из этого сл-ва при $\Delta K \ll K_0$
то же самое можно сделать и с ф-цией Блэха.

Требования к качеству
вашиного идею.

$$\int d\vec{k}$$



Смещение зоны Бриллюэна

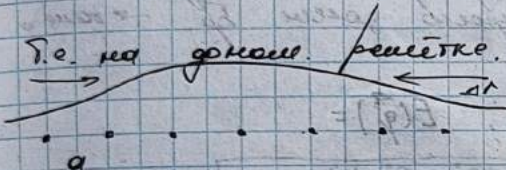


$$e^{i(\vec{k}_0 \cdot \vec{r} - \frac{E_n(\vec{k}_0)}{\hbar} t)} \int d\vec{k} e^{i(\vec{k} - \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \frac{1}{\hbar} t)} d\vec{k}$$

Чтобы распространяться линейно необходимо $\Delta k \ll k_0 \ll \text{хар-й интервала зоны}$.

$$\Delta k \ll k_0 \sim k_F \sim \frac{1}{a}$$

$$\Delta \Gamma \sim \Delta k \Rightarrow \Delta \Gamma \gg a, \lambda_F, \lambda_0 = \frac{2\pi}{k_0}$$



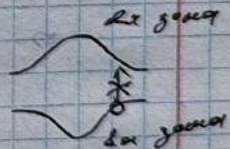
обсуждения в реальном пространстве больше а

Улучш. сущ-т отражение - влияние на электронную массу незначительно

Основные положения теории зонной структуры

- 1) Вывод спектра из зонной модели: $E_n(\vec{k})$
- 2) n - интеграл обозначает - запрещенные энергетические переходы
- 3) $\vec{E}$ - классич. частота со сложившейся зоной дисперсии

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F} = -\vec{E} \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{p}, \vec{B}] \right)$$



$E_n(\vec{k})$ - выражает для линейных энергий

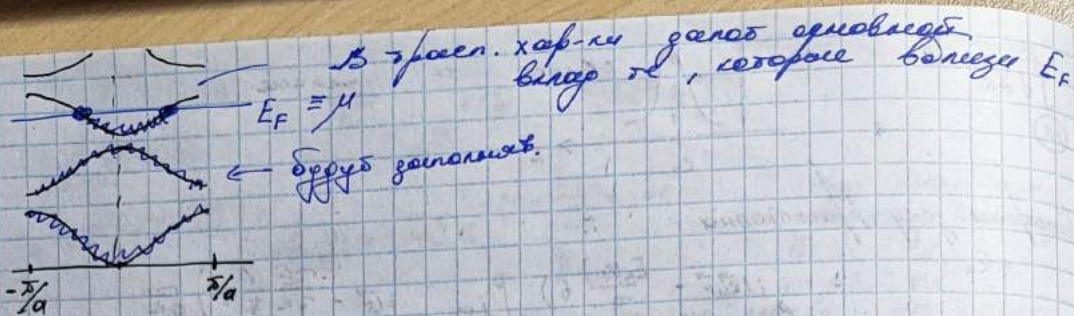
- 4) $\hbar \vec{k}$ - в зонной модели - квазиимпульс.

$\vec{p}, \vec{k} + \vec{p}$ - одно и то же явление в одной зоне Бриллюэна

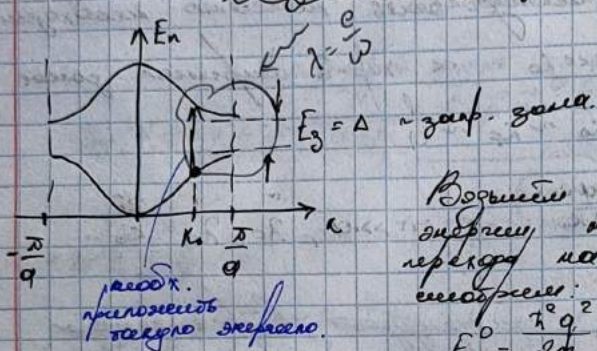
- 5) Формула Ферми.

$$f(E_n) \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} = \frac{d\vec{k}/4\pi^3}{e^{(E_n(\vec{k}) - \mu)/T} + 1}$$

Каждый элемент так. может быть занят



Условие отсутствия
 запрещенных зон



Возвращаясь к сдвигу координат, можно всего
 энергии, чтобы приложить разл.
 переход на краю зоны E_F — там
 минимум:
 $E_g^0 = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$

Будем:

$$E(\vec{q}) = \frac{1}{2} (E_g^0 + E_{g-k}^0) \pm \sqrt{\left(\frac{E_g^0 - E_{g-k}^0}{2}\right)^2 + |\hbar k|^2} \quad \text{---}$$

Прям. с. ф. из которой ΔE — разброс Δk , сдвиги
 разброс Δk — разброс Δk , сдвиги

$$\Delta V(k) = \frac{\partial V}{\partial k} \Delta k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \Delta k$$

$$V = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \quad E_{g-k}^0 = \frac{\hbar^2 (q-k)^2}{2m}$$

$$\text{---} \quad \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 qk}{2m} \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 q^2}{4m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 + |\hbar k|^2}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial E}{\partial q^2} \Big|_{q=\frac{k}{2}} = \frac{(\hbar^2 k/m)^2}{|\hbar k|} \sim \Delta$$

$$\Rightarrow \Delta V = \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2 k^2/m^2}{|\hbar k|} \Delta k \ll V_F \quad \text{из предположения малости волнового вектора}$$

Следовательно:

$$\lambda_F \sim a \sim \frac{1}{k_F} \Rightarrow \frac{\hbar k}{m} \sim v_F$$

$$\Rightarrow \left\{ \Delta k \ll \frac{\Delta}{\hbar v_F} \right\} \frac{1}{\Delta k} \text{ — идеализированный набор волн}$$

Из принципа неопределенности

$$\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k} \gg \frac{\hbar v_F}{\Delta}$$

Какая энергия передается за этот путь Δk :

$$\tilde{E} \Delta x = e E \frac{\hbar v_F}{\Delta}$$

и — энергия

Если это $> \Delta$, то e может
 перейти из запрещенной зоны в зону

Чтобы этого не было $\rightarrow$ обратное условие:
мелкие переходы существуют:

$$\Delta^2 < e E \hbar v_F$$

$$v_F \hbar k_F \sim E_F \sim \frac{\hbar v_F}{a}$$

$$\frac{\Delta^2}{E_F} \ll e E a$$

когда поле больше $\rightarrow$ мелкие переходы.

Пример:

$$\begin{aligned} E &= 10^{-2} \text{ А} \\ E_F &= 10 \text{ эВ} \\ \Delta &= 0.3 \text{ эВ} \\ a &= 10^{-8} \text{ см} \end{aligned}$$

$$e E a \sim 10^{-10} \text{ эВ}$$

С магнитным полем. пр. Зеемана. Там, сохр.ся энергия:
но есть магн.-об. помешенной орбиты.



$$\Delta k_x \Delta k_y \sim \frac{e H}{\hbar c}$$

$$\Delta k^2 \sim \frac{e m}{\hbar}; \quad \omega_c = \frac{e H}{m c}$$

$$\left\{ \hbar \omega_c \ll \frac{\Delta^2}{E_F} \right\}$$

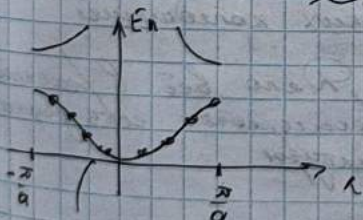
$$H \sim 10^4 \text{ Гс} \Rightarrow \hbar \omega_c \sim 10^{-4} \text{ эВ}$$

условие нарушилось если $\Delta \sim 10^{-2} \text{ эВ}$
 $\rightarrow$ м.б. переход.

Если светим e $\lambda = \frac{c}{\omega}$

$$\left\{ \hbar \omega > \Delta \right\} \rightarrow \text{тогда возможен переход.}$$

Известность заполненных зон.



если зона полностью заполн. $\rightarrow$ E переходит в металл не
изменяет (в др. зоне) и равняется энергии металла.

$$\vec{j} = e \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}} \right) = 0$$

$$\vec{j} = e \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} E_n(\vec{k}) \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{2} \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} (E_n^2(\vec{k})) = 0$$

только гол. ? $\Rightarrow$ только частично заполн. зоны дают вклад в транспортные свойства. по периодич. р-ам.

Движение в постоянном
электрическом
поле.
Блоховские состояния

Прим. полупров. модель, с кристаллу приложено $\vec{F}$

Знаем для фотона:

$$E_n(\vec{k}) ; E_n(\vec{k} + \vec{k}) = E_n(\vec{k})$$

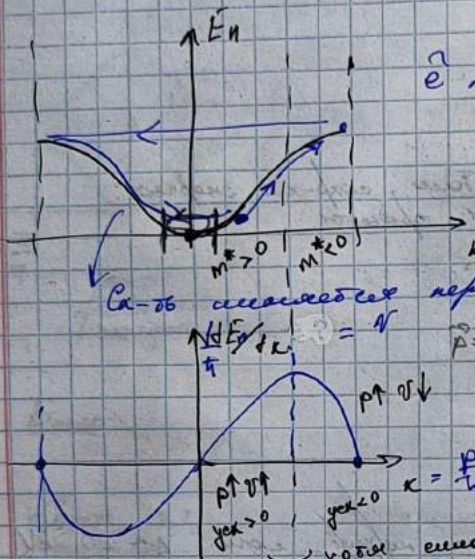
$$\hbar \dot{\vec{k}} = e \vec{E} \Rightarrow \vec{k}(t) = \vec{k}_0 + \frac{e \vec{E}}{\hbar} t = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}} \Rightarrow v(\vec{k} + \vec{k}) = v(\vec{k})$$

а тут периодичность

$$\vec{v}(\vec{k}_0 + \frac{e \vec{E}}{\hbar} t)$$

что мы имеем дело?



$\vec{E}$ ползёт-ползёт, а дальше имеет не монотон, всё справ. в 1-й зоне Brill.

Скорость колеблется вверх-вниз, $\vec{E}$ в пр. направлении

колеблется (Блоховские колебания)

Сила перем. в одну и ту же сторону.

$$ma = F$$

хотя сила направл. в одну и ту же сторону

При приближ. к Брэгговской м-те $\vec{E}$ -волна сжимается 100%. $\hbar$ на чуть уменьшается. $\vec{v} \downarrow$, хотя импульс $\vec{p}$

$$\frac{eE}{\hbar} \tau = 2 \frac{\pi}{a} \Rightarrow \tau = \frac{2\pi\hbar}{eEa} \quad \omega = \frac{2\pi}{\tau} = \frac{eEa}{\hbar}$$

~ период Блоховских колебаний

Пр. В реальности это плохо реализуется. Дело всё в рассеянии или в реальности есть дефекты кристаллической структуры.

$$K_{\max} = K_{\tau} = \frac{eE\tau}{\hbar} \sim 10^8 \text{ см}^{-1}$$

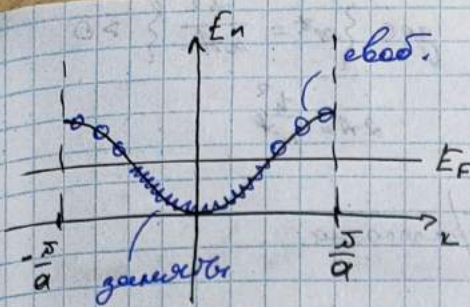
$$a = 10^{-8} \text{ см}$$

$$\frac{1}{a} \sim 10^8 \text{ см}^{-1}$$

$$\omega \sim 10^{10} - 10^{11} \text{ с}^{-1}$$

могут пробегать всю длину. Рассеив. гораздо сильнее

Электронные дрейфы.



Для тока:

$$\vec{j} = e \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} v_n(\vec{k}) = e \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} v_n(\vec{k}) - e \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} v_n(\vec{k}) = 0$$

замкнуты
своб.

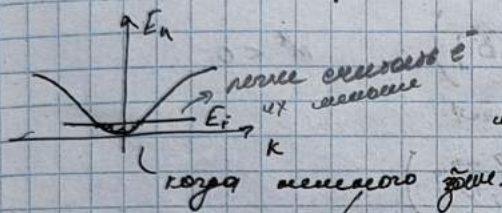
замкнуты
своб.

своб.
своб.

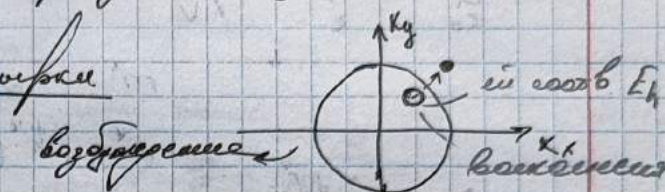
Свободы соединять ток можно пропустить. неадекватные своб., но с "зарядом".

Если это $\tilde{e} \rightarrow q < 0 \Rightarrow$ дырки

Зачем? М.Д. ситуация.



замкнуты
своб.



замкнуты
своб.

Энергия электронного возбуждения всегда больше 0

$$E_{\tilde{e}} = E_{\tilde{e}} - E_F > 0$$

$$E_h = E_F - E_h > 0$$

Пр-я, опис. движение $\tilde{e}$:

$$\vec{v}_n = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}}$$

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \tilde{e} \left(\vec{E} + \frac{1}{mc} [\vec{k}, \vec{B}] \right)$$

замкнуты траектории

Представим эти уравнения:

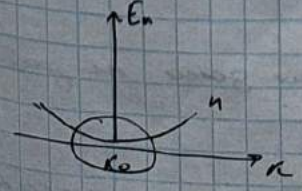
Если некоторое фазовое пр-во. траектории опис. кинемат. функции поля E_n и не зависят от $\tilde{e}$.

