

ВИБРАЦИОННЫЙ СПЕКТР И ТЕПЛОЁМКОСТЬ ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННЫХ КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ *)

Как известно, тепловые свойства твёрдых тел полуколичественно объясняются тепловыми колебаниями атомов около их положений равновесия. В целом ряде случаев простейшая теория, предложенная Дебаем, отказывается служить. Известно, например, что теплоёмкости серебра и хлористого калия не подчиняются этой теории. Более совершенная теория, предложенная Борном и Карманом, не применялась ещё ни разу к решению подобных проблем из-за трудностей в решении векового уравнения для спектра частот решётки.

В реферируемой работе впервые сделана попытка применить теорию Борна — Кармана к трёхмерному случаю и довести решение этой задачи до сравнимых с опытом чисел.

Если N_1 , N_2 и N_3 суть числа атомов вдоль трёх рёбер кристалла, то число нормальных колебаний dn , частоты которых лежат в пределах от ν до $\nu + d\nu$, выражаются формулой

$$dn = N_1 N_2 N_3 G(\nu) d\nu.$$

Определение функции $G(\nu)$ прodelывается при помощи моделей. Из написанного уравнения следует, что

$$G(\nu) = \frac{1}{v_0} \frac{dv}{d\nu},$$

где v_0 и v — объёмы в пространстве xuz :

$$x = \pi(-l/N_1 + m/N_2 + n/N_3); \quad y = \pi(l/N_1 - m/N_2 + n/N_3);$$

$$z = \pi(l/N_1 + m/N_2 - n/N_3).$$

Здесь l , m , n — целые числа.

*) R. B. Leighton, Rev. Mod. Phys., 20, 165 (1948).

Каждой точке x, y, z соответствуют три частоты — результат решения векового уравнения. Всего точек в пространстве x, y, z $N_1 N_2 N_3$. Объем с ними связанный, есть v_0 , а v — это объем в пространстве, ограниченный поверхностью $v = \text{const}$.

Несложно получить уравнения поверхностей $v = \text{const}$. в рассматриваемом пространстве. Ввиду симметрии кристалла достаточно изучить часть пространства, заключенного между двумя плоскостями симметрии при $y = 0$ и $x = y$. Линии пересечения поверхностей $v = \text{const}$. с плоскостями симметрии строились на миллиметровой бумаге, а затем при помощи булавки переносились на куски пластелина, вырезанные в форме рассматриваемого участка фазового пространства. На каждый кусок наносилась серия линий пересечения для одной из ветвей частот.

Блоки разрезались на куски так, чтобы получить элемент объема, заключенный между двумя поверхностями $v = \text{const}$. Экстраполяция от контуров к поверхностям оказалась вполне возможной; помогает то обстоятельство, что эти поверхности перпендикулярны плоскостям симметрии. Следует также помнить, что симметрия кристалла позволяет рассматривать относительно небольшой телесный угол пространства x, y, z .

Взвешиванием и погружением вырезанных кусков в воду автор определил функцию $v(v)$ и, далее, дифференцированием — функцию $G(v)$. Точность таких модельных вычислений должна быть, согласно автору, порядка нескольких процентов.

Полученный этим способом спектр частот был применен автором для вычисления теплоемкостей. Автором были проведены для серебра вычисления дебаевской характеристической температуры в функции температуры. Выше 7°K теория Борна и Кармана превосходно совпадает с опытом. Ниже той температуры имеются аномалии, которые заставляют считать применяемую модель неправильной.