

где N — число элементарных ячеек, V — объём тела, ν — число частиц в элементарной ячейке.

Д. т. характеризует мн. свойства твёрдых тел: теплоёмкость, тепло- и электропроводность, упругие свойства, уширение линии рентг. спектров и т. п. Д. т. является характерным масштабом, разделяющим область высоких темп-р ($T \gg \theta_D$), в к-рой колебания кристаллич. решётки можно описывать классич. теорией и где, в частности, справедлив Дюлонга и Пти закон, и область низких темп-р ($T \ll \theta_D$), где становятся существенными квантовомехан. эффекты.

Д. т. обычно находят путём подгонки наблюдаемых значений уд. теплоёмкости к ф-ле, даваемой теорией Дебая, в точке, где величина теплоёмкости составляет половину от значения, соответствующего закону Дюлонга и Пти. Полученные таким путём значения Д. т. для нек-рых элементов приведены в табл. 1.

Т а б л. 1. — Температура Дебая для разных веществ

Элемент	θ_D , К	Элемент	θ_D , К	Элемент	θ_D , К	Элемент	θ_D , К
Li	400	Sn	260	In	129	Pd	275
Na	150	(серое)	260	Tl	96	Cd	120
K	100	(белое)	170	C (алмаз)	1860	Hg	100
Be	1080	As	285	Si	625	Cf	460
Mg	318	Bi	120	Ge	360	Mo	380
Ca	230	Ag	85	W	310	Pt	230
B	1250	Cu	315	Fe	420	La	132
Al	394	Ag	215	Co	385	Gd	152
Ga	240	Au	170	Ni	375	Pr	74
		Zn	234				

Для сложных кристаллич. решёток вводят т. н. характеристич. Д. т., к-рая подбирается так, чтобы соответствующие ф-лы правильно описывали наблюдаемые температурные зависимости, напр. теплоёмкости. При этом характеристич. Д. т. сама является ф-цией темп-ры. Эксперим. или теоретич. данные по теплоёмкости представляются в виде графика $\theta_D(C_V)$ от T . Значение характеристич. Д. т. при $T=0$ можно вычислить теоретически, зная упругие постоянные решётки. Сравнение Д. т., полученных по измерению C_V и вычисленных из упругих постоянных (табл. 2), позволяет получить информацию об особенностях межатомных связей и динамич. свойствах решётки кристалла.

Т а б л. 2. — Значения характеристической температуры Дебая при $T=0$ К

Вещество	$\theta_D(C_V)$, К	θ_D (упр.), К	Вещество	$\theta_D(C_V)$, К	θ_D (упр.), К
Cu	345,2	344,4	Mg	404,6	385,8
Ag	226,0	226,4	Zn	305,5	328
Au	164,7	161,1	Ge	374,0	—
LiF	740,0	734,1	Si	674,8	—

Лит.: Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, ч. 1, 3 изд., М., 1976; Займан Д. Ж., Принципы теории твёрдого тела, пер. с англ., М., 1974; Ашкрофт Н., Мермин Н., Физика твёрдого тела, пер. с англ., т. 2, М., 1979. В. М. Винокур, Э. М. Эпштейн.

ДЕБАЯ ТЕОРИЯ твёрдого тела — теория, описывающая колебания кристаллич. решётки и обусловленные ими термодинамич. свойства твёрдого тела; предложена П. Дебаем в 1912 в связи с задачей о теплоёмкости кристалла. Д. т. основана на упрощённом представлении твёрдого тела как изотропной упругой среды, атомы к-рой совершают колебания в конечном диапазоне частот.

Кристаллич. решётка, состоящая из N элементарных ячеек по ν атомов в каждой, имеет $3N\nu-6 \approx 3N\nu$ колебат. степеней свободы. С механич. точки зрения, такую систему можно описывать как совокупность $3N\nu$ независимых осцилляторов, каждый из к-рых со-

ответствует отд. нормальному колебанию системы (см. Колебания кристаллической решётки). Вычисление статистической суммы и, следовательно, термодинамич. ф-ций такой системы в общем виде невозможно, т. к. результат существенно зависит от конкретного распределения частот по спектру колебаний твёрдого тела, т. е. от плотности колебат. состояний $g(\omega)$, где ω — частота колебаний. Однако в предельном случае низких темп-р задача упрощается, т. к. возбуждаются только колебания низких частот ($\omega \sim kT/\hbar$, T — абс. темп-ра). Они представляют собой звуковые волны с линейным законом дисперсии: $\omega = c_l k$ для продольных и $\omega = c_t k$ для поперечных волн (c_l и c_t — продольная и поперечная скорости распространения волн, k — волновое число). Т. о., при низких темп-рах дискретная структура кристаллич. решётки не проявляется. Плотность колебат. состояний, т. е. число собственных колебаний в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$ в спектре звуковых волн, равна:

$$g(\omega) d\omega = V \frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3}, \quad (1)$$

где V — объём тела, \bar{c} — усредненная скорость звука, к-рая для изотропного тела определяется соотношением:

$$\frac{3}{\bar{c}^3} = \frac{2}{c_l^3} + \frac{1}{c_t^3}. \quad (2)$$

В случае анизотропных кристаллов закон усреднения изменяется, он требует решения задачи теории упругости о распространении звука в кристалле данной симметрии. Зависимость же плотности g от частоты (1) сохраняется.

В предельном случае высоких темп-р ($T \gg \hbar \bar{c}/a$, где a — постоянная решётки) возбуждены все $3N\nu$ колебат. степеней свободы и на каждую приходится энергия kT (закон равномерного распределения). В обоих предельных случаях статистич. сумма и термодинамич. ф-ции кристаллич. решётки могут быть вычислены.

Д. т. представляет собой интерполяцию между этими предельными случаями. Она предполагает, что для всех $3N\nu$ нормальных колебаний имеет место линейный закон дисперсии и плотность колебат. состояний описывается ф-лой (1), что в действительности справедливо лишь для малых частот. Спектр колебаний начинается от $\omega=0$ и обрывается на т. н. частоте Дебая ω_D , к-рая определяется условием равенства полного числа колебаний числу степеней свободы $3N\nu$:

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 c^3} \int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega = \frac{V\omega_D^3}{2\pi^2 c^3} = 3N\nu,$$

откуда

$$\omega_D = c \left(\frac{6\pi^2 N\nu}{V} \right)^{1/3}. \quad (3)$$

Плотность колебат. состояний в Д. т. можно записать в виде:

$$g(\omega) = \begin{cases} 9N\nu \omega^2 / \omega_D^3, & \omega \leq \omega_D \\ 0, & \omega > \omega_D \end{cases} \quad (4)$$

Все термодинамич. ф-ции в Д. т. могут быть выражены через т. н. ф-цию Дебая:

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{z^3 dz}{e^z - 1}. \quad (5)$$

Свободная энергия F , энтропия S , внутр. энергия \mathcal{E} и теплоёмкость при пост. объёме C_V определяются ф-лами:

$$F = N\mathcal{E}_0 + N\bar{\nu} k T \{ 3 \ln [1 - \exp(-\theta_D/T)] - D(\theta_D/T) \}, \quad (6)$$

$$S = 4N\bar{\nu} k D(\theta_D/T) - 3N\bar{\nu} k \ln [1 - \exp(-\theta_D/T)], \quad (7)$$

$$\mathcal{E} = N\mathcal{E}_0 + 3N\bar{\nu} k T D(\theta_D/T), \quad (8)$$

$$C_V = 3N\bar{\nu} k [D(\theta_D/T) - (\theta_D/T) D'(\theta_D/T)], \quad (9)$$