В к. механике траектории пересекаются не могут.

$$\{ m^* \vec{a} = \vec{F} \}$$

меняются в своб. с доминирующей дисперсией

Рядом с E_n , смотрим вблизи рма.



$$E_n = E_n(k_0) + A(k-k_0)^2 + \dots, \text{ где } A > 0$$

аппроксимируем параболой.

$$v_n = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k} = \frac{2A}{\hbar} (k-k_0) = \frac{1}{m^*}$$

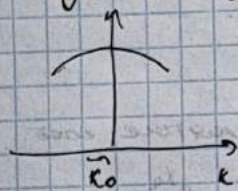
$$a_n = \frac{dV_n}{dt} = \frac{2A}{\hbar} \frac{d\kappa}{dt} = \frac{\hbar}{m^*} \frac{d\kappa}{dt} = \vec{F}$$

$$\text{где } \left\{ m^* = \frac{\hbar^2}{2A} \right\} > 0$$

$$2A = \frac{\hbar^2}{m^*}$$

$$\Rightarrow \left\{ m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial \kappa^2} \right)^{-1} > 0 \right\}$$

Когда находится у потолка зоны Бриллюэна:



$$E_n = E_n(k_0) - A(\kappa - \kappa_0)^2$$

Продифференцируем:

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2A} < 0$$

$$\Rightarrow \vec{a} \nabla \vec{F}$$

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial \kappa^2} \right)^{-1}$$

$$\hbar \dot{\vec{\kappa}} = m^* \frac{d\vec{V}_n}{dt} = -|e| \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{B}] \right)$$

$$m^* < 0$$

можно решить как с $\vec{E}$, но с отриц. массой.

учтем явно знак элект.

$$|m^*| \frac{d\vec{V}_n}{dt} = |e| \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{B}] \right)$$

а можно положить массу, помнож. заряд, → график

В такой зоне 2 элект. движутся в противополож. напр-иях! Выбираю что-то одно.

Эффективное / число свободных электронов

$$\frac{d\vec{V}_0}{dt} = \frac{e\vec{E}}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial \kappa^2} \right)$$

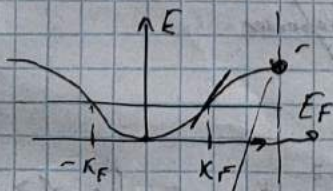
Пусть есть ток: (пусть $\vec{v} = 0$)

$$I = \sum_{\text{зона, элект.}} e \cdot \vec{v}_0(t)$$

$$\frac{dI}{dt} = \frac{e^2 E}{\hbar^2} \sum_{\text{зона, элект.}} \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial \kappa^2} \right) \xrightarrow{\text{с учетом}} \frac{1}{\pi} \frac{e^2 E}{\hbar^2} \int_{-\kappa_F}^{\kappa_F} d\kappa \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial \kappa^2} \right)$$

Свободные электроны, N - число:

$$\frac{dI}{dt} = \frac{e^2 E}{m} N$$



Сравнивая, можно ввести эффективное число $\tilde{e}$

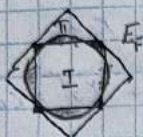
$$N_{\text{эфф}} = \frac{1}{\pi} \frac{m}{\hbar^2} \int_{-\kappa_F}^{\kappa_F} d\kappa \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial \kappa^2} \right)$$

Полностью заполненная зона не даёт вклада в ток.

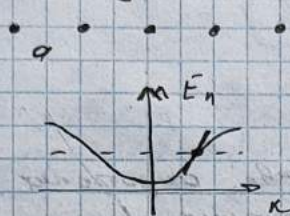
Квадр. усл. размерная: если много $\tilde{e}$ на ячейку

$$N_{\text{эфф}} = \frac{1}{\pi} \frac{m}{\hbar^2} \left. \frac{\partial E_n}{\partial k} \right|_{k_F} = \frac{2}{\pi} \frac{m}{\hbar^2} \left. \frac{\partial E_n}{\partial k} \right|_{k_F} \rightarrow \text{сферично } \frac{\partial E_n}{\partial k} = 0 \rightarrow N_{\text{эфф}} = 0 \rightarrow \text{диэлектрик.}$$

всё спр-ся производной от энергии



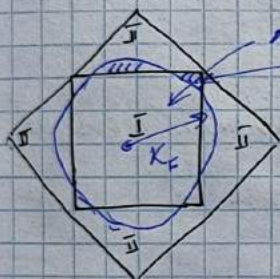
Есть целочисл. осей:



число осей: $\frac{2\pi/a}{2\pi/a} = 1$
 $N = \frac{b}{a} = \frac{2\pi/a}{2\pi/a}$
 $N_{\text{числ.}} = 2N_p$

21.11.23.

Необх. усл. диэлектрика: нети много $\tilde{\epsilon}$ на атомах.



пов-сть Ферми.

но не все зоны в I заняты. $\Rightarrow$ будет всё равно металл.

Полупров. движение $\tilde{\epsilon}$ в магнитном поле.

$$E=0, H \neq 0$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{\tilde{\epsilon}}{c} [\vec{v}, \vec{H}] = \vec{F}$$

Выбираем с.к., чтобы $z \parallel \vec{H}$; Если $\tilde{\epsilon}$ движется, то попо.

$E = \text{const} = \text{пронизогам. пов-сть}$ $\frac{dk_z}{dt} = \frac{dp_z}{dt} = 0$
 $\Rightarrow$ изотропн. движение: $\hbar k_z = p_z = \text{const}$
 Как меняется энергия:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dE}{d\vec{p}} \cdot \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{v} \cdot \frac{\tilde{\epsilon}}{c} [\vec{v}, \vec{H}] = 0 \Rightarrow E = \text{const}$$

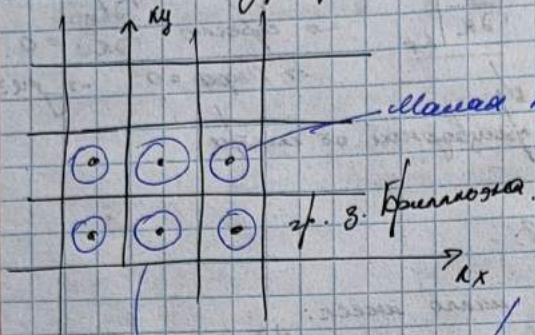
$\Rightarrow$ даёт тривиальное движение в с.к.р-ве.

В теории Блоха есть условие:

$$E(\vec{k} + \vec{K}) = E_n(\vec{k})$$

и эта связь существует для любых значений энергии Ферми.

Рассеяние электр. рассеяния.

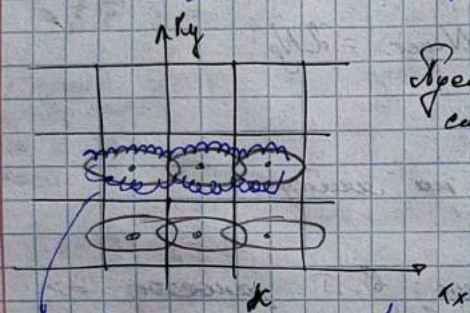


малая пов-сть Ферми

Предполагаем, что $k_z = 0$

(* Если $k_z \neq 0 \Rightarrow \sqrt{k_F^2 - k_z^2} = k_\perp$

закрученное пов-сть Ферми.



Проблема появления анизотропии может возникнуть след. ситуация.

Но орбита замыкается

Огибающая пов-сть Ферми

→ Бурез сферический цилиндр.



Время движения по траектории $\vec{z} \parallel \vec{H}$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{\hbar}{e} [\vec{v}, \vec{H}] =$$

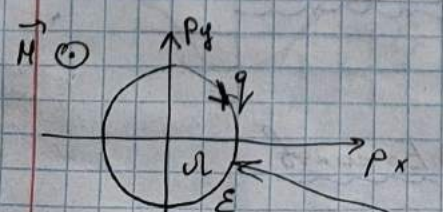
расширение по координатам

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{\hbar}{e} v_y H$$

$$\frac{dp_y}{dt} = -\frac{\hbar}{e} v_x H$$

$$\left(\frac{dp_x}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dp_y}{dt} \right)^2 = \frac{\hbar^2 H^2}{e^2} v_\perp^2$$

$$\Rightarrow \frac{dq}{dt} = \frac{\hbar}{e} H v_\perp \Rightarrow dt = \frac{e}{\hbar H} \frac{dq}{v_\perp(q)}$$

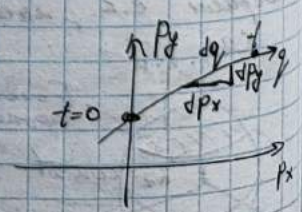


$$t = \frac{e}{\hbar H} \int \frac{dq}{v_\perp(q)}$$

Период:

$$T = \frac{e}{\hbar H} \oint \frac{dq}{v_\perp(q)}$$

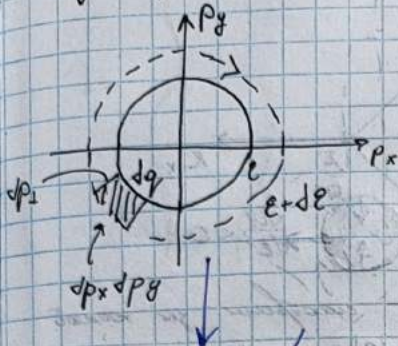
и для 2 условия равенства траектории



$d\Omega = \int dp_x dp_y$ — не-го сф-ая конфигурация

$d\Omega = dp_x dp_y = dq dp_x = \left| \frac{dp_x}{dE} \right| dE dq =$
 $= \frac{dE dq}{\left| \frac{dE}{dp_x} \right|} = \frac{dE dq}{v_x}$

Чтобы увеличить энергию:



Получаем кольца: $[E, E+dE] \approx$

$= \int \frac{dE}{v_x} dq = dE \int \frac{dq}{v_x(q)} \equiv d\Omega$

$\Rightarrow \left\{ \frac{c}{v} = \frac{d\Omega}{dE} \right\}$

приор сф-я по фазе.

Если материал пол-ов Ферми, а в малом поле мерцающий резонанс или мурманский свет T по знаку $T \Rightarrow$ уменьшено угловое пространство пол-ов Ферми

Из массы:

$\omega_c = \frac{eH}{mc} = \frac{2\pi}{T}$

Можно ввести эквивалентную массу:

$m_c = \frac{1}{2\pi} \frac{d\Omega}{dE} \sim$ эквивалентная величина $\rightarrow$ можно во все ф-лы аналогично ввести

Электронные и дырочные фобиты

1) $E(k_x, k_y)$ — спектр, когда рассматриваем кубический кристалл.

$E(k_x, k_y) = E - \frac{1}{2} (\cos k_x a + \cos k_y a)$

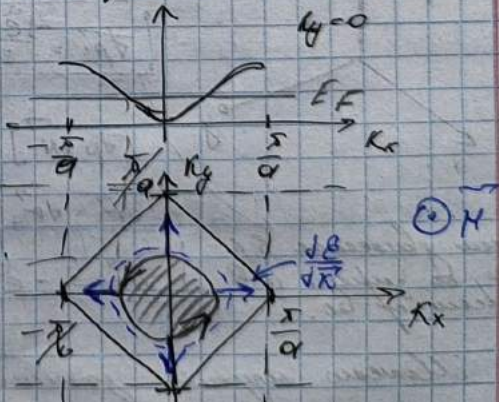
$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{1}{\hbar c} \left[\frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \times \vec{H} \right] = \frac{d\vec{p}}{dt}$

где знак $\vec{e}$

Можно считать:

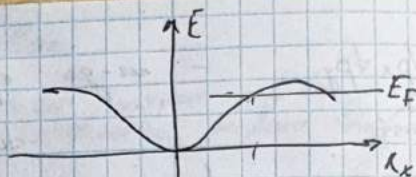
$\frac{\partial E}{\partial k_x} = \frac{a}{2} \sin k_x a \cdot \vec{x}_0 + \frac{a}{2} \sin k_y a \cdot \vec{y}_0$

$\Rightarrow \frac{d\Omega}{dE} > 0$, — в редуцированном $\Rightarrow m_c > 0$
и электронная фобита



2) Что если E_F будет находиться?

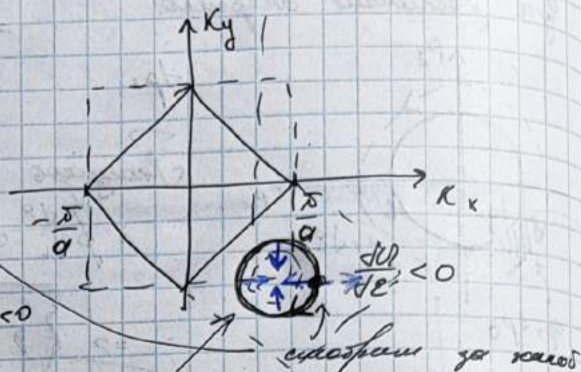
Увелич. $E \rightarrow$ орбиты $\downarrow$
 $\frac{dE}{dk} < 0 \Rightarrow m_e < 0$



$$k_x = \frac{\pi}{a} + \delta$$

$$\Rightarrow \frac{dE}{dk} < 0$$

$\Rightarrow \tilde{e}$ находится не в ту сторону, это связано с $m_e < 0$

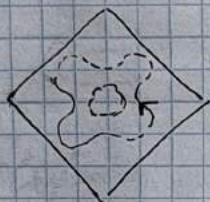


Если наоборот $m_e > 0$ и $\tilde{e} > 0 \Rightarrow$

$$m_e = \frac{1}{a^2} \left| \frac{d^2 E}{dk^2} \right| > 0$$

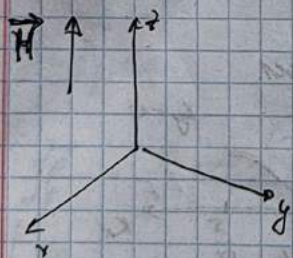
$$e \rightarrow -e$$

$\Rightarrow$ изменение орбиты



А что в реальном пр-ве?

