

## 11 Теория теплоемкости твердого тела

Для теплоемкости твердого тела был известен закон Дюлонга и Пти (1819) который получил объяснение в рамках классической статистической физики: по теореме равнораспределения каждая колебательная степень дает вклад во внутреннюю энергию, равный  $kT$ , и для простого кристалла с  $3N$  степенями свободы  $U = 3NkT$ , т.е.  $C_V = 3Nk$ . Однако закон Дюлонга и Пти имел приближенный характер:  $C_V \approx 3R$  только в сравнительно узком интервале "комнатных" температур; особенно сильная зависимость от  $T$  была обнаружена при низких температурах. Пути преодоления этих трудностей были показаны Эйнштейном (1907), который распространил идеи Планка на поведение атомов в решетке, используя в явном виде предположение о квантовании энергии осциллятора. Модель Эйнштейна, в которой твердое тело рассматривалось как совокупность  $3N$  одинаковых (с одной характеристической частотой) несвязанных гармонических осцилляторов, позволила качественно объяснить поведение теплоемкости. Количественно лучшее согласие с экспериментально измеренной теплоемкостью при низких температурах  $C_V \sim T^3$  было получено в модели П. Дебая (1912). Мы изложим результаты теории Эйнштейна и теории Дебая, используя концепцию квазичастиц.

### 11.1 Акустические и оптические ветви колебаний решетки

Ограничимся рассмотрением динамики кристаллической решетки на примере простейших периодических структур – линейной цепочки с одним и двумя атомами в элементарной "ячейке" (цепочки Борна и Кармана).

Функция Гамильтона цепочки взаимодействующих частиц одного типа в гармоническом приближении имеет вид

$$H = \sum_{\ell=1}^N \frac{p_{\ell}^2}{2m} + \frac{\gamma}{2} \sum_{\ell=1}^N (\xi_{\ell} - \xi_{\ell-1})^2, \quad (1)$$

где  $\gamma$  – константа взаимодействия ближайших атомов;  $\xi_{\ell}$  – смещение  $\ell$ -го атома относительно положения равновесия. Координаты  $\xi_{\ell}$  удовлетворяют

циклическим условиям (Борна – Кармана)  $\xi_\ell = \xi_{\ell+N}$ , которые моделируют идеальную периодическую структуру.

Уравнения Гамильтона  $\dot{p}_\ell = -\partial H/\partial \xi_\ell$ ,  $\dot{\xi}_\ell = p_\ell/m$  дают уравнение движения  $\ell$ -го атома

$$\ddot{\xi}_\ell = \frac{\gamma}{m} [(\xi_{\ell+1} - \xi_\ell) + (\xi_{\ell-1} - \xi_\ell)]. \quad (2)$$

Введем новые координаты  $q_k(t)$  преобразованием

$$q_k(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\ell \xi_\ell \exp(-ik\ell a). \quad (3)$$

Обратное к (3) преобразование позволяет записать смещения  $\xi_\ell$  через нормальные координаты  $q_k(t)$ :

$$\xi_\ell(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k q_k(t) \exp(ik\ell a). \quad (4)$$

Из условий Борна – Кармана находим:  $\exp(ikNa) = 1$ , т. е.  $k = (2\pi/Na)\nu$ , где  $\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, N/2$ . Для цепочки из  $N$  атомов имеется ровно  $N$  неэквивалентных значений волнового числа  $k$  на интервале  $(-\pi/a, \pi/a)$ . (В трехмерном случае это соответствует первой зоне Бриллюэна кубической решетки: волновой вектор  $\vec{k} = (2\pi/Na^2)\nu\vec{a}$  определен с точностью до периода обратной решетки  $\vec{g} = (2\pi/a^2)\vec{a}$ , т. е.  $\vec{k} \rightarrow \vec{k}' = \vec{k} + \vec{g}$ ; взаимодействия с  $\Delta\vec{k} = \vec{g}$  называют процессами переброса.)

