Олена Трифонова
(Кіровоград, Україна)

НАУКОВО-МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ВИВЧЕННЯ ФОНОНІВ У ЗАГАЛЬНОМУ КУРСІ ФІЗИКИ

У даній статті розглянуті шляхи удосконалення методики вивчення поняття фонона та його характеристик, які дають змогу студентам чітко визначити поняття фонона у його хвильовому, квазіімпульсному та енергетичному вираженнях, виокремити основні властивості фононів та їх значення для наукових та практичних досліджень.
Ключові слова: *методика навчання, фонони, фізика твердого тіла, загальна фізика, студенти, метод аналогій.*

In this article the ways of improving the methododology of the study of the concepts of phonon and its descriptions are considered which enable students to define the concept of phonons in its is wave and power expressions, to select basic properties of fonons and their value for scientific and practical researches.
Keywords: *methodology of studies, phonons, physics of solid matters, general physics, students, method of analogies.*

Постановка проблеми. Поняття фонона займає особливе місце у вивченні фізики твердого тіла, зокрема, кристалів у середній та вищій школі. Під кристалічною структурою розуміється рівноважний стан системи атомів, що відповідає мінімуму потенційної енергії. Дослідження коливань кристалічної решітки є складним як з точки зору сутності фізичного явища, так і математично. Воно полягає у тому, що спочатку необхідно модельно зобразити розміщення атомів та іонів у решітці, окреслити у ній комірки, визначити параметри, за допомогою яких можна описати їх поведінку, а потім виходити на опис і пояснення властивостей кристала в цілому. Ми пропонуємо вивчення поняття фонона зі студентами фізико-математичних факультетів педагогічних ВНЗ здійснити використовуючи метод аналогій.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. В дидактиці й методиці навчання фізики проблему удосконалення змісту фізики розробляли О.І. Бугайов, С.У. Гончаренко, І.Т. Горбачук, Г.О. Грищенко, Е.В. Коршак, Д.Я. Костюкевич, І.М. Кучерук, М.Т. Мартинюк, М.І. Садовий, М.І. Шут та ін. [4].

Метою нашої **статті** є формування методики вивчення фононів у курсі загальної фізики з врахуванням досягнень фізичної науки, які відомі людству на початку ХХІ століття, що відповідає дидактичному принципу науковості.

Виклад основного матеріалу. Пропонуємо згадати відомі з загального курсу фізики дослідження вчених спектру моделі абсолютно чорного тