

# Võnkumised kolmemõõtmelistes kristallides.

Ettekanne aines “Tahke keha füüsika”

Indrek Mandre <indrek@mare.ee>

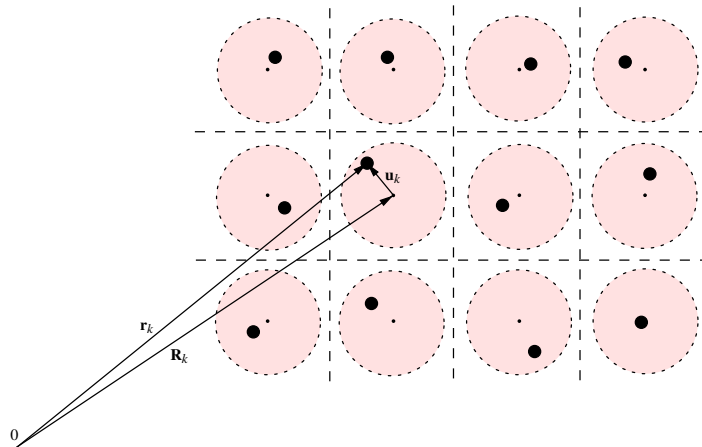
11. märts, 2009

## Kokkuvõte

Baasvektor. Liikumisvõrrand. Harmooniline lähendus. Perioodilised rajatingimused. Lainevektor. Dünaamiline maatriks. Omavektorid ja omaväärtused (sagedused). Polarisatsioonivektorid. Võnkumiste tihedusfunktsioon.

Kasutatud materjalid: Neil. W. Ashcroft ja N. David Mermin, “Solid State Physics”; Yuri M. Galperin, “Introduction to Modern Solid State Physics”; James D. Patterson, Bernard C. Bailey, “Solid-State Physics: Introduction to the Theory”.

## 1 Kristallvõre mudel



Joonis 1: Iooni asukoht  $\mathbf{r}_k = \mathbf{R}_k + \mathbf{u}_k$ .

Me teeme kaks eeldust:

1. Iga iooni keskmistatud asukoht on Bravais'i võre sõlmes. Ioon ise siis võngub selle asukoha ümbruses.

2. Ioonid ei liigu antud võre sõlmest kuigi kaugemale võrreldes ionide vahelise kaugusega.

See tähendab, et ioonid ei saa püsivalt muuta oma asukohta, puudub ionide difusioon. Teine eeldus võimaldab meil kasutada matemaatilist meetodit - harmoonilist lähendust. Lisaks vaatame lihtsustatud mudelit, kus meil on Bravais'i võre - ainult üks aatom iga primitiivse raku kohta.

Olgu iooni  $k$  keskmine asukoht määratud vektoriga  $\mathbf{R}_k$  läbi **baasivektorite**:

$$\mathbf{R}_k = R_k^x \mathbf{a}_1 + R_k^y \mathbf{a}_2 + R_k^z \mathbf{a}_3, \text{ kus } R_k^{\mu} \in \mathbb{Z}.$$

Olgu selle iooni asukoht konkreetsel ajahetkel aga kohal  $\mathbf{r}_k$ :

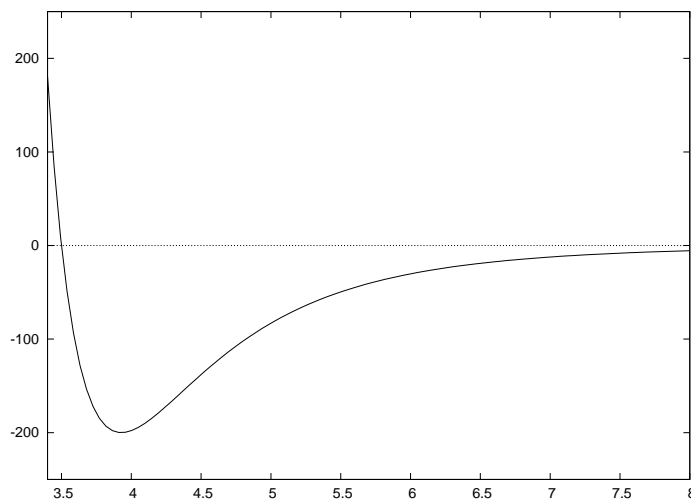
$$\mathbf{r}_k = \mathbf{R}_k + \mathbf{u}_k$$

ehk siis keskmisele asukohale tuleb juurde nihe  $\mathbf{u}_k$  (joonis 1).