Векторы $\tilde{e}$ в координатной системе



$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{-e\hbar}{c} [\vec{v} \times \vec{H}]$$

$$\boxed{\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{-e\hbar}{c} [d\vec{r}_1 \times \vec{H}]}$$

$$d\vec{r} = \vec{v} dt$$

$$[d\vec{p} \times \vec{H}] = -\frac{e\hbar^2}{c} d\vec{r}_1 - \frac{e\hbar}{c} [H^2 - H_z^2] dz = -\frac{e\hbar^2}{c} d\vec{r}_1$$

$$d\vec{r} = d\vec{r}_1 + dz \cdot \vec{z}_0$$

Зная движение в к-пр-ве, в з-рези и в реальном пр-ве.

$$\boxed{d\vec{r}_1 = -\frac{c}{eH^2} [d\vec{p}_1 \times \vec{H}]}$$

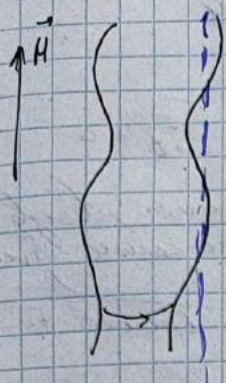
Можно получить замкнут.

$$x \leftrightarrow -\frac{c}{eH} p_y ; y \leftrightarrow \frac{c}{eH} p_x$$

- 1) Движение в реальном пр-ве, когда $-e$ полев. с-по.
- 2) В.м-ти $\perp H$ траектория в реальном пр-ве повторяется в импульсном пр-ве.
- 3) Если в р-пр-ве траектория замкнута $\rightarrow$ в реальном

сфера.

в) $-//$ - сфера $\rightarrow$ в реальном поле сфера.



поверхность сферического поля

Кинетическое уравнение

28.11.23.

Поправим сеп-то наши знания

$$\psi_{nk} \sim e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} \psi_{nk}(\vec{r})$$

Пусть из известной функции известно: $E_n(\vec{r})$

$$\varphi \sim e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} = i E_n(\vec{r}) \hbar / \hbar \int d\vec{r}' e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} \frac{\partial E_n}{\partial \vec{r}'} \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{r}'} = \vec{v}_n$$

проинтегрируем и будем тогда

обложимся от центр $\vec{v}_n = \vec{v}_0$

поэтому введем функцию

$$\vec{p}(t), \vec{r} = \int_{t_0}^t dt \vec{v}_n(t, \vec{r}) + \vec{r}_0$$

Введем неравновесную ф-но распр-я.

$f(\vec{p}, \vec{r}, t)$ $\rightarrow$ можно иметь стандартные кинетические уравнения

разве что в 3d

$$\frac{df}{dt} = \bar{I}(f) \quad \text{примем} \quad \bar{I}(f_0) = 0$$

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = \left\{ \vec{v}_n = \frac{\partial E_n}{\partial \vec{p}} \right\} \odot$$

уточнение $e(E + \frac{1}{em} [\vec{p}, \vec{H}])$

$$\odot \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial E_n}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \vec{e} \left(E + \frac{1}{em} [\vec{p}, \vec{H}] \right) \right) = \bar{I}(f) = - \frac{f - f_0}{\tau}$$

дифференциальное уравнение

Если будем считать близко к равновесию:

$$f = f_0 + f_1, \quad f_1 \ll f_0 \quad \text{тогда интеграл переносим:}$$

равновесие $\bar{I}(f) = - \frac{f - f_0}{\tau}$ - интеграл сбалансирован в э-перебалансе (фр. сего ф-на ав-н. - диокине)

что если: $E = 0, H = 0$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad \text{иначе некорректно}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{f - f_0}{\tau} \Rightarrow \frac{\partial f_1}{\partial t} = - \frac{f_1}{\tau} \Rightarrow f_1 \sim e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Удельная проводимость металла

$\vec{E}, \vec{H} = 0$
Пусть $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ и ищем стационарное решение $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$

Тогда остается: $f = f_0 + f_1$, ищем отклонения, возм. $\vec{E}$
из-за $\frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} \vec{E} = - \frac{f_1}{\tau}$ (зав. только от энергии, не от импульса) $f_1 \ll f_0$
внешнее $f_0 \rightarrow f_0$

Для поправки:

$$f_1 = -e\tau \frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} \frac{\partial \vec{E}}{\partial \vec{p}} = -e\tau \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} (\vec{v}_n \cdot \vec{E})$$

Какой поток ток:

$$\vec{j} = 2e \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \vec{v}_n \cdot f = 2e \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \vec{v}_n (f_0 + f_1) = 2e \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \vec{v}_n f_1$$

спл. вырожд.

$$= -2e^2 \tau \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \vec{v}_n (\vec{v}_n \cdot \vec{E}) = \text{целое } \vec{E} \parallel \vec{x}_0$$

$\vec{v}_n \cdot \vec{v}_n = \vec{x}_0$

$\vec{v}_n \cdot \vec{v}_n = \vec{x}_0$

исключаем $\vec{v}_n \cdot \vec{v}_n$ и $\vec{x}_0$

$$= -2e^2 \tau E x_0 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} v_x^2 = \frac{1}{3} v_x^2 = \frac{1}{3} v^2 \quad \text{с}$$

вводя не-то вырожденный = $de g(\epsilon)$

уже учт. вырожд. и $g(\epsilon)$

$$\text{с} = \frac{e^2 \tau E}{3} \int de g(\epsilon) v^2 \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$$

вырожденного

Рассеяние газа свободных незав. электронов.

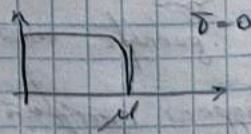
$$g(\epsilon) = \frac{4}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}; \quad f_0 = e^{-\frac{\epsilon - \mu}{kT}} + 1$$

$$\Rightarrow \vec{j} = e^2 \vec{E} \left[\frac{1}{3} v^2 \tau g(\epsilon) \right]_{\epsilon=\mu} =$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -\delta(\epsilon - \mu)$$

$$g(\mu) = \frac{3}{2} \frac{m}{\hbar^2}$$

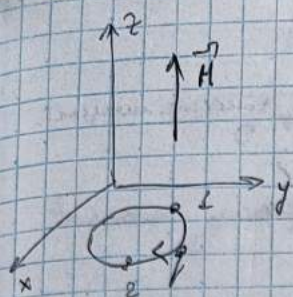
$$\Rightarrow \vec{j} = \frac{ne^2 \tau}{m} \vec{E}$$



Как при $\vec{H} = 0$ в магнитном поле.

Время релаксации со скоростью

$$t_1 = \frac{e}{eH} \int \frac{d\vec{p}}{v_H(P_x, P_y)}$$



$$\int \vec{p} \times d\vec{r} = \int d\vec{r} \frac{d\vec{r}}{dt} = \int d\vec{r} \frac{e\hbar}{2m} \frac{d\vec{r}}{dt}$$

$$\frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int \vec{p} \dots = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int \vec{p} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \dots = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e\hbar}{2m} \int \rho(\vec{r}) d\vec{r} \dots$$

$$H_1 = \frac{e}{2m} \frac{d\vec{r}}{dt}$$

$$H_1 f(\vec{r}, \vec{p}, t) \rightarrow f(p_2, e, t_1)$$

$$\Rightarrow \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t_1} + \frac{\partial f}{\partial p_2} \frac{dp_2}{dt} + \frac{\partial f}{\partial e} \frac{de}{dt} = I(f)$$

$$\frac{de}{dt} = \frac{\partial e}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} = (\vec{v} \cdot \vec{e}) \cdot e$$

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = e\vec{E}$$

В атомном пространстве:

$$\frac{\partial f}{\partial t_1} \frac{dt_1}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_2} eE_2 + \frac{\partial f}{\partial e} e(\vec{v}, \vec{E}) = - \frac{f - f_0}{\tau}$$

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = e(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v} \times \vec{H}])$$

вплоть только
идеально поля

в реальных условиях
обычно: $\frac{\tau}{c} |\vec{H}| \gg |\vec{E}|$
тогда $\frac{dt_1}{dt} = 1$

$$\Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t_1} + \frac{\partial f}{\partial p_2} eE_2 + \frac{\partial f}{\partial e} e(\vec{v}, \vec{E}) = - \frac{f - f_0}{\tau}$$

→ как бы H и не
велико — магн.
поле не совершает
работы

$$f = f_0 - \frac{\partial f_0}{\partial e} \chi$$

→ связь с квант.
равновесием. Ворот
φ=0

$$\frac{\partial f_0}{\partial e} \frac{\partial \chi}{\partial t_1} - \frac{\partial f_0}{\partial e} \frac{\partial \chi}{\partial p_2} eE_2 + \frac{\partial f_0}{\partial e} e(\vec{v}, \vec{E}) = - \frac{\partial f_0}{\partial e} \chi \frac{1}{\tau}$$

$$- \frac{\partial f_0}{\partial e} \chi e(\vec{v}, \vec{E}) - \frac{\partial f_0}{\partial e} \frac{\partial \chi}{\partial e} e(\vec{v}, \vec{E}) = \frac{\partial f_0}{\partial e} \chi \frac{1}{\tau}$$

ост. L₀₀ преобразует малые погр.

$$\left\{ \frac{\partial \chi}{\partial t_1} + e(\vec{v}, \vec{E}) = \frac{\chi}{\tau} \right\} \text{ — подробно в приложении § 52 стр 76}$$

"Гальванского магнетического явления"

Магнетизм электропроводящего тела

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi \vec{M}$$

$$\vec{M} = \chi \vec{H}$$

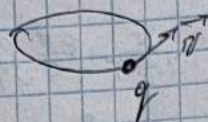
магн. восприимчивость

$$\chi = \frac{\mu - 1}{4\pi}$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H}$$

магн. проницаемость

Напомним, $\vec{L}$ связано со круговой орбитой:



$$\vec{L} = \frac{1}{2e} [\vec{r} \times \vec{v}] = \frac{1}{2em} [\vec{r} \times \vec{p}] \quad \text{механ. момент}$$

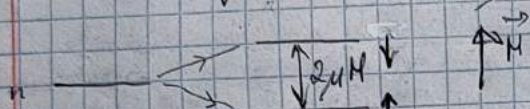
$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] \quad \frac{|\vec{L}|}{|\vec{r}|} = \frac{1}{2em}$$

орбитальный момент.

У $\vec{S}$ есть вектор. мех. момент

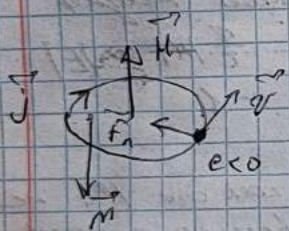
$$\frac{\mu}{\hbar} \vec{S} = - \frac{|\vec{e}|}{mc} \Rightarrow \mu = - \frac{|\vec{e}| \hbar}{2mc} \equiv - \mu_B$$

Дополнительно $\vec{H} = - \mu \vec{H}$, если был уровень $\rightarrow$ расщепление



в данном случае $\vec{e}$ больше

$\vec{e}$ тогда в магн. поле - парамагнетизм



$$\vec{F}_L = - \frac{|\vec{e}|}{c} [\vec{v} \times \vec{H}]$$

круговой ток создаст $\vec{m} \uparrow \downarrow \vec{H}$ - диамагнетизм.

т.е. у $\vec{e}$ тогда есть парамагн. и диамагн. ток в атоме по какой ток?

Парамагн. моменты - из-за свойств магнет. момента $\vec{e}$ - спин. - парамагнетизм Полюри $LSZr$. ($\chi > 0$)
 Диамагн. моменты - из-за орбитального рв. $\vec{e}$ в магн. поле. ($\chi < 0$) - Палерату

1. Модель - ферромагн. $\vec{e}$ тогда: $\tau \ll \mu$
 2) свободная энергия:

$$\mathcal{L}(V, \sigma, \mu) \rightarrow \mathcal{L} = - p dV - S d\sigma - N d\mu$$

$$\Rightarrow N = - \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mu} \right)$$

$$\text{Усл.-св.} \quad \mathcal{L} = - \sigma \sum_k \ln \left[1 + e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{\tau}} \right]$$

$$\Rightarrow N = - \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mu} \right) = \sum_k \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\tau}} + 1}$$

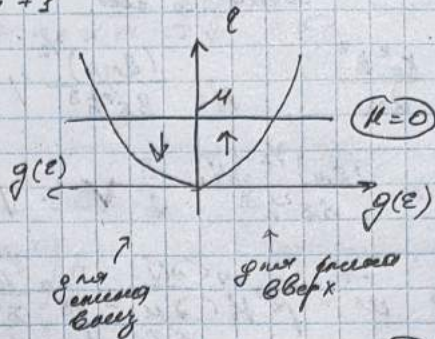
Может быть 2 ситуации: $\vec{S} \uparrow \uparrow \vec{H}$ $\vec{S} \uparrow \downarrow \vec{H}$

имеется в виду проекция спина
 $E - \beta \mu$ $E + \beta \mu$

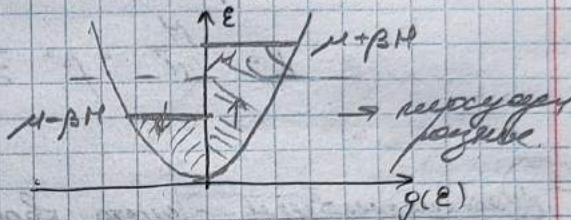
где $\beta = \frac{1}{k_B T}$ - параметр Бора.

$$\Rightarrow f = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{T}} + 1} \rightarrow \exp\left\{\frac{\epsilon - (\mu \pm \beta H)}{T}\right\} + 1$$

Волновая функция: $g(\epsilon) \sim \sqrt{\epsilon}$



когда добавляется магнитное поле.

