

## Определение комплексных статистических сумм

твердого, жидкого и газообразного тела

Якубовский Е.Г.

e-mail [yakubovski@rambler.ru](mailto:yakubovski@rambler.ru)

Уравнения Шредингера для твердого, жидкого и газообразного тела имеют одинаковый вид. Для их отличия учтем кинематическую вязкость среды. При этом постоянная Планка равна своему эффективному значению. Данная статья взята из книги «Следствие комплексности декартова пространства» Экспериментальная проверка комплексности пространства издательства LAP.

### 1. Определение уравнения состояния твердого тела, жидкости и газа, и теплоемкости твердого тела

Применим другой подход к определению энергии состояния среды. При этом энергия состояния одноатомной молекулы определяется по формуле

$$E_{n\chi} = mc^2 \left\{ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{[\sqrt{|\chi|^2 - (Z\alpha)^2} + n_r]^2} \right\}^{-1/2}. \quad (1.1)$$

Величины  $|\chi|, n_r$  это квантовые числа атома,  $Z$  заряд ядра атома см. [13].

При этом постоянная тонкой структуры считалась при учете эффективного значения постоянной Планка, равной  $\alpha = \frac{1}{137[1 - 2im_e\eta_l / (\hbar\rho_b)]}$ . Значит,

получим комплексное значение энергии состояния, т.е. молекула является квазистационарной, причем мнимая часть энергии молекулы много меньше действительной части. Введение вязкости, т.е. трения, делает состояние молекулы стационарным, но с комплексной энергией. При этом частота волны и волновое число комплексное, но длина волны и период колебаний определяется действительной частью этой величины.

Полученные результаты позволяют использовать энергию состояния твердого, жидкого и газообразного состояния вещества в статистических суммах с учетом вязкости среды. И получать более точные значения

параметров, как фазовых переходов, так и получать уравнение состояния среды в разных фазовых состояниях.

Полученные соотношения позволяют определить сходящиеся статистические суммы по следующему алгоритму

$$Q = \sum_{n,\chi} \sum_a \exp[-(E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + E_a)/k_B T].$$

Где величина  $E_{n\chi\eta}$  энергия атома в вязкой среде,  $E_{n\chi 0}$  энергия атома в вакууме, значение  $E_a$  это оставшаяся энергия среды.

Статистическая сумма приближенно равна

$$Q = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_a \left\{ \exp\left[\frac{\beta m_e Z^2 e^4}{2n^2 (\hbar - 2im_e \eta / \rho_b)^2} - \frac{\beta m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}\right] - 1 \right\} \exp(-\beta E_a) + \sum_a \exp(-\beta E_a) =$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_a \exp\left[\frac{\beta m_e Z^2 e^4}{2n^2 (\hbar - 2im_e \eta / \rho_b)^2} - \frac{\beta m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}\right] \exp(-\beta E_a), \beta = 1/k_B T$$

При этом сумма в фигурных скобках сходится. Причем в случае газа не взаимодействующая часть энергии равна

$$E_a = E_{n_x n_y n_z} = \frac{(\hbar - 2im_e \eta / \rho_b)^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right). \text{ В случае твердого тела не}$$

взаимодействующая часть энергии равна энергии гармонических осцилляторов  $E_a = E_n^i = (\hbar - 2im_e \eta / \rho_b) \omega_i (n + 1/2)$ . Кроме того, в энергию статистической суммы, надо вставить энергию кванта затухания  $E_a = \varepsilon_{m,l}$ , где величина кванта затухания вычислена в случае вязкой среды и в случае вакуума равна нулю. Квантовые числа  $n_r, l$  соответствуют квантовым числам водородоподобного атома.

Эти суммы в вакууме переходят в статистическую сумму идеального газа или гармонического осциллятора, а в случае вязкой среды описывает взаимодействие каждой частицы со всеми остальными частицами. Причем статистическая сумма состоит из первого члена произведения, описывающего взаимодействие, и из статистической суммы, соответствующей не

взаимодействующим частицам, т.е. для второго члена произведения можно применять статистику Бозе – Эйнштейна, или статистику Ферми-Дирака.

При этом внутренняя энергия тела равна

$$U = k_B T^2 \frac{\partial \ln Q}{\partial T} = \frac{\sum_{n,\chi} \sum_a (E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + E_a) \exp[-(E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + E_a)/k_B T]}{\sum_{n,\chi} \sum_a \exp[-(E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + E_a)/k_B T]}.$$

Т.е. расчет изменения энергии тела при фазовых переходах является приближенным, учитывающим только главный член разложения внутренней энергии.

Вычислим энтропию системы

$$S = -k_B P_{nN} \ln P_{nN};$$

$$P_{nN} = \frac{\exp[-(E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + E_a)/k_B T]}{\sum_{n,\chi} \sum_a \exp[-(E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + E_a)/k_B T]} =. \quad (1.2)$$

$$= \frac{\exp[-(E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + E_a)/k_B T]}{\frac{1}{N!} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2} V^N [1 + f(\eta, T)]}$$

Где имеем  $f(\eta, T) = \sum_{n,\chi} \{\exp[-(E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + \varepsilon_{m\chi})/k_B T] - 1\}$ , величина

учитывающая взаимодействие частиц,  $\frac{1}{N!} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2} V^N$  статистическая

сумма не взаимодействующих частиц. Имеется представление взаимодействующих статистических сумм газа и жидкости для классического предела, путем введения члена  $Z_N$  см. [1]

$$\exp(-\beta F) = \frac{1}{N!} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2} Z_N.$$

Где величина  $Z_N$  определяется по формуле

$$Z_N = \int \exp[-\beta V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)] d^3\mathbf{R}_1 d^3\mathbf{R}_2 \dots d^3\mathbf{R}_N.$$

Но при этом значение потенциала  $V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$  взаимодействия неизвестно. Кроме того, значение потенциала общее для твердого, жидкого и газообразного состояния и значит, равновесие фаз не опишет. Для описания

разных фаз необходимо, чтобы уравнение состояния имело несколько ветвей решения, равное количеству фаз. При этом в случае тройной точки в ней должно иметься три ветви решения, что в тройной точке равновесия твердого, жидкого и газообразного состояния не реализуется. Предлагается другой способ учесть взаимодействие частиц, путем учета вязкости среды. При этом разные фазовые состояния имеют разную вязкость, и значит, опишут разные состояния вещества.