Подставив (4) в (2), получим:  $\sum_k [\ddot{q}_k(t) + \omega^2(k)q_k(t)] = 0$  и

$$\ddot{q}_k(t) + \omega^2(k)q_k(t) = 0, \quad (5)$$

где

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2\gamma}{m} [1 - \cos(ka)]} = 2 \left( \frac{\gamma}{m} \right)^{1/2} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| - \quad (6)$$

закон дисперсии для колебаний цепочки, т. е. зависимость частоты колебаний  $\omega$  от волнового числа  $k$ . Уравнение (5) есть уравнение для отдельного гармонического осциллятора с характеристической частотой  $\omega(k)$ . Таким образом, задачу о связанной цепочке с помощью преобразования (3) мы

свели к задаче линейных несвязанных гармонических осцилляторов – нормальных мод линейной цепочки атомов. В пределе длинных волн, когда значения  $k$  – вдали от границы зоны Бриллюэна ( $ka \ll \pi$ ), мы можем записать:  $|\sin(ka/2)| \approx ka/2$  и  $\omega(k) \approx (\gamma/m)^{1/2}ak$ . В этом приближении отсутствует дисперсия (фазовая скорость  $c_{\text{фаз.}} = \omega/k$  равна групповой  $c_{\text{гр}} = d\omega/dk$ ) и скорость звука есть  $c_{\text{зв}} = (\gamma/m)^{1/2}a$ .

Этот же результат можно получить и в приближении сплошной упругой среды для одномерного случая:  $c_{\text{зв}} = \sqrt{E/\rho}$ , где  $E = f_{\text{упр}}/(\Delta l/l)$  – модуль Юнга,  $\rho = m/a$  – плотность среды,

$$\frac{\Delta l}{l} = \frac{\Delta \xi}{a} = \frac{\xi_i - \xi_{i-1}}{a}, \quad f_{\text{упр}} = \gamma \Delta \xi$$

и

$$c_{\text{зв}} = \left[ \frac{\gamma \Delta \xi}{(m/a)(\Delta \xi/a)} \right]^{1/2} = \left( \frac{\gamma}{m} \right)^{1/2} a.$$

В силу дискретности цепочки существует минимальная длина волны (а следовательно, и  $k_{\text{max}}$ )  $\lambda_{\text{min}} = 2\pi/k_{\text{max}} = 2a$ . Когда  $\lambda \sim a$ , закон дисперсии существенно отличается от звукового, и групповая скорость  $c_{\text{гр}} = a\sqrt{\gamma/m} \cos(ka/2) < c_{\text{фаз.}}$  ( $c_{\text{гр}} = 0$  при  $k = k_{\text{max}}$  – брэгговское отражение от кристаллической решетки.)

Теперь перейдем к рассмотрению двухатомной цепочки, функция Гамильтона которой есть

$$H = \sum_{\ell=1}^N \left( \frac{p_{1\ell}^2}{2m_1} + \frac{p_{2\ell}^2}{2m_2} \right) + \frac{\gamma}{2} \sum_{\ell=1}^N \left[ (\xi_{\ell}^{(1)} - \xi_{\ell}^{(2)})^2 + (\xi_{\ell}^{(1)} - \xi_{\ell-1}^{(2)})^2 + (\xi_{\ell}^{(2)} - \xi_{\ell+1}^{(1)})^2 \right].$$

Уравнения движения в этом случае имеют вид

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{\xi}_{\ell}^{(1)} &= -\gamma \left[ (\xi_{\ell}^{(1)} - \xi_{\ell}^{(2)}) + (\xi_{\ell}^{(1)} - \xi_{\ell-1}^{(2)}) \right], \\ m_2 \ddot{\xi}_{\ell}^{(2)} &= -\gamma \left[ (\xi_{\ell}^{(2)} - \xi_{\ell}^{(1)}) + (\xi_{\ell}^{(2)} - \xi_{\ell+1}^{(1)}) \right]. \end{aligned}$$

Вводя нормальные координаты  $q_k^{(1)}(t)$  и  $q_k^{(2)}(t)$  преобразованиями

$$q_k^{(1)}(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell} \xi_{\ell}^{(1)} \exp(-ik\ell a), \quad q_k^{(2)}(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell} \xi_{\ell}^{(2)} \exp(-ik\ell a),$$

получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \sum_k e^{ikla} \left[ \ddot{q}_k^{(1)} + \frac{\gamma}{m_1} \left( 2q_k^{(1)} - q_k^{(2)} - q_k^{(2)} e^{-ika} \right) \right] &= 0, \\ \sum_k e^{ikla} \left[ \ddot{q}_k^{(2)} + \frac{\gamma}{m_2} \left( 2q_k^{(2)} - q_k^{(1)} e^{ika} - q_k^{(1)} \right) \right] &= 0, \end{aligned}$$

откуда

$$\begin{aligned} \ddot{q}_k^{(1)} + \frac{\gamma}{m_1} \left( 2q_k^{(1)} - q_k^{(2)} - q_k^{(2)} e^{-ika} \right) &= 0, \\ \ddot{q}_k^{(2)} + \frac{\gamma}{m_2} \left( 2q_k^{(2)} - q_k^{(1)} e^{ika} - q_k^{(1)} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Ищем решения системы (7) в виде

$$q_k^{(1)}(t) = A_k \exp(-i\omega t), \quad q_k^{(2)}(t) = B_k \exp(-i\omega t). \quad (8)$$

Подставляя (8) в (7), получим систему однородных алгебраических уравнений для амплитуд  $A_k$  и  $B_k$

$$\begin{aligned} \left( 2\frac{\gamma}{m_1} - \omega^2 \right) A_k - \frac{\gamma}{m_1} (1 + e^{-ika}) B_k &= 0, \\ -\frac{\gamma}{m_2} (1 + e^{ika}) A_k + \left( 2\frac{\gamma}{m_2} - \omega^2 \right) B_k &= 0, \end{aligned} \quad (9)$$

условием разрешимости которой является обращение в нуль ее детерминанта:

$$\begin{vmatrix} 2\frac{\gamma}{m_1} - \omega^2 & -\frac{\gamma}{m_1} (1 + e^{-ika}) \\ -\frac{\gamma}{m_2} (1 + e^{ika}) & 2\frac{\gamma}{m_2} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0,$$

откуда

$$\omega_s^2(k) = \gamma \left( 1/\mu + (-1)^s \left[ 1/\mu^2 - 4/(m_1 m_2) \sin^2(ka/2) \right]^{1/2} \right), \quad (10)$$

где  $s = 1, 2$ , а  $\mu = (1/m_1 + 1/m_2)^{-1}$  – приведенная масса элементарной ячейки.

Итак, в случае цепочки двухатомных ячеек получим два типа колебаний или две ветви: 1) акустическая ветвь ( $s = 1$ ), для которой  $\omega_{\text{ак}}(k = 0) = 0$ ; 2) оптическая (борновская) ветвь ( $s = 2$ ), для которой  $\omega_{\text{опт}}(k = 0) = \sqrt{2\gamma/\mu}$ . Как и раньше, зависимость от  $k$  является периодической, и достаточно рассмотреть ее в пределах первой зоны Бриллюэна. Акустическая ветвь имеет тот же характер, что и в случае одноатомной

решетки, и при малых  $k$  соответствует звуковым волнам. (Переход к одноатомной ячейке  $m_1 = m_2$ ,  $a/2 \rightarrow a$  дает прежнее выражение (6) для  $\omega(k)$ .)

На границе зоны Бриллюэна  $\omega_{\text{ак}} = \sqrt{2\gamma/m_2}$ ,  $\omega_{\text{опт}} = \sqrt{2\gamma/m_1}$  для  $m_1 < m_2$ . Название "оптическая" для ветви с  $s = 2$  связано с тем, что колебания этого типа характеризуются частотами инфракрасного диапазона  $10^{12} - 10^{13} \text{ с}^{-1}$  и взаимодействуют с инфракрасным излучением.

Для отношения амплитуд  $A_k^{(s)}/B_k^{(s)}$  получим из (9):

$$\frac{A_k^{(s)}}{B_k^{(s)}} = \frac{(\gamma/m_1)[1 + \exp(-ika)]}{2\gamma/m_1 - \omega_s^2(k)}.$$

При  $k \rightarrow 0$  для акустической ветви  $A_k^{(1)}/B_k^{(1)} \rightarrow 1$ , а для оптической  $A_k^{(2)}/B_k^{(2)} \rightarrow -m_2/m_1$ . Таким образом, в пределе длинных волн атомы  $m_1$  и  $m_2$  движутся в фазе с одинаковыми амплитудами в акустических колебаниях и – в противофазе с неподвижным центром масс ячейки в оптических колебаниях. Другими словами, в длинноволновом пределе (континуальном или приближении сплошной среды) акустическая ветвь представляет колебания ячейки как целого, а оптическая – колебания атомов внутри ячейки.

В случае трехмерной решетки, элементарная ячейка которой содержит  $l$  атомов, имеется три акустические ветви и  $3(l - 1)$  оптические ветви. Каждая ветвь характеризуется поляризацией; в случае акустических колебаний можно ввести одну продольную – колебания плотности вещества в направлении распространения волны – и две поперечные поляризации. В анизотропном кристалле частота зависит не только от модуля  $k$ , но и от направления волнового вектора: говорят о законе дисперсии  $\omega_\alpha(\vec{k})$  для данного кристаллографического направления.

## 11.2 Квантование колебаний решетки. Фононы

Проследим процедуру квантования на примере гамильтониана (1). Запишем функцию Гамильтона в нормальных координатах  $q_k(t)$  и соот-

ветствующих им обобщенных импульсах  $p_k(t)$  :

$$H = \frac{1}{2m} \sum_k [p_k p_{-k} + m^2 \omega_k^2 q_k q_{-k}], \quad p_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\ell p_\ell \exp(ik\ell a) = m\dot{q}_{-k} = m\dot{q}_k^*.$$

Оператор Гамильтона получим, заменяя  $p_k$  и  $q_k$  на операторы  $\hat{p}_k$ ,  $\hat{q}_k$  и вводя операторы рождения и уничтожения  $a_{-k}^+$ ,  $a_k$  преобразованиями

$$\hat{q}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} (a_k + a_{-k}^+), \quad \hat{p}_k = \sqrt{\frac{m\hbar\omega_k}{2}} (a_k^+ - a_{-k}),$$

где  $a_{-k}^+$ ,  $a_k$  удовлетворяют перестановочным соотношениям для бозе-операторов  $[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{kk'}$ ,  $[a_k, a_{k'}] = [a_k^+, a_{k'}^+] = 0$ . Окончательно гамильтониан примет форму

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_k \hbar\omega_k (a_k^+ a_k + \frac{1}{2}) = \sum_k \hbar\omega_k (\hat{n}_k + \frac{1}{2}),$$

где  $\hat{n}_k = a_k^+ a_k$  – оператор чисел заполнения состояния  $k$ . Для того, чтобы отсчитывать энергию от основного состояния, введем

$$\hat{H}' = \hat{H} - E_0 = \frac{1}{2} \sum_k \hbar\omega_k a_k^+ a_k = \sum_k \hbar\omega_k \hat{n}_k,$$

где  $E_0 = (1/2) \sum_k \hbar\omega_k$  – энергия нулевых колебаний решетки.

В представлении чисел заполнения

$$\hat{H}' |\dots, n_k, \dots\rangle = \sum_k \hbar\omega_k n_k |\dots, n_k, \dots\rangle, \quad (11)$$

и мы, как и в случае электромагнитного поля, можем ввести понятие кванта энергии  $\hbar\omega_k$ . В данном случае – это кванты распространяющихся по решетке волн упругих колебаний, акустических или оптических. Такие кванты (квазичастицы) называют фононами, и в уравнении (11)  $\varepsilon_k = \hbar\omega_k$  – энергия фонона в состоянии  $k$ , а  $n_k$  – число таких фононов.

Фононы похожи на кванты электромагнитного поля, но имеются и существенные отличия. Во-первых, число поляризаций фонона равно 3, и, во-вторых, импульс фонона не определен. Однако с фононом нормальной

моды  $k$  можно связать квазиимпульс  $\hbar k$ , который сохраняется (за исключением процессов переброса) при электрон–фоонных, фотон–фоонных и фонон–фоонных взаимодействиях.

С колебаниями решетки связано множество разнообразных явлений, таких как неупругое рассеяние света на оптических фононах – эффект Рамана, эффективное притяжение электронов, обусловленное электрон–фоонным взаимодействием (гамильтониан Фрелиха) и приводящее в конечном счете к сверхпроводимости, процессы переброса (передача импульса кристаллу как целому) – механизм теплопроводности, резонансное поглощение  $\gamma$ -квантов ядром в кристалле в эффекте Мессбауэра и многое другое. Разные ветви колебаний решетки влияют на различные процессы: поглощение и испускание инфракрасного излучения, комбинационное рассеяние – борновские ветви, рассеяние нейтронов – продольные акустические и т.д.

Вклад колебаний в термодинамику кристалла в первом приближении мы можем исследовать, изучая свойства газа невзаимодействующих квазичастиц – идеального газа фононов. Подчеркнем еще раз, что отсутствие взаимодействия фононов друг с другом обусловлено гармоническим приближением для потенциала взаимодействия соседних атомов кристаллической решетки. Химический потенциал такого газа равен нулю (как в случае равновесного излучения), а средние числа фононов моды  $(k, \alpha)$  подчиняются распределению Бозе – Эйнштейна

$$\langle n_{k\alpha} \rangle = \frac{1}{\exp(\beta \hbar \omega_k) - 1}.$$

Внутренняя энергия такого газа есть

$$U \equiv \langle E \rangle = \sum_{k,\alpha} \hbar \omega_k \langle n_{k\alpha} \rangle = \sum_{k,\alpha} \frac{\hbar \omega_k}{\exp(\beta \hbar \omega_k) - 1}. \quad (12)$$

### 11.3 Модель Эйнштейна

Предположим, что все колебательные моды кристалла имеют одну и ту же характеристическую частоту  $\omega_E$ , т. е. энергия фонона не зависит от индекса  $k$ :  $\varepsilon_k = \hbar \omega_E$ . Тогда для простого (с одним атомом в ячейке)

кристалла  $\sum_k 1 = 3N$  и

$$U = \frac{3N\hbar\omega_E}{\exp(\hbar\omega_E/kT) - 1}, \quad (13)$$

$$C_V = 3Nk \left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 \frac{\exp(\theta_E/T)}{[\exp(\theta_E/T) - 1]^2} = 3Nk\mathcal{E}\left(\frac{\theta_E}{2T}\right), \quad (14)$$

где  $\theta_E \equiv \hbar\omega_E/k$  – эйнштейновская характеристическая ”температура”,  $\mathcal{E}(x)$  – функция Эйнштейна (см. 7.5).

При низких температурах ( $T \ll \theta_E$ )

$$C_V \simeq 3Nk \left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\theta_E}{T}\right). \quad (15)$$

В пределе высоких температур  $T \gg \theta_E$  получим закон Дюлонга – Пти

$$C_V \simeq 3Nk(1 - \mathcal{O}(\theta_E/T)) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 3Nk.$$

[Покажите, что в длинноволновом пределе модель Эйнштейна учитывает вклад оптических фононов, поэтому ее результат надо сравнивать с данными измерения  $C_V$  для кристаллов с двумя и более атомами в элементарной ячейке. Как в этом случае выглядит спектральная плотность числа фононных мод  $D(\omega)$  ?]

## 11.4 Модель Дебая

При большом числе ячеек  $N$  в кристалле сумму по волновым числам  $k$  можно заменить интегрированием по уже известному рецепту  $\sum_k \rightarrow V/(2\pi)^3 \int d^3k$ . Предположим, что:

- оптические ветви отсутствуют – простой кристалл или низкие температуры  $T \leq 10 K^\circ$ , при которых оптические ветви не возбуждаются;
- для трех акустических ветвей справедливо длинноволновое приближение с линейной зависимостью частоты от волнового числа, одинаковой для продольной и двух поперечных поляризаций:  $\omega = c_l k_l$ ,  $\omega = c_\perp k_\perp$ .



Тогда число фононных состояний с частотами в интервале  $\omega \div \omega + d\omega$  можно записать в виде

$$d\Gamma(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi(k_l^2 dk_l + 2k_\perp^2 dk_\perp) = \frac{V}{2\pi^2} \omega^2 \left( \frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_\perp^3} \right) d\omega.$$

Вводя скорость  $\bar{c}$ , усредненную по направлениям с помощью соотношения

$$\frac{3}{\bar{c}^3} = \frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_\perp^3},$$

получим плотность числа фононных состояний с частотами вблизи  $\omega$

$$D(\omega) = \frac{d\Gamma(\omega)}{d\omega} = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2\bar{c}^3}. \quad (16)$$

Это выражение отличается от соответствующей формулы для фотонов лишь множителем  $3/2$  (число поляризаций у фононов в 1,5 раза больше по сравнению с фотонами). Но для фононов существует конечная максимальная частота  $\omega_{\max}$  (поскольку  $\lambda_{\min} = 2a$ ), которую можно определить из уравнения

$$\int_0^{\omega_{\max}} D(\omega) d\omega = 3N.$$

Интегрируя, найдем:  $\omega_{\max} = \bar{c}(6\pi^2 N/V)^{1/3}$ , и (16) можно переписать в виде  $D(\omega) = 9N\omega^2/\omega_{\max}^3$ .

Запишем теперь внутреннюю энергию (12) фононного газа в этой модели

$$U = \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega D(\omega)}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} d\omega = \frac{3V}{2\pi^2\bar{c}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}. \quad (17)$$

Если ввести обозначения

$$f_D(x_m) = \frac{3}{x_m^3} \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (18)$$

где  $x = \hbar\omega/kT$ ,  $x_m = \hbar\omega_{\max}/kT = \theta_D/T$ ,  $\theta_D \equiv \hbar\omega_{\max}/k$  – дебаевская характеристическая температура, то

$$U = 3NkT \cdot 3 \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 3NkT f_D \left( \frac{\theta_D}{T} \right) \quad (19)$$

и

$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3Nk \left[ f_D \left( \frac{\theta_D}{T} \right) - \frac{\theta_D}{T} f'_D \left( \frac{\theta_D}{T} \right) \right]. \quad (20)$$

Вычислим  $f_D(x_m)$  в двух предельных случаях: при низких температурах ( $T/\theta_D \ll 1$ ) и высоких ( $T/\theta_D \gg 1$ ). В первом случае верхний предел интеграла в (19) можно устремить к бесконечности, учитывая экспоненциальное убывание подынтегральной функции, и

$$f_D(x_m) \approx \frac{3}{x_m^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{3}{x_m^3} \Gamma(4) \zeta(4) = \frac{\pi^4}{5} \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3,$$

$$C_V \approx \frac{12\pi^4}{5} Nk \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3. \quad (21)$$

Этот результат, известный как закон Дебая, хорошо согласуется с экспериментально обнаруженной зависимостью  $C_V$  от  $T$  при низких температурах.

В пределе высоких температур

$$f_D(x_m) \approx \frac{3}{x_m^3} \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{[1 + x + x^2/2 + \dots - 1]} \approx$$

$$\approx \frac{3}{x_m^3} \int_0^{x_m} x^2 (1 - x/2) dx = 1 - \frac{3}{8} x_m. \quad (22)$$

И при  $T \rightarrow \infty$  получим классический закон Дюлонга и Пти

$$C_V \approx 3Nk(1 + o(1)).$$

Таким образом, формула Дебая (20) дает правильные ответы в двух предельных случаях и может рассматриваться как интерполяционная для произвольных температур.

Дебаевскую температуру можно определить из эксперимента по измерению скорости звука  $\bar{c}$  и по измерениям  $C_V$ . Эти данные показывают самосогласованность модели Дебая.

|                               | Al  | Mg    | Cu    | Zn  | Ag    | Au    |
|-------------------------------|-----|-------|-------|-----|-------|-------|
| $\theta_D, K$<br>из $\bar{c}$ | 399 | 385,6 | 344,4 | 328 | 226,4 | 161,1 |
| $\theta_D, K$<br>из $C_V$     | 394 | 404   | 345,2 | 305 | 226,0 | 164,7 |

[При низких температурах результат теории Дебая является естественным, так как, именно при низких температурах, когда возбуждаются только низкочастотные гармоники колебаний решетки, предположения Дебая, которые привели к  $D(\omega) \sim \omega^2$ , не вызывают сомнения. Но при высоких температурах длинноволновое приближение акустических колебаний заведомо непригодно, тем не менее и здесь теория Дебая дает правильный ответ. Почему?]

## 11.5 Концепция квазичастиц

Представление о фононах как о некоторых распространяющихся по решетке квазичастицах является частным случаем общего понятия, играющего важную роль в квантовой теории конденсированных систем. Всякое слабо возбужденное состояние макроскопического тела можно рассматривать как совокупность отдельных элементарных возбуждений, которые ведут себя как некоторые квазичастицы, движущиеся в занимаемом телом объеме. До тех пор, пока их число мало, они не взаимодействуют друг с другом и их совокупность можно рассматривать как идеальный газ квазичастиц. Понятие элементарного возбуждения вводится как способ описания коллективного движения атомов тела, взаимодействующих друг с другом, и они (квазичастицы) не отождествляются, вообще говоря, с отдельным атомом или молекулой.

Назовем в качестве примера некоторые квазичастицы, связанные так или иначе с различными ветвями колебаний решетки:

**поляритон** – квант смеси оптических фононов и фотонов (квант поперечного электромагнитного поля, возбуждаемого при поперечных оптических колебаниях ионов решетки);

**плазмон** – квант продольной электромагнитной волны, возникающей при кулоновском взаимодействии электронов с ионами решетки (в металлах и полупроводниках);

**магنون** – квант спиновых волн, т. е. распространяющихся в кристалле нарушений упорядоченности спинов;

**полярон** – автолокализованное состояние электрона, отвечающее взаимодействию электрона с оптическим фононом, т. е. электрон, дви-

жущийся в кристалле вместе с локальной поляризацией (электрон + облако виртуальных оптических фононов).