

Глава. Элементы квантовой теории твердого тела. Фононы

Кристаллическая структура, представляющая собой ансамбль сильно связанных атомов, является сложной колебательной системой. Характерно, что спектр колебаний кристалла и каждого атома определяется всей системой связанных атомов, образующих решетку.

По аналогии с непрерывной упругой средой спектр колебаний можно представить в виде дискретного набора стоячих волн (**нормальных колебаний**) с длинами волн $2L, 2L/2, 2L/3, 2L/4 \dots 2a$, где L — длина кристалла, a — межатомное расстояние. Самая малая длина волны колебаний кристалла $\lambda_{\min} = 2a$, так как более коротких волн в решетке существовать не может. Колебание с длиной волны $\lambda_{\max} = 2L$ называется **основной модой**. **Мода колебаний** – нормальное колебание с определенной частотой, направлением волнового вектора и поляризацией.

Каждое нормальное колебание характеризуется определенной частотой, с которой осциллируют все элементы системы. Набору длин волн от $\lambda_{\max} = 2L$ до $\lambda_{\min} = 2a$ соответствует набор частот $\omega_{\min}, 2\omega_{\min}, 3\omega_{\min}, \dots, \omega_{\max}$. В системах состоящих из N связанных гармонических осцилляторов, число нормальных колебаний равно $2L/(2a) = Na/a = N$. Совокупность нормальных колебаний обладает **свойством полноты**: произвольное свободное движение колебательной системы может быть представлено в виде суперпозиции колебаний с нормальными частотами. При этом полная энергия движения элементов системы является суммой энергий нормальных колебаний.

Переходя *от классического* рассмотрения *к квантовому*, будем рассматривать каждую моду нормальных колебаний как квантовый гармонический осциллятор. Таким образом, **собственную энергию движения атомов в кристалле можно представить в виде суммы энергий независимых гармонических осцилляторов с частотами, соответствующими набору частот нормальных колебаний кристаллической решетки.**

Энергия осциллятора в квантовой механике квантуется и описывается формулой

$$E_{n,\omega_j} = \hbar\omega_j \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

где ω_j — частоты нормальных колебаний, n — целое положительное число. Возбужденным состояниям осциллятора соответствуют значения $n = 1, 2, 3, \dots$. При $n = 0$ осциллятор находится в основном, невозбужденном состоянии.

Основное состояние кристаллических структур. Нулевые колебания

Энергия основного состояния осциллятора $E_{0,\omega_j} = \hbar\omega_j/2$ не является тепловой энергией. Её природа имеет чисто квантово-механический характер, связанный с соотношением неопределенностей Гейзенберга $\delta p \cdot \delta x \sim \hbar$ (δp и δx — неопределенности импульса и координаты частицы, соответственно), из которого следует, что частица даже при температуре абсолютного нуля ($T = 0$ К) не может находиться в состоянии покоя, то есть иметь точно определенные координаты. Принято говорить, что частица при $T = 0$ К совершает нулевые колебания с некоторой амплитудой x_0 и нулевой энергией $\hbar\omega_j/2$.

Амплитуду нулевых колебаний можно оценить, используя принцип соответствия между квантово-механическим и классическим выражениями для энергии. Это утверждение требует уточнения. Под гармоническим осциллятором в классической механике обычно понимается система с сосредоточенными параметрами, обладающая инертностью, положением равновесия, при отклонении от которого возникают возвращающие силы, пропорциональные величине отклонения. Мы рассматриваем упругую плоскую стоячую волну с частотой ω_j и соответствующей ей длиной волны $\lambda_j \sim 1/\omega_j$. В стоячей волне **аналогом колебательной системы** с сосредоточенными параметрами может служить каждый **участок волны длиной $\lambda/4$** (от узла смещений до узла деформаций). Энергия этого участка среды не изменяется с течением времени, а лишь периодически (с периодом $T/4$) переходит из потенциальной в кинетическую и наоборот. Поэтому в данном случае следует сравнивать энергию квантового осциллятора $\hbar\omega_j/2$ с энергией такого участка стоячей волны.

Средние значения плотности кинетической и потенциальной энергии в классической упругой волне совпадают и выражаются формулой $\langle \varepsilon_{\dot{\varepsilon}\dot{\varepsilon}} \rangle = \langle \varepsilon_{i\dot{\varepsilon}} \rangle = (1/4)\rho_m x_0^2 \omega_j^2$, где ρ_m — плотность среды, x_0 — амплитуда волны. Плотность полной энергии в 2 раза больше

$$\langle \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon_{\dot{\varepsilon}\dot{\varepsilon}} \rangle + \langle \varepsilon_{i\dot{\varepsilon}} \rangle = (1/2)\rho_m x_0^2 \omega_j^2.$$

Энергия, приходящаяся на область $\lambda_j/4$, составляет

$$\langle E_j \rangle = \frac{1}{4} \rho_m x_0^2 \omega_j^2 \cdot \frac{\lambda_j}{4} \cdot S.$$

Здесь S — сечение кристалла, а $(\lambda_j/4) \cdot S$ — объем кристалла в области между соседними узлами смещений и деформаций в волне.

Поскольку $\lambda_j \sim 1/\omega_j$, то $\langle E_j \rangle \sim \rho_m x_0^2 \omega_j$. Приравнявая $\hbar\omega_j/2 = \langle E_j \rangle$, находим, что **амплитуда нулевых колебаний атомов решетки, не зависит от длины волны** нормальных колебаний и, соответственно, на всех частотах ω_j одинакова.

Задача 1. Учитывая независимость амплитуды **нулевых колебаний** от частоты, оцените абсолютное значение этой амплитуды, рассматривая

колебания решетки с максимально возможной частотой ω_{\max} ($\lambda_{\min}=2a$). При этом энергию нулевых колебаний можно положить равной классической механической энергии колебаний одного атома решетки.

Решение. В приближении задачи энергия нулевых колебаний равна классической механической энергии колебаний одного атома решетки

$$\frac{\hbar\omega_{\max}}{2} = \frac{M\omega_{\max}^2 x_0^2}{2}, \quad (6.1)$$

где M — масса атома.

Полагая $\omega_{\max} \approx \sqrt{2\beta/M} = \omega_{\text{par}}$, где ω_{par} — парциальная частота, равная собственной частоте колебаний атома при закрепленных (неподвижных) соседях, β — упругая постоянная решетки, из формулы (6.1) находим амплитуду нулевых колебаний:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_{\max}}} = \left(\frac{\hbar^2}{2M\beta}\right)^{1/4}.$$

Максимальная частота для большинства металлов по порядку величины равна $\omega_{\max} \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$.

Для меди $M = \frac{64 \cdot 10^{-3}}{N_A} \approx 10^{-25} \text{ êã}$, амплитуда колебаний приблизительно равна

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_{\max}}} \approx \sqrt{\frac{10^{-34}}{10^{-25} \cdot 10^{13}}} = 10^{-11} \text{ î} = 0,1 \text{ Å}.$$

Межатомные расстояния составляют несколько ангстрем.

