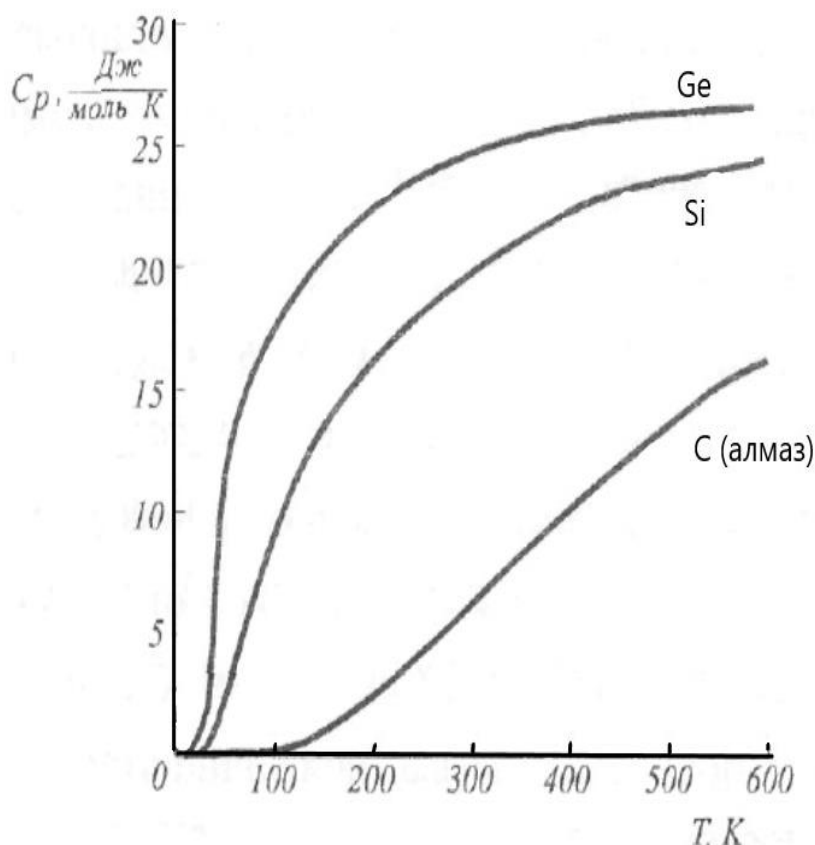


Блок 3

Время выполнения задания – 180 минут. Максимальное количество баллов – 75

На рисунке показаны температурные зависимости теплоемкости германия, кремния и углерода (алмаз). Все материалы имеют структуру типа алмаза. Поясните приведенные зависимости, проанализируйте общие черты и различия, перечислите параметры, которые вы можете оценить из этих данных. Приведите оценки.

Значение универсальной газовой постоянной $R=8,314 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$. Постоянная Больцмана $8,617 \cdot 10^{-5} \text{ эВ} \cdot \text{К}^{-1}$.



	Критерии оценки	Баллы
1	Общее определение понятия теплоемкость	1
2	Описание теплоемкости твердого тела. Указание на вклад в теплоемкость от системы носителей заряда и колебаний кристаллической решетки	2
3	Указание на возможные вклады в теплоемкость кристалла от вибрационных и либрационных мод колебаний	3
4	Оценка вклада в полную теплоемкость электронной подсистемы. Указание на область температур, при которой электронный вклад существенен	3
5	Оценка вклада в полную теплоемкость решетки на основании представлений квантовой теории теплоемкости. Поведение теплоемкости при температурах, близких 0 К. Максимально высокое значение теплоемкости кристалла.	3
6	Основания для выделение низкотемпературной и высокотемпературной частей температурной зависимости теплоемкости	3
7	Описание модели кристаллической решетки Эйнштейна. Указание на модельные приближения. Все ионы колеблются с одной частотой независимо друг от друга. Понятие температуры Эйнштейна.	8
8	Описание модели кристаллической решетки Дебая. Указание на модельные приближения. Существует максимальная граничная частота колебаний, появляется понятие звуковой волны, то есть коррелированного движения ионов	12