## 2 Harmooniline lähendus

Meid huvitab võres olevate aatomite potentsiaalne energia. Näiteks kahe aatomi vaheline potentsiaalne energia võib olla antud kasutades mingit funktsiooni  $\phi(\mathbf{r})$ , nagu Lennard-Jonesi potentsiaal (joonis 2):

$$\phi(\mathbf{r}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right].$$



Joonis 2: Lennard-Jonesi potentsiaal.

Olgu meile siis antud funktsioon  $U$ , mis arvutab kogu võre potentsiaalse energia. See funktsioon sõltub kõikide võre aatomite positsioonidest ehk kui meil on vektor

$$\mathbf{r} = (r_1^x, r_1^y, r_1^z, r_2^x, r_2^y, r_2^z, \dots),$$

siis

$$U = U(\mathbf{r}) = U(r_1^x, r_1^y, r_1^z, r_2^x, r_2^y, r_2^z, \dots).$$

Tähistame sarnaselt aatomite positsioonid tasakaaluolekus kasutades vektorit  $\mathbf{R}$  ja aatomite nihke tasakaaluolekust eemale kui  $\mathbf{u}$ . Sellisel juhul

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= \mathbf{R} + \mathbf{u}; \\ U(\mathbf{r}) &= U(\mathbf{R} + \mathbf{u}).\end{aligned}$$

Funktsiooni  $f$  Taylori arendus konkreetse vektori  $\mathbf{r}$  naabruses on:

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = f(\mathbf{r}) + \mathbf{a} \cdot \nabla f(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^2 f(\mathbf{r}) + \frac{1}{3!} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^3 f(\mathbf{r}) + \dots$$

Rakendame seda  $U$  peal võttes  $\mathbf{r} = \mathbf{R}$  ja  $\mathbf{a} = \mathbf{u}$  aga jättes alles ainult kolm esimest liiget:

$$\begin{aligned}U(\mathbf{R} + \mathbf{u}) &= U(\mathbf{R}) + \mathbf{u} \cdot \nabla U(\mathbf{R}) + \frac{1}{2} (\mathbf{u} \cdot \nabla)^2 U(\mathbf{R}) \\ &= U_0 + \sum_i \sum_{\mu=x}^z u_i^\mu \left. \frac{\partial U}{\partial u_i^\mu} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}} + \frac{1}{2} \left( \sum_i \sum_{\mu=x}^z u_i^\mu \frac{\partial}{\partial u_i^\mu} \right)^2 U(\mathbf{R}) \\ &= U_0 + \sum_i \sum_{\mu=x}^z u_i^\mu \left. \frac{\partial U}{\partial u_i^\mu} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \sum_{\mu=x}^z \sum_{\nu=x}^z u_i^\mu u_j^\nu \left. \frac{\partial^2 U}{\partial u_i^\mu \partial u_j^\nu} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}}.\end{aligned}$$

Arv  $U_0$  on võre potentsiaalne energia tasakaaluolekus. Kasutades eeldust, et vektor  $\mathbf{R}$  on aatomite tasakaaluolek, peab esimene tuletis funktsioonist  $U$  kohal  $\mathbf{R}$  olema 0 - tasakaaluolekus ei saa osakesele mõjuda mingid jõud. Teisisõnu osake peab tasakaaluolekus asuma potentsiaaliaugu põhjas (nagu kujutatud näiteks joonisel 2) ja seega

$$\left. \frac{\partial U}{\partial u_i^\mu} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}} = 0.$$

Lisaks tähistame arvu  $D_{ij}^{\mu\nu}$

$$D_{ij}^{\mu\nu} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial u_i^\mu \partial u_j^\nu} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}}.$$