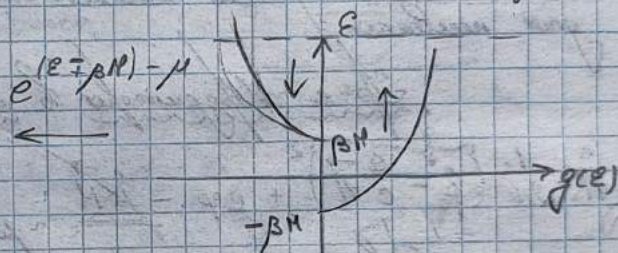


$$\mu > 0$$

$$\chi > 0$$

Рисунок функции распределения:

$\vec{\mu} \uparrow \uparrow \vec{H}$
параллельно.



1) $T=0, \mu=0$

$$n_T = n_V = \frac{1}{2} \int_0^\mu g(\epsilon) d\epsilon \rightarrow \text{по ор-е магнетизма}$$

2) $T=0, \mu \neq 0$

$$\Rightarrow n_T = \frac{1}{2} \int_0^{\mu + \beta H} g(\epsilon) d\epsilon$$

$$n_V = \frac{1}{2} \int_0^{\mu - \beta H} g(\epsilon) d\epsilon$$

$$\Rightarrow \text{Гусснерт магнетизма}$$

$$\chi = \beta(n_T - n_V) = \frac{\beta}{2} \int_{\mu - \beta H}^{\mu + \beta H} g(\epsilon) d\epsilon$$

стандартное расщепление уровней: $\beta H \ll \mu$

$$\Rightarrow \frac{\beta}{2} g(\mu) \cdot 2\beta H = \beta^2 g(\mu) H$$

$$\Rightarrow \chi = \beta^2 g(\mu) > 0$$

3) Для $T \neq 0$:

$$\mathcal{Z}_0(\mu) = \mathcal{Z}_0 = - \sum_k \ln [1 + e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{T}}] ; N = - \frac{\partial \mathcal{Z}_0}{\partial \mu}$$

$$\mathcal{Z}(\mu, H) = \frac{1}{2} \mathcal{Z}_0(\mu + \beta H) + \frac{1}{2} \mathcal{Z}_0(\mu - \beta H) = \{ \text{в фазе действия} \} =$$

$$= \mathcal{Z}_0(\mu) + \frac{1}{2} (\beta H)^2 \frac{\partial^2 \mathcal{Z}_0}{\partial \mu^2} + \dots$$

$$\vec{M} = \left(- \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \mu} \right)_{T, V, H} = - \frac{1}{H} \beta^2 \frac{\partial \mathcal{Z}_0}{\partial \mu^2} = + \beta^2 \mu \frac{\partial N}{\partial \mu}$$

для симметрии
концентрации
Рассчит.
д.в. кол-во разное?

$$N = 2 \frac{\frac{4}{3} \pi K_F^3}{\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^3} = V \frac{K_F^3}{3\pi^2} \quad \text{объем сферы Ферми.} \quad \rightarrow K_F^3 = 3\pi^2 n$$

объем 1го слоя.

$$\mu = \frac{K_F^2 \hbar^2}{2m}; \quad N = \frac{(2m\mu)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} V$$

$$\frac{\partial N}{\partial \mu} = \frac{(2m)^{3/2} \sqrt{\mu}}{3\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{3}{2} \sqrt{\mu} = V \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^2} \quad \mu = \frac{p_F^2}{2m}$$

$$\Rightarrow \vec{\mu} = \beta^2 \hbar \frac{\partial N}{\partial \mu} = \beta^2 \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^2} V \hbar, \quad \beta = \frac{|\epsilon| \hbar}{2m \epsilon}$$

Магнитная восприимчивость:

$$\chi = \frac{\mu}{V N} = \beta^2 \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^3}$$

Динамический - чисто квантовый эффект - для классика:

уравнение Шредингера в магнитном поле.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi - \vec{\mu} \cdot \vec{H}$$

или обобщено
инвариантно.

разложение по $\vec{H}$ приводит к
различ. μ -сб.
при изменении внешнего
поля $\rightarrow$ эффект спина

$$1) \hat{p} = -i\hbar \nabla; \quad [\hat{p}, \vec{A}] = -i\hbar \text{div} \vec{A}$$

$\hat{p}$ и $\vec{A}$ не коммутируют.

Но $\vec{A}$ выбран такое, чтобы $\text{div} \vec{A} = 0$

2) Квант. уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

можно сделать каноническое преобразование

уравнение

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \nabla f, \quad \varphi \rightarrow \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad \psi \rightarrow \psi e^{i\frac{e}{\hbar c} f}$$

$$3) \hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2$$

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = i\hbar^2 e H_z$$

не коммутирует (не можем
знать точно ϵ_x - ϵ_y)

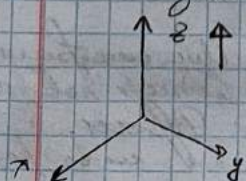
Связанное с вектор. полем

также вращиваем:

$$\text{М.Д.} \quad \vec{A} = H \cdot x \cdot \vec{y}_0 \rightarrow \text{выберем вот это}$$

$$\text{так } \vec{A} = H \vec{r}$$

$$\text{или } \vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{H} \times \vec{r}]$$



$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{e}{c} H x \right)^2 + \frac{p_z^2}{2m}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{eH}{c} x \right)^2 \psi = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = E \psi$$

$$\psi = F(x) e^{i \frac{p_y}{\hbar} y + i \frac{p_z}{\hbar} z}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{eH}{c} x \right)^2 F + \frac{p_z^2}{2m} F = E F$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{eH}{c} x \right)^2 F = \left(E - \frac{p_z^2}{2m} \right) F$$

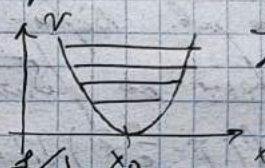
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + \frac{e^2 H^2}{2m c^2} \left(x - \frac{c p_y}{e H} \right)^2 F = \left(E - \frac{p_z^2}{2m} \right) F = E_0 F$$

$$\omega_c = \frac{|e| \hbar}{m c}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} F'' + \frac{m}{2} \omega_c^2 \left(x - \frac{c p_y}{e H} \right)^2 F = E_0 F$$

Сдвинуто относительно x_0 гармон. осцил.

гармон. осцилатор. про него все ясно.



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Phi'' + \frac{k}{2} u^2 \Phi = E \Phi$$

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

$$\omega^2 = \frac{k}{m}$$

Сравнивая

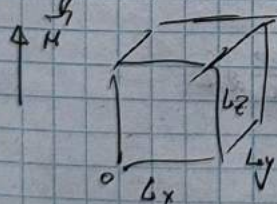
→ уровни Ландау

$$E_n = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar \sqrt{\frac{m \omega_c^2}{m}} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \quad \downarrow = \pm \frac{1}{2}$$

если вращаем по формуле к случаю.

x_0 - сдвиг, p_y - какое p_y можно брать?

Есть куб.



$$x_0 = -\frac{p_y}{m \omega_c}$$

$\vec{e}$ - вектор в оср. пр-ве.

$$\rightarrow 0 \leq x_0 \leq L_x \Rightarrow \text{ограничение по } p_y$$

$$m \omega_c L_x < p_y < 0$$

серию краевых + внутренних уровней

$$\Rightarrow \Delta p_y = \frac{2\pi \hbar}{L_y}$$

состояния укладываются много раз, т.е. можно реализовать

$$\frac{K L_x L_y}{2\pi \hbar} = S$$

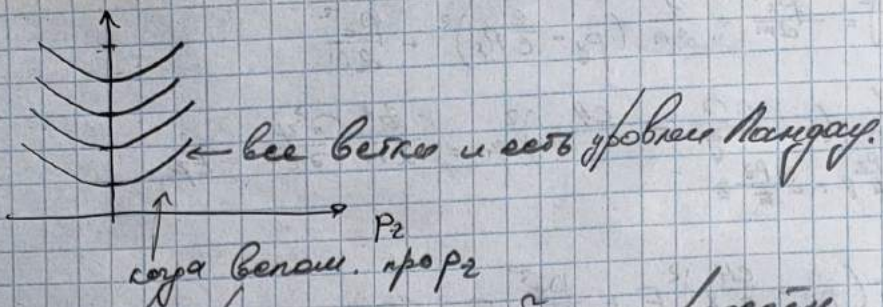
$$\Phi_0 = \frac{2\pi \hbar c}{|e|}$$

квант магнитного потока

это вычисл. состояний (разная форма по p_y , но энергия одинак.)

магн. поток через куб.

Уровни Ландау назыв. совм. всех уровней с заданным p_z . Уровни Ландау вырождены.



Внеш. возмущенности $\vec{E}$ неопределен только $\rightarrow$
из-за этого и возникает вырождение уровней.
т.е. зная это в сумме.

Квантование фазы $\vec{E}$ во
внешнем магн. поле.

Окунев + Лифшиц:

Фазы $\vec{E}$ в магн. поле квантуются в соотв-ии с
правилом к.в. Бора-Зоммерфельда.

Интеграл по фазе:

$$\oint (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) \cdot d\vec{r} = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2}) = \{ \text{коррекция фаз.} \} = \{ \text{картыся не бурею} \} =$$

$$= 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2})$$

$\odot \vec{B}$ $\vec{E} = 0$, есть только $\vec{B}$ (из или $\vec{H}$)
 $e \neq 0$

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{B}] = -\frac{e}{c} \left[\frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B} \right]$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -\frac{e}{c} [\vec{r} \times \vec{B}] + \hbar \dot{\vec{k}}_0$$

$$\oint \vec{p} \cdot d\vec{r} = \hbar \oint \vec{k} \cdot d\vec{r} = -\frac{e}{c} \oint (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot d\vec{r} =$$

$$= -\frac{e}{c} \vec{B} \oint [\vec{r} \times d\vec{r}] = +\frac{e}{c} \vec{B} \cdot 2\vec{S} \cdot \vec{z}_0 = \frac{e}{c} 2\Phi$$

пусть $x = r \cos \theta$ $dx = -r \sin \theta d\theta$
 $y = r \sin \theta$ $dy = r \cos \theta d\theta$

$$\begin{vmatrix} x_0 & y_0 & z_0 \\ x & y & 0 \\ dx & dy & \end{vmatrix} = \vec{z}_0 (x dy - y dx) = \vec{z}_0 r^2 d\theta$$

С фазой $\vec{A}$ связано,

$$\oint (-\frac{e}{c} \vec{A}) \cdot d\vec{r} = -\frac{e}{c} \Phi$$

$$\Rightarrow \oint (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) \cdot d\vec{r} = \frac{e}{c} \Phi = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2})$$

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e} (n + \frac{1}{2}) = 2\Phi_0 (n + \frac{1}{2})$$

Магнитный поток
через фазу
квантуется

Рассмотрим свойства фотона в к-пространстве; измем. импульса: 5.12.23,
 $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{B}]$ где $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$

решаем д-у:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{c} [\vec{r} \times \vec{B}] + \hbar \vec{k}_0$$

Получаем дифференциал:

$$\oint d\vec{r} d\vec{k} = -\frac{e}{c} \oint [\vec{r} \times \vec{B}] d\vec{k} = \frac{e}{c} \vec{B} \oint [\vec{r} \times d\vec{k}] = \frac{2\pi e B}{c} S$$

Скорость скольжения:

$$\hbar \Delta k = \frac{|\vec{e}|}{c} \Delta \Phi$$

→ переход к нек. площади ~ квадрату

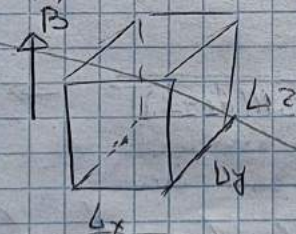
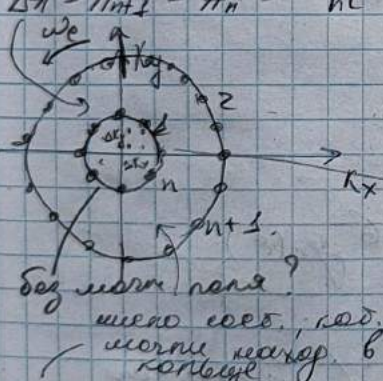
$$A_n = \dots = \left(\frac{e}{\hbar c}\right)^2 S_n = \frac{|\vec{e}|^2 B}{c^2 \hbar^2} \Phi_n$$

$$\Rightarrow \left\{ A_n = (2\pi n) \frac{2\pi |\vec{e}|}{\hbar c} B \right\} \text{ к-пространство}$$

→ представим

Вырождение уровней Ландау

$\Delta A = A_{n+1} - A_n = \frac{2\pi |\vec{e}|}{\hbar c} B$ ~ площадь между двумя фотонами
 Величина фотон, где $\vec{e}$ из фотона в магн. поле



$$\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}, \quad \Delta k_y = \frac{2\pi}{L_y}$$

В к-пространстве всегда может быть на фотон

$$\frac{\Delta A}{(2\pi)^2 L_x L_y} = \frac{|\vec{e}| B}{2\pi \hbar c} L_x L_y = \frac{B L_x L_y}{2\Phi_0}$$

Согласно выводу по сф. орбиты?

$$E_n = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

~ квант. энергия фотон магн. поля

→ составные хар-т $\{n, k_z\}$. Когда 1 - составные без магн. поля, → только тогда же только при мал. магн. поля. с ω_c - но только же находится составные, или сразу с ω_c

Уровни Ландау вырождены

с такой же вероятн.

