

Лекція №10

Взаємодія між фононами

На попередніх лекціях розглядалися елементарні збудження кристалу - фонони, що відповідають коливанням атомів, потенціальна енергія яких містила лише члени, квадратичні за зміщеннями атомів із рівноважних положень. У цьому наближенні, яке прийнято називати гармонічним, оператор Гамільтона кристала має вигляд

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, S} \hbar \omega(\mathbf{k}) \left(\hat{b}_{\mathbf{k}, S}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}, S} + \frac{1}{2} \right), \quad (1)$$

де $\hat{b}_{\mathbf{k}, S}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}, S}$ - оператор числа фононів S -ї гілки з хвильовим вектором \mathbf{k} у стані $|\nu_{\mathbf{k}S}\rangle$. Оператор числа фононів $\hat{b}_{\mathbf{k}, S}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}, S}$ комутує з гамільтоніаном (1), тому число фононів у кожному стані є інтегралом руху, тобто зберігається. Отже, у гармонічному наближенні фонони незалежні і не взаємодіють між собою. Така проста картина порушується при врахуванні в розкладанні потенціальної енергії кристала за ступенями зміщень атомів з положень рівноваги кубічних членів і вищого ступеня.

Нагадаємо у зв'язку з цим матеріал попередньої лекції, а саме:

Попарна взаємодія атомів у \mathbf{m} -му й \mathbf{n} вузлі кристалічної ґратки дається наступним виразом для відповідної потенціальної енергії:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{n, m} W(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m),$$

де сума по m і n вираховується за всіма вузлами кристалічної ґратки, $R_{n\alpha}$ - α -а компонента в декартовому просторі радіуса - вектора положення даного вузла. Якщо розглядати малі зміщення \mathbf{r}_n атома в n -му вузлі від його стану рівноваги \mathbf{R}_n^0

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^0 + \mathbf{r}_n, \quad |\mathbf{R}_n^0| \gg |\mathbf{r}_n|,$$

і врахувавши, що

$$W^{(0)} = \frac{1}{2} \sum_{n, m} W(\mathbf{R}_n^0 - \mathbf{R}_m^0)$$

від зміщень не залежить і має фізичний сенс енергії соновного стану, а похідна

$$\left[\frac{\partial W(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)}{\partial R_{na}} \right]_{\substack{\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^0 \\ \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_m^0}} = 0,$$

оскільки мова йде про рівноважний стан, прийдемо до наступного виразу для потенціальної енергії кристалу:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{n,m} W(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m) \approx W^{(0)} + U + W^{(3)} + \dots \quad (2)$$

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \alpha; \mathbf{m}, \beta} V_{\alpha\beta}(\mathbf{n} - \mathbf{m}) r_{n\alpha} r_{m\beta}, \quad W^{(3)} = \frac{1}{3!} \sum_{\mathbf{n}, \alpha; \mathbf{m}, \beta} V_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{m} - \mathbf{n}, \mathbf{l} - \mathbf{n}) r_{n\alpha} r_{m\beta} r_{l\gamma}, \quad \dots$$

де компоненти тензорів другого й третього рангів $V_{\alpha\beta}(\mathbf{n} - \mathbf{m})$, визначаються формулами

$$V_{\alpha\beta}(\mathbf{n} - \mathbf{m}) \equiv \left[\frac{\partial^2 W(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)}{\partial R_{n\alpha} \partial R_{m\beta}} \right]_{\substack{\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^0, \\ \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_m^0}}, \quad V_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{m} - \mathbf{n}, \mathbf{l} - \mathbf{n}) = \left[\frac{\partial^3 W(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)}{\partial R_{n\alpha} \partial R_{m\beta} \partial R_{l\gamma}} \right]_{\substack{\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^0, \\ \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_m^0, \\ \mathbf{R}_l = \mathbf{R}_l^0}} \quad (3)$$

Доданки, визначені величиною U називаються гармонічними, а доданки типу $W^{(3)}$ називаються ангармонічними поправками.