В случае произвольного количества тождественных не взаимодействующих частиц статистическая сумма равна

$$Q_a = \prod_a \sum_{p_{ab}} \exp(-\beta p_a E_a)$$

1. Величина  $p_a = 0, 1, 2, \dots$ , в случае статистики Бозе – Эйнштейна
2. Величина  $p_a = 0, 1$  в случае статистики Ферми-Дирака

В первом случае статистическая сумма для члена, описывающего не взаимодействующие частицы в случае произвольного количества частиц, равна

$$Q_a = \prod_a [1 - \exp(-\beta E_a)]^{-1}.$$

Во втором случае имеем

$$Q_a = \prod_a [1 + \exp(-\beta E_a)].$$

В случае фиксированного количества частиц  $P = \sum_a p_a$  имеем в первом

случае 
$$E = \sum_a p_a (E_a - \mu)$$

$$Q_a^{(\mu)} = \sum_{p_1, p_2, \dots} \exp[-\beta \sum_a p_a (E_a - \mu)].$$

В случае газа Бозе – Эйнштейна с фиксированным количеством частиц имеем

$$Q_a^{(\mu)} = \prod_a \{1 - \exp[-\beta(E_a - \mu)]\}^{-1}.$$

В случае газа Ферми-Дирака имеем статистическую сумму с фиксированным числом частиц

$$Q_a^{(\mu)} = \prod_a \{1 + \exp[-\beta(E_a - \mu)]\}.$$

Вычислим уравнение состояния газа и жидкости со взаимодействующими частицами. Для не взаимодействующей части получим значение статистической суммы см. [1]

$$\exp(-\beta F) = \frac{1}{N!} \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3N/2} V^N.$$

В случае статистических сумм, состоящих из нескольких фракций в одной фазе, статистическая сумма не взаимодействующих частиц определяется по формуле

$$\exp(-\beta F) = \exp[-\beta(F_1 + \dots + F_N)] = \prod_{k=1}^N \frac{1}{N_k!} \left( \frac{m_k}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3N_k/2} V^{N_k}.$$

В статистических суммах, связанных с взаимодействием, нужно учитывать энергию частиц из разных фракций.

Статистическую сумму свободного состояния надо умножить на статистическую сумму, связанную с взаимодействием, причем статистическая сумма разбивается на две части

$$\begin{aligned} \exp(-\beta F) &= \frac{1}{N!} \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3N/2} V^N \sum_{n,\chi} \{ \exp[-(E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + \varepsilon_{m\chi})/k_B T] - 1 \} + \\ &+ \frac{1}{N!} \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3N/2} V^N = \frac{1}{N!} \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3N/2} V^N f[\eta(N/V, T), T] + \frac{1}{N!} \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3N/2} V^N \end{aligned}$$

Где имеем соотношение  $f(\eta, T) = \sum_{n,\chi} \{ \exp[-(E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + \varepsilon_{m\chi})/k_B T] - 1 \}$ ,

причем этот ряд является сходящимся, так как энергия частиц стремится к нулю по мере роста орбитального квантового числа и приближенно равна

$$\begin{aligned} E_{n\chi\eta} - E_{n\chi 0} + \varepsilon_{m\chi} &= -\frac{\beta m_e Z^2 e^4}{2n^2 (\hbar - 2im_e \eta / \rho_b)^2} + \frac{\beta m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} + \frac{\varepsilon_{i00}(\eta) [1 - \gamma_{n,l} n_r / (l+1)]^2}{(n_r + l + 1)^2} \sim \\ &\sim \frac{4i\beta m_e^2 Z^2 e^4 \eta}{\hbar^3 n^2 \rho_b} + \frac{\varepsilon_{i00}[\eta(c, T)] [1 - \gamma_{n,l} n_r / (l+1)]^2}{(n_r + l + 1)^2}, |\gamma_{n,l}| < 1 \end{aligned}$$

Где имеем определение концентрации молекул в твердой, жидкой или газообразной среде  $c = \frac{N}{V}$ . При этом свободная энергия равна

$$F = \frac{3N}{2\beta} \ln \beta + \frac{3N}{2\beta} \ln \frac{2\pi\hbar}{m} - \frac{1}{\beta} \ln \{ [1 + f[\eta(N/V, T), T]] V^N \} + \frac{N}{\beta} \ln \frac{N}{e}.$$

Термодинамический потенциал для одной фазы состоящий из  $P$  веществ равен

$$\begin{aligned} \varphi(T, V, N_1, \dots, N_P) = & \sum_{k=1}^P \left[ \frac{3N_k}{2\beta} \ln \beta + \frac{3N_k}{2\beta} \ln \frac{2\pi\hbar}{m} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{\beta} \ln \{ [1 + f[\eta(c_1, \dots, c_N, T), T]] V^{N_k} \} + \frac{N_k}{\beta} \ln \frac{N_k}{e} + p_k V \right] \end{aligned} \quad (1.3)$$

Объем вещества надо выразить из уравнения состояния через давление и температуру. Вязкость нескольких веществ в одной фазе считается по формуле

$$(N_1 + \dots + N_P) \eta(c_1, \dots, c_P, T) = N_1 \eta_1(c_1, T) + \dots + N_P \eta_P(c_P, T)$$

При этом воспользовались формулой  $N! = \left(\frac{N}{e}\right)^N \sqrt{2\pi N}$ . Для нахождения