Прокладываем

$$\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} F(\vec{k}) \rightarrow \int d\epsilon g(\epsilon) F(\epsilon)$$

~ м-ть состояний

$$\frac{\frac{\Delta K_x}{25}}{25} \cdot \frac{\Delta K_y}{25} = \frac{\frac{25}{L_x}}{25} \cdot \frac{\frac{25}{L_y}}{25} = \frac{1}{L_x L_y}$$

→ $\rho_e V = L \times b \times u$

$$\frac{\Delta K_1 \Delta K_2}{\int \frac{1}{(2\pi)^3} F(\varphi)} \rightarrow \sum_n \int \frac{\sqrt{K_2}}{d\varphi} \cdot \frac{|e|B}{(2\pi)^2 \cosh} \cdot 2 \cdot F(\varphi) =$$

двукр. Високог.

$$\int d\mathbf{e} \, g_n(\mathbf{e}) F(\mathbf{e})$$

$$g_n(\theta) = \frac{4|\tilde{e}|B}{(2\pi)^3 e\hbar} \frac{\sqrt{|k_z|}}{4e}$$

$$L_n = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(1 + \frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{3}{2}\hbar\omega_c \quad \text{per } \beta = 2mc$$

type $\beta = 2mc$

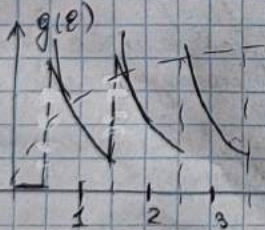
Вопросы кт

$$|Kz| = \frac{1}{h} \sqrt{2m(E - \beta \hbar^2 (2n+1))}$$

$$|K_2| = \frac{1}{h} \sqrt{2m(E - V_0(2n+1))}$$

Деревья - ели

$$\frac{d(K_2)}{dt} = \frac{1}{2t} \frac{2m}{\sqrt{2m(E - \beta H(2m + \frac{1}{2}t))}} \rightarrow 6 g_n(E)$$



← Из-за професур. ур-ба направи
визитацията се об. в пд-та
соедотенето.

Буден Помирау

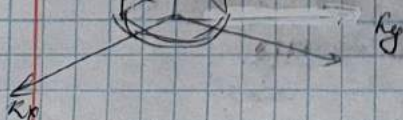
~ ров-ть флоры в с. ф-ве, котор. садов некот. фирм.
уровня Ломброу и и кодкелеу-то на

$\Rightarrow$ подвигается

Секрет.



$$E_n = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

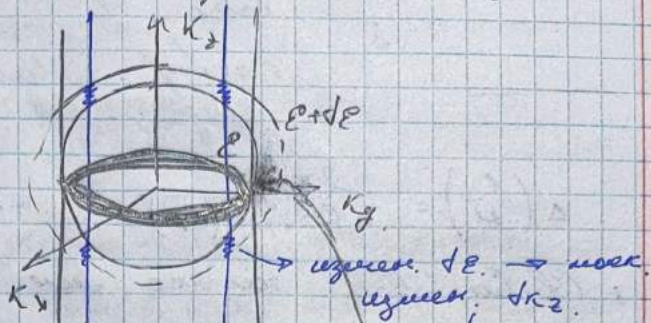


$$g_n(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^3} \frac{\partial V}{\partial \hbar} \frac{dK_z}{d\epsilon}$$

Представим у нас газ незав. $\vec{\epsilon}$, про него всё знаем.

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \text{шарик}$$

У нас этот же шарик для каждого $\vec{k}$ имеет полн. шарик. Шарик вращается.



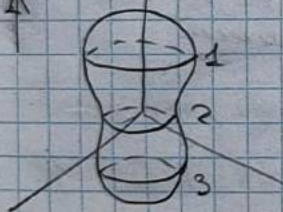
Меняем радиус шарика $\rightarrow$ меняется $dK_z \rightarrow$ сфер. k_z становится больше.

Как всё интер. Величина энергии Ферми. Когда шарик имеет $\epsilon_F \rightarrow$ будет увеличение числа элект. $\rightarrow$ ферми (электронные)

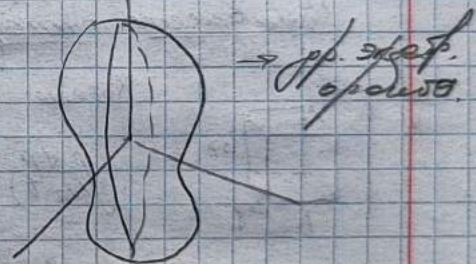
Для неё характерно $\frac{d\epsilon_F}{dK_z} = 0$

Если пов-ть Ферми становится $\rightarrow$ электр. фронт

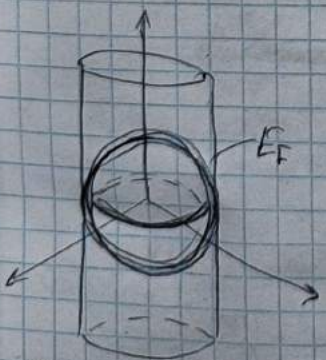
Направление $\vec{k}$



$\rightarrow$ 3 элект. фронт. Совершение $\vec{k}$



Повр. шар. или $\vec{k}$ $\rightarrow$ можно считать повр. фронт $\rightarrow$ можно считать повр. фронт Ферми



$$N_{\text{ext}}(\epsilon_F) = \frac{2\pi \epsilon_F^3}{\hbar^3} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Обобщенная ситуация: до $\hbar < \epsilon_F$

Если $\hbar \sim 10^{-4}$ эВ $\rightarrow \frac{\hbar \omega_c}{\epsilon_F} \sim 10^{-4} \Rightarrow n \gg 1$

про $\frac{\hbar}{2}$ можно забыть

Есть уровни Ландау:

$$\epsilon_n = \frac{\hbar \omega_c}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \epsilon_F \text{ - была где-то здесь}$$

$\rightarrow$ можно увелич. магн. поле

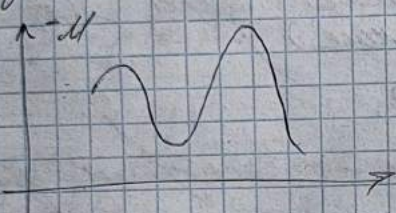
$\hbar \omega_c \rightarrow \hbar \omega_c \uparrow \rightarrow$ картина изменяется.

$n+1$
 n
 $n-1$

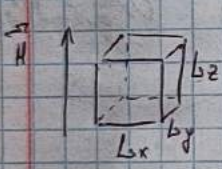
→ уровень полупроводника, свободная зона
 и - уровень не занят в узле
 все уменьшилось
 Вопрос: Каким образом, полупроводник стал уменьшаться?

$\Delta(\frac{1}{\mu}) = \frac{2\pi\epsilon}{h^2 \cdot \text{ext}(\epsilon_F)}$

- возбуждение с такими моментами
 Св-ва в-в также меняются.

Эффект де Гааза - ван Альфреда
 Измен. намагн. от H :

 Обсужд. аналогично выше.
 период. именно по H .

12.12.2022
 Исправление ошибки

Хотели написать плотность состояний

 $\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \dots \rightarrow \int g(\epsilon) d\epsilon$
 $V = L_x L_y L_z$
 $\{n, p_z\}$
 $\frac{1}{V} \int \frac{|e|H}{2\pi\hbar} L_x L_y + \frac{dp_z}{2\hbar} L_z = \frac{|e|H}{c} \frac{dp_z}{(2\pi\hbar)^2}$
 много уровней на узел
 много состояний в интервал dp_z

$E_n = \frac{p_z^2}{2m} + \beta H (2n+1)$
 $|p_z(\epsilon)| = \sqrt{2m[\epsilon - \beta H (2n+1)]}$
 $\omega_n = \hbar(n + \frac{1}{2})$

$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} F(\epsilon) \rightarrow \int d\epsilon g(\epsilon) \dots \rightarrow \sum_n 2 \cdot \frac{|e|H}{c (2\pi\hbar)^2} \int dp_z F(\epsilon)$
 полная энергия
 ф-я энергии
 ф-я энергии
 ф-я энергии
 $\sum_n \int d\epsilon \frac{|e|H}{c (2\pi\hbar)^2} \frac{dp_z}{d\epsilon} F(\epsilon) = \int d\epsilon \sum_n g_n(\epsilon) F(\epsilon)$
 ф-я энергии
 ф-я энергии
 ф-я энергии

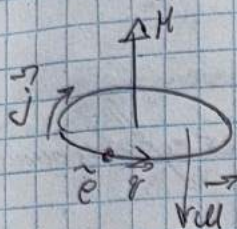
$$g(E) = \sum_n g_n(E)$$

$$F(E) = \underbrace{f(E)}_{\text{Ферми-дир. стат.}} \cdot \underbrace{E}_{\text{Энергия}} \quad \text{Средняя энергия}$$

Возбуждаемся в дискретных состояниях.

Диаметр молекулы параметр

Равновесие частицы



Если есть гравитационный потенциал

$$\mathcal{L}(\vec{r}, \vec{v}, \mu, H) = \mathcal{L}_0(\vec{r}, \vec{v}, \mu) - \vec{M} \cdot \vec{H} \quad \text{но сред. энергия}$$

$$\Rightarrow \vec{M} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{H}}$$

Обычно оператор импульса $\vec{p} = -i\hbar \nabla$ но $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$
 поэтому переход к гравитационному полю:

$$\vec{p} = -i\hbar \nabla \rightarrow (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) \equiv \vec{p} \text{ поэтому заменим}$$

$$\Rightarrow \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \rightarrow \int \frac{d(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})}{(2\pi\hbar)^3} \rightarrow \text{по из-за сдвига радиуса не меняется}$$

Ответ не будет зав-ть от магн. поля.

$$\Rightarrow \mathcal{M} = 0 \quad \text{это чисто боинтовский эффект}$$

Потенциал без магнитного поля:

$$\mathcal{L}_0 = -\delta \sum_k \ln(1 + e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{T}})$$

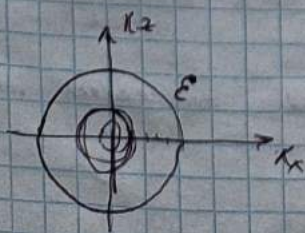
$$\frac{d\mathcal{L}_0}{d\mu} = -\rho \delta V - \delta \delta \mu - N \delta \mu \Rightarrow N = -\frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \mu}$$

$$N = \sum_k f_{FD}(\epsilon_k)$$

Всего выражение для плотности состояний:

$$\mathcal{L} = -\frac{4VT}{(2\pi\hbar)^2} \frac{|e|H}{c} \int d\epsilon \sum_n \frac{d|p_z(n)|}{d\epsilon} \ln(1 + e^{\frac{\mu - \epsilon}{T}}) \quad \text{①}$$

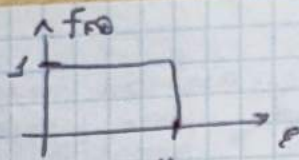
$$\text{②} \quad -\frac{4VT}{(2\pi\hbar)^2} \frac{|e|H}{c} \sum_n |p_z(n)| \ln(1 + e^{\frac{\mu - \epsilon}{T}}) \Big|_{\epsilon = \epsilon_n + \frac{\epsilon_c}{2}}^{\epsilon = \epsilon_n + \frac{\epsilon_c}{2} + \frac{\epsilon_c}{2}}$$



$\epsilon = \epsilon_n + \epsilon_c$
 мин. циклоформы
 Всегда р.д. $\epsilon \geq \epsilon_c$

$$\Rightarrow \mathcal{L} = -\frac{4VT}{(2\pi\hbar)^2} \frac{|e|H}{c} \int d\epsilon \sum_n \frac{2m[\epsilon - \beta H(2n + \frac{1}{2})]}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{T}} + 1}$$

Рассчитаем сумму $\sum_{n=0}^{\infty} f(n)$



$$\int_0^{\infty} \sum_{\beta H(2n+1)}^{\infty} \sqrt{2m(\epsilon - \beta H(2n+1))} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{2m} [\epsilon - \beta H(2n+1)]^{3/2} =$$

$$= \sum_{n=0}^{n_0} \frac{2}{3} \sqrt{2m} \underbrace{(\mu - \beta H(2n+1))}_{f(n)}^{3/2}$$

Если $\beta H < \mu$ можно перейти к аналогу формулы Эйлера-Маклорена

$$2n_0 + 1 = \frac{\mu}{\beta H} \Rightarrow n_0 \approx \frac{\mu}{2\beta H}$$

Формула (см. 7.5 Коурау-Моргенштерна с. 206)

$$\sum_{n=0}^{n_0} f(n) \approx \int_{-1/2}^{n_0+1/2} f(n) dn - \frac{1}{24} [f'(n_0 + \frac{1}{2}) - f'(-\frac{1}{2})]$$

Если все проделать:

$$\mu = -\frac{8}{15} \frac{V}{(2\pi\hbar)^2} \frac{|\epsilon| \mu^{3/2}}{\beta \cdot e} \sqrt{2m} + \frac{1}{3} \frac{V}{(2\pi\hbar)^2} \frac{|\epsilon| \mu^2}{e} \mu^{1/2} \sqrt{2m}$$

Вспомогательная:

$$\mu = \frac{\mu^2}{2m} = \frac{\beta^2 V}{15m \pi^2 \hbar^2} + \frac{V \beta^2 \hbar^2}{6} \left(\frac{\rho_1 m}{\pi^2 \hbar^2} \right)$$

Кинетическая энергия:

$$\mu = -\frac{\partial \Omega}{\partial N} = \frac{1}{V} = -\frac{1}{3} \beta^2 \hbar g_2(\epsilon_F) \quad \text{гидростатическое давление}$$

$$\chi_s = -\frac{1}{3} \beta^2 g_2(\epsilon_F) \quad \text{гидростатическая восприимчивость}$$

$$\chi_F = \beta^2 g_2(\epsilon_F) \quad \text{парамагнитная восприимчивость}$$

$$\chi_s \chi_F = \frac{2}{3} \chi_F > 0 \quad \text{всегда все будет диамагнитно}$$

Парамагнитная восприимчивость: откуда и как?

$$\chi_F = \beta^2 g_2(\epsilon_F) \quad \beta_F = \frac{|\epsilon| \hbar}{2m^* e}$$

$$\chi_s = -\frac{1}{3} \beta^2 g_2(\epsilon_F)$$

на самом деле парамагнитная восприимчивость

$$\Rightarrow \beta_F = \frac{|\epsilon| \hbar}{2m^* e}$$

$$\frac{|x_d|}{|x_p|} = \frac{1}{3} \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 > 1 \quad - \text{диамагнит. атом.}$$

прого вырожденный су - парамагнитный.

