сти, обусловленной акустическими колебаниями, появится дополнительный член [ср. с формулой (6.13)]

$$c_V^{\text{опт}}=(3r-3)\frac{N}{r}\kappa_B\frac{[\hbar\omega_э/(\kappa_B T)]^2 e^{\hbar\omega_э/(\kappa_B T)}}{(e^{\hbar\omega_э/(\kappa_B T)}-1)^2}, \tag{6.39}$$

который при температуре много большей температуры Эйнштейна ($T\gg\theta_э$), когда возбуждены все моды оптических колебаний, дает постоянный, не зависящий от температуры вклад в теплоемкость. При температурах $T\ll\theta_э$ вклад оптических колебаний в теплоемкость экспоненциально исчезает и при очень низких температурах, близки к абсолютному нулю, оптические колебания можно вообще не учитывать, поскольку они не возбуждаются (см. гл. 5) и не дают вклада в тепловую энергию решетки.

6.4. ВЫВОД ФОРМУЛЫ ДЛЯ ТЕПЛОЕМКОСТИ, ОСНОВАННЫЙ НА ПРЕДСТАВЛЕНИИ О ФОНОНАХ

Коллективные движения атомов в кристалле, как мы видели в гл. 5, представляют собой звуковые волны, а соответствующие им возбуждения — кванты звука или фононы, энергия которых равна $E=\hbar\omega$, а импульс p связан с волновым числом κ обычным соотношением для свободных частиц $p=\hbar\kappa$. Энергия и импульс фонона с учетом выражения типа (6.18) связаны соотношением

$$E=p\,v_s, \tag{6.40}$$

где v_s определяется условием (6.23).

Для определения плотности состояний $G(\omega)$ фононов, т. е. числа фононов, энергия которых заключена в интервале от E до $E+dE$, поступим следующим образом. В p-пространстве выделим слой, заключенный между сферами радиуса p и $p+dp$ (ср. рис. 6.4 для κ-пространства). Объем сферического слоя

$$dV_{\text{сл}}=\frac{4\pi}{3}(p+dp)^3-\frac{4\pi}{3}p^3\approx 4\pi p^2\,dp.$$

Разобъем p-пространство на фазовые ячейки объемом $(2\pi\hbar)^3/V$ (V — объем кристалла). Тогда в сферическом слое таких ячеек будет

$$dz=G(E)\,dE=\frac{3\cdot 4\pi p^2 V\,dp}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{6.41}$$

Множитель 3 в (6.41) учитывает три возможные поляризации фононов (одна продольная и две поперечные). Заменяя в (6.41) p на энергию E, пользуясь выражением (6.40), получим

$$G(E)=\frac{12\pi V}{(2\pi\hbar)^3}\cdot\frac{1}{(v_s)^3}E^{1/2}. \qquad (6.42)$$

Поскольку полное число фононов в ограниченном твердом теле не может быть больше $3N$, то

$$\int_0^{\kappa_D\Theta_D} G(E)\,dE=3N. \qquad (6.43)$$

Отсюда, с учетом формулы (6.42),

$$G(E)=\frac{9NE^2}{(\kappa_B\Theta_D)^3}. \qquad (6.44)$$

Фононы подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна, поэтому среднее число фононов в одной ячейке фазового пространства объемом $(2\pi\hbar)^3/V$ с энергией E определяется выражением (5.73). Тогда полная энергия фононов в кристалле

$$\langle E\rangle=\int_0^{\kappa_D\Theta_D} E\,G(E)\langle n(\kappa,s)\rangle dE=\frac{9N\kappa_B T}{(\Theta_D/T)^3}\int_0^{\Theta_D/T}\frac{x^3\,dx}{e^x-1}, \qquad (6.45)$$

где

$$x=E/(\kappa_B T)=\hbar\omega(\kappa_B T);\quad \Theta_D=\hbar\omega_D/\kappa_B.$$

Сравнение формул (6.45) и (6.32) указывает на их полную тождественность. Отсюда можно сделать вывод о том, что представление о фононах позволяет использовать понятия и математические приемы, справедливые для обычных реальных частиц.

6.5. ТЕПЛОЕМКОСТЬ МЕТАЛЛОВ. УЧЕТ ВКЛАДА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

По современным представлениям, металл рассматривается как совокупность системы положительно заряженных ионов, колеблющихся около их средних положений равновесия в кристаллической решетке, и системы относительно свободных коллективизированных валентных электронов, образующих в металле своеобразный газ.

При обсуждении закона Дюлонга и Пти отмечалось, что если исходить из классических представлеиий и считать электроны в металле свободными, так же как молекулы идеального