

где \mathcal{E}_0 — энергия нулевых колебаний атома в решётке, $\theta_D = \hbar \omega_D / k$, θ_D — Дебая температура, выше k -рой возбуждены все моды кристалла, а ниже k -рой некоторые моды начинают «вымерзать».

Согласно Д. т., теплоёмкость твёрдого тела есть ф-ция отношения θ_D / T . В предельных случаях высоких темп-р ($T \gg \theta_D$) и низких темп-р ($T \ll \theta_D$) из ф-лы (9) получаются соответственно Дюлонга и Пти закон и Дебая закон теплоёмкости:

$$C_V = \frac{12}{5} \pi^4 N \nu k (T / \theta_D)^3 = \frac{2}{5} \pi^2 k V (k T / \hbar^2 c)^3. \quad (10)$$

Критерием применимости предельных законов для теплоёмкости является соотношение между T и $\theta_D / 4$; теплоёмкость можно считать постоянной при $T \gg \theta_D / 4$ и пропорциональной T^3 при $T \ll \theta_D / 4$ (рис.).

Д. т. хорошо передаёт температурную зависимость термодинамич. ф-ций, в частности теплоёмкости, лишь для тел с простыми кристаллич. решётками, т. е. для большинства элементов и ряда простых соединений, напр. галоидных солей. К телам с более сложной структурой она фактически неприменима из-за сложности спектра колебаний решётки. Так, у сильно анизотропных кристаллов, в частности у слоистых (квазидвумерных) и цепочечных (квазиодномерных) структур, спектр звуковых колебаний характеризуется не одной, а несколькими темп-рами. Закон T^3 для теплоёмкости имеет место лишь при темп-рах, малых по сравнению с наименьшей из дебаевских темп-р, в промежуточных областях возникают новые предельные законы. Термодинамич. ф-ции таких кристаллов помимо отношения θ_D / T зависят также от параметра, характеризующего относит. величину энергии связи между слоями (цепочками) атомов по сравнению с энергией связи между атомами в одном слое (цепочке).

При рассмотрении решётки с полватомным базисом (больше 1 атома в узле) существенны оптич. колебания, частота k -рых слабо зависит от k , и поэтому здесь лучше применима теория теплоёмкости Эйнштейна, в k -рой всем колебаниям приписывается одна и та же частота ω_3 . При этом теплоёмкость кристалла

$$C_V = 3 N k \frac{(\theta_3 / T)^3 e^{\theta_3 / T}}{e^{\theta_3 / T} - 1}, \quad (14)$$

где θ_3 — темп-ра Эйнштейна, определяемая равенством:

$$k \theta_3 = \hbar \omega_3. \quad (12)$$

При темп-ре $T \gg \theta_3$ каждая оптич. мода даёт пост. вклад k / V в уд. теплоёмкость в соответствии с законом Дюлонга и Пти. При $T \ll \theta_3$ этот вклад экспоненциально падает.

Лит.: Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, ч. 1, 3 изд., М., 1976; Дебае Р., Zur Theorie der physikalischen Wärmen, «Ann. Phys.», 1912, Bd 30, S. 789.

Э. М. Энштейн.

ДЕБАЯ — УОЛЛЕРА ФАКТОР (иногда Дебая — Валле́ра) — безразмерный коэффициент W , характеризующий влияние колебаний кристаллической решётки (фононов) на процессы рассеяния или излучения в кристалле без отдачи. Д. — У. ф. определяет температурную зависимость вероятности процессов, при k -рых импульс передаётся кристаллу как целому без изменения состояния системы фононов: упругого когерентного рассеяния рентг. лучей, γ -квантов и нейтронов в кристалле (брэгговское рассеяние), а также резонансного испускания и поглощения γ -квантов (Мёссбауэра эффект). Наличие тепловых колебаний кристаллич. решётки уменьшает интенсивности этих процессов:

$$I = I_0 \exp(-W), \quad (1)$$

где I_0 — интенсивность рассеяния на жёсткой решётке, $\exp(-W)$ — Д. — У. ф., k -рый определяется усреднённым матричным элементом:

$$\exp(-W) = | \langle \Phi_i | \exp(i P u_n / \hbar) | \Phi_i^* \rangle |^2. \quad (2)$$