уравнения состояния воспользуемся формулой  $p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ , получим

$$\frac{p}{k_B T} = \left[ \frac{N}{V} - \frac{1}{1 + f[\eta(c, T), T]} \frac{\partial f[\eta(c, T), T]}{\partial c} \frac{N}{V^2} \right]. \quad (1.4)$$

В случае нескольких веществ в одной фазе имеем

$$\frac{p}{k_B T} = \sum_{k=1}^n \left[ \frac{N_k}{V} - \frac{1}{1 + f[\eta(c_1, \dots, c_N, T), T]} \frac{\partial f[\eta(c_1, \dots, c_N, T), T]}{\partial c_k} \frac{N_k}{V^2} \right]$$

Или введя обозначение  $R = N_{av} k_B$ , получим уравнение для газа и жидкости, каждое со своим коэффициентом вязкости

$$\frac{pV}{RT} = \sum_{k=1}^N \frac{m_k}{\mu_k} \left[ 1 - \frac{1}{V \{ 1 + f[\eta(c_1, \dots, c_N, T), T] \}} \left( \frac{\partial f[\eta(c_1, \dots, c_N, T), T]}{\partial c_k} \right)_T \right].$$

Где величина  $\frac{m_k}{\mu_k}$  это число молей данного вещества.

При этом справедливо  $f(0, T) = 0$ . При этом давление величина действительная положительная, поэтому правую часть надо взять по модулю. При этом двойной точке соответствует равенство вязкости у жидкости и пара, после чего при повышении температуры имеется одна фаза газ.

В случае твердого тела, состоящего из разных элементов, уравнение состояния запишется в виде

$$\frac{p}{RT} = \sum_{k=1}^N \frac{\rho_k}{\mu_k} \left[ 1 - \frac{1}{\{1 + f[\eta(c_1, \dots, c_N, T), T]\}} \left( \frac{\partial f[\eta(c_1, \dots, c_N, T), T]}{\partial N_k} \right)_T \right].$$

Где величина  $\rho_k$  постоянная плотность каждого вещества, и каждый элемент может образовать новое твердое вещество. При этом в твердом теле имеются касательные напряжения, которые этой формулой не описываются. Формула для касательных напряжений, определяемых тензором вязкости

$$\sigma_{ik} = \eta_{ikpq} \left( \frac{\partial V_p}{\partial x_q} + \frac{\partial V_q}{\partial x_p} \right).$$

При этом тензор вязкости связан с тензором модулей упругости  $\lambda_{ikpq}$ , определяемым  $\sigma_{ik} = \lambda_{ikpq} u_{pq}$ , где величина  $u_{pq}$  является тензором деформации. Для выявления связи между тензором вязкости и тензором модулей упругости приравняем напряжения при определенной деформации и определенном изменении скорости (нет суммирования по индексам  $p, q$ )

$$\eta_{ikpq} \left( \frac{\partial V_p}{\partial x_q} + \frac{\partial V_q}{\partial x_p} \right) = \lambda_{ikpq} u_{pq}. \quad (1.5)$$

Воспользуемся равенствами

$$pn_p = \eta_{pppq} \left( \frac{\partial V_p}{\partial x_q} + \frac{\partial V_q}{\partial x_p} \right) = \lambda_{pppq} u_{pq} \quad (1.6)$$

Разделив (1.6) на (1.5) получим равенство (1.7)

$$\eta_{ikpq} = \frac{\lambda_{ikpq}}{\lambda_{pppq}} \eta_{pppq} = \frac{\lambda_{ikpq}}{\lambda_{pppq}} \eta. \quad (1.7)$$

Где величина  $\eta$  это вязкость твердого тела. При переходе от кристаллического тела к изотропному телу получается обычная вязкость тела. Для данного кристаллического тела все данные можно получить из справочника.

Для их вычисления надо вводить тензор вязкости и при дифференцировании по объему получим тензор напряжения. И возникнет тензор энергии состояния и тензор свободной энергии.

$$E_{n\chi\eta ik} - E_{n\chi 0 ik} = - \frac{\beta m_e Z^2 e^4 \left[ \sum_{n,p,q=1}^3 (\hbar \delta_{inpq} - 2im_e \eta_{inpq} / \rho_b)(\hbar \delta_{nkqp} - 2im_e \eta_{nkqp} / \rho_b) \right]^{-1}}{2n^2} +$$

$$+ \frac{\beta m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \delta_{ik} \sim \frac{2i\beta m_e^2 Z^2 e^4 \sum_{n,p,q=1}^3 (\delta_{inpq} \eta_{nkqp} + \eta_{inpq} \delta_{nkqp})}{\hbar^3 n^2 \rho_b}$$

Где последний член формулы определится при малой вязкости. При этом определится тензор напряжения  $\sigma_{ik}$ .

$$\frac{\sigma_{ik}}{RT} = \sum_{s=1}^N \frac{\rho_s}{\mu_s} \left[ 1 - \frac{1}{\{1 + f[\eta_{ik}(c_1, \dots, c_N, T), T]\}} \left( \frac{\partial f[\eta_{ik}(c_1, \dots, c_N, T), T]}{\partial N_k} \right)_T \right]$$

Вычислим теплоемкость твердого тела с учетом взаимодействия между молекулами. Свободная энергия для электронного газа равна

$$F = - \sum_i \frac{1}{\beta} \ln \sum_{n_r, l} \{ \exp[-\beta(E_{n_r, l\eta} - E_{n_r, l0} + \varepsilon_{n_r, l})] - 1 \} \{ 1 + \exp[-\beta(\varepsilon_i - \mu)] \} +$$

$$+ \{ 1 + \exp[-\beta(\varepsilon_i - \mu)] \} = - \sum_i \frac{1}{\beta} \ln \{ 1 + f[\eta(c, T)] \} \{ 1 + \exp[-\beta(\varepsilon_i - \mu)] \}$$

