

УДК 536.631

DOI: 10.17223/00213411/63/3/102

А.В. ОРЛОВ¹, М.А. ГУМИРОВ², В.Л. ОРЛОВ², В.И. ЗЕЛЕНСКИЙ¹СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ ЭНЕРГИИ ФОНОНОВ В МЕТАЛЛАХ
С КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ

Приведено выражение для спектральной плотности энергии акустических фононов. Введены основные свойства ангармонических фононов, и записано выражение для их спектральной плотности энергии.

Ключевые слова: тепловое расширение, кристаллическая решетка, ангармонические фононы, спектральная плотность энергии.

Описание колебаний атомов кристаллической решетки до настоящего времени не может считаться окончательно законченным, несмотря на существование теории теплоемкости при постоянном объеме (теории Дебая). Теория Дебая прекрасно объясняет закон кубического возрастания теплоемкости с температурой при низких значениях последней. Однако при высоких температурах модель Дебая представляется недостаточно обоснованной [1]. В частности, неясно, в силу каких физических причин введено значение критической частоты – частоты фононов, выше которой их появление невозможно.

Кроме того, не рассматривается спектральная плотность энергии фононов ангармонизма, хотя эта информация крайне важна. Именно спектральный состав ангармонических фононов необходим для предметного описания фонон-фононного взаимодействия в кристалле.

Роль фононов в формировании кристаллического состояния существенно недооценена. Приведем лишь несколько примеров:

1. Можно предположить, что именно фононы ответственны за строгую прямолинейность атомных рядов в решетке. Тогда появляется возможность связать изгибную прочность материала с соответствующими фононами.

2. Фононы определяют поверхностное натяжение материала, в особенности в случае, когда волновой фронт источника колебаний не является плоским.

3. Можно предположить, что фононы определяют вид (строение) наночастиц.

Даже такой ограниченный список приложений физики фононов свидетельствует о важности рассмотрения спектральной плотности их энергии. При этом рассмотрение должно быть более детальным, чем приближение Дебая.

В данной работе изложены принципы, на основании которых может производиться расчет спектральной плотности энергии фононов. Анализ проводится для простой кубической кристаллической решетки.

1. Стандартное описание фононов

При описании колебаний кристаллической решетки спектральная плотность энергии записывается в виде [2]

$$r(\omega, T) = (2j + 1) \left[\frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{g(\omega, T) \hbar \omega}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_b T}\right) - 1} \right], \quad (1)$$

где $j = 1$ – спин фонона; $g(\omega, T)$ – числа заполнения или плотность состояний. В уравнении (1) учтена энергия нулевых колебаний и тот факт, что фононы подчиняются статистике Бозе – Эйнштейна. Далее следует записать дисперсионное соотношение – связь между энергией фонона и его квазиимпульсом. При учете взаимодействия только между атомами-соседями может быть использован формализм одночастичных функций Блоха:

$$p_\Phi = \hbar k, \quad \omega = \frac{V_{3B}}{2a} \sin \frac{ak}{2}, \quad (2)$$

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>