

УДК 530.145

ФИЗИКА

Г. А. Варданян

Вклад дефектонов в теплоемкость кристалла

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР Г. С. Слакяном 4/IV1975)

Задача о вычислении сдвигов различных термодинамических величин была поставлена и решена И. М. Лифшицем.

В настоящей работе будет вычислен вклад дефектонов, расположенных вблизи поверхности Ферми, в теплоемкость квантового кристалла, методом, развитым в работах (1,2).

Запишем волновую функцию дефектона в виде (3,4):

$$\varphi(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = \varphi_0(\vec{R}_1, \vec{R}_2) + iI(\vec{R}_2 - \vec{R}_1). \quad (1)$$

Входящий здесь интеграл

$$I(\vec{R}_2 - \vec{R}_1) = \int \frac{e^{i\vec{v}(\vec{R}_2 - \vec{R}_1) \cdot \vec{d}^3x}}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - 2\varepsilon(\vec{q}'/2) + i0} \quad (2)$$

связан с амплитудой рассеяния дефектонов. Последняя есть величина определяющая влияние взаимодействия на свойства системы. Следовательно, спектральная плотность $\nu(\varepsilon)$ будет:

$$\nu(\varepsilon) = \text{arctg} \frac{\tau_0 \text{Im} I_F(0)}{1 + \tau_0 \text{Re} I_F(0)}, \quad (3)$$

где

$$\text{Im} I(0) = -\pi \int \frac{d\Omega}{|\nabla\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \nabla\varepsilon(\vec{x} + \vec{q})|}, \quad (4)$$

а величина τ_0 — определяется соотношением:

$$\frac{1}{\tau_0} \leq \int \frac{d\varepsilon \nu(\varepsilon)}{\varepsilon}.$$

Воспользуясь выражением спектральной плотности, можем представить сдвиг энергии

$$E - E_0 = \text{Sp} \left\{ \varphi(\hat{\Lambda} + \hat{L}) - \varphi(\hat{L}) \right\}, \quad (5)$$

где функция

$$\varphi(z) = T \ln \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{\hbar \sqrt{z}}{T} \right] \right\} + \frac{\hbar \sqrt{z}}{2}$$

\hat{L} — гамильтониан кристалла в основном состоянии, $\hat{\Lambda}$ — добавка, обусловленная взаимодействием дефектонов, в виде:

$$E - E_0 = n \int \varphi(z) \left| v(z) - v_0(z) \right| dz, \quad (6)$$

где n — число дефектонов.

$$v_0(z) = \int \frac{d\Omega}{|\nabla \epsilon(\vec{x})|} \Big|_{\vec{x} = z}$$

сдвиг энергии при $T = 0$:

$$E_0 = 2(\epsilon_0 - \epsilon_g) + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \text{arctg} \frac{\tau_0 \text{Im} l_f(0)}{1 + \tau_0 \text{Re} l_f(0)} dz \quad (7)$$

После простых вычислений, имеем:

$$E - E_0 = \frac{\pi}{3} n T^2 \left. \frac{dv(\epsilon)}{d\epsilon} \right|_{\epsilon = \epsilon_f} \quad (8)$$

Следовательно, вклад в теплоемкость кристалла будет:

$$\Delta C = \frac{2}{3} \pi \tau_0 T \frac{\frac{d}{d\epsilon} \left| \text{Im} l_f(0) \right| + \tau_0 \frac{d}{d\epsilon} \left| \text{Im} l_f(0) \right| \text{Re} l_f(0) - \frac{d}{d\epsilon} \text{Re} l_f(0) \text{Im} l_f(0)}{\left| \tau_0 \text{Im} l_f(0) \right|^2 + \left| 1 + \tau_0 \text{Re} l_f(0) \right|^2}. \quad (9)$$

Очевидно, что к выражению (9) должен быть прибавлен член ($\sim T^3$), соответствующий вкладу бозевских ветвей возбуждений в теплоемкость кристалла (2). Это ограничивает применимость полученной формулы областью предельно низких температур:

$$T^3 \ll \frac{N_f T_f^3}{n T}, \quad T \ll T_f$$

где T_f — температура фермиевского вырождения, N_f — число дефектонов (выражаемое объемом поверхности ферми), T_0 — температура, определяемая граничной частотой фононных возбуждений. Зависимость