Представим суммы в виде интегралов, получим

$$F = - \frac{1}{\beta} \int \ln \{ 1 + \exp[-\beta(p^2/2m - \mu)] \} \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} V - \frac{1}{\beta} \ln \{ 1 + f[\eta(c, T)] \}$$

$$\rho = \frac{\langle N \rangle}{V} = - \frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial \mu} = \int \frac{\exp[-\beta(p^2/2m - \mu)]}{1 + \exp[-\beta(p^2/2m - \mu)]} \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$u = \frac{U}{V} = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial \beta F}{\partial \beta} + \mu N \right) = \int \frac{p^2}{2m} \frac{\exp[-\beta(p^2/2m - \mu)]}{1 + \exp[-\beta(p^2/2m - \mu)]} \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} + \frac{1}{V} \left( \frac{\partial \ln \{ 1 + f[\eta(c, T)] \}}{\partial \beta} \right)$$



Введем новую переменную  $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ . Тогда интегралы запишутся в виде

$$\rho = \int \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1} \frac{4\pi m^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} d\varepsilon$$

$$u = \int \frac{\varepsilon^{3/2}}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1} \frac{4\pi m^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} d\varepsilon + \frac{1}{V} \frac{\partial \ln\{1 + f[\eta(c, T)]\}}{\partial \beta}$$

Из первого интеграла определим зависимость  $\mu = \mu(\rho)$ , а из второго интеграла определим плотность внутренней энергии. Зная внутреннюю энергию электронного газа, определим его теплоемкость по формуле  $c_V = \frac{\partial U}{\partial T}$ . К стандартно вычисленной теплоемкости электронного газа добавляется член  $\frac{\partial^2 \ln\{1 + f[\eta(c, T)]\}}{\partial T \partial \beta}$ , который надо умножить на количество частиц.

Вычислим теплоемкость кристаллической решетки, которая тоже считается с учетом ее вязкости. Для одной моды кристаллической решетки имеем

$$F = k_B T \ln[1 - \exp(-\hbar\omega_{\mathbf{K}}^{(p)} / k_B T)] \{1 + f[\eta(c, T)]\}.$$

Пусть кристалл имеет объем  $V$ . Кроме того, считаем, что наложены периодические граничные условия. Значения  $\mathbf{K}$  пробегает квазинепрерывный спектр, тогда получим

$$\frac{F}{V} = k_B T \int_{\mathbf{K}} \left\{ \sum_p \frac{\hbar\omega_{\mathbf{K}}^{(p)}}{2} + k_B T \ln[1 - \exp(-\hbar\omega_{\mathbf{K}}^{(p)} / k_B T)] \right\} \{1 + f[\eta(c, T)]\} \frac{d^3 K}{(2\pi)^3}.$$

Рассмотрим высокотемпературный предел для внутренней энергии

$$U = \sum_i \left[ \frac{\hbar\omega_i}{2} + \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{\exp(\hbar\omega_i / k_B T) - 1} \right] \{1 + f[\eta(c, T)]\} =$$

$$= \left( \frac{\hbar}{2} \sum_i \omega_i + \sum_i k_B T \right) \{1 + f[\eta(c, T)]\} = (U_0 + 3Nk_B T) \{1 + f[\eta(c, T)]\}$$

Где  $N$  число Авогадро. Отсюда получаем  $c_V = 3Nk_B = 3R$ .

Вычислим теплоемкость при низкой температуре при трех совпадающих скоростях звука  $V_0$ , имеем

$$U = \sum_i \left[ \frac{\hbar\omega_i}{2} + \frac{\hbar\omega_i}{\exp(\hbar\omega_i/k_B T) - 1} \right] \{1 + f[\eta(c, T)]\} =$$

$$= \left[ \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2} + 3 \int_0^{K_M} \frac{\hbar\omega_i(K)}{\exp(\hbar\omega_i/k_B T) - 1} \frac{4\pi K^2}{(2\pi)^3} dK \right] \{1 + f[\eta(c, T)]\}, K = \frac{\omega}{V_0}$$

Где величина  $K_M$  определяется из формулы

$$3AN = \int_0^{K_M} \frac{3Vd^3K}{(2\pi)^3} = \frac{K_M^3 V}{2\pi^2}$$

Или вводя температуру Дебая, получим

$$\frac{U}{V} = \left[ \frac{U_0}{V} + \frac{3k_B^4 T^4}{2\pi^2 \hbar^2 V_0^3} \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{\exp(x) - 1} \right] \{1 + f[\eta(c, T)]\} = \left( \frac{U_0}{V} + AT^4 \right) \{1 + f[\eta(c, T)]\},$$

$$x = \frac{\hbar\omega}{k_B T} = \frac{\Theta}{T}, \Theta = \frac{\hbar K_M V_0}{k_B}$$

Откуда для вклада в теплоемкость кристаллической решетки имеем следующую формулу

$$c_V = 4AT^3 \{1 + f[\eta(c, T)]\} + AT^4 \frac{\partial f[\eta(c, T)]}{\partial T}.$$

Где  $\eta(c, T)$  величина вязкости кристаллической решетки твердого тела.

## 2. Определение статистических сумм с учетом вектора обратной решетки.

Для кристаллического тела можно предложить формулу, учитывающую кристаллическую структуру с помощью особым образом определенной вязкости твердого тела, определяющую кинетическую энергию системы с возможной отрицательной эффективной массой

$$E = \varepsilon_0 + U_G \exp(i\mathbf{Gr}/2) + \sum_{\mu, \nu=1}^3 \frac{(\hbar - im_e \eta_\mu / \rho_e)(\hbar - im_e \eta_\nu / \rho_e)}{2m_e} k_\mu k_\nu =$$

$$= m_e c^2 + U_G \exp(i\mathbf{Gr}/2) + \sum_{\mu, \nu=1}^3 \frac{\hbar^2 - m_e^2 \eta_\mu \eta_\nu / \rho_e^2 - i\hbar m_e (\eta_\mu + \eta_\nu) / \rho_e}{2m_e} k_\mu k_\nu \quad (2.1)$$

в формуле введен тензор вязкости тела  $\eta_\mu$ , который у твердого тела может определить отрицательную энергию. Т.е. кинетическая энергия электрона может быть отрицательна, а у дырок может быть положительна. Это соответствует тому, что эффективная масса электрона, находящегося в кристалле отрицательна, а дырок положительна. При этом полная энергия должна быть больше энергии покоя, меньшая энергия покоя соответствует запрещенной области энергии.