Якщо в останньому виразі замінити зсуви $r_{n\alpha}$ операторами $\hat{r}_{n\alpha}$ (матеріал попередньої лекції)

$$\hat{r}_{n\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2mN}} \sum_{\mathbf{k}, S} \frac{e_{\alpha}^{(S)}(\mathbf{k})}{\sqrt{\omega_S(\mathbf{k})}} \hat{\phi}_{\mathbf{k}S} \exp(i\mathbf{n}\mathbf{k}), \quad (4)$$

де

$$\hat{\phi}_{\mathbf{k}S} = \hat{b}_{\mathbf{k},S} + \hat{b}_{-\mathbf{k},S}^+, \quad (5)$$

то отримаємо оператор ангармонічного збурення

$$\hat{W}^{(3)} = \sum V_{SS't}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') \hat{\phi}_{-\mathbf{q}t} \hat{\phi}_{\mathbf{k}S} \hat{\phi}_{\mathbf{k}'S'}, \quad (6)$$

де

$$V_{SS't}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{12} \sqrt{\frac{\hbar^3}{2m^3 N^3}} \sum V_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{n}, \mathbf{l}) e_{\alpha}^{(t)}(-\mathbf{q}) e_{\beta}^{(S)}(\mathbf{k}) e_{\gamma}^{(S')}(\mathbf{k}') \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{n} + \mathbf{k}'\mathbf{l})], \quad (7)$$

і

$$\mathbf{q} = \mathbf{g} + \mathbf{k} + \mathbf{k}'. \quad (8)$$

Вектор \mathbf{g} або дорівнює нулю, або такому вектору зворотної решітки, при якому хвильовий вектор \mathbf{q} залишається в першій зоні Брілюена. Доданки (7), що відповідають значенням \mathbf{q} при $\mathbf{g} \neq 0$, відповідальні за процеси, які дістали назву **процеси перекиду**.

«Ліричний» відступ. Процеси перекиду - процеси зіткнення між квазічастинками в кристалах, при яких закон збереження імпульсу виконується з точністю до вектора оберненої ґратки:

$$\hbar \mathbf{K}_f = \hbar \mathbf{K}_i + \hbar \mathbf{g}$$

де \hbar - зведена стала Планка, \mathbf{K}_i - сумарний початковий хвильовий вектор усіх квазічастинок, \mathbf{K}_f - сумарний кінцевий хвильовий вектор усіх квазічастинок, \mathbf{g} - довільний вектор оберненої ґратки. Процеси перекиду важливі, наприклад, для такого явища, як теплопровідність діелектриків. Завдяки цим процесам квазічастинки можуть розсіюватися при зіткненнях на великі кути.

Є лише чотири типи матричних елементів оператора $\hat{W}^{(3)}$ на функціях від чисел заповнення $|\nu_{\mathbf{k}S}\rangle$. Ними є матричні елементи

$$V_{SS'}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') \sqrt{\nu_{\mathbf{q}'} \nu_{\mathbf{k}S} \nu_{\mathbf{k}'S'}} \langle \nu_{-\mathbf{q}'} - 1, \nu_{\mathbf{k}S} - 1, \nu_{\mathbf{k}'S'} - 1 | \hat{b}_{-\mathbf{q}'} \hat{b}_{\mathbf{k}S} \hat{b}_{\mathbf{k}'S'} | \nu_{-\mathbf{q}'}, \nu_{\mathbf{k}S}, \nu_{\mathbf{k}'S'} \rangle, \quad (9)$$

$$V_{SS'}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') \sqrt{(\nu_{\mathbf{q}'} + 1) \nu_{\mathbf{k}S} \nu_{\mathbf{k}'S'}} \langle \nu_{-\mathbf{q}'} + 1, \nu_{\mathbf{k}S} - 1, \nu_{\mathbf{k}'S'} - 1 | \hat{b}_{-\mathbf{q}'}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}S} \hat{b}_{\mathbf{k}'S'} | \nu_{-\mathbf{q}'}, \nu_{\mathbf{k}S}, \nu_{\mathbf{k}'S'} \rangle \quad (10)$$

та ермітово спряжені їм.

Матричні елементи (9) відповідають процесам знищення трьох фононів. Матричні елементи, їм спряжені, відповідають процесам народження трьох фононів. Усі ці процеси заборонені законом збереження енергії.