Амплитуда нулевых колебаний атомов возрастает при уменьшении их массы и уменьшении упругой постоянной β . При малых M и β она может быть порядка межатомных расстояний a . Таким образом, свойства кристаллической структуры должны зависеть от величины отношения x_0/a . При $x_0/a \ll 1$ вероятность перескоков атомов из занимаемых ими положений, то есть вероятность делокализации, мала. Это условие выполняется практически для всех кристаллических решеток элементов периодической системы и их сплавов, за исключением гелия. Поэтому во всех веществах при $T = 0$ каждый атом можно считать локализованным в области пространства значительно меньшей объема элементарной ячейки a^3 .

Жидкий гелий, для которого $x_0/a \sim 1$, является единственной в природе квантовой жидкостью, не замерзающей при нормальных давлениях до абсолютного нуля температур. Аналогичными свойствами обладает его изотоп ^3He . При повышении давления возрастает β и жидкий гелий замерзает при давлении ~ 25 атмосфер (при 1°K), образуя квантовый кристалл с гексагональной плотноупакованной решеткой. Квантовый кристалл сочетает свойства кристалла, так как имеет определенную кристаллическую решетку, и жидкости: если на пластинку кристаллического гелия положить металлический шарик, то через некоторое время шарик пройдет насквозь через пластинку, структура которой после этого останется неизменной.

Таким образом, в основном состоянии (при $T = 0$ К) атомы кристалла совершают сложные периодические движения, спектр которых определяется спектром частот всех мод нормальных колебаний.

Ответ. $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_{\max}}} = \left(\frac{\hbar^2}{2M\beta}\right)^{1/4}$

Возбужденное состояние кристалла

При $T \neq 0$ К кристалл находится в **возбужденном состоянии**. Энергетическое состояние кристалла, описываемое набором квантовых чисел n для каждой моды нормальных колебаний, зависит от температуры. При повышении температуры в первую очередь возбуждаются низкочастотные колебания. В кристалле размером ~ 1 см минимальная частота составляет $\approx (10^4 \div 10^5)$ Гц и квант энергии $\hbar\omega_{\min}$ возбуждается уже при температуре $T \approx \hbar\omega_{\min}/k_B \approx 10^{-6}$ К.

При дальнейшем повышении температуры происходят два процесса. С одной стороны, увеличивается число возбужденных мод нормальных колебаний решетки (увеличивается число частот, удовлетворяющих условию $\hbar\omega < k_B T$ (см. гл.)), а с другой стороны, одновременно увеличивается число возбужденных квантов энергии у каждой моды (см. гл.). При температуре

$$T_D \approx \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B}, \quad (6.2)$$

называемой **температурой Дебая**, возбуждаются моды колебаний со всеми возможными частотами. При дальнейшем повышении температуры число возбужденных мод не изменяется и увеличивается только энергия, которую несет каждая мода, то есть число возбужденных квантов с разными частотами. **Температура Дебая имеет порядок $\sim (100 \div 300)$ К.** Таким образом, энергия одного кванта $\hbar\omega_j$ для разных мод изменяется в широком диапазоне от $10^{-6} k_B$ до $(100 \div 300) k_B$ (то есть от 10^{-6} К до $(100 \div 300)$ К).

Температура Дебая разделяет шкалу температур на две области: низкотемпературную, где возбуждены не все частоты спектра колебаний решетки, и высокотемпературную, где возбуждены все частоты. Деление это условно, поскольку переход от одной области к другой в трехмерном кристалле не является резким.

На **рис.6–1** представлены качественные зависимости энергии квантового осциллятора $W_{\omega,n}$ от его частоты ω для разного числа возбужденных квантов n . Вертикальные штриховые прямые соответствуют разрешенным значениям частот ω_j (соответственно, длинам волн λ_j).

При $T = 0$ в спектре присутствуют только нулевые колебания, энергия которых соответствует точкам на пересечении зависимости $W_n(\omega)$ при $n = 0$ и штриховых вертикальных линий.

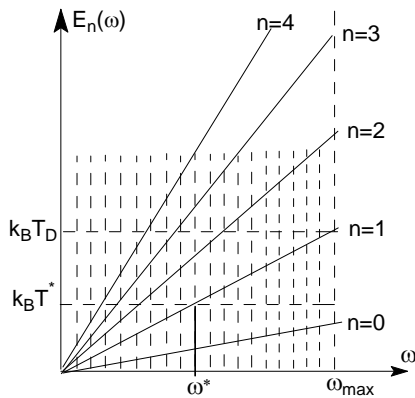


Рис. 6–1. Зависимость энергии квантового осциллятора $E_n(\omega)$ от частоты при различных числах n возбужденных квантов

При повышении температуры появляются кванты тепловых возбуждений, причем большее число квантов возбуждений приходится на долю низкочастотных колебаний. Возбужденным при температуре $T = T^*$ квантам энергии соответствуют те точки пересечения линейных зависимостей $W_n(\omega)$ для разных n и вертикальных штриховых линий, которые расположены ниже горизонтальной прямой $W = k_B T^*$ на рис. 6–1, то есть энергия которых меньше $k_B T^*$. Например, при температуре T^* возбуждены колебания с частотами $\omega < \omega^*$, а более высокочастотные колебания практически отсутствуют (кроме нулевых). При температуре Дебая T_D в кристалле возбуждаются колебания со всеми возможными частотами. Дальнейшее повышение температуры приводит только к увеличению числа возбужденных квантов на каждой частоте, то есть росту энергии каждой моды колебаний.

Итак, размер кристалла (в одномерном случае — длина цепочки атомов L) определяет длины волн λ_j возбуждений. Энергия, возникающего возбуждения на длине λ_j зависит от **числа квантов** возбуждений на этой длине волны. Число квантов связано с величиной возбуждающего фактора, например, с температурой. Энергия одного кванта зависит как от λ_j , так и от параметров решетки. Эта зависимость может быть определена только при рассмотрении динамики распространения возбуждений в кристалле (см. задачу №4 ниже).

Фононы – кванты возбуждений

Переход решетки в возбужденное состояние описывался выше как возбуждение квантов нормальных колебаний. Нормальные колебания — это стоячие волны, групповая скорость которых равна нулю. В этой модели квант энергии нельзя принять за квазичастицу с определенным импульсом, поскольку равенство нулю скоростей квазичастиц не позволяет рассматривать динамику тепловых возбуждений в решетке. Чтобы приписать энергетическим возбуждениям определенный импульс, заменим каждую стоячую волну двумя бегущими навстречу друг другу звуковыми волнами, удовлетворяющими циклическим граничным условиям Борна - Кармана: на границах кристалла волны имеют одно и то же значение (см.).

Бегущие звуковые волны в кристалле, в отличие от нормальных мод, имеют отличную от нуля скорость распространения V_s . Причем для длинноволновых колебаний (при условии $\lambda_i \gg a$) справедлив линейный закон дисперсии

$$\omega_i = V_s q_i, \quad (6.8)$$

из которого следует, что длина волны λ_i связана с частотой ω_i соотношением: $\lambda_i = 2\pi V_s / \omega_i$, где $q_i = 2\pi / \lambda_i$ — волновое число, определяемое длиной волны.

Для одномерной цепочки атомов длины L с периодом a замена стоячих волн бегущими происходит по следующей схеме.