9	Из приведенных температурных зависимостей можно приближенно выделить области, в которых теплоемкость пропорциональна $\sim T^3$, то есть подчиняется закону Дебая. Верхняя граница этой области приближенно соответствует значению $\Theta_D/10$. То есть можно оценить температуру Дебая и максимальную частоту колебаний ионов в модели Дебая.	22
10	Из приведенных температурных зависимостей для германия и в меньшей степени для кремния можно приближенно выделить области, в которых теплоемкость перестает меняться при изменении температуры, то есть подчиняется закону Дюлонга-Пти и равна примерно $3R$.	18
	Максимальный балл	75

Ожидаемый ответ

- 1. Определение понятия «теплоемкость».** Теплоёмкость — количество теплоты, поглощаемой (выделяемой) телом в процессе нагревания (остывания) на 1 кельвин. Более точно, теплоёмкость — физическая величина, определяемая как отношение количества теплоты, поглощаемой/выделяемой термодинамической системой при бесконечно малом изменении её температуры.
- 2. Теплоемкость твердого тела** определяется в простейшем случае двумя подсистемами, Носителями заряда (электронами) и кристаллической решеткой. Возможны вклады от внутримолекулярных колебаний (вибрационные моды) и колебаний сложных молекул вокруг центра масс молекулы (либрационные моды)
3. Поскольку величина теплоемкости твердого тела определяется температурной зависимостью внутренней энергии кристалла, то необходимо рассмотреть из каких составляющих складывается это энергия. Основной вклад во внутреннюю энергию вносит энергия тепловых колебаний атомов (ионов) около средних положений равновесия. Составляющая теплоемкости, обусловленная этим процессом, называется **решеточной теплоемкостью**. Решеточная теплоемкость уменьшается до нуля при уменьшении температуры тела до 0 К.
4. В веществах с металлическим характером проводимости вклад **электронной подсистемы** существенен при температурах ниже 10 К и линейно возрастает с температурой. При более высоких температурах он значительно меньше решеточного вклада.
5. Квантовая теория теплоемкости показывает, что при низких температурах решеточная (фононная) теплоемкость кристалла пропорциональна кубу температуры. При высоких температурах теплоемкость близка к значению $3R$ (закон Дюлонга и Пти) и не может быть выше этого значения (если отсутствуют какие-либо фазовые превращения). Основанием для выделения высокотемпературной и низкотемпературной частей теплоемкости является сравнение энергии фононов $\hbar\omega$ с энергией термических колебаний решетки kT .
6. В начале 20 века возникли актуальные и сегодня модели кристаллической решетки, описывающие температурные зависимости теплоемкости кристаллов. **Модель Эйнштейна** предполагает, что все ионы колеблются с одной частотой независимо друг от друга. С этой частотой связано понятие температуры Эйнштейна Θ_E .
7. **Модель Дебая** предполагает, что ионы в кристалле колеблются с разными частотами, но имеется граничная частота, носящая название частоты Дебая, и соответствующее ей значение температуры Дебая Θ_D . Кроме того, модель Дебая устанавливает связь частоты колебаний с волновым вектором k через коэффициент, которым является скорость звука $\omega = kV_{зв}$.
8. Эти температуры определяют понятия «высокие» и «низкие температуры», характерные для конкретного кристалла. При «низких» температурах теплоемкость пропорциональна кубу температуры, при «высоких» - не зависит от температуры и близка к значениям, которые дает закон Дюлонга-Пти. Принято считать, что низкие температуры - ниже 0,1 температуры Дебая.
9. Таким образом приведенные температурные зависимости показывают, что указанные материалы, несмотря на близость кристаллических структур, имеют разные частоты колебаний ионов.

Самое низкое значение температуры Дебая у германия, самое высокое – у алмаза.

По графику видно, что в германии закон T^3 заканчивается примерно на уровне 30 К, то есть температура Дебая германия около 300 К (по таблице 377К), для кремния – примерно при 60 К, то есть температура Дебая около 600 К (по таблице 674К). Ну и для алмаза закон T^3 проявляется никак не ниже 200 К, то есть температура Дебая алмаза около 2000 К и близка к табличному значению.

10. Выполнение закона Дюлонга –Пти можно проверить на примере германия, теплоемкость которого при температурах выше температуры Дебая близка к $3R$.