Матричні елементи (10) описують процеси злиття двох фононів в один; пов'язані з ними матричні елементи описують процеси розпаду одного фонону на два інших (навести малюнки). Процеси злиття та розпаду можуть відбуватися тільки при виконанні закону збереження енергії

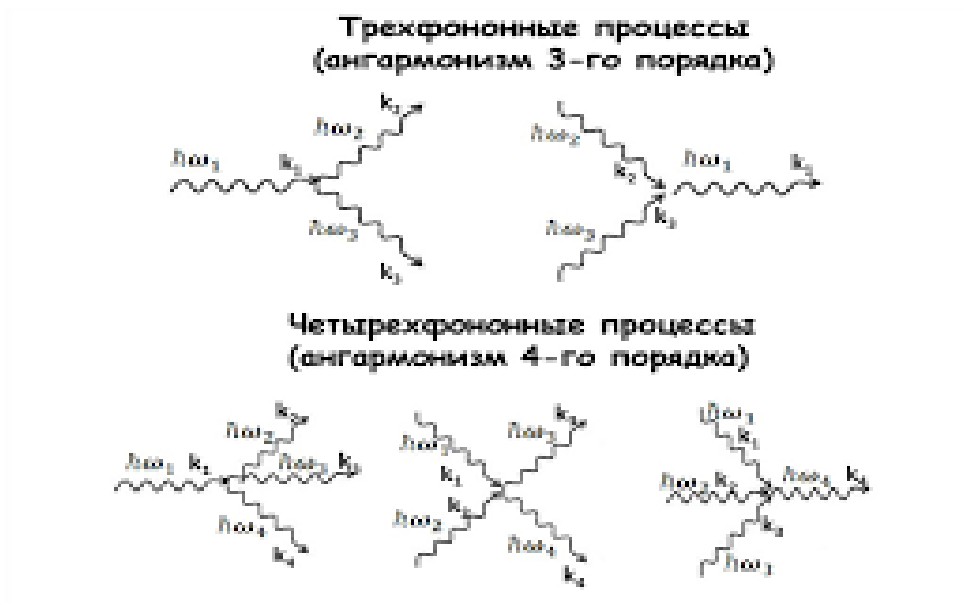
$$\omega_i(\mathbf{q}) = \omega_s(\mathbf{k}) + \omega_{s'}(\mathbf{k}'). \quad (11)$$

Якщо при цьому $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$, то зберігається й квазіімпульс фононів. Якщо ж здійснюється процес перекиду,

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{g},$$

де \mathbf{g} - вектор оберненої ґратки, то квазіімпульс не зберігається.

Таким же чином можна показати, що врахування в потенціальній енергії членів четвертого порядку за зміщенням атомів призводить до чотирифоновних процесів, у яких два фонони розсіюються один на одному, або фонон розпадається на три інших, або три фонони зливаються в один.



Ангармонічні обурення зумовлюють теплове розширення кристалів та встановлення термодинамічної рівноваги серед фононів. Вони відповідальні за появу скінченної теплопровідності твердих тіл. Як уперше показав Пайєрлс, скінченна теплопровідність непровідних кристалів обумовлена процесами перекиду.

Фононна теплоємність твердих тіл.

У кристалі в кожному квантовому стані \mathbf{k}, S може бути збуджена будь-яка кількість $\nu_{\mathbf{k},S}$ фононів. Отже (нами це вже наголошувалося), фонони утворюють «газ» квазічастинок, що підпорядковуються статистиці Бозе. Через взаємодію між фононами, зумовлену ангармонічними ефектами, число фононів у кристалі не зберігається. Вони перерозподіляються за різними квантовими станами таким чином, що настає тепла рівновага, якщо кристал знаходиться за певної температури.

Для обчислення середніх енергій фононів при термодинамічній рівновазі слід нагадати деякі положення статистичної фізики, які у попередніх лекціях розглядалися докладніше.