Справедливо следующее общее определение тензора вязкости

$$\sigma_{ik} = \lambda_{ikpq} \left( \frac{\partial V_p}{\partial x_q} + \frac{\partial V_q}{\partial x_p} \right).$$

При этом справедливо  $\lambda_{ikpq} = \eta_i \delta_{ik} \delta_{ip} \delta_{iq}$ . При этом длина свободного пробега для электрона равна трансляционному периоду решетки. Причем в случае Брэгговского отражения получаем малое значение эффективной массы, переходящее из отрицательного значения в положительное. Значит,

кинематическая вязкость определяется по формуле  $\eta_\mu = \rho v_\mu = \frac{\rho c_\mu}{3\sqrt{|G^2 + 2\mathbf{kG}|}}$

, так как длина свободного пробега при Брегговском отражении стремится к бесконечности в силу нулевой массы частицы. Эта величина для дырок имеет противоположный знак корня. Величина  $c_\mu$  это продольная или поперечная скорость звука.

При этом кинематическая вязкость  $v_\mu$  почти свободного электрона на границе зоны Бриллюэна может иметь большое значение, делая энергию частицы отрицательной. Т.е. эффективная масса электрона может быть отрицательна, а эффективная массы дырки положительна.

При этом имеем в одномерном случае соотношение относительно волнового числа, удовлетворяющее нахождению электрона в кристаллической решетке с возможной отрицательной массой частицы, что в данном случае интерпретируется как отрицательная часть кинетической энергии

$$\varepsilon_{kG} = U_G \exp[iG(x+a)/2] + \left[ \hbar^2 - \frac{m_e^2 \rho^2 c_\mu^2}{9G(G+2k_0)\rho_e^2} - \frac{i\hbar m_e \rho (c_\mu + c_\nu)}{3\sqrt{G(G+2k_0)}\rho_b} \right] \frac{k_\mu k_\nu}{2m_e}$$

Где величина  $U_G \exp[iG(x+a)/2]$  потенциальная комплексная электрическая энергии частицы. При величине  $G = 2\pi/a$ , получим  $U = -U_G \exp(iGx/2)$ , где величина  $U_G$  соответствует притяжению частиц и отрицательна. Для второй зоны Бриллюэна  $G = 4\pi/a$  величина потенциальной энергии входит со знаком плюс  $U = U_G \exp(iGx/2)$ . Известно, что спектральная компонента ряда  $\sum_G U_G \exp(iGx)$  изменяется в соответствии с формулой  $U_G \sim 1/G^2$ . См. [2], §9.

Будем определять энергию электрона в зависимости от его координаты. Подсчитаем изменение волнового числа при выполнении закона сохранения энергии частицы.

$$2m_e \varepsilon_{kG} / k_0^2 = -2m_e U_G \exp(iGx/2) / k_0^2 + 4m_e U_G \exp(iGx/2) \Delta k / k_0^3 + \hbar^2 - \frac{m_e^2 \rho^2 c_\mu^2}{9G(G+2k_0)\rho_e^2} + \frac{2m_e^2 \rho^2 c_\mu^2 \Delta k}{9G(G+2k_0)^2 \rho_e^2} - \frac{i\hbar m_e \rho (c_\mu + c_\nu)}{3\sqrt{G(G+2k_0)}\rho_e} + \frac{i\hbar m_e \rho (c_\mu + c_\nu) G \Delta k}{3[\sqrt{G(G+2k_0)}]^3 \rho_e}$$

Построим формулы для первой зоны Бриллюэна. Для энергии электрона выполняется соотношение  $\varepsilon_{kG} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_e} - U_G \exp(iGx/2)$ , причем каждая пара состоит из  $n$  зоны Бриллюэна, которой соответствует вектор обратной решетки  $G = (2n-1)\pi/a$  и  $n+1$  зоны Бриллюэна, которой соответствует вектор обратной решетки  $G = 2n\pi/a$ , имеют одинаковый спектральный коэффициент  $U_G$ , пропорциональный  $1/n^2$ .

Можно определить разность энергий второй и первой зоны Бриллюэна  $\varepsilon_+ - \varepsilon_- = -U_{4\pi/a} \exp(2i\pi x/a) + U_{2\pi/a} \exp(i\pi x/a)$  при произвольном значении координаты  $x$ , соответствующей запрещенной зоне, так как для границы этих зон  $k_+ = G - k_0 = k_0 = k_-$ .

Приращение волнового числа соответствует появлению вязкого дополнительного члена в уравнении энергии, учитывающего введение

эффективной массы. Т.е. вязкий член наряду с обычной энергией, учитывает влияние кристаллической решетки, а появление кристаллической решетки приводит к появлению запрещенной зоны. Т.е. вязкий член учитывает ширину запрещенной зоны. При этом для определения ширины запрещенной зоны, учитывая закон сохранения энергии, получаем вспомогательную формулу

$$\Delta k [4m_0 U_G \exp(iGx/2) / k_0^3 + \frac{2m_0^2 \rho^2 c_\mu^2}{9G(G+2k_0)^2 \rho_b^2} + \frac{i\hbar m_0 \rho (c_\mu + c_\nu) G}{3[\sqrt{G(G+2k_0)}]^3 \rho_b}] =$$

$$= \frac{m_0^2 \rho^2 c_\mu^2}{9G(G+2k_0)^2 \rho_b^2} - \frac{i\hbar m_0 \rho (c_\mu + c_\nu)}{3\sqrt{G(G+2k_0)} \rho_b}, U < 0$$