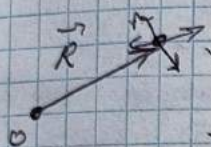
$$\left[\frac{3}{2} \right] M = \frac{3}{2} N (g \mu_B)$$

Роман.

выброшены в решетку. Знаю есть решетка

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

потому микра не рубит. в узлах и есть конк. посыл.



или как-то добавляется волна с.р. (T, времен. возмущения.)

Точечное поле. решетка как на рисунке.

Нерезультат: ① Сила с.р. электр. в с.р. атома.

$$\frac{E}{V} = \frac{(2m)^{3/2}}{5\pi^2 \hbar^3} E_F^{5/2} \left[1 + \frac{5}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right] \quad \text{для вып. элект. газа}$$

$$C_V = \frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial T} \sim T \quad \text{температура}$$

В эксперименте - для металла

$$\begin{cases} T < 10 \text{ K}, & C_V \sim T \\ T > 10 \text{ K}, & C_V \sim T^3 \\ T \gtrsim 10^2 - 10^3, & C_V = \text{const} \end{cases}$$

не вое. с констант. фукции

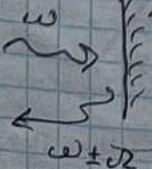
для диэлектр. $\delta < 10 \text{ K}$, $C_V \sim e \frac{E_F}{k_B}$

② Решетка на решетке Браве авл. ф-ция Блоха:

$$\psi \sim e^{ikr} \quad \text{и} \quad \psi(r) \rightarrow \psi(r) \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad - \text{е. в. ф-ция. с.р.}$$

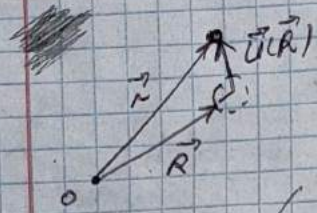
Движение атомов в узлах приводит к рассеянию электронов Блоха не работает - другие

③ металл, на него падает волна.



рассеяние фукции с.р. на то же ω . Но эксперимент показ $\omega \neq R$.

Классическая теория кристалла.



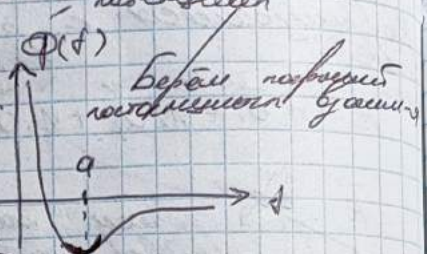
$\vec{R}$ - центр, положение ячеики
 $\vec{r}$ - положение атома
 $\vec{u}$ - вектор смещения.

$$\vec{r}(\vec{R}) = \vec{R} + \vec{u}(\vec{R})$$

Все атомы. Вблизи с.р. $|\vec{u}(\vec{R})| \ll a$

$$\langle \vec{r}(t) \rangle = \vec{R}$$

Гравитация взаимодействий.



Относительные функции смещения - атомы, параболы

$$\Phi(r) \approx \Phi(a) + \Phi'(a)(r-a) + \frac{1}{2} \Phi''(a)(r-a)^2 + \dots$$

это и есть гармонич. приближение

остальные члены ангармоничности

Потенциал:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{R, R'} \Phi(\vec{r}(\vec{R}) - \vec{r}(\vec{R}'))$$

атомы не движутся. как образцы латекс.

Вектора дальше не пишем.

$$V = \frac{1}{2} \sum_{R, R'} \Phi(R + u(R) - R' - u(R')) = \text{где } R - R' = r$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{RR'} \Phi(R - R')}_{V_0} + \frac{1}{2} \sum_{RR'} \Phi''(R - R') (u(R) - u(R')) +$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{R, R'} [\vec{u}(R) - \vec{u}(R'), \nabla]^2 \Phi(R - R') + \dots$$

V_h (harmonic)

тогда по перемещениям.

Наско заменили в ср. виде:

$$V_h = \frac{1}{4} \sum_{RR'} [\mu_\mu(R) - \mu_\mu(R')] \Phi_{,\mu\nu}(R - R') [\mu_\nu(R') - \mu_\nu(R)]$$

$\mu, \nu = x, y, z$ проекции

$$\Phi_{,\mu\nu} = \frac{\partial^2 \Phi(\vec{r})}{\partial r_\mu \partial r_\nu}$$

Без разг-ва можно переписать:

$$m \ddot{u}_n = -k(u_n - u_{n-1}) - k(u_n - u_{n+1}) = -k(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1})$$

$$V = \frac{k}{2} \sum_n (u_n - u_{n-1})^2 - \frac{\omega^2}{2}$$

20

Находим на групп. скорости, в фаз. пространстве q, ω

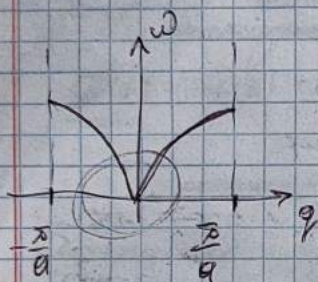
$$u_n(t) = A e^{i q n a - i \omega t}$$

решение на узлах

$$-m \omega^2 e^{i q n a - i \omega t} = -k(a - e^{i q a} - e^{-i q a}) e^{i q n a - i \omega t}$$

$$-m \omega^2 = -k(1 - \cos q a) = -4k \sin^2 \frac{q a}{2}$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \frac{4k}{m} \sin^2 \frac{q a}{2}$$



$$q a \ll 1$$

$$\omega^2 = \frac{4k}{m} \left(\frac{q a}{2} \right)^2$$

$$\Rightarrow \omega = \pm \frac{|q| a}{2} \sqrt{\frac{4k}{m}}$$

$\omega \sim q$ ~ по-ф-но акустич. волна

Кристаллическая оптическая
двухатомная решетка

Омни-модели

$$V = \frac{k_1}{2} \sum_n (u_n - v_n)^2 + \frac{k_2}{2} \sum_n (u_n - v_{n+1})^2$$

$$\frac{\partial V}{\partial u_n} = k_1(u_n - v_n) - k_2(u_n - v_{n+1})$$

$$m \ddot{u}_n = k_1(v_n - u_n) - k_2(v_n - u_{n+1})$$

Решение в виде:

$$u_n = A e^{i q n a - i \omega t}$$

$$v_n = B e^{i q n a - i \omega t}$$

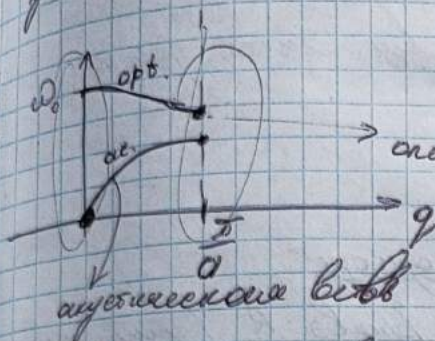
Формулы для частоты, получаем:

$$\omega^2 = \frac{\omega_0^2}{\alpha} \left[1 \pm \sqrt{1 - \beta^2 \sin^2 \frac{q a}{2}} \right]$$

где $\omega_0^2 = (K_1 + K_2) \frac{m + m}{m \cdot m}$; $\xi^2 = 16 \frac{K_1 K_2}{(K_1 + K_2)^2} \left(\frac{m \cdot m}{m + m} \right)^2$

$\xi_{max} = 1$

где $K_1 = K_2$; $m = m$



$q_0 = \frac{\omega_0^2}{2} (1 \pm \sqrt{1 - \xi^2})$

Два значения - две ветви
→ оптич. ветвь (при $q=0$ есть колебания)

акустическая ветвь

В амплитуде в кот. более двух элементов ветви
или оптические и акустические ветви.

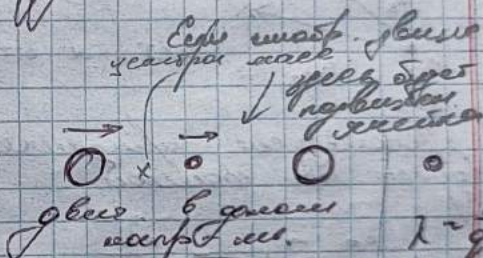
Можно получить соотношение:

$$\frac{B}{A} = \frac{\frac{\omega_0^2}{\omega^2} - \frac{m}{m+m}}{\frac{m}{m+m}}$$

будет меньше $m \ll M$

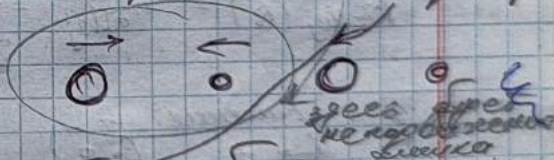
1) Акустическая:

$q \rightarrow 0$ $\omega \rightarrow 0$ $\frac{B}{A} \sim 1$



2) Оптическая:

$q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow \omega_0 \Rightarrow \frac{B}{A} < 0$



Скорости колебаний будут разные

Другой случай:

1) Акустическая:

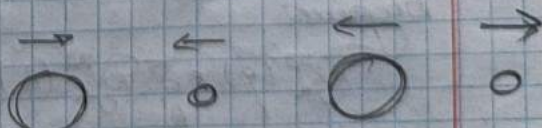
$q \rightarrow \frac{\pi}{2}$; $\omega \rightarrow 0$; $\frac{B}{A} = -1$

самое



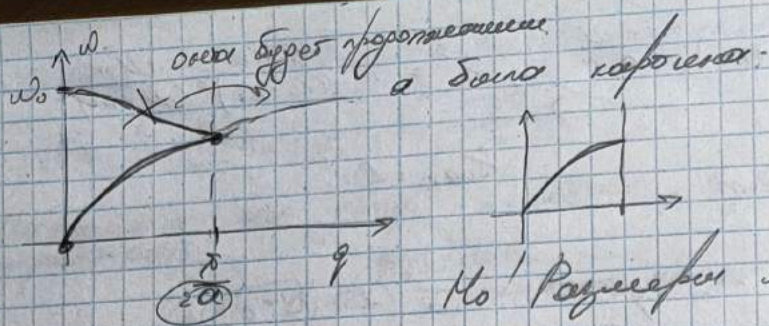
2) Оптическая:

$q \rightarrow \frac{\pi}{2}$ самое



Близко края зоны близко колебаний не
будет фрагмента колебл. другая эта не
такая.

Р/З: Будет схематично м к то будет в процессе
колебаний при m=m
K_1=K_2=K

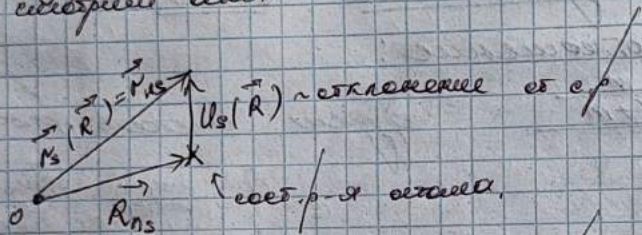


Но! Различия имеет форму

19.12.23.