Здесь u_n — смещение n -го атома относительно положения равновесия, P — импульс, передаваемый кристаллу (изменение импульса частиц при брэгговском рассеянии или импульс излучаемого γ -кванта), волновая ф-ция Φ_i описывает фононное состояние кристалла (* означает комплексное сопряжение), а черта над матричным элементом означает усреднение по всем возможным фононным состояниям при заданной темп-ре. При малых смещениях атомов из положения равновесия выражение (2) упрощается; W оказывается пропорц. ср. квадрату смещения атомов. Так, для одноатомного кубич. кристалла:

$$W \approx \overline{u_n^2} P^2 / 3 \hbar^2. \quad (2)$$

Д. — У. ф. экспоненциально зависит от темп-ры T и, подобно др. термодинамич. ф-циям кристалла (напр., теплоёмкости), задаваемым состоянием фононной системы, является интегральной характеристикой фононного спектра и может быть выражен через плотность фононных состояний $g(\omega)$ (ω — частота). Для одноатомного кубич. кристалла:

$$W \approx \frac{P^2}{2 M \hbar} \int g(\omega) / \omega c \hbar (\hbar \omega / 2 k T) d\omega, \quad (2)$$

где M — масса атомов, образующих кристалл. В предельном случае низких или высоких темп-р (по сравнению с Дебая температурой θ_D) Д. — У. ф. с хорошей точностью вычисляется в соответствии с Дебая теорией твёрдого тела. При этом для кубич. кристалла при высоких темп-рах $T \gg \theta_D$ (в пренебрежении различием трёх скоростей звука): $W \sim (3/2) (P^2 T / M k \theta_D^2)$. Предельное значение $W \sim (3/8) (P^2 / M k \theta_D)$ → при $T \ll \theta_D$ определяется нулевыми колебаниями решётки, причём след. температурная поправка к величине W пропорц. $(T / \theta_D)^2$.

Д. — У. ф. при высоких темп-рах можно оценивать по ф-ле: $W \approx x^2 (T / T_{пл}) (P^2 k \theta_D)$, где $T_{пл}$ — темп-ра плавления кристалла, а безразмерный параметр x определяет, какую долю от размера элементарной ячейки составляет ср. квадрат теплового смещения атомов в точке плавления; для большинства твёрдых тел $x \sim 0,2 - 0,25$.

При описании эффекта Мёссбауэра величину, аналогичную Д. — У. ф., часто наз. фактором Лэмба — Мёссбауэра.

Лит.: Марадудин А. А., Монролл Э., Вейсс Дж., Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, пер. с англ., М., 1965; Киттель Ч., Квантовая теория твёрдых тел, пер. с англ., М., 1967; Харрисон У., Теория твёрдого тела, пер. с англ., М., 1972; Займан Д. Ж., Принципы теории твёрдого тела, пер. с англ., М., 1974; Анималу А., Квантовая теория кристаллических твёрдых тел, пер. с англ., М., 1981.

А. Э. Мейерович.

ДЕБАЯ — ШЕРРЕРА МЕТОД (метод поликристалла, метод порошка) — метод исследования мелкокристаллич. (поликристаллич.) материалов с помощью дифракции рентгеновских лучей.

Коллимированный пучок монохроматич. рентг. излучения [обычно K -серия характеристич. рентг. излучения (см. Рентгеновские спектры)] падает на поликристаллич. образец малого объёма (рис. 1). Дифрагированное излучение распространяется вдоль образующих соосных конусов, вершины k -рых расположены в образце, а ось совпадает с направлением первичного пучка (см. Дебаеграмма). Дифрагированное излучение регистрируется на рентг. фотоплёнке или ионизац. методом (в последнем случае дебаеграмма наз. дифрактограммой). Дифракц. линия (линия пересечения дифракц. конуса с фотоплёнкой) возникает при отражении излучения от одной из систем атомных плоскостей. Кассеты для фотоплёнки могут быть цилиндрическими с осью, перпендикулярной первичному пучку (совместно де-