Или преобразуя формулу, получим

$$\Delta k_- = \frac{(2k_0 + G) \left[ \frac{m_e^2 \rho^2 c_\mu^2}{9G(G+2k_0)^2 \rho_b^2} - \frac{i\hbar m_e \rho (c_\mu + c_\nu) G}{3[\sqrt{G(G+2k_0)}]^3 \rho_b} \right]}{4m_e U_G \exp(iGx/2) / k_0^3 + \frac{2m_e^2 \rho^2 c_\mu^2}{9G(G+2k_0)^2 \rho_b^2} + \frac{i\hbar m_e \rho (c_\mu + c_\nu) G}{3[\sqrt{G(G+2k_0)}]^3 \rho_b}}, U_G < 0. \quad (2.2)$$

При этом приращение волнового числа у второй зоны Бриллюэна равно

$$\Delta k_+ = \frac{(2k_0 + G) \left[ \frac{m_e^2 \rho^2 c_\mu^2}{9G(G+2k_0)^2 \rho_b^2} - \frac{i\hbar m_e \rho (c_\mu + c_\nu) G}{3[\sqrt{G(G+2k_0)}]^3 \rho_b} \right]}{-4m_e U_G \exp(iGx/2) / k_0^3 + \frac{2m_e^2 \rho^2 c_\mu^2}{9G(G+2k_0)^2 \rho_b^2} + \frac{i\hbar m_e \rho (c_\mu + c_\nu) G}{3[\sqrt{G(G+2k_0)}]^3 \rho_b}}$$

При этом изменение волнового числа в зависимости от координаты, соответствующего разности приращений волновых чисел второй и первой зоны Бриллюэна равно  $\Delta k = \Delta k_+ - \Delta k_-$  и соответствует ширине запрещенной зоны.

Трехмерная формула для собственной энергии частиц в твердом кристаллическом теле имеет вид

$$\varepsilon_{kG} = E_{kG} - m_e c^2 = U_G \exp(i\mathbf{G}\mathbf{a}/2) +$$

$$+ \sum_{\mu, \nu=1}^3 \frac{\hbar^2 - m_e^2 \eta_\mu \eta_\nu / \rho_b^2 - i\hbar m_e (\eta_\mu + \eta_\nu) / \rho_b}{2m_e} k_\mu k_\nu = \quad (2.3)$$

$$= U_G \exp(i\mathbf{G}\mathbf{a}/2) + \sum_{\mu, \nu=1}^3 \left[ \hbar^2 - \frac{m_e^2 \rho^2 c_\mu c_\nu}{9(G^2 + 2\mathbf{kG}) \rho_b^2} - \frac{i\hbar m_e \rho (c_\mu + c_\nu)}{3\sqrt{G^2 + 2\mathbf{kG}} \rho_b} \right] \frac{k_\mu k_\nu}{2m_e}$$

причем эта формула учитывает запрещенные зоны, соответствующие равенству нулю знаменателя в этой формуле.

Эта формула обобщает формулу для собственной энергии электрона в первой и второй зоне Бриллюэна кристаллической решетки  $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm U_1$  с учетом эффективной массы.

При этом внутри одной зоны Бриллюэна волновое число принимает ряд дискретных значений. Если длина цепочки по направлению вектора обратной решетки первой зоны Бриллюэна  $G_\mu$  равна  $L_\mu$ , то имеется  $G_\mu L_\mu / \pi$  дискретных состояний соответствующих разным направлениям спина. Т.е. суммарная энергия берется по дискретным состояниям электрона.

Найдем значение волнового числа, при котором сингулярность устраняется. При этом отношение  $\frac{e_\mu k_\mu}{\sqrt{G^2 + 2kG}} = \chi$  должно быть конечным.

Это выполняется при условии  $(e_\mu, f_\mu)^2 k^2 = \chi^2 G^2 + 2k\chi^2 (f_\mu, G_\mu)$ . Величина волнового числа конечна, если выполняется  $\chi = (e_\mu, f_\mu)\lambda$ . Величина  $\lambda$  меняется от нуля, до конечного большого значения, соответствующем запрещенной зоне Бриллюэна. Так как запрещенная зона Бриллюэна соответствует большим значениям параметра  $\lambda$ , то предел интегрирования по  $\lambda$  можно определить бесконечностью. Подынтегральное выражение в статистических суммах при этом стремится к нулю. При этом имеем для величины модуля волнового числа выражение

$k = [(f_\mu, G_\mu)\lambda^2 + \sqrt{(f_\mu, G_\mu)^2 \lambda^4 + G^2 \lambda^2}] = \frac{2\pi n \lambda}{b(\lambda)}$ . Энергия системы равна

$$\varepsilon_{n\lambda\mu\nu} = U_G \exp(i\mathbf{G}\mathbf{a}/2) + \sum_{\mu,\nu=1}^3 [\hbar^2 k^2 e_\mu e_\nu - \frac{m_e^2 \rho^2 V^2 (e_\mu, f_\mu)(e_\nu, f_\nu) \lambda^2}{9\rho_b^2} - \frac{i\hbar k m_e \rho V [(e_\mu, f_\mu) f_\nu + (e_\nu, f_\nu) f_\mu] \lambda}{3\rho_b}] / 2m_e = U_G \exp(i\mathbf{G}\mathbf{a}/2) + \quad .(2.4)$$

$$+ \sum_{\mu,\nu=1}^3 \frac{\hbar^2 g_{\mu\nu}(n, \lambda)}{2b_\mu(\lambda)b_\nu(\lambda)m_e}; c^2 = \sum_{\mu=1}^3 c_\mu^2, e_\mu = c_\mu / c, f_\mu = k_\mu / k$$

При этом запрещенной зоне соответствует бесконечность величин  $k^2, \lambda^2$  и бесконечная положительная энергия. Следовательно, вероятность этого состояния нулевая.