Комбинация волн в 3D решетке с брэгговскими

Если S, m_s — индекс вектора решетки Брэгга $\vec{R}$ (или любой а вектору решетке) n — номер волны



Используем гармоническое приближение: $|U_s(\vec{R})| \ll a$
Вводим по формуле:

$$m_s U_{sj}(\vec{R}) = - \frac{\partial U}{\partial U_{sj}} = - \sum_{\vec{R}', s', k} D_{jk}^{ss'}(\vec{R} - \vec{R}') U_{s'k}(\vec{R}') \quad \sim \text{дифференциал}$$

Ищем решение:

$$U_s(\vec{R}) = \frac{E_s(\vec{q})}{\sqrt{m_s}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{R} - i\omega t) \quad \sim \text{по пути плоская волна}$$

для брэгговского

Подставляя, получим:

$$\omega^2 \sqrt{m_s} E_{sj} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} = \sum_{\vec{R}', s', k} D_{jk}^{ss'}(\vec{R} - \vec{R}') E_{s'k} \frac{1}{\sqrt{m_{s'}}} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}' - \vec{R})}$$

Второе:

$$D_{jk}^{ss'}(\vec{q}) = \sum_{\vec{R}'} D_{jk}^{ss'}(\vec{R}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}'}$$

$$\Rightarrow \left\{ \omega^2 E_{sj} = \sum_{s', k'} \frac{D_{jk}^{ss'}(\vec{q})}{\sqrt{m_s m_{s'}}} E_{s'k'} \right\} \quad \sim \text{матрица}$$

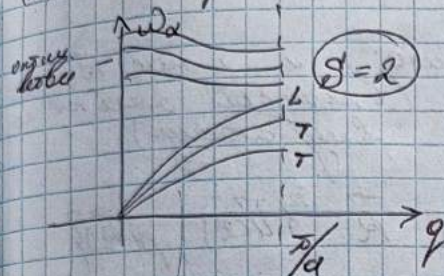
Ка-ко др-ий? проекции $\vec{q}$ и $\vec{R}$ — это векторы и $\vec{q}$ — это волновой вектор

$$\det \left[\frac{D_{jk}^{ss'}}{\sqrt{m_s m_{s'}}} - \omega^2 \delta_{ss'} \delta_{jk} \right] = 0 \Rightarrow \omega_\alpha(\vec{q}) = \omega \sim \text{дисперсия}$$

$\alpha = 1, \dots, 3S$

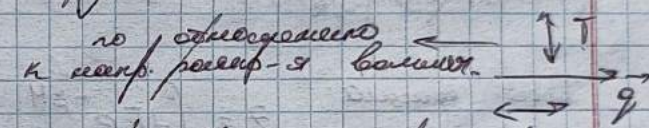
! Если рассматривать 3D-волны в кристалле, то для такого кристалла существуют 3D-волны, которые являются решетками. Без дисперсии, как спектр устроен.

(*) $\omega = \omega_\alpha(\vec{q})$, $\alpha = 1, \dots, 3S$



Уб. U_2 3D-волны $\rightarrow$ дисперсия
 волны ($\omega \rightarrow 0$ при $q \rightarrow 0$)
 $3(S-1)$ - оптические волны

Если рассматривать 3D-волны, то для кристалла с симметрией, то есть аксиальной, волны имеют 2 поперечные и 1 продольную.



1. Звукосное колебание может рассматриваться по кристаллу с частотой и волн. вектор. (x)
2. Если 3 осей в элементе кристалла, то в кристалле возможны 3D-колеб., из которых 3 звука, остальные оптические.
3. В кристалле существуют поперечные и продольные колебания по волн. к волн. вектору.

это важно для понимания дисперсии

4. Для каждого типа колеб. дается дисперсия $\omega(\vec{q})$ (в том числе и для оптич. волн).

Продольная компонента имеет более высокую частоту.

Задание: Покажите, что для оптич. колеб. дисперсия такова, как и для акустических (кристаллическая решетка).

$$U_3(\vec{R}) = A_3(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{R} - i\omega t} \xrightarrow{q \rightarrow 0} \sim e^{-i\omega t}$$

$$\sum_s \left(m_s A_s; \omega^2 = \sum_{s', s''} D_{jk}^{ss'}(\vec{R}) A_{s''k} \right) \text{ для того чтобы получить}$$

$$\omega^2 \sum_s m_s A_{sj} = \sum_{s, k} \sum_{R^s} \tilde{D}_{jk}^{ss'}(\vec{R}') \dots$$

это и есть по сути величина масс.

Важно $\tilde{\omega}^2 \neq 0 \rightarrow$ т.е. несутся отсюда акуст. волны. $\rightarrow$ расщепление от акуст. ветви.

Задача Дюлонга-Пти

Для простоты $S=1$, заменим сумму по N на интеграл (вспомогательная функция)

$$N = \sum_R \frac{p^2(R)}{2M} + V$$

Сейчас разобьем p -во на ячейки для каждого $\vec{R}$: $\{u_j(\vec{R}), p_j(\vec{R})\}$

Общее разложение:

$$\Gamma = \prod_R \int \tilde{p}(\vec{R}) \int u(\vec{R}) = \sum_{R, j} \int p_j(\vec{R}) \int u_j(\vec{R})$$

Составим: $Z = \int \Gamma e^{-\beta H}$ где $\beta = \frac{1}{k_B T}$

$$\bar{E} = -\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{1}{V} \frac{\int \Gamma H e^{-\beta H}}{\int \Gamma e^{-\beta H}}$$

Преобразования:

$$u_j = \frac{\tilde{u}_j}{\sqrt{\beta}}; \quad p_j = \frac{\tilde{p}_j}{\sqrt{\beta}}$$

$$H = \frac{1}{\beta} \sum_{R, j} \frac{p_j^2}{2M} + V_0 + \frac{1}{2\beta} \sum_{\substack{R, R' \\ j, k}} D_{jk}(\vec{R}-\vec{R}') \tilde{u}_j(\vec{R}) \tilde{u}_k(\vec{R}')$$

Запишем разложение объема:

$$\Gamma = \prod_{R, j} \int \tilde{u}_j(\vec{R}) \int \tilde{p}_j(\vec{R}) = \beta^{-3N} \prod_{R, j} \int \tilde{u}_j(\vec{R}) \int \tilde{p}_j(\vec{R})$$

$$Z = \int \Gamma e^{-\beta H} = e^{-\beta V_0} \beta^{-3N} \int \tilde{\Gamma} \exp \left\{ -\sum_{R, j} \frac{\tilde{p}_j^2}{2M} + \sum_{\substack{R, R' \\ j, k}} \tilde{u}_j(\vec{R}) \tilde{u}_k(\vec{R}') \right\}$$

Зная эту функцию можно найти среднюю энергию.

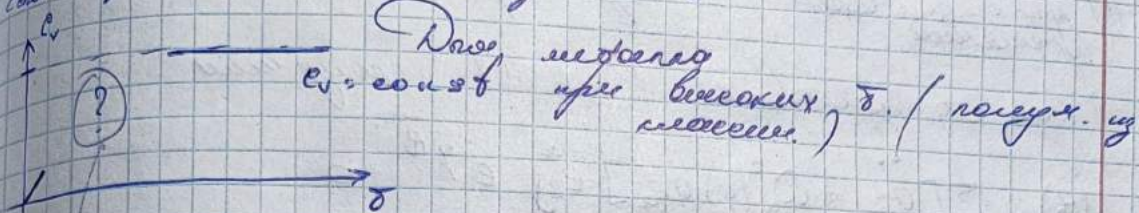
$$\bar{E} = -\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{1}{V} \left(-V_0 - 3N \frac{1}{\beta} \right) = \frac{V_0}{V} + \frac{3N}{V} \cdot k_B T$$

$$\frac{N}{V} = n \Rightarrow \bar{E} = E_0 + 3n k_B T$$

$$\Rightarrow \rho_v = \frac{\partial \epsilon}{\partial \tau} = 3n k_B = \text{const}$$

Но ϵ по-прежнему $\rho_v = 3R$

выр. электромагнит газ $\rho_v \sim T$



Давл. излучения при высоких T (полюс. излучения) $\rho_v = \text{const}$

здесь T^3 , пока не поупали. (в этой обл. темп. изл. квантовое описание)

Квантовая теория кристаллов

Энергия системы по статистическим (среднеквадратичным)

$$\bar{E} = \frac{1}{V} \frac{\sum E_i e^{-\beta E_i}}{\sum e^{-\beta E_i}} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Остаток энергии E_i и энергия состояния

Здесь кристаллы из N атомов в объеме V атомов.

$$\sum_{s,k} \frac{D_{jk}^{ss'}(\vec{q})}{\sqrt{m_s m_{s'}}} e_{s'k}(\vec{q}) - \omega^2 e_{sj}(\vec{q}) = 0$$

~ если зарядка на свобод. заряде / свобод. заряде

$$u_s(\vec{R}) = \frac{e_s(\vec{q})}{\sqrt{m_s}} e^{i\vec{q}\vec{R} - i\omega t}$$

$\omega_{\alpha} = ?$ Зарядка / масса атома $e_s^* = ?$ методом усреднения.

Усреднение:

1. $D_{jk}^{ss'}(\vec{q}) \sim$ динамическая матрица

$$[D_{kj}^{ss'}(\vec{q})]^* = D_{jk}^{ss'}(\vec{q})$$

из этого вытекает свойство:

$$e_s^*(-\vec{q}) = [e_s^*(\vec{q})]^* \quad \sum_{\alpha} e_{sj}^*(\vec{q}) [e_{s'k}^*(\vec{q})]^* = \delta_{ss'} \delta_{jk}$$

$$2. \omega(-\vec{q}) = \omega(\vec{q})$$

$$\omega(\vec{q} + \vec{k}) = \omega(\vec{q})$$

свойств. ед. имеет только в $\vec{k}$ зоне брэгговской. любое колебание можно разложить по e_s^*

Здесь получается то же самое.

$$\vec{U}_s(\vec{R}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha=1}^{3S} \sum_{\vec{q}} \left[a_{\vec{q}\alpha}(t) \frac{e_s(\vec{q})}{\sqrt{m_s}} e^{i\vec{q}\vec{R}} + a_{\vec{q}\alpha}^*(t) \frac{[e_s(\vec{q})]^*}{\sqrt{m_s}} e^{-i\vec{q}\vec{R}} \right]$$

представим в виде
аналогичных вещ. $a_{\vec{q}\alpha}^* = a_{-\vec{q}\alpha}$

Если это представить в $\vec{U}_s(\vec{R})$ получим:

$$(*) \sum_{\vec{q}\alpha} [\ddot{a}_{\vec{q}\alpha} + \omega_{\alpha}^2(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha}] e_{sj}^{\alpha} e^{i\vec{q}\vec{R}} = 0$$

$$\sum_{\vec{q}\alpha} (*) [e_{sj}^{\alpha}(\vec{q})]^* \Rightarrow \boxed{\ddot{a}_{\vec{q}\alpha} + \omega_{\alpha}^2(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha} = 0}$$

т.е. ампл. колеб. свобод. атом.
уровн. упр-но гармон. осцилл.

Значит спектр гармон. осцилл.

$$E_n = \hbar \omega_{\alpha}(\vec{q}) \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

26.12.23

Есть кристалл с N ячейками, по S атомов в каждой.
Получим, что при внешних $T \rightarrow$ тепловое равнов. атомы
с разными массами колеб. вокруг

$$\vec{U}_s(\vec{R}) = \frac{e_s(\vec{q})}{\sqrt{m_s}} e^{i\vec{q}\vec{R} - i\omega t}$$

$\rightarrow$ представляя решение, получим
систему

$$\sum_{s', j} \left(\frac{U_{sj}^{s'}}{\sqrt{m_s m_{s'}}} - \omega^2 \delta_{ss'} \delta_{jk} \right) e_{sj}^{\alpha} = 0 \Rightarrow \omega = \omega_{\alpha}(\vec{q})$$

$\alpha = 1, \dots, 3S$

$e_s^{\alpha}(\vec{q}) \sim$ вектор единич. размера $3S$.

$$\vec{U}_s(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha=1}^{3S} \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}\alpha}(t) \frac{e_s(\vec{q})}{\sqrt{m_s}} e^{i\vec{q}\vec{R}} + \text{к.с.}$$

по осц. атом. $\rightarrow$ опис. мех. колеб. атомов

чтобы было действие. тогда потребуем $a_{\vec{q}\alpha}^* = a_{-\vec{q}\alpha}$

и представим в раннем упр-е, получили:

$$\sum_{\vec{q}\alpha} [\ddot{a}_{\vec{q}\alpha} + \omega_{\alpha}^2(\vec{q}) a_{\vec{q}\alpha}] e_{sj}^{\alpha} e^{i\vec{q}\vec{R}} = 0 \quad (*)$$

/ $(e_{sj}^{\alpha})^* e^{-i\vec{q}\vec{R}}$
умножим.

$$\sum_{s', k} \sum_{\vec{R}}$$

$$\frac{\alpha(q) I^*}{m_s} e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

$$\sum_{\vec{r}} e^{i\vec{R}(\vec{q}-\vec{q}')} = \begin{cases} N, & \vec{q} = \vec{q}' \\ 0, & \vec{q} \neq \vec{q}' \end{cases}$$

В итоге получаем условие:

$$\sum_{\vec{q}} \left(\sum_{\vec{q}'} [\dots] e^{i\vec{R}(\vec{q}-\vec{q}')} \right) = 0$$

то есть об сумм.

а именно

уравнение + условие на

по разности волновых

векторов.