Järgi jääb valem, mida nimetatakse potentsiaali harmooniliseks lähenduseks:

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{ij\mu\nu} u_i^\mu D_{ij}^{\mu\nu} u_j^\nu.$$

Tähistades  $\mathbf{u}_k = (u_k^x, u_k^y, u_k^z)$  ning maatriksi

$$\mathbf{D}_{ij} = \begin{pmatrix} D_{ij}^{xx} & D_{ij}^{xy} & D_{ij}^{xz} \\ D_{ij}^{yx} & D_{ij}^{yy} & D_{ij}^{yz} \\ D_{ij}^{zx} & D_{ij}^{zy} & D_{ij}^{zz} \end{pmatrix}$$

saame potentsiaalse energia ümber kirjutada maatrikskuul

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathbf{u}_i \mathbf{D}_{ij} \mathbf{u}_j.$$

Sellel valemil on huvitav omadus - kaks nihkes aatomit lisavad potentsiaalset energiat ainult omavahelisest interaktsioonist - kordajad  $\mathbf{D}_{ij}$  ei sõltu teiste aatomite liikumisest. Mõned jõud võivad näiteks oma iseloomu muuta kolmanda aatomi sekkumisel nende interaktsiooni - samas meie harmooniline lähendus ei võimalda sellist füüsikalist süsteemi kirjeldada.

Kordajaid  $D_{ij}^{\mu\nu}$  ja  $\mathbf{D}_{ij}$  iseloomustavad järgmised omadused:

1. On selge, et kui aatomite võre on lõpmatu (või väga suur) ja homogeenne - omades igal pool sama struktuuri, siis kahe nihkes aatomi poolt lisatud potentsiaalne energia ei sõltu nende absoluutsest positsioonist, vaid nende suhtelisest positsioonist. Seega

$$\begin{aligned} D_{ij}^{\mu\nu} &= D_{\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j}^{\mu\nu}; \\ \mathbf{D}_{ij} &= \mathbf{D}_{\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j}. \end{aligned}$$

kus  $\mathbf{R}_k = (R_k^x, R_k^y, R_k^z)^T$ .

2. Vahetades kordajate argumentide järjekorra, saame sama väärtusega kordaja:

$$D_{ij}^{\mu\nu} = D_{ji}^{\nu\mu}.$$

See on selge  $D_{ij}^{\mu\nu}$  definitsioonist kahekordse osatuletisena:

$$D_{ij}^{\mu\nu} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial u_i^\mu \partial u_j^\nu} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial u_j^\nu \partial u_i^\mu} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}} = D_{ji}^{\nu\mu}$$

Ehk siis tuletiste järjekorda saab muuta (me eeldame, et  $U$  võimaldab seda).

3. Kehtib

$$D_{ij}^{\mu\nu} = D_{ji}^{\nu\mu} \quad \text{ehk} \quad \mathbf{D}_{ij} = \mathbf{D}_{ji}.$$

4. Kehtib

$$\sum_{ij} D_{ij}^{\mu\nu} = 0 \quad \text{ehk} \quad \sum_{ij} \mathbf{D}_{ij} = 0.$$

Juhul kui igale aatomile antakse fikseeritud nihe  $d^\mu$ , see tähendab iga  $\mathbf{u}_k \equiv (d^x, d^y, d^z)$ , siis ei tohiks võre potentsiaalne energia muutuda - aatomite omavaheline suhteline kaugus pole ju muutunud. Ehk siis

$$\sum_{ij\mu\nu} u_i^\mu D_{ij}^{\mu\nu} u_j^\nu = \sum_{ij\mu\nu} d^\mu d^\nu D_{ij}^{\mu\nu} = \sum_{\mu\nu} d^\mu d^\nu \left( \sum_{ij} D_{ij}^{\mu\nu} \right) = 0.$$

Et see saaks kehtida, peab  $\sum_{ij} D_{ij}^{\mu\nu} = 0$ .