Стан системи, що знаходиться в термодинамічній рівновазі, описується не хвильовою функцією, а статистичним оператором чи матрицею густини. Матриця густини для системи, що знаходиться при постійній температурі та тиску, визначається виразом

$$w = \exp \frac{\Phi - \hat{H} - \mu \hat{N}}{\Theta}, \quad \Theta = kT, \quad (12)$$

де Θ , як бачимо, є температурою в енергетичних одиницях, \hat{H} - оператор Гамільтона системи, \hat{N} - оператор числа частинок, μ - хімічний потенціал, Φ - термодинамічний потенціал у змінних μ і Θ .

Матриця густини описує системи, які можуть обмінюватися енергією та частинками з навколишнім термостатом, тобто системи, що знаходяться при постійній температурі та тиску P (**великий канонічний ансамбль**). Термодинамічний потенціал визначається із умови нормування матриці густини:

$$Spw = 1, \quad \Phi = -\Theta \ln Sp \left\{ \exp \frac{\mu \hat{N} - \hat{H}}{\Theta} \right\}. \quad (13)$$

Хімічний потенціал системи визначається умовою

$$\mu = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N} \right)_{\Theta, P},$$

де N - загальна кількість частинок у системі.

За допомогою матриці густини, як ми вже відзначали, можна обчислити середнє значення будь-якої фізичної величини A , якщо відомий її оператор \hat{A} :

$$A = Spw \hat{A}.$$

Зокрема, середня кількість частинок \bar{N} у системі визначається виразом

$$\bar{N} = Spw \hat{N}.$$

Якщо число частинок у системі зберігається, то цією рівністю визначається у неявному вигляді хімічний потенціал у термінах N і Θ . Якщо число частинок у системі не зберігається, то рівноважний стан системи визначається умовою мінімуму термодинамічного потенціалу щодо зміни числа частинок

$$\mu = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N} \right)_{\Theta, P} = 0.$$

Таким чином, у рівноважному стані систем із змінним числом частинок (наприклад, у системі фононів) хімічний потенціал дорівнює нулю. У цьому випадку вільна енергія F системи збігається з термодинамічним потенціалом Φ , тому що в загальному випадку

$$F = \Phi + \mu N.$$

Отже, звідси і з (13) випливає:

$$F = -\Theta \ln Sp \left\{ \exp \left(-\frac{\hat{H}}{\Theta} \right) \right\}. \quad (14)$$

Знаючи вільну енергію (14), можна обчислити середнє значення енергії

$$E = F - \Theta \frac{\partial F}{\partial \Theta} = -\Theta^2 \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\frac{F}{\Theta} \right). \quad (15)$$

Як і раніше, у попередніх лекціях, припустимо, що стани частинок у системі характеризуються набором квантових чисел S і оператори енергії \hat{H} та числа частинок \hat{N} надаються виразами

$$\hat{H} = \sum_S \hat{H}_S, \quad \hat{N} = \sum_S \hat{N}_S. \quad (16)$$

У поданні чисел заповнення станів S для частинок Бозе хвильові функції $|\nu_S\rangle$ є власними функціями операторів \hat{H} і \hat{N} , тобто,

$$\hat{H}_S |\nu_S\rangle = E_S |\nu_S\rangle, \quad \hat{N}_S |\nu_S\rangle = \nu_S |\nu_S\rangle.$$

Тому як нами вже робилося,

$$Sp \left\{ \exp \frac{\mu \hat{N}_S - \hat{H}_S}{\Theta} \right\} = \sum_{\nu_S=0}^{\infty} \exp \frac{\nu_S (\mu - E_S)}{\Theta} = \left\{ 1 - \exp \frac{\mu - E_S}{\Theta} \right\}^{-1}.$$

Тоді термодинамічний потенціал Φ_S стану S згідно з (13) набуває вигляду:

$$\Phi_S = \Theta \ln \left\{ 1 - \exp \frac{\mu - E_S}{\Theta} \right\}.$$

Середнє число $\bar{\nu}_S$ частинок у цьому стані

$$\bar{\nu}_S = -\frac{\partial \Phi_S}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\frac{E_S - \mu}{\Theta}} - 1}. \quad (17)$$

Застосуємо отримані співвідношення до фононів у кристалі. Їхні стани характеризуються хвильовим вектором \mathbf{k} і вказівкою гілки коливань α . При цьому, вважаючи, що енергія відраховується від енергії основного стану E_0 , оператори Гамільтона й числа частинок можна записати в вигляді

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}, \alpha} + \hat{W}, \quad \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \hat{b}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}, \alpha}$$

де \hat{W} - оператор ангармонічних поправок. Цей оператор робить малий внесок в енергію фононів, проте він забезпечує встановлення термодинамічної рівноваги в системі і відповідальний за **не збереження** числа фононів. Надалі ми враховуватимемо цей оператор неявно лише тим, що покладемо $\mu = 0$.

Отже, вважаючи в (17) $\mu = 0$, прийдемо до наступних виразів для середнього числа фононів у стані $|\nu_{\mathbf{k},\alpha}\rangle$

$$\bar{V}_{\mathbf{k},\alpha} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})}{\Theta}} - 1}, \quad (18)$$

$$F = \Phi = \sum_{\mathbf{k},\alpha} \Phi_{\mathbf{k},\alpha} = \Theta \sum_{\mathbf{k},\alpha} \ln \left\{ 1 - \exp \frac{\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})}{\Theta} \right\}.$$

Особливо просто може бути обчислена вільна енергія ізотропних кристалів у граничних випадках низьких та високих температур.

Низькі температури.

Припустимо, що температура така, що збуджуються тільки фонони акустичної гілки з енергією, пропорційною хвильовому вектору.

$$\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k}) = \hbar V_{\alpha} k, \quad ak_{\max} \approx 0,1,$$

де V_{α} - швидкість звуку відповідної гілки коливань. По порядку величини $V_{\alpha} \sim 10^5$ см/сек. Якщо $a \sim 10^{-8}$ см, то $\hbar\omega_{\max} = \hbar V_{\alpha} k_{\max} \approx 10^{-15}$ ерг. k_{\max} обчислюється із вимоги $k_{\max} a \sim 1$, де a величина порядку сталої ґратки (границя порушення довгохвильового наближення). Таким чином, поставлені вище умови виконуються, якщо температура кристала менша за 10°K .

За великого числа N елементарних чарунок у кристалі підсумовування \mathbf{k} у формулі (18) може бути замінено інтегруванням

$$\sum_{\mathbf{k},\alpha} \dots = \frac{N\nu}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int_0^{k_{\max}} d^3k \dots = \frac{N\nu}{2\pi^2} \sum_{\alpha} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{d\omega \omega^2}{V_{\alpha}^3} \dots,$$

де $N\nu$ - повний об'єм системи, ν - об'єм елементарної комірки кристалу, N - число таких комірок у кристалі.

Якщо ввести далі позначення

$$\bar{V}^{-3} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} V_{\alpha}^{-3},$$

вираз для F можна записати в вигляді

$$F = \frac{3\nu N\Theta}{2\pi^2\bar{V}^3} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \ln \left\{ 1 - \exp \frac{\hbar\omega}{\Theta} \right\},$$

де верхня межа в інтегралі поширена до нескінченності, оскільки великі частоти вносять знехтувано малий внесок. Уводячи нову змінну

$$x = \frac{\hbar\omega}{\Theta}$$

та інтегруючи частинами, отримаємо

$$F = -\frac{\nu N\pi^2\Theta^4}{30(\hbar\bar{V})^3}.$$

Звідси повну енергію фононів можна знайти за наведеною вище формулою

$$E = -\Theta^2 \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\frac{F}{\Theta} \right) = \frac{\nu N\pi^2\Theta^4}{10(\hbar\bar{V})^3},$$

що дає можливість визначити теплоємність одиниці об'єму кристалу

$$C_v = \frac{1}{N\nu} \frac{\partial E}{\partial T} = a\Theta^3, \quad a = \frac{2\pi^2\kappa}{5(\hbar\bar{V})^3}, \quad (19)$$

де κ - постійна Больцмана.

Високі температури.