Отметим, что у твердого тела имеется параметр, имеющий одно направление в пространстве и постоянную величину, вектор обратной решетки  $G_\mu$ , причем производится суммирование по векторам обратной решетки. В случае жидкой среды, этот параметр не постоянен и принимает разные значения, которые необходимо усреднить. Так как в случае твердого тела производится усреднение по векторам обратной решетки, в случае жидкости вычислить интеграл с усредняющим обратную решетку вероятностной функцией, используя нормальное распределение с нулевым средним и заданной дисперсией. Причем амплитуда рассеяния в направление  $G_\mu = k'_\mu - k_\mu$  см. [3] глава 2, заменится на равномерное рассеяние во все стороны, что свойственно жидкому телу

$$\begin{aligned}
 A &= \sum_{n,m,k} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^N f_j \exp[-i(x_j^\mu + \rho_{nmk}^\mu)G_\mu - G_\mu^2 a^2 / 2] dG_1 dG_2 dG_3 = \\
 &= \sum_{n,m,k} \sum_{j=1}^N f_j \exp[-(x_j^\mu + \rho_{nmk}^\mu)^2 / 2a^2] / (\sqrt{2\pi}a)^3
 \end{aligned}$$

Где  $x_j^\mu$  координаты каждого элемента в узле кристаллической решетки,  $\rho_{nmk}^\mu$  суммируется по узлам решетки, величина  $f_j$  форм-фактор, учитывающий внутреннюю структуру рассеяния атома. Вычисленное среднее значение определяемой функции энергии или амплитуды рассеяния определит свойства жидкости с размытой кристаллической структурой. Т.е. в случае жидкости энергию и амплитуду рассеяния жидкости надо усреднять по параметрам обратной решетки с нормальным законом распределения, с нулевым средним и дисперсией этого параметра, определяющей структуру жидкости.

Как известно из статистической физики микроскопический вывод термодинамических формул основан на так называемых статистических

суммах, причем имеется следующая формула для вероятности состояния с собственной энергией  $\varepsilon_{n\lambda\mu\nu}$ , считаемой по формуле (2.4)

$$w_{n\lambda\mu\nu} = Z_G^{-1} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{n\lambda\mu\nu}}{T}\right).$$

В этой формуле  $T$  абсолютная температура,  $Z_G$  нормировочный множитель, который определяется из уравнения

$$\sum_{n,\lambda,\mu,\nu} w_{n\lambda\mu\nu} = 1.$$

Величина  $Z_G$  называется статистической суммой, и определяется по формуле

$$Z_G = \sum_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_{n\lambda\mu\nu}}{T}\right).$$

Энергия определяется по формуле

$$\varepsilon_{n\lambda\mu\nu} = U_G \exp(i\mathbf{Ga}/2) + \sum_{\mu,\nu=1}^3 \frac{\hbar^2 g_{\mu\nu}(n,\lambda)}{2b_\mu(\lambda)b_\nu(\lambda)m_e}.$$

Величина  $Z_G$  определяет свободную энергию  $F$  в переменных  $V, T$  соотношением

$$\begin{aligned} F &= -VT \ln \sum_n \sum_{\mu,\nu} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{n\mu\nu}}{T}\right) = \\ &= -VT \ln \sum_G \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{n\theta_\mu\varphi_\mu\theta_\nu\varphi_\nu}}{T}\right) \sin\theta_\mu \sin\theta_\nu d\theta_\mu d\varphi_\mu d\theta_\nu d\varphi_\nu \end{aligned}$$

Определим внутреннюю энергию по формуле см. [10]

$$\frac{U}{V} = \sum_n \sum_{\mu\nu} \varepsilon_{n\mu\nu} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{n\mu\nu}}{T}\right) / \sum_G Z_G$$

или по формуле

$$\frac{U}{V} = \frac{\sum_n \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \varepsilon_{n\theta_\mu\varphi_\mu\theta_\nu\varphi_\nu} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{n\theta_\mu\varphi_\mu\theta_\nu\varphi_\nu}}{T}\right) \sin\theta_\mu \sin\theta_\nu d\theta_\mu d\varphi_\mu d\theta_\nu d\varphi_\nu}{\sum_n \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{n\theta_\mu\varphi_\mu\theta_\nu\varphi_\nu}}{T}\right) \sin\theta_\mu \sin\theta_\nu d\theta_\mu d\varphi_\mu d\theta_\nu d\varphi_\nu}.$$

Причем величина собственной энергии равна



$$\varepsilon_{n\mu\nu} = U_G \exp(i\mathbf{G}\mathbf{a}/2) + \frac{\hbar^2 g_{\mu\nu}(n, \lambda)}{2b_\mu(\lambda)b_\nu(\lambda)m_e}.$$

К сожалению, вычисления по этой формуле не представимы в виде элементарных функций. Покажем, что в частных случаях эта формула определяет правильные результаты для теплоемкости кристаллической решетки.

Существующие формулы для теплоемкости кристаллических тел соответствуют малым возмущениям кристаллической решетки, которая рассматривается как совокупность гармонических осцилляторов. При этом не учитываются запрещенные зоны и решение получается в линейном приближении. При этом можно добавить к собственной энергии колеблющейся частицы собственную энергию гармонического осциллятора, ведь линейное приближение тоже надо учитывать

$$\varepsilon_{n\mu\nu} = U_G \exp(i\mathbf{G}\mathbf{a}/2) + \frac{\hbar^2 g_{\mu\nu}(n, \lambda)}{2b_\mu(\lambda)b_\nu(\lambda)m_e} + \hbar\omega(m + 1/2)$$

В случае учета первого наибольшего члена в формуле решетки имеем более простую формулу

$$\frac{U}{V} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n \exp(-\frac{\varepsilon_n}{T})}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\frac{\varepsilon_n}{T})}$$