Стоячие волны		Бегущие волны
$\lambda_1=2L,$		
$\lambda_2=L,$	\Rightarrow	$\lambda_1=L,$
$\lambda_3=2L/3,$		
$\lambda_4=L/2,$	\Rightarrow	$\lambda_2=L/2,$
$\lambda_5=2L/5,$		
$\lambda_6=L/3,$	\Rightarrow	$\lambda_6=L/3,$
.....		
$\lambda_N=2L/N=2a=\lambda_{min}$	\Rightarrow	$\lambda_{N/2}=2L/N=2a=\lambda_{min}$
$\lambda_j=2L/j,$ $j=1, 2, 3, \dots, N;$	\Rightarrow	$\lambda_i=L/i,$ $i=\pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2,$

(6.9)

В таблице N — число атомов в цепочке.

Обратим внимание на то, что при таком переходе число волн с различными λ уменьшилось в два раза, но зато теперь каждому значению λ_j стало соответствовать две волны с волновыми векторами $+\mathbf{q}_j$ и $-\mathbf{q}_j$, так что полное число волн осталось прежним.

Волновые вектора бегущих волн определяются соотношением:

$$q_i = \frac{2\pi}{\lambda_i} = \frac{2\pi}{L} i, \quad (i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2). \quad (6.10)$$

Максимальные значения волнового вектора \mathbf{q} , соответствующие $i = N/2$, в одномерном случае равны $\pm\pi/a$, так что все возможные значения волнового вектора находятся в интервале

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}, \quad (6.11)$$

то есть на отрезке длиной $2\pi/a$.

Указанная область значений (6.11) называется **первой зоной Бриллюэна** в одномерном случае. Волны, с волновыми векторами, соответствующими границам зоны Бриллюэна $q = \pm \frac{\pi}{a}$, испытывают брэгговское отражение (см. гл.1).

Полное число физически различных значений волнового вектора всегда равно полному числу нормальных колебаний,

которое, в свою очередь, определяется **числом атомов в решетке**. Это обстоятельство позволяет определить **предельное значение волнового вектора** (одинаковое для продольных и поперечных волн):

$$\frac{(4/3)\pi q_{\max}^3}{(2\pi/L)^3} = N. \quad (6.66)$$

$$q_{\max} = \left[6\pi^2 \frac{N}{L} \right]^{1/3} \quad (6-6)$$

В одномерной цепочке атомов число различных значений волнового вектора равно отношению длины интервала (6.11) к минимально возможному значению $q_{\min} = 2\pi/L$. Поскольку разрешенные значения волнового вектора эквидистантны, то $(2\pi/a)/(2\pi/L) = N$.

Теперь можно каждой бегущей волне с волновым вектором \mathbf{q}_i (6.10) и частотой ω_i поставить в соответствие частицу с энергией, равной кванту энергии волны

$$E_i = \hbar\omega_i \quad (6.12)$$

и импульсом

$$\mathbf{p}_i = \hbar\mathbf{q}_i. \quad (6.13)$$

Соотношения (6.12) и (6.13) аналогичны уравнениям Эйнштейна, определяющим элементарную частицу — фотон, как квант электромагнитных волн. По аналогии с фотонами Я.Б. Френкелем для элементарных возбуждений решетки было предложено название **фонон**. Фононы — квазичастицы, описывающие коллективные возбуждения кристаллической решетки. Они введены теоретически для упругих сред, поэтому их не может быть вне среды.

Поскольку волновой вектор (и импульс) фонона может принимать только дискретные значения q_i с интервалом $\Delta q_0 = 2\pi/L$, то принято говорить, что фонон находится в состоянии с волновым вектором \mathbf{q} , а $\Delta q_0 = 2\pi/L$ — *объем этого состояния* (в одномерном случае). В трехмерном случае объем одного состояния в \mathbf{q} -пространстве равен $\Delta q_0^3 = (2\pi/L)^3$. Поскольку $L \gg a$, то объем q -состояния, характеризующий дискретность спектра, мал, и спектр можно считать *квазинепрерывным*, а минимально возможное значение по модулю волнового вектора равным нулю. В этих условиях можно говорить о **законе дисперсии** фононов (зависимости частоты от волнового вектора $\omega(q)$), как некоторой непрерывной функции волнового вектора \mathbf{q} .

Фононы являются бозе-частицами: число фононов в одном состоянии (с заданной частотой и волновым вектором) не лимитировано принципом запрета Паули и может быть сколь угодно большим.

Среднее число фононов в каждом состоянии зависит только от температуры и от энергии фонона, то есть его частоты (распределение Бозе-Эйнштейна):

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \quad (30).$$

Задача 2. Оцените величину *вероятности возбуждения* одного, двух и трех квантов с частотой ω при температуре Дебая T_D , которую можно положить равной комнатной $\approx 300\text{K}$, что справедливо для большинства металлов.

Решение. Вероятность возбуждения n фононов была определена ранее (при выводе распределения Бозе-Эйнштейна)

$$w_{\omega,n} = [1 - \exp(-\hbar\omega/(k_B T))] \cdot \exp(-n \cdot \hbar\omega/(k_B T)).$$

Используя соотношение (6.2), для вероятности возбуждения на максимальной частоте ω_{\max} одного кванта ($n = 1$) получаем

$$(1 - e^{-1}) e^{-1} = 0,232,$$

$$\text{двух } (n = 2) - 0,086,$$

$$\text{и трех } (n = 3) - 0,032,$$

то есть при $T = T_D$, в среднем, только 23% атомов находится на первом уровне возбуждения, соответствующем максимальной частоте. Таким образом, вблизи комнатных температур около 80% атомов на ω_{\max} , совершают только нулевые колебания. При температуре $T_D/2$ доля возбужденных атомов на этой частоте еще меньше и составляет в среднем $\approx 12\%$, при $T_D/3 - \approx 5\%$. Только при температуре $1,4T_D$ вероятность возбуждения 1 кванта на частоте ω_{\max} равна ≈ 1 .

Ответ.

Задача 3. Чему равна *средняя энергия* некоторой *моды колебаний* – волны, распространяющейся в определенном направлении с определенной поляризацией и частотой? Рассмотрите предельные случаи низких и высоких температур.

Решение. Используя выражение для среднего равновесного числа возбужденных квантов на частоте ω_j при температуре T (распределение Бозе-Эйнштейна (30)), можно вычислить среднюю энергию колебательной моды (осциллятора) на частоте ω

$$\langle W_{\omega}^{full} \rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega + \langle n \rangle \cdot \hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1 \right)^{-1} \quad (6.4)$$

Первое слагаемое в (6.4) — энергия нулевых колебаний, второе слагаемое — средняя энергия тепловых колебаний

$$\langle W_{\omega} \rangle = \langle n \rangle \cdot \hbar\omega = \hbar\omega \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1 \right)^{-1} \quad (6.5)$$

на данной частоте ω при температуре T .

В приближении низких температур для данной моды колебаний $T \ll \hbar\omega/k_B$ число возбужденных квантов и их средняя тепловая энергия экспоненциально малы:

$$\langle n \rangle \approx e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}; \quad \langle W_\omega \rangle \approx \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \quad (6.6)$$

При **высоких температурах** $T \gg \hbar\omega/k_B$ (в классическом приближении) средняя энергия осциллятора пропорциональна температуре:

$$\langle n \rangle \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega}, \quad \langle W_\omega \rangle \approx k_B T. \quad (6.7)$$

Ответ: $\langle W_\omega \rangle = \langle n \rangle \cdot \hbar\omega = \hbar\omega \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1 \right)^{-1}$.

Задача 4 (закон дисперсии фононов в одномерной цепочке идентичных атомов). Получите аналитическое выражение закона дисперсии фононов для простейшей модели одномерного кристалла: цепочки длиной L , составленной из периодически (с периодом a) расположенных атомов массой M , связанных упругими пружинками с коэффициентом жесткости β (рис. 6–2). Определите групповую скорость фононов.

Решение. Для определения закона дисперсии фононов $\omega(q)$, связанного со скоростью их движения $d\omega/dq$, следует рассматривать динамику распространения возбуждений, так же как скорость звука в сплошных средах вычисляется на основе динамики распространения деформаций в этих средах.

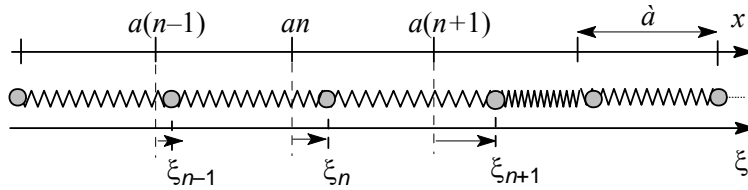


Рис.6–2. Модель одномерного кристалла. Штрихами на верхней и нижней осях показаны положения атомов решетки в недеформированном и деформированном (возбужденном) состояниях, соответственно. ξ_n — смещение n -го атома из положения равновесия $x_n = an$

Запишем уравнение движения для n -го атома, учитывая действие на него в первом приближении только ближайших соседей:

$$M\ddot{\xi}_n = \beta(\xi_{n+1} - \xi_n) - \beta(\xi_n - \xi_{n-1}),$$

или

$$M\ddot{\xi}_n = \beta \sum_{i=\pm 1} (\xi_{n-i} - \xi_n), \quad (6.14)$$

где ξ_n — смещение из положения равновесия $x_n = an$ n -го атома. Будем искать решение в виде бегущей волны, то есть для n -го атома при $x_n = an$:

$$\xi_n = A e^{i(\omega t + qna)}. \quad (6.15)$$

Выражение для ξ_n удовлетворяет условию цикличности

$$\xi(x) = \xi(x + L), \quad (6.16)$$

если волновой вектор принимает дискретный набор значений

$$q_i = \frac{2\pi}{Na} i = \frac{2\pi}{L} i \quad (i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2), \quad (6.17)$$

который совпадает с набором волновых чисел (6.10), описывающих всевозможные возбуждения в одномерном кристалле.

Подставляя (6.15) в (6.14) получаем частоты колебаний атомов

$$\omega = \pm 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} \sin \frac{qa}{2} = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} \sin \frac{\pm qa}{2} = \omega_{\max} \sin \frac{\pm qa}{2}, \quad (6.18)$$

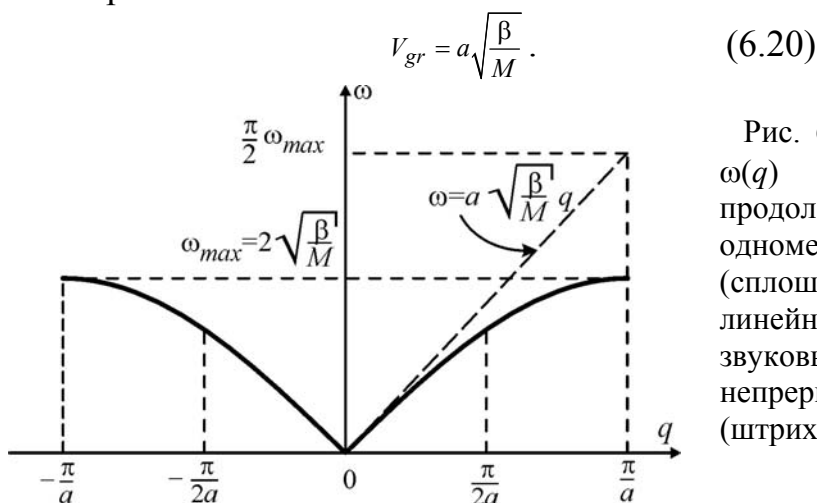
где $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/M}$.

Значение частоты колебаний атома не зависит от его порядкового номера, а, следовательно, все атомы колеблются с одной и той же частотой и амплитудой (6.15), что соответствует распространению бегущих волн. Поскольку частота не может быть отрицательной, то знак \pm перенесен к волновому вектору и соответствует двум волнам, распространяющимся в противоположных направлениях. Зависимость $\omega(q)$ (6.18) выражает **закон дисперсии акустической ветви продольных фононов (рис.6–3)**.

При низкочастотных колебаниях ($\lambda \gg a$ или $qa \ll 1$) закон дисперсии можно линеаризовать, разлагая (6.18) в ряд Тейлора по q до первого порядка, что дает линейную зависимость ω от q :

$$\omega \approx \left(a\sqrt{\frac{\beta}{M}} \right) q, \quad (6.19)$$

характерную для звуковых волн, распространяющихся в непрерывной упругой среде. Таким образом, при $\lambda \gg a$ цепочка ведет себя как непрерывная упругая нить, в которой звуковые волны, распространяются со скоростью



$$V_{gr} = a\sqrt{\frac{\beta}{M}}. \quad (6.20)$$

Рис. 6–3. Закон дисперсии $\omega(q)$ акустической ветви продольных фононов для одномерной цепочки атомов (сплошная кривая) и линейный закон дисперсии звуковых волн в непрерывной среде (штриховая прямая)

Групповая скорость фононов $V_{gr} = d\omega/dk$ является градиентом частоты (или энергии) в пространстве волновых векторов (или импульсов) и для акустических фононов имеет вид

$$V_{gr}^{(ak)} = \pm a\sqrt{\frac{\beta}{M}} \cos \frac{qa}{2} \quad (6.21)$$

Равенство нулю групповой скорости при $q = \pm\pi/a$, т.е. на границе зоны Бриллюэна, имеет наглядную корпускулярную интерпретацию, если рассматривать фононы, как независимые и несвязанные с кристаллической структурой квазичастицы.

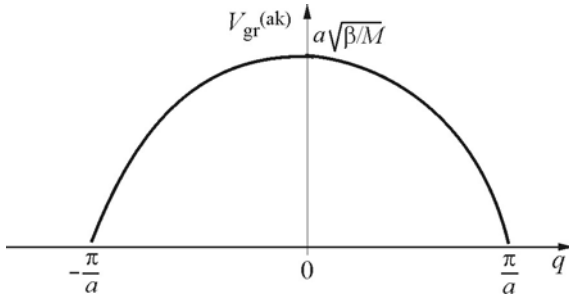


Рис.6–4. Зависимость групповой скорости акустических фононов от волнового вектора в линейной цепочке атомов

На первый взгляд такое предположение кажется некорректным, поскольку фононы не являются внешними частицами по отношению к решетке. Они «рождены» решеткой, являются результатом ее возбуждения. Однако описание колебательного движения (возбуждений системы) с помощью квазичастиц имеет то преимущество, что квазичастицы (фононы), после их введения (определения закона дисперсии) можно рассматривать как ансамбль самостоятельных частиц, движущихся в *неподвижной кристаллической структуре*, то есть находящейся в основном, невозбужденном состоянии. Тогда фононы, как и другие микроскопические частицы, испытывают брэгговское отражение на границе зоны Бриллюэна при условии Вульфа–Брэггов $q = \pm\pi/a$. Условию $q = \pm\pi/a$ (то есть $\lambda = 2a$) соответствуют колебания соседних атомов в противофазе $\Delta\varphi = qa = (\pi/a)a = \pi$. Такое колебание представляет собой стоячую волну, которая не переносит энергии, ее групповая скорость равна нулю. Узел стоячей волны всегда находится по середине между атомами, что соответствует \cos -типу стоячих волн (рис. 6–5).

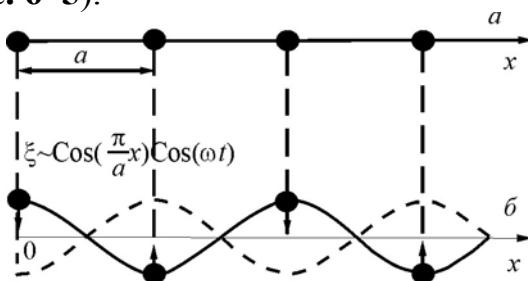


Рис.6–5. Смещение атомов (δ) в линейной цепочке (a) при возбуждении фононов с волновыми векторами $q = \pm\pi/a$ ($\lambda = 2a$)

Ответ. $\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} \sin \frac{\pm qa}{2} = \omega_{\max} \sin \frac{\pm qa}{2}$, $V_{gr}^{(ak)} = \pm a\sqrt{\frac{\beta}{M}} \cos \frac{qa}{2} = \pm \frac{a}{2} \omega_{\max} \cos \frac{qa}{2}$, где $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/M}$.

Задача 5 (фононы в *одномерной цепочке, состоящей из атомов двух сортов*). В одномерной цепочке атомов (рис.6–6) четные по порядку номера атомы (черные) имеют массу больше, чем нечетные (белые): $M_1 > M_2$. Определите закон дисперсии и групповую скорость фононов в приближении длинных и коротких волн.

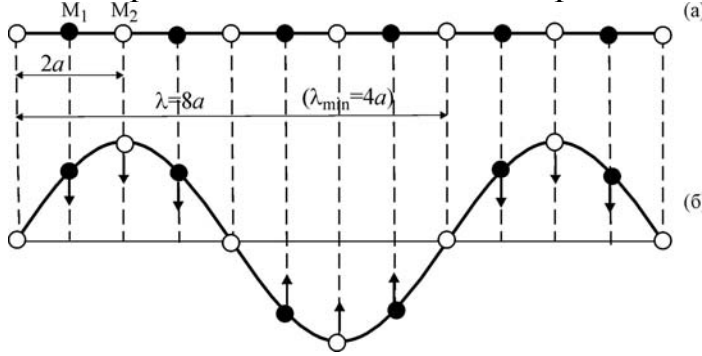


Рис.6–6. (а) – одномерная цепочка из атомов двух сортов: масса черных атомов больше массы светлых $M_1 > M_2$; (б) – акустическая волна в цепочке с длиной волны $\lambda = 8a$

Решение. По аналогии с предыдущей задачей запишем уравнения движения двух соседних атомов с разными массами:

$$M_1 \ddot{\xi}_{2n} = \beta(\xi_{2n+1} + \xi_{2n-1} - 2\xi_{2n}), \quad (6.22)$$

$$M_2 \ddot{\xi}_{2n+1} = \beta(\xi_{2n+2} + \xi_{2n} - 2\xi_{2n+1}). \quad (6.23)$$

Решение уравнений будем искать в таком же виде как (6.15), то есть в виде колебаний атомов в среде, в которой распространяется волна $e^{i(\omega t + kx)}$:

$$\xi_{2n} = \zeta e^{i(\omega t + 2nqa)}, \quad (6.24)$$

$$\xi_{2n+1} = \eta e^{i(\omega t + (2n+1)qa)}, \quad (6.25)$$

где координаты четных атомов равны $x = 2na$, нечетных — $x = (2n+1)a$, а ζ и η — их амплитуды колебаний, соответственно.

Подставляя (6.24) и (6.25) в уравнения движения (6.22) и (6.23) получим систему уравнений:

$$-\omega^2 M_1 \zeta = \beta \eta (e^{iqa} + e^{-iqa}) - 2\beta \zeta, \quad (6.26)$$

$$-\omega^2 M_2 \eta = \beta \zeta (e^{iqa} + e^{-iqa}) - 2\beta \eta. \quad (6.27)$$

Система имеет нетривиальное решение, если детерминант коэффициентов этой системы равен нулю:

$$\begin{vmatrix} 2\beta - \omega^2 M_1 & -2\beta \cos qa \\ -2\beta \cos qa & 2\beta - \omega^2 M_2 \end{vmatrix} = 0.$$

Это условие приводит к наличию двух различных собственных частот колебаний неоднородной цепочки атомов:

$$\omega_{\pm}^2 = \beta \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \beta \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{M_1 M_2}}. \quad (6.28)$$

В приближении $qa \ll 1$, что соответствует *длинноволновой области* спектра, частоты можно записать в виде

$$\omega_+ \approx \sqrt{2\beta \left(\frac{1}{M_2} + \frac{1}{M_2} \right)}, \quad (6.29)$$

$$\omega_- \approx \left(a \sqrt{\frac{2\beta}{M_1 + M_2}} \right) q. \quad (6.30)$$

Зависимость (6.30) аналогична (6.19) и описывает закон дисперсии длинноволновых продольных акустических фононов, групповая скорость которых

$$V_{gr}^{ak} = a \sqrt{\frac{2\beta}{M_1 + M_2}} \quad (6.31)$$

при $M_1 = M_2$ переходит в выражение для скорости длинноволновых колебаний (6.20) в моноатомной цепочке. В том же приближении $qa \ll 1$, подставляя (6.29) и (6.30) в одно из уравнений (6.26) или (6.27), находим отношение амплитуд колебаний при частотах ω_- и ω_+ :

$$\omega_-: (\eta/\zeta)_- = 1; \quad (6.32)$$

$$\omega_+: (\eta/\zeta)_+ = -M_1/M_2. \quad (6.33)$$

Отношение амплитуд (6.32) означает, что для акустической ветви колебания соседних атомов происходят с одинаковой амплитудой и при больших λ практически синфазно (рис.6–6 б).

Из (6.33) следует, что во второй ветви колебаний соседние атомы колеблются в противофазе и с разными амплитудами. Записав выражение (6.33) в виде

$$\frac{M_1 \zeta + M_2 \eta}{M_1 + M_2} = 0, \quad (6.34)$$

приходим к выводу, что колебания соседних атомов происходят так, что амплитуда смещения центра масс атомов в элементарной ячейке равняется нулю. Эта ветвь колебаний называется **оптической** (рис.6–7).

Для самых коротких волн длина волны равна $\lambda = 4a$ ($q^{\lim} = \pi/(2a)$) тяжелые атомы неподвижны, а соседние легкие атомы колеблются в противофазе, аналогично колебаниям атомов двух сортов в линейной цепочке (рис. 6–7 а). При увеличении длины волны λ начинают колебаться тяжелые атомы, а разность фаз колебаний соседних атомных плоскостей в каждой из подрешеток уменьшается (рис. 6–7 б,в). В пределе, когда разность фаз обращается в нуль, атомы в каждой из подрешеток можно считать неподвижными друг относительно друга (соседние идентичные атомы неподвижны друг относительно друга). В этом случае (при $\lambda \rightarrow \infty$, $q \rightarrow 0$) оптические колебания представляют собой колебания в противофазе двух жестких подрешеток относительно друг друга (рис. 6–7 г). Поперечные и продольные колебания

подрешеток в рассматриваемом случае эквивалентны, а значит, частоты всех трех ветвей (двух поперечных и одной продольной) оптических фононов при $\mathbf{q} = 0$ одинаковы.

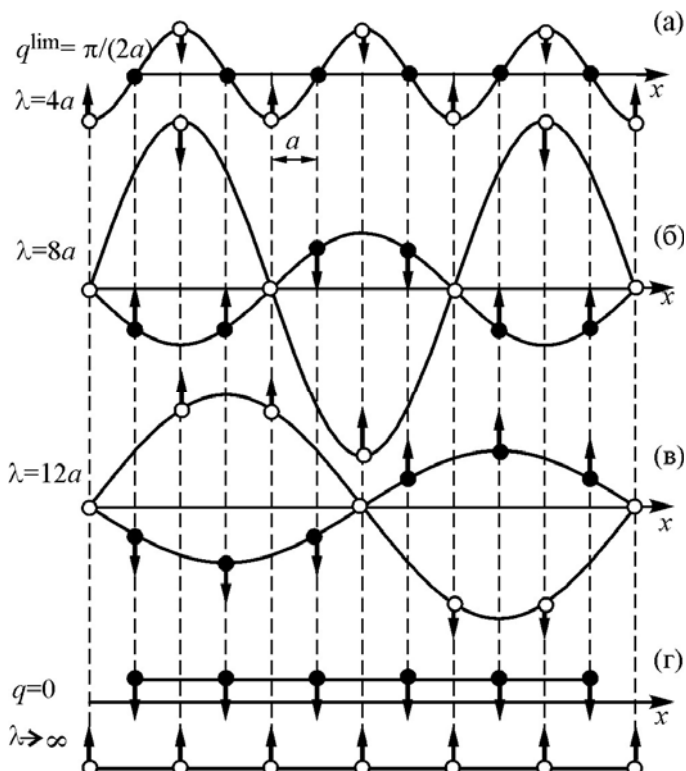


Рис.6–7 Смещение атомов в линейной цепочке при возбуждениях, соответствующих оптическим фононам с длинами волн от минимальной $\lambda = 4a$ до $\lambda \rightarrow \infty$. Пример (г) соответствует случаю $\lambda \rightarrow \infty$, когда колебания атомов одного сорта происходят синфазно друг с другом, но в противофазе с атомами второго сорта

Колебания при $q^{\text{lim}} = \pi/(2a)$ и при $\mathbf{q} = 0$ соответствуют стоячим волнам, имеющим разные энергии. Предположим, что все атомы в кристалле стали одинаковыми. Тогда оптическим колебаниям с $\mathbf{q} = 0$ будут соответствовать акустические колебания с $\lambda = 2a$, то есть с волновым вектором $q = \pi/a$ в два раза превышающим значение $q^{\text{lim}} = \pi/(2a)$. Учитывая закон дисперсии, можно сделать вывод, что частота оптических колебаний при $\mathbf{q} = 0$ больше частоты колебаний при $\mathbf{q} = q^{\text{lim}}$.

Заметим, что для появления оптических колебаний не обязательно, чтобы решетка состояла из атомов разной массы. Существенно лишь, чтобы положение всех атомов в решетке не было одинаковым и можно было бы выделить две или более подрешеток. Например, в структурах с двумя атомами, приходящимися на элементарную ячейку, можно выделить две подрешетки с различными упругими постоянными, независимо от того одинаковы по массе эти атомы или нет.

Общий вид дисперсионных кривых $\omega_-(k)$ и $\omega_+(k)$ (6.28) для акустической и оптической ветвей фононного спектра представлен на рис. 6–8. Все энергетически различные состояния фононов находятся в интервале значений волнового вектора $-\pi/2a \leq q \leq +\pi/2a$, который представляет собой I зону Бриллюэна для двухатомной цепочки, период которой в \mathbf{r} -пространстве равен $2a$. Характерно, что в длинноволновой

области *частота оптических фононов практически не зависит от значений волнового вектора*.

Максимальное значение частоты $\omega_{-\max} = \sqrt{2\beta/M_1}$ фононы акустической ветви имеют при значении волнового вектора $q = \pm\pi/(2a)$. Частота оптических колебаний $\omega_+(k)$ изменяется от $\omega_{+\min} = \sqrt{2\beta/M_2}$ при $q = \pm\pi/2a$ до $\omega_{+\max} = \sqrt{2\beta(1/M_1 + 1/M_2)}$ при $q=0$. Групповая скорость оптических фононов как в максимуме, так и в минимуме дисперсионной кривой равна нулю $\partial\omega_+/\partial k = 0$ (рис. 6–9).

Между акустической и оптической ветвями спектра (рис.6–8) расположена область запрещенных значений частот (**энергетическая щель** в законе дисперсии фононов). Это означает, что фононов с частотами, находящимися в области энергетической щели, не существует, решетка не совершает колебаний с такими частотами.

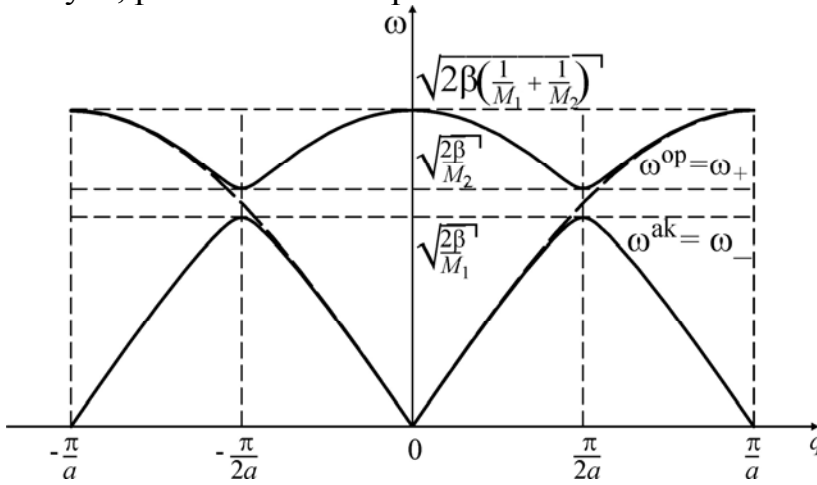


Рис.6–8. Дисперсионные кривые для акустической ω_- и оптической ω_+ ветвей фононного спектра

При значительной разнице в массах соседних атомов $M_1 \gg M_2$ оптические колебания с разными q происходят практически с одной частотой (одной энергией):

$$\omega_{\max} = \sqrt{2\beta\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)} \approx \sqrt{\frac{2\beta}{M_2}\left(1 + \frac{M_2}{2M_1}\right)}. \quad (6.35)$$

Дискретный набор волновых чисел, как и в случае моноатомной цепочки, находится из условий цикличности $\xi_{2n} = \xi_{2n+N}$ и $\xi_{2n+1} = \xi_{2n+1+N}$:

$$q_i = \frac{2\pi}{Na}i = \frac{2\pi}{L}i, \quad i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{4}. \quad (6.36)$$

Рассмотрим **коротковолновые** акустические и оптические фононы с волновыми векторами $qa = \pi/2 - \delta$. При $\delta \ll 1$ отношение амплитуд колебаний легких и тяжелых атомов следующее:

для акустической ветви

$$\left(\frac{\eta}{\zeta}\right)_- \approx \frac{\delta}{1 - M_2/M_1} > 0, \quad (6.37)$$

для оптической ветви

$$\left(\frac{\zeta}{\eta}\right)_+ \approx \frac{\delta}{M_1/M_2 - 1} < 0. \quad (6.38)$$

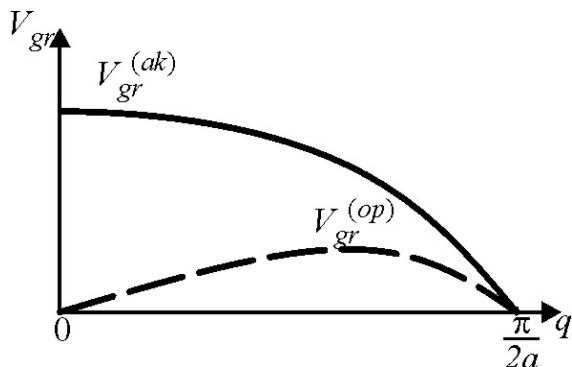


Рис.6–9. Зависимость от волнового вектора групповой скорости акустических и оптических фононов для линейной цепочки атомов двух сортов

По мере приближения к границе зоны Бриллюэна (при $\delta \rightarrow 0$) происходит уменьшение амплитуды колебаний легких атомов в акустической ветви и амплитуды колебаний тяжелых атомов — в оптической ветви. Фононы акустической ветви с $q = \pm\pi/(2a)$ имеют частоту $\sqrt{2\beta/M_1}$ (рис.6-8), которая соответствует колебаниям тяжелых атомов M_1 при неподвижных легких. Фононы с частотой $\sqrt{2\beta/M_2}$ в оптической ветви соответствуют колебаниям легких атомов M_2 при неподвижных тяжелых.

Ответ.
$$\omega_{\pm}^2 = \beta \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \beta \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{M_1 M_2}}$$

Задача 6 (температура Дебая). Оценить температуру Дебая для железа, полагая скорости распространения продольных и поперечных волн одинаковыми и равными $V_s = 5 \text{ км/с}$. Плотность железа $\rho = 7,8 \text{ г/см}^3$.

Решение. Температура Дебая по определению связана с максимальной частотой фононов $k_B T_D = \hbar \omega_{\max}$.

Максимальное значение волнового вектора определяется концентрацией атомов $n = \frac{N}{L^3} = \frac{\rho}{m} = \frac{\rho N_A}{M}$, где m — масса одного атома железа, M — молярная масса железа, ρ — плотность, по формуле (6-6):

$$q_{\max} = [6\pi^2 N / L^3]^{1/3} = [6\pi^2 n]^{1/3} = \left[6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{1/3}.$$

Используя линейный закон дисперсии $\omega = Vq$, получаем выражение для оценки температуры Дебая

$$T_D = \frac{\hbar}{k_B} V_s q_{\max} = \frac{\hbar}{k_B} V_s [6\pi^2 n]^{1/3} = \frac{\hbar}{k_B} V_s \left[6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{1/3}.$$

Подставляя числовые данные: $V_s = 5 \text{ км/с} = 5 \cdot 10^3 \text{ м/с}$, $\rho = 7,8 \text{ г/см}^3 = 7,8 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, находим

$$T_D = \frac{\hbar}{k_B} V_s \left[6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{1/3} = \frac{10^{-34}}{1,38 \cdot 10^{-23}} 5 \cdot 10^3 \left[6\pi^2 \frac{7,8 \cdot 10^3 \cdot 6 \cdot 10^{23}}{55,8 \cdot 10^{-3}} \right]^{1/3} \approx 615 \text{ К}$$

Ответ. $T_D = \frac{\hbar}{k_B} V_s \left[6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{1/3}$.

Задача 7 (теплоемкость решеток). Определить температурную зависимость молярной изохорической теплоемкости для моноатомной трехмерной кубической решетки. Рассмотреть предельные случаи низких и высоких температур. Период решетки a . Закон дисперсии линейный.

Решение. Чтобы вычислить решеточную теплоемкость, нужно знать температурную зависимость средней тепловой энергии решетки. Теплоемкость тела определяется соотношением $C = \delta Q/dT$, а теплоемкость при постоянном объеме

$$C_v = \frac{d\langle W(T) \rangle}{dT}, \quad (6.75)$$

где δQ — элементарное количество теплоты, $\langle W(T) \rangle$ — средняя тепловая энергия решетки.

В фоновой модели $\langle W(T) \rangle$ является суммой средних тепловых энергий фононов в каждой моде колебаний. Мода колебаний характеризуется частотой, волновым вектором (или импульсом) и поляризацией. В каждом квантовом состоянии с определенной энергией и импульсом (**см., например, рис.2, гл.**) в трехмерном случае находятся фононы трех мод колебаний, соответствующие трем поляризациям волн: двум поперечным и одной продольной.

Приближение низких температур $T \ll T_D$

Учитывая, что число фононов с энергиями $\hbar\omega > k_B T$ экспоненциально мало (**см.**), то можно считать, что при температуре T возбуждаются только фононы, энергия которых $\hbar\omega \leq k_B T$. Состояния этих фононов находятся внутри сферической поверхности постоянной частоты $\omega^{\text{lim}} \sim k_B T / \hbar$. Энергия каждой возбужденной моды, чьи квантовые состояния находятся внутри объема, ограниченного данной поверхностью $\sim k_B T$ (**см.**). Учитывая, что различных поляризаций три, получаем, что энергия фононов, находящихся в каждом квантовом состоянии $3k_B T$. Число, возбужденных квантовых состояний — число квантовых состояний, заключенных в объеме, ограниченном сферой. Для линейного закона дисперсии $\omega = V_{gr} q$ радиус сферы q_T определим из равенства $k_B T = \hbar\omega = \hbar V_{gr} q_T$:

$$q_T = \frac{k_B T}{\hbar V_{gr}}. \quad (11)$$

Число состояний N_T^{ak} в объеме, ограниченной сферой

$$N_T = \frac{\frac{4}{3} \pi q_T^3}{(2\pi/L)^3} = \frac{(k_B T)^3 L^3}{6 \cdot \pi^2 (\hbar V_{gr})^3}$$

и энергия всех возбужденных фононов (тепловая энергия решетки):

$$W(T) = 3N_T k_B T = \frac{(k_B T)^4 L^3}{3 \cdot \pi^2 (\hbar V_{gr})^3}$$

и теплоемкость решетки объемом L^3

$$C_0 = \frac{dW(T)}{dT} = \frac{4k_B^4 L^3}{3\pi^2 (\hbar V_{gr})^3} T^3.$$

Число атомов в узлах кубической решетки L^3/a^3 , число молей в объеме L^3 : $\nu_0 = \frac{L^3}{a^3 N_A}$. Тогда для молярной теплоемкости имеем

$$C = \frac{C_0}{\nu_0} = \left(\frac{4}{3\pi^2} \right) \cdot \frac{k_B^4 a^3 N_A}{(\hbar V_{gr})^3} T^3. \quad (6.81)$$

Полученная зависимость $C \sim T^3$ (6.81) носит название **закона Дебая**. Он хорошо выполняется практически у всех кристаллических веществ при $T \leq T_D/10$ (рис. 6–23).