Якщо виконується нерівність $\hbar\omega_\alpha(\mathbf{k}) \ll \Theta$ для всіх фононів, то (18) можна замінити наближеним виразом

$$F = \Theta \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \ln \{ \hbar\omega_\alpha(\mathbf{k}) / \Theta \}. \quad (20)$$

У цьому випадку повна енергія надається формулою

$$E = -\Theta^2 \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\frac{F}{\Theta} \right) = 3(N\sigma - 1)\Theta \approx 3N\sigma\Theta,$$

де σ - число атомів в елементарній комірці кристала. Теплоємність одиниці об'єму кристала

$$C_v = \frac{3\sigma\kappa}{\nu}.$$

Середні температури.

При середніх температурах обчислення вільної енергії фононів за допомогою наведених вище загальних формул вимагає знання явного виду залежності $\omega_\alpha(\mathbf{k})$. Наближене обчислення базується на таких спрощеннях

а) При обчисленні внеску в F оптичних фононів нехтують залежністю їх частоти від хвильового вектора (наближення Ейнштейна)

$$\omega_{\alpha}(\mathbf{k}) \equiv \omega_{\alpha 0},$$

$$F_{opt} = \Theta N \sum_{\alpha} \ln \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\hbar \omega_{\alpha 0}}{\Theta} \right) \right\},$$

де підсумовування поширюється на $3\sigma - 3$ гілки оптичних коливань кристала, що містить N елементарних комірок із σ атомами в кожній.

б) Під час обчислення вкладу до вільної енергії акустичних фононів використовують наближення Дебая. Це наближення полягає в тому, що енергія фононів трьох акустичних гілок коливань вважаються рівними

$$\hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{k}) = \begin{cases} \bar{V}k, & \text{если } k \leq \omega_{\max} / \bar{V}, \\ 0, & \text{если } k > \omega_{\max} / \bar{V}, \end{cases} \quad (21)$$

де

$$\bar{V} = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{V_t} + \frac{1}{V_l} \right)^{-1}$$

- середня швидкість акустичних фононів, а величина ω_{\max} визначається за умови, щоб їх повне число, що обчислюється за допомогою інтегралу

$$\frac{3\nu N}{2\pi^2 \bar{V}^3} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \omega^2 = \frac{\nu N \omega_{\max}^3}{2\pi^2 \bar{V}^3},$$

дорівнювало $3N$ (тобто, у збудженні приймають участь усі наявні елементарні комірки кристалу). Із цієї умови здобуваємо

$$\omega_{\max} = \bar{V} \left(\frac{6\pi^2}{\nu} \right)^{1/3}.$$

Тоді вільна енергія F_{ac} акустичних фононів обчислюється за допомогою виразу (18)

$$F_{ac} = \frac{9\nu N \Theta}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \omega^2 \ln \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\hbar \omega}{\Theta} \right) \right\}.$$

Запроваджуючи змінну $x = \hbar \omega / \Theta$ та дебаївську температуру $\Theta_D = \hbar \omega_{\max}$, після інтегрування частинами отримуємо остаточний вираз

$$F_{ac} = \nu N \Theta \{ 3 \ln(1 - e^{-\xi}) - D(\xi) \}, \quad \xi \equiv \Theta_D / \Theta$$

де введено до розгляду спеціальну функцію $D(\xi)$

$$D(\xi) \equiv \frac{3}{\xi^3} \int_0^{\xi} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

що носить назву функції Дебая, і яка має наступні асимптотики

$$D(\xi) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{8}\xi + \frac{1}{20}\xi^2, & \xi \ll 1, \\ \frac{\pi^4}{15\xi^3} + O(e^{-\xi}), & \xi \gg 1. \end{cases} \quad (22)$$

Повна енергія акустичних фононів у кристалі дається виразом

$$E = 3\nu N \Theta D(\xi),$$

звідки може бути обчислена теплоємність одиниці об'єму кристалу

$$C_v = 3\kappa \left(D(\xi) + \Theta \frac{\partial D(\xi)}{\partial \Theta} \right), \quad \xi = \frac{\Theta_D}{\Theta}.$$

Простота дебаївського наближення полягає в тому, що весь спектр акустичних фононів кристала виражається через один параметр – дебаївську температуру $\Theta_D = \kappa T_D$ ($\Theta_D = \hbar \omega_{\max}$). У таблиці наведено значення дебаївської температури для деяких кристалів:

Кристалл	Pb	KBr	NaCl	C, алмаз
T_D, K	90	180	280	2000