где энергия считается по формуле для одномерной решетки

$$\varepsilon_{nm} = U_1/n^2 + \frac{G^2 \hbar^2 \lambda^2}{2m_e} + \hbar\omega(m + 1/2), G = 2\pi n/b(\lambda).$$

При этом если пренебречь потенциальной энергией и энергией гармонического осциллятора, то задача сводится к вычислению суммы

$$\frac{U}{N_{av}V} = \sum_{n=0}^N 6 \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2 \lambda^2}{m_e b^2} \exp[-\frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2 \lambda^2}{m_e b^2 kT}] / \sum_{n=0}^N \exp[-\frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2 \lambda^2}{m_e b^2 kT}] = 6kT/2 = 3kT$$

Энергия гармонических осцилляторов, которыми описываются фононы в кристаллической решетке гораздо меньше кинетической энергии, так как фононы распространяются со скоростью звука и, следовательно, их частота мала. Оценим члены кинетической энергии и энергии гармонического осциллятора

$$\frac{G^2 \hbar^2}{2m_e} = \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2 \lambda^2}{m_e b^2} .$$

$$\hbar \omega(m + 1/2) = \hbar c_\mu (m + 1/2) / a$$

Тогда их отношение равно  $\frac{2\pi^2 \hbar}{m_e b c_\mu} = \frac{2\pi^2 e^2}{\hbar c} \frac{c}{c_\mu} \gg 1, b = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ , так как скорость

света много больше звуковой скорости фононов. При этом получается, что влияние фононов можно пренебречь. Т.е. существующие формулы, где участвуют только члены с фононами, являются приближенными и только качественно описывают кристаллическую решетку. Дело в том, что теплоемкость измеряется в относительных единицах и даже линейное приближение к вычислению теплоемкости определяет правильный качественный результат.

Имеется три степени свободы у электрона, которые нужно умножить на две проекции спина, итого коэффициент равен  $6R$  у одномерной части кубической одноатомной решетки. Т.е. получаем, что твердое тело с одноатомной решеткой имеет теплоемкость, приближенно равную  $c_V = 3R$ .

Если же предел суммирования не бесконечность, то электроны заполняют не все зоны Бриллюэна, т.е. при низких температурах теплоемкость будет меньше. Если учитывать потенциальную энергию, то получаем отличающуюся теплоемкость, так как изменится и числитель, и знаменатель выражения для внутренней энергии.

Вычислим асимптотику теплоемкости при конечном большом количестве членов. Существуют асимптотические формулы для интеграла вероятности

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-x}^x \exp(-kx^2) dx = \frac{1}{\sqrt{2k}} \left\{ 1 - \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\exp(-kx^2)}{\sqrt{2kx}} [1 + O(1/x\sqrt{k})] \right\} \quad (2.5)$$

продифференцируем эту формулу по величине параметра  $\lambda$ , получим

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-x}^x x^2 \exp(-kx^2) dx = \frac{1}{2k\sqrt{2k}} \left\{ 1 - \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\exp(-kx^2)}{\sqrt{2k}x} [1 + 0(1/x\sqrt{k})] \right\} - \frac{1}{2xk} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} (kx^2 + \frac{1}{k}) \exp(-kx^2) \quad (2.6)$$

разделив формулу (2.6) на формулу (2.5), получим

$$\frac{\int_{-x}^x t^2 \exp(-kt^2) dt}{\int_{-x}^x \exp(-kt^2) dt} = \frac{1}{2k} \left[ 1 - \frac{1}{x\sqrt{2k}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} (kx^2 + 1/k) \exp(-kx^2) \right]$$

$$k = 2\left(\frac{\pi\hbar\lambda}{b}\right)^2 / km_e T, x^2 = N^2$$

Т.е. получаем формулу для внутренней энергии

$$\frac{U}{V} = 3RT \left\{ 1 - \frac{b\sqrt{2km_e T}}{2\pi\hbar\lambda N} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \left[ \frac{(2\pi\hbar\lambda N)^2}{2b^2 m_e kT} + \frac{2b^2 m_e kT}{(2\pi\lambda\hbar)^2} \right] \exp\left[-\frac{(2\pi\hbar\lambda N)^2}{2b^2 m_e kT}\right] \right\}.$$

При условии  $k \gg 1$ . При малом количестве членов ряда, получим формулу, соответствующую низкой температуре

$$\begin{aligned} \frac{U}{V} &= \frac{\varepsilon_1 \exp(-\varepsilon_1/kT) + \varepsilon_2 \exp(-\varepsilon_2/kT)}{\exp(-\varepsilon_1/kT) + \exp(-\varepsilon_2/kT)} 6 = \\ &= \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \exp[-(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/kT]}{1 + \exp[-(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/kT]} 6 \end{aligned}$$

Имеется три степени свободы у электрона, которые нужно умножить на две проекции спина, итого коэффициент равен  $6R$  у одноатомной решетки. Тогда теплоемкость равна

$$\begin{aligned} c_V &= \frac{1}{V} \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 \exp[-(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/kT]}{k^2 T^2 \{1 + \exp[-(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/kT]\}^2} 6kN = \\ &= \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 \exp[-(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/kT]}{k^2 T^2 \{1 + \exp[-(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/kT]\}^2} 6R \end{aligned}$$

Тогда имеем для теплоемкости формулу, так как  $\varepsilon_1 = 0$

$$c_V = \frac{6\varepsilon^2 \exp(-\varepsilon/T)}{k^2 T^2 [1 + \exp(-\varepsilon/T)]^2} R. \quad (2.7)$$

Формула применима при условии  $T \rightarrow 0$ , имеем теплоемкость, вычисляемую по формуле (2.7), стремящуюся к нулю.

#### Литература

1. *Р. Фейнман* Статистическая механика М.: «Мир», 1975г., 407с.
2. *Киттель Ч.* Квантовая теория твердых тел М.: «Наука», 1967г., 492стр.
3. *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела М.: «Наука», 1978г., 791с.