$\Rightarrow$ можно получить, что

$$\ddot{a}_{\vec{q}\alpha} + \omega_{\alpha}^2 a_{\vec{q}\alpha} = 0$$

$$a_{\vec{q}\alpha} \sim e^{-i\omega_{\alpha} t}$$

Переходим отсюда к каноническим переменным

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, s} m_s \dot{U}_s^2 \in \sim \text{кин. энергия} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{если считать} \end{array} \right.$$

$$\Theta \sum_{\alpha, \vec{q}} \omega_{\alpha}^2 \left\{ a_{\vec{q}\alpha} a_{\vec{q}\alpha}^* - \frac{1}{2} (a_{\vec{q}\alpha} a_{-\vec{q}\alpha} + \text{к.с.}) \right\}$$

потому энергия

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{R}, s \\ \vec{R}', s'}} V_{jk}(\vec{R}-\vec{R}') U_s(\vec{R}) U_{s'}(\vec{R}') = \sum_{\vec{q}} \omega_{\alpha}^2 \left\{ a_{\vec{q}\alpha} a_{\vec{q}\alpha}^* + \frac{1}{2} (a_{\vec{q}\alpha} a_{-\vec{q}\alpha} + \text{к.с.}) \right\}$$

т.е. дисперсия преобразование + уравнение

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, s} m_s \left[\sum_{\alpha, \vec{q}} a_{\vec{q}\alpha} \frac{\vec{e}_s(\vec{q})}{m_s} e^{i\vec{q}\vec{R}} + \text{к.с.} \right] \cdot \left[\sum_{\alpha', \vec{q}'} \frac{\vec{e}_{s'}(\vec{q}')}{m_{s'}} e^{-i\vec{q}'\vec{R}} + \text{к.с.} \right]$$

используем, если $\vec{q}' = -\vec{q}$ и $\alpha' = \alpha$

Полная энергия:

$$\frac{1}{2} E = T + V = \sum_{\alpha, \vec{q}} \omega_{\alpha}^2(\vec{q}) |a_{\vec{q}\alpha}|^2$$

$\sim$ энергия, как будто есть независимые колебания

$\Rightarrow$ колебания рассматриваются $\Rightarrow$ энергия колебаний.

Чтобы перейти к каноническим переменным, введем

$$Q_{\vec{q}\alpha} = a_{\vec{q}\alpha} + a_{\vec{q}\alpha}^* \quad \text{где } a_{\vec{q}\alpha} \sim e^{-i\omega_{\alpha} t} \quad \text{нормировка}$$

$$P_{\vec{q}\alpha} = \dot{Q}_{\vec{q}\alpha} = -i\omega_{\alpha} (a_{\vec{q}\alpha}^* - a_{\vec{q}\alpha}) \quad \text{и импульс}$$

Запишем через них выражение:

$Q_{\vec{q}\alpha}$ через Q и P — представим

$$E = H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \vec{q}} (P_{\vec{q}\alpha}^2 + \omega_{\alpha}^2 Q_{\vec{q}\alpha}^2)$$

$$\begin{cases} p_{q\alpha} = \dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \\ \dot{p}_{q\alpha} = -\omega_\alpha^2 q_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial p_{q\alpha}} \end{cases}$$

→ далее берем канон. трансформ.

$$q_\alpha + i\omega_\alpha^2 q_\alpha = 0$$

а для кв. гармон. осцилл. знаем

$$E_n = \hbar \omega_\alpha (n + \frac{1}{2})$$

то есть фазов. пространство

возб. колебаний рассматривается как совокуп. энергетических уровней $E_n = \hbar \omega_\alpha (n + \frac{1}{2})$, которая зависит от координаты q_α .

у нас есть нек-ая температура T , состоящая из-за теплов. хаот. движения n - число занятых уровней

$$E_n = \hbar \omega_\alpha (q_\alpha) (n + \frac{1}{2}) \quad (**)$$

→ распр. квант.-го осцилл. мур.

Если изв. T и имеем в равновесии. Среднее распр. по уровням n ? Введем среднюю энергию:

$\bar{E}$ - ? Считаем среднюю энергию:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega_\alpha (n + \frac{1}{2})} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega_\alpha (n + \frac{1}{2})}$$

$$\frac{\hbar \omega_\alpha}{2} = x; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\Rightarrow \bar{E} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega_\alpha (n + \frac{1}{2})}$$

$$Z = e^{-\beta \frac{\hbar \omega_\alpha}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega_\alpha n} = \frac{e^{-\beta \frac{\hbar \omega_\alpha}{2}}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_\alpha}}$$

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\frac{\hbar \omega_\alpha}{2} e^{-\beta \frac{\hbar \omega_\alpha}{2}}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_\alpha}}$$

$$\Rightarrow \bar{E} = \hbar \omega_\alpha \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_\alpha} - 1} \right) \quad \text{сравним с (**)}$$

где $\bar{n}_{q\alpha} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_\alpha} - 1}$ - равновесное значение уровня

→ для гармон. осцилл. получается распр. по Бозе-Эйнштейну

Теплоемкость

$$\bar{E} = \sum_{q\alpha} \hbar \omega_\alpha (q_\alpha) \left[\bar{n}_{q\alpha} + \frac{1}{2} \right]$$

$$\Rightarrow C_V = \frac{\partial E}{\partial \theta}$$

$$\text{где } \overline{n_{q\alpha}} = \frac{e^{\frac{\hbar \omega_{q\alpha}}{k_B \theta}} - 1}{\hbar \omega_{q\alpha}}$$

Предельные случаи:

1) Т. высокая, такие что $\hbar \omega_{q\alpha} \ll k_B \theta$ экр. в фазе.

$$\Rightarrow \frac{\hbar \omega_{q\alpha}}{k_B \theta} \ll 1 \rightarrow \text{экр. в фазе}$$

$$\overline{n_{q\alpha}} \approx \frac{k_B \theta}{\hbar \omega_{q\alpha}}$$

$$\Rightarrow E = V \sum_{q\alpha} \hbar \omega_{q\alpha} = 3N \hbar \omega_{q\alpha}$$

$$\text{Если } S=1; E = \frac{3N}{V} k_B \theta$$

Напомн. столько же и электронов $q\alpha$, $\alpha = 1, \dots, 3S$.

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial \theta} = \frac{3N}{V} k_B \text{ из-к. флуктуация - Пвч.}$$

2) Низкие температуры: $\theta \rightarrow 0$

$$\sum_{q\alpha} \rightarrow \sum_{\alpha} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} V \dots$$

$$C_V = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} V \frac{\hbar \omega_{q\alpha}}{e^{\frac{\hbar \omega_{q\alpha}}{k_B \theta}} - 1}$$

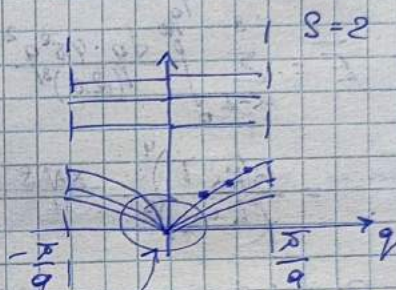
по зоне Бриллюэна

$U_1 = 1$ $U_2 = 2$

продольная и 2 поперечные

$$\omega = q \cdot u$$

Низкие температуры
Оптом.
о них



несколько, что выделено только двумя. Если учесть безразличность, то они равны.

Рассеивание сферически симметрично для $q \ll \pi/a$.

$$C_V = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} V \frac{\hbar \omega_{q\alpha}}{e^{\frac{\hbar \omega_{q\alpha}}{k_B \theta}} - 1} = \left\{ \omega = q \cdot u \right\} = \text{переход к интегр. по } \omega$$

$$\frac{1}{V} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B \theta}} - 1} = \frac{\omega^2 d\omega}{2\pi^2} \left(\frac{1}{U_1^3} + \frac{2}{U_2^3} \right) = \left\{ x = \frac{\hbar \omega}{k_B \theta} \right\} \ominus$$

$= \frac{3}{U_1^3}$ - введём среднюю скорость

$$\frac{3}{2\pi^2 U_1^3} \cdot \frac{\hbar (k_B \theta)^4}{\hbar^4} \cdot \int \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

$\frac{\pi^4}{15}$

пока, когда $\theta \rightarrow 0$ все выходы равны, т.е. в максим. θ $\rightarrow \infty$

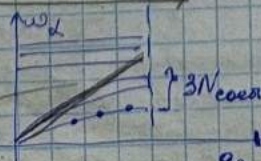
$$\Rightarrow E = \frac{(k_B \theta)^4 \pi^2}{10 (\hbar u)^3}$$

$$\left\{ C_V = \frac{2\pi^2}{5} k_B \left(\frac{k_B \theta}{\hbar u} \right)^3 \right\}$$

и з-к флукт.



Что в (9)?



Если S задан в ячейке, то на какой-то велич. N возмущений. А флукт. оптом. велич. - это не уже много соед. в фазе. θ

* и медлен. $\omega = u q$

3. Дебали - расширяем зону Бриллюэна до ω_D зон, чтобы было нужное число состояний $3NS$.

по зоне Брилли.
 $\int \rho(\omega) d\omega \rightarrow \int_0^{\omega_D} 4\pi \omega^2 d\omega$

$$3 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{\omega_D} 4\pi \omega^2 d\omega = 3NS$$

→ всегда имеем ω_D

или вместо

Но так все считаем. $\omega_D = \bar{\omega}$

$$\omega_D = \bar{\omega} \Rightarrow \left[\frac{V \omega_D^3}{2\pi^2 \bar{\omega}^3} = 3NS \right]$$

конф-е максимума Дебали

Дальше просто математика

$$\bar{E} = \sum_{\alpha=1}^3 \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega \cdot 4\pi \omega^2}{(2\pi)^3} \cdot \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} = \left\{ x = \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right\} =$$

$$= \frac{3(k_B T)^4}{(\hbar \omega_D)^3} \cdot \frac{3NS}{V} \int_0^{\omega_D / T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad \text{ⓐ}$$

ф-я температуры.

$k_B \Theta_D = \hbar \omega_D$ где $\omega_D = \bar{\omega}$

→ температура Дебали

Если ввести $\mathcal{D} = \frac{\Theta_D}{T}$

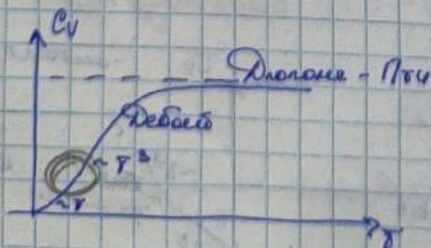
$$\text{ⓐ} \Rightarrow \frac{3NS}{V} \frac{1}{k_B} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

$\mathcal{D}(\mathcal{D}) \sim$ табулируется

$$\Rightarrow \bar{E} = \frac{3NS}{V} k_B T \cdot \mathcal{D}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)$$

$$C_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{3NS}{V} k_B \left[\mathcal{D}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right) - \frac{\Theta_D}{T} \mathcal{D}'\left(\frac{\Theta_D}{T}\right) \right]$$

→ даёт квантовую зависимость.



$T \rightarrow 0: C_V = \frac{12\pi^4}{5} k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$
 конст.

$T \rightarrow \infty$: Дюлонг - Пти

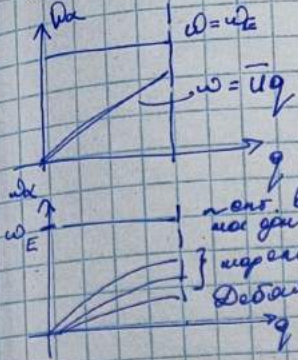
а было:

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar \bar{\omega}} \right)^3$$

Но способ расч. отсюда.

пределами классической физики. Если температура $T \rightarrow 0$ и тогда становится ясно, что можно получить более точную теорию квантовой зависимости.

Модель Гамильтона



Решим, что нужно учесть стик. ветви. Он предполагает учесть вклад от акуст. ветвей как в модели Дебая.

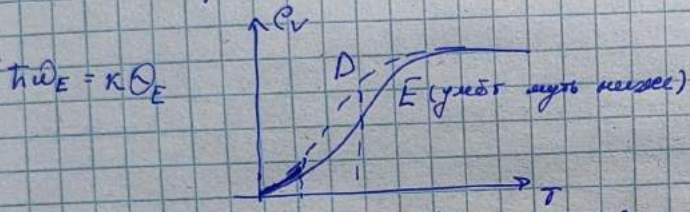
$$\bar{E}_a = \frac{3N}{V} \kappa D(\omega) ; \quad \kappa = \frac{\omega_0}{\omega_E}$$

но ветвей 3N, без увелич. диспер. до ω_0

$$\Rightarrow \frac{\omega_0^3}{2\pi^2 \omega_E^3} = \frac{3N}{V} ; \quad \bar{E}_{\text{ост}} = (3S-3) V \frac{N}{\omega_E} \frac{\hbar \omega_E}{e^{\frac{\hbar \omega_E}{kT}} - 1}$$

бд. равнов. законность.

$$\bar{E} = \bar{E}_a + \bar{E}_{\text{ост}} ; \quad C_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T}$$



2) $\vec{u}(\vec{R}) \vec{u}(\vec{R}')$ $\rightarrow$ оформим кв. мемори $\rightarrow$ гармон. приближение (всё было в этом приближении)

$$u(R-R')$$

$\alpha \rightarrow \alpha(1+\epsilon)$ - деформ. во всех напр.

Можно показать, что если оф. кв. мемори, то ур-я дадут тот же спектр $\hbar \omega_\alpha$, что и при отсутств. деформ. $\Rightarrow \omega_\alpha$ не зависит от объёма.

$$E = \sum \frac{\hbar \omega_\alpha}{e^{\frac{\hbar \omega_\alpha}{kT}} - 1} \Rightarrow E \text{ тоже не зависит от } V$$

В гармон. приближ. нет способов описать тепловое расширение $\Rightarrow$ нужно учитывать другие члены.

$$\Delta u(\vec{R}) \vec{u}(\vec{R}') + \Delta_2 u_1 u_2 u_3 + \Delta_3 u_1 u_2 u_3 u_4 + \dots$$

ангармонические члены.

$$\frac{\Delta \omega}{\omega} \sim \frac{\Delta V}{V} \text{ появляея завис. от объёма, частот об объёма}$$

$T \uparrow \Rightarrow$ колеб. с большими ампл. $\Rightarrow$ не работает фидл.

колеб. около равнов.

колеб. больше + взаимод. $\Rightarrow$ некое равновесие устанавливается

или, узлов решётки $\rightarrow$ это даёт $\sim \frac{\Delta V}{V}$

$\delta \rightarrow 0$
конвергенция