Точные расчеты дают для теплоемкости формулу, отличающуюся от (6.81) и только коэффициентом:

$$C = \left(\frac{2\pi^2}{5} \right) \cdot \frac{k_B^4 a^3 N_A}{(\hbar V_{gr})^3} T^3. \quad (6.8_1)$$

С учетом полученного в задаче 6 выражения для температуры Дебая формула для молярной теплоемкости (6.8_1) приобретает простой вид:

$$C = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{T_D} \right)^3, \quad (6.8_2)$$

где R – универсальная газовая постоянная.

Приближение высоких температур $T \gg T_D$

При высоких температурах $T > T_D$ возбуждаются все моды акустических колебаний, число которых равно утроенному (за счет трех разных поляризаций) числу атомов в решетке $N_T = 3(L/a)^3$.

Энергия всех возбужденных фононов (тепловая энергия решетки):

$$W(T) = N_T k_B T = 3 \frac{L^3 k_B T}{a^3};$$

теплоемкость решетки объемом L^3

$$C_0 = \frac{dW(T)}{dT} = \frac{3k_B L^3}{a^3}.$$

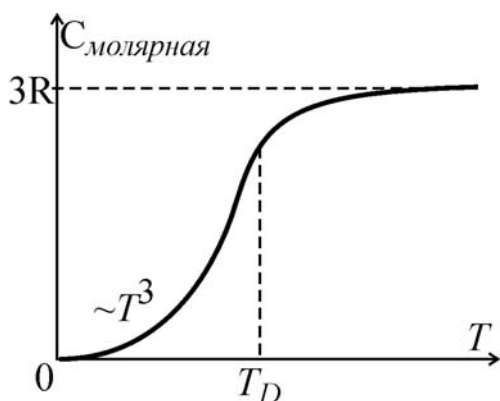


Рис. 6-23. Температурная зависимость молярной теплоемкости трехмерной кристаллической решетки

Учитывая, что число молей в объеме L^3 : $\nu_0 = \frac{L^3}{a^3 N_A}$, для молярной теплоемкости при высоких температурах получаем **закон Дюлонга и Пти**:

$$C = 3k_B N_A = 3R.$$

Температурная зависимость молярной теплоемкости трехмерной кристаллической решетки представлена на **рис.6-23**.

Ответ.

Задача 8. (модель Эйнштейна). В модели Эйнштейна кристалл представляется совокупностью независимых идентичных квантовых осцилляторов с одинаковой частотой ω_0 . Вообще говоря, применение модели Эйнштейна к кристаллам некорректно, так как спектр колебаний сужается до одной частоты. Однако для описания оптических колебаний модель может быть использована достаточно обоснованно, так как частотный интервал оптических фононов достаточно узкий и позволяет аппроксимировать его одной частотой.

В рамках модели Эйнштейна оцените колебательную энергию и теплоемкость решетки.

Решение. Средняя тепловая энергия одного моля вещества в модели Эйнштейна с учетом трех возможных поляризаций

$$\langle W \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \langle n_{\omega_0} \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \cdot \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}. \quad (6.92)$$

Решеточная молярная теплоемкость

$$C = \frac{\partial \langle W \rangle}{\partial T} = 3R \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right)^2 \exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-2} \quad (6.93)$$

При низких температурах $k_B T \ll \hbar \omega_0$ выражения (6.92) и (6.93) принимают вид

$$\langle W \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right), \quad (6.94)$$

$$C = 3R \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right). \quad (6.95)$$

При высоких температурах $k_B T \gg \hbar \omega_0$, когда возбуждены все три ветви оптических фононов, получаем (условие нормировки на $N/2$)

$$\langle W \rangle = 3RT, \quad (6.96)$$

$$C = 3R. \quad (6.97)$$

Теплоемкость при низких температурах, в рамках модели Эйнштейна, имеет экспоненциальную зависимость от T , в отличие от степенной зависимости $\sim T^3$ закона Дебая. В пределе высоких температур модели Эйнштейна и закон Дебая дают одинаковые значения теплоемкости.

Ответ. $\langle W \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \cdot \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}$, $C = 3R \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right)^2 \exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-2}$.

Задания для самостоятельной работы.

1. Получить температурную зависимость для тепловой энергии и молярной теплоемкости **двумерных слоистых квадратных решеток**. Скорость звука V_s . Покажите, что теплоемкость линейных цепочек пропорциональна температуре.

Ответ. $W(T) = 2k_B T \frac{\pi q^2}{(2\pi/L)^2} = \frac{(k_B T)^3}{2\pi\hbar^2 V_s^2}$, $C = \frac{k_B^3 a^2 N_A}{2\pi\hbar^2 V_s^2} T^2$.

2. Определить дебаевскую температуру для **двумерных слоистых квадратных решеток**. Скорость продольных и поперечных волн считать одинаковой V_s . Число атомов, приходящихся на единицу площади n .

Ответ. $T_D = \frac{\hbar}{k_B} V_s \sqrt{4\pi n}$

3. Вычислите скорость звука в линейной цепочке идентичных атомов с дебаевской температурой 300 К и межатомным расстоянием 0,25 нм.

Ответ: $V_s = \frac{k_B T_D a}{\pi\hbar} \approx 3,1 \text{ нм/с}$

4. **(И. №6.205)**. Оценить скорость распространения акустических колебаний в алюминии, дебаевская температура которого $T_D = 396 \text{ К}$.

Ответ: $V_s = \frac{T_D k_B}{\hbar} \left[6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{-1/3} = 3,4 \text{ нм/с}$.

5. Оцените максимальную частоту колебаний для меди, если при температуре $T = 125 \text{ К}$ ее молярная теплоемкость отличается от классического значения при высоких температурах на $\alpha = 25\%$.

Ответ. $\omega_{\max} = \frac{k_B T}{\hbar} \left(\frac{4\pi^4}{5(1-\alpha/100)} \right)^{1/3} \approx 8,1 \cdot 10^{13} \text{ рад/с}$

6. Оцените энергию, которую необходимо сообщить 27г алюминия, чтобы нагреть его от $T_D/20$ до $T_D/10$. Температура Дебая алюминия $T_D = 396 \text{ К}$.

Ответ. $\Delta Q = \int_{T_D/20}^{T_D/10} C dT \approx 2 \cdot 10^{-5} \pi^4 R T_D \approx 6,4 \text{ Дж}$.

7. Найдите число продольных мод колебаний в диапазоне частот (ω , $\omega+d\omega$) для цепочки из N атомов, расположенных с периодом a . Масса каждого атома m . Коэффициент жесткости связи между атомами равен β . Считайте, что на движение каждого атома влияют лишь его непосредственные соседи.

Ответ: $dn = \frac{2Nd\omega}{\pi\sqrt{4\beta/m - \omega^2}}$.

8. Определите молярную теплоемкость кристаллической решетки при температуре $T_D/20$. На сколько процентов отличается молярная теплоемкость решетки при этой температуре от классического значения?

Ответ: $C = 3 \cdot 10^{-4} \pi^4 R \approx 0,03R$; $C_0 - C = 3R - 0,03R = 3R \cdot 0,99$, 99%