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

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

где γ – константа взаимодействия ближайших атомов; ξ_ℓ – смещение ℓ–го атома относительно положения равновесия. Координаты ξ_ℓ 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 ℓ–го атома

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

Введем новые координаты $q_k(t)$ преобразованием

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

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

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

Из условий Борна – Кармана находим: $\exp(ikNa) = 1$, т. е. $k = (2\pi/Na)\nu$, где $\nu = 0, \pm1, \pm2, \ldots, N/2$. 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. $\vec{k} \to \vec{k}' = \vec{k} + \vec{g}$; взаимодействия с $\Delta\vec{k} = \vec{g}$ называют процессами переброса.)

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

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

где

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

закон дисперсии для колебаний цепочки, т. е. зависимость частоты колебаний ω 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,

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

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 $k_{\max}$) $\lambda_{\min} = 2\pi/k_{\max} = 2a$. 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 $k = k_{\max}$ – брэгговское отражение от кристаллической решетки.)

Теперь перейдем к рассмотрению двухатомной цепочки, функция Гамильтона которой есть

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

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

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

получим систему уравнений

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

откуда

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

Ищем решения системы (7) в виде

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

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

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

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

$$\omega_s^2(k)=\gamma\left(1/\mu+(-1)^s\left[1/\mu^2-4/(m_1m_2)\sin^2(ka/2)\right]^{1/2}\right),\tag{10}$$

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 $m_1 = m_2$, $a/2 \to a$ 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 $10^{12} - 10^{13}$ 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 $k \to 0$ для акустической ветви $A_k^{(1)}/B_k^{(1)} \to 1$, а для оптической $A_k^{(2)}/B_k^{(2)} \to -m_2/m_1$. 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 соответствующих 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 $E_0 = (1/2)\sum\limits_k \hbar\omega_k$ – энергия нулевых колебаний решетки.

В представлении чисел заполнения

$$\hat{H}^{'}\left|\ldots, n_k, \ldots\right\rangle = \sum_k \hbar\omega_k n_k \left|\ldots, n_k, \ldots\right\rangle, \tag{11}$$

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–фононных, фотон–фононных и фонон–фононных взаимодействиях .

С колебаниями решетки связано множество разнообразных явлений, таких как неупругое рассеяние света на оптических фононах – эффект Рамана, эффективное притяжение электронов, обусловленное электрон–фононным взаимодействием (гамильтониан Фрелиха) и приводящее в конечном счете к сверхпроводимости, процессы переброса (передача импульса кристаллу как целому) – механизм теплопроводности, резонансное поглощение γ–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, α) подчиняются распределению Бозе – Эйнштейна

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

Внутренняя энергия такого газа есть

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

11.3 Модель Эйнштейна

Предположим, что все колебательные моды кристалла имеют одну и ту же характеристическую частоту ω_E, т. е. энергия фонона не зависит от индекса k: $\varepsilon_k = \hbar \omega_E$. Тогда для простого (с одним атомом в ячейке) кристалла $\sum\limits_k 1 = 3N$ и

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

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

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

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

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

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

$$C_V \simeq 3Nk(1 - \theta_E/T) \underset{T\to\infty}{\longrightarrow} 3Nk.$$

[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 $\sum\limits_k \to V/(2\pi)^3 \int d^3k$. 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

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

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 ω

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

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

$$\int\limits_0^{\omega_{\max}} D(\omega) d\omega = 3N.$$

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

$$U = \int\limits_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega D(\omega)}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} d\omega = 9NkT \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int\limits_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}, \tag{17}$$

где $\theta_D \equiv \hbar\omega_{\max}/k$ – дебаевская характеристическая температура. Если ввести обозначения

$$f_D(x_m) = \frac{3}{x_m^3} \int\limits_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \tag{18}$$

где $x = \hbar\omega/kT$; $x_m = \hbar\omega_{\max}/kT = \theta_D/T$, то

$$U = 3NkT \cdot 3 \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int\limits_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 3NkT f_D\left(\frac{\theta_D}{T}\right) \tag{19}$$

и

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

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

$$f_D(x_m) \approx \frac{3}{x_m^3}\int\limits_0^\infty \frac{x^3dx}{e^x-1} = \frac{3}{x_m^3}\Gamma(4)\zeta(4) = \frac{\pi^4}{5}\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3,$$

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

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

В пределе высоких температур

$$\begin{aligned} f_D(x_m) &\approx \frac{3}{x_m^3}\int\limits_0^{x_m} \frac{x^3dx}{[1+x+x^2/2+\ldots-1]} \approx \\ &\approx \frac{3}{x_m^3}\int\limits_0^{x_m} x^2(1-x/2)dx = 1-\frac{3}{8}x_m. \end{aligned} \qquad (22)$$

И при $T \to \infty$ 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
θ_D, K из $\bar{c}$	399	385,6	344,4	328	226,4	161,1
θ_D, K 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);

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

полярон – автолокализованное состояние электрона, отвечающее взаимодействию электрона с оптическим фононом, т. е. электрон, движущийся в кристалле вместе с локальной поляризацией (электрон + облако виртуальных оптических фононов).