5. Lõpmatu suure võre korral kehtib iga funktsiooni  $f$  korral järgmine võrdus:

$$\sum_i f(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k) = \sum_i f(\mathbf{R}_i).$$

### 3 Liikumisvõrrandid

Kui meil on olemas valem potentsiaalsele energiale, saame tuletada liikumisvõrrandid (Newtoni teine seadus,  $F = ma$ ). Kui meile on antud Hamiltoniaan

$$\mathcal{H} = T + U = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2M} + U_0 + \frac{1}{2} \sum_{ij\mu\nu} u_i^\mu D_{ij}^{\mu\nu} u_j^\nu,$$

siis

$$p_k^\mu = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u_k^\mu}.$$

Kuna  $p_k^\mu = Mv_k^\mu = M\dot{u}_k^\mu$ , siis igale nihkevektori komponendile tuleb:

$$M\ddot{u}_k^x = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u_k^x} = -\sum_{i\nu} D_{ik}^{x\nu} u_i^\nu$$

$$M\ddot{u}_k^y = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u_k^y} = -\sum_{i\nu} D_{ik}^{y\nu} u_i^\nu$$

$$M\ddot{u}_k^z = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u_k^z} = -\sum_{i\nu} D_{ik}^{z\nu} u_i^\nu$$

$M$  on siin aatomi mass. Maatrikskujul oleks see

$$M\ddot{\mathbf{u}}_k = -\sum_i \mathbf{D}_{ik} \mathbf{u}_i. \quad (1)$$

Võrrandid moodustavad süsteemi - kui meil on  $N$  aatomit, saame  $3N$  võrrandit.

Me otsime lahendit kujul

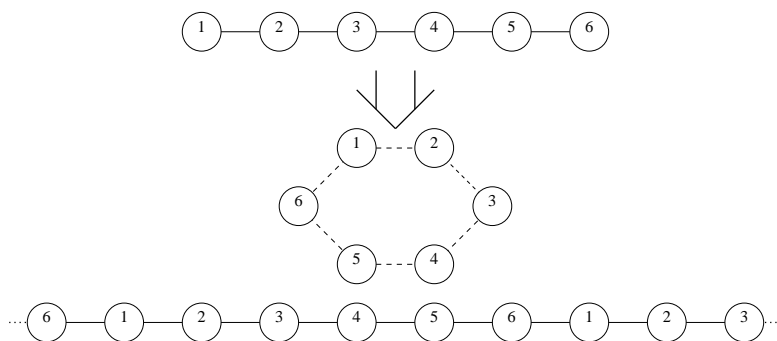
$$\mathbf{u}_k = \epsilon e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_k - \omega t)}. \quad (2)$$

Siin  $\epsilon$  on polarisatsioonivektor ja näitab sihti, milles aatom võngub.  $\mathbf{k}$  on lainevektor, mis kirjeldab laine levimise suunda.

### 4 Perioodilised rajatingimused ja lainevektor

Et leida vastavad võnkumiste näitajad, ei ole praktiline arvutada üle lõpmatu suurusega võre; parem on arvutada kasutades lõpliku arvu aatomitega võret aga tuues lõpmatuse sisse kasutades ühte väikest matemaatilist trikki, mille abil saame lõpliku arvu matemaatilisi suurusi.

Jaotades aatomid risttahukasse (või struktuuri, mille saame  $N_1 \times N_2 \times N_3$  primitiivse raku kordamisega), siis Bravais'i võre aatomite arv oleks  $N = N_1 N_2 N_3$ . Äärtes olevad aatomid samas komplitseerivad meie arvutusi. Et sellest üle saada, rakendame Born-von Karmani perioodilist rajatingimust, kus ühe külje ääres asuvad aatomid asuvad virtuaalselt aatomite kõrval, mis asuvad vastasküljel. Antud rajatingimust on lihtne visualiseerida ühedimensionaalse struktuuri juures (joonis 3).



Joonis 3: Ühedimensionaalse perioodilise rajatingimuse saamine. Iga aatomi kummalgi küljel (vasakul ja paremal) on siin korduseta viis aatomit (liikudes aatomist aina kaugemale), edasi liikudes hakkavad aatomid perioodiliselt korduma; samas matemaatiliselt kirjeldame kokku ainult kuut aatomit.

Matemaatiliselt saab perioodi kordumist väljendada järgnevalt. Olgu  $\mathbf{u}(\mathbf{R})$  nihe seotud aatomiga asukohal  $\mathbf{R}$ . Siis peab kehtima

$$\mathbf{u}(\mathbf{R} + N_i \mathbf{a}_i) = \mathbf{u}(\mathbf{R})$$

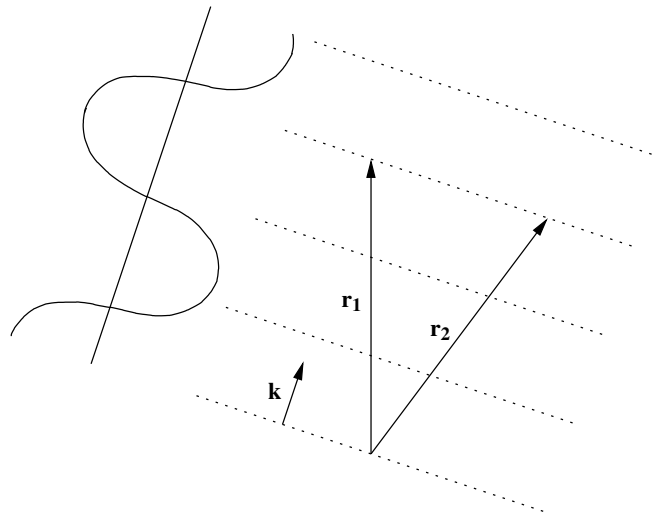
kus  $\mathbf{a}_i$  on baasvektor ja  $N_i$  on vastavas suunas liikudes unikaalsete võre rakkude arv. Ehk siis nihe kordub perioodiliselt liikudes läbi struktuuri - kohatud aatom võngub täpselt sama moodi iga  $N_i$  aatomi tagant.

**Lainevektor**  $\mathbf{k}$  kirjeldab tasalaine liikumist ruumis. Tema suund näitab laine liikumise suunda ja vektori pikkus on lainearv, ehk siis

$$|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda},$$

kus  $\lambda$  on lainepikkus. Lainevektorit kasutatakse ruumi igas punktis  $\mathbf{r}$  laine kirjeldamiseks järgnevalt:

$$\psi(t, \mathbf{r}) = A \cos(\varphi + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t).$$



Joonis 4: Laine levib lainevektori  $\mathbf{k}$  suunas; punktiiriga on tähistatud erinevad lainefrondid; vasakul on näha laine intensiivsus (faas) erinevate lainefrontide kohal.

Proovime visualiseerida antud lainet kahedimensionaalses ruumis ( $\mathbf{k} = (x, y)$ ) joonisel 4. Kuna  $\mathbf{r}_1$  ja  $\mathbf{r}_2$  asuvad samas lainefrondis, siis

$$\Psi(t, \mathbf{r}_1) = \Psi(t, \mathbf{r}_2).$$

Perioodilised rajatingimused seavad piirangud võimalikele lainevektoritele. Kuna  $\mathbf{u}(\mathbf{R} + N_i \mathbf{a}_i) = \mathbf{u}(\mathbf{R})$ , siis peab ka

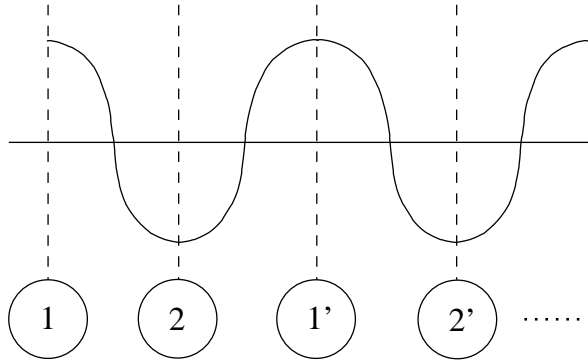
$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + N_i \mathbf{a}_i)}.$$

Miks see nii olema peab, võib veenduda ka jooniselt 5: punktis 1 ja 1' peab laine faas sama olema. Seda tingimust rahuldavad ainult lainevektorid kujul

$$\mathbf{k} = \frac{n_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{n_3}{N_3} \mathbf{b}_3 \quad (n_i \in \mathbb{Z}),$$

kus  $\mathbf{b}_i$  on pöördvõre baasivektorid, mis rahuldavad tingimust  $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$ . Näiteks:

$$e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + N_2 \mathbf{a}_2)} = e^{i(\frac{n_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{n_3}{N_3} \mathbf{b}_3) \cdot (\mathbf{R} + N_2 \mathbf{a}_2)} = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} + n_2 2\pi)} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}.$$



Joonis 5: Perioodilise rajatingimuse korral peab laine faas perioodi kordumisel sama olema.

Lisaks annab see lainevektor unikaalseid lahendeid ainult mingi ühe kindla pöördvõre raku sees, sest kui  $\mathbf{k}' = \mathbf{K} + \mathbf{k}$ , kus  $\mathbf{K} = l_1 \mathbf{b}_1 + l_2 \mathbf{b}_2 + l_3 \mathbf{b}_3$  (nihe ühest pöördvõre rakust mingisse teise) ja  $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ , siis

$$e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}} = e^{i(l_1 \mathbf{b}_1 + l_2 \mathbf{b}_2 + l_3 \mathbf{b}_3 + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}} = e^{i l_1 \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{R}} e^{i l_2 \mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{R}} e^{i l_3 \mathbf{b}_3 \cdot \mathbf{R}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = e^{i l_1 n_1 2\pi} e^{i l_2 n_2 2\pi} e^{i l_3 n_3 2\pi} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}.$$

## 5 Liikumisvõrrandi lahendid

Asendame nüüd valemi (2) valemisse (1):

$$\begin{aligned} M\epsilon(-i\omega)^2 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_k - \omega t)} &= -\sum_j \mathbf{D}_{jk} \epsilon e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j - \omega t)} \\ M\omega^2 \epsilon e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_k} &= \sum_j \mathbf{D}_{jk} \epsilon e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \\ M\omega^2 \epsilon &= \left( \sum_j \mathbf{D}_{\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} \right) \epsilon \\ M\omega^2 \epsilon &= \left( \sum_j \mathbf{D}_{\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \right) \epsilon \\ M\omega^2 \epsilon &= \mathbf{D}(\mathbf{k}) \epsilon. \end{aligned} \tag{3}$$

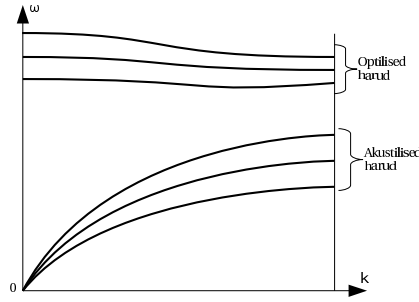
Maatriksit

$$\mathbf{D}(\mathbf{k}) = \sum_j \mathbf{D}_{\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j}$$

nimetatakse dünaamiliseks maatriksiks. Kuna  $\mathbf{D}_{\mathbf{R}_k} = \mathbf{D}_{-\mathbf{R}_k}$ , siis

$$\mathbf{D}(\mathbf{k}) = \sum_j \mathbf{D}_{\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} = \sum_j \mathbf{D}_{\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j)} = \sum_j \mathbf{D}_{\mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j}.$$





Joonis 6: Dispersioonikõverad.

Edasi saame suuruse  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$  kirjutada järgmiselt:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_j \mathbf{D}_{\mathbf{R}_j} \left[ e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} - 2 \right] \\ &= \sum_j \mathbf{D}_{\mathbf{R}_j} [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) - 1] \\ &= -2 \sum_j \mathbf{D}_{\mathbf{R}_j} \sin^2 \left( \frac{1}{2} \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j \right). \end{aligned}$$

On selge, et  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$  on paarisfunktsioon, ehk  $\mathbf{D}(\mathbf{k}) = \mathbf{D}(-\mathbf{k})$ , ja seega  $\omega_s(\mathbf{k}) = \omega_s(-\mathbf{k})$ . Valem (3) on lihtne omaväärtusülesanne. Võttes

$$\det(\mathbf{D}(\mathbf{k}) - \lambda(\mathbf{k})I) = 0,$$

saame kolm omaväärtust  $\lambda_s(\mathbf{k})$  ja neile vastavad kolm omavektorit  $\epsilon_s$ , mis on polarisatsioonivektorid. Matriks  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$  on reaalarvuline ja sümmeetriline, järelikult on tema omaväärtused reaalarvulised. Aatomite võnkesagedus on seega

$$\omega_s(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\lambda_s(\mathbf{k})}{M}} \quad (s = 1, 2, 3).$$

Ühe aatomiga primitiivse raku korral tekib iga  $\mathbf{k}$  korral kolm nn. akustilist dispersioonikõverat. Kui aatomeid primitiivses rakuks kaks, tekib tavaliselt lisaks kolm nn. optilist dispersioonikõverat (joonis 6). Akustilised sagedused käituvad väikeste  $|\mathbf{k}|$ -de juures lineaarselt.

## 6 Sageduste tihedusspekter

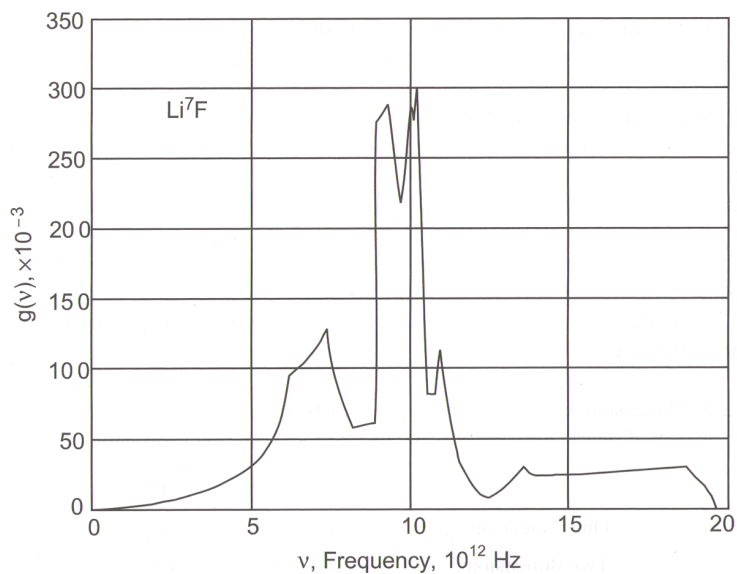
Lainevektor  $\mathbf{k}$  annab unikaalseid sagedusi  $\omega_s = \omega_s(\mathbf{k})$  ainult ühe primitiivse raku ulatuses. Vaadates läbi kõik unikaalseid lahendeid pakkuvad  $\mathbf{k}$ -d huvitab meid, kui suur on mingi kindla sageduse osakaal, või täpsemalt palju  $\mathbf{k}$ -sid ruumiühikus vastab sagedusvahemikule  $\omega + d\omega$ . Tähistame selle kui funktsiooni  $g(\omega)$ , mis on summa integraalidest üle pöördvõre primitiivse raku:

$$g(\omega) = \sum_s \int \frac{\delta(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}.$$

Temperatuur on aatomite liikumine/võnkumine. Antud juhul meie kristallis levivad lained/phononid moodustavad osa temperatuurist või siis aine soojusmahtuvusest. Sageduste tihedusspektrit kasutatakse erisoojusmahtuvuse arvutamiseks:

$$C_{lattice} = k_B \int g(\omega) \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1\right)^2} d\omega.$$

Sageduste tihedusspekter on näha joonisel 7<sup>1</sup>.



Joonis 7:  $Li^7F$  sageduste tihedusspekter temperatuuril  $298\text{ K}$ .

<sup>1</sup>Joonis on pärit raamatust James D. Patterson ja Bernard C. Bailey, "Solid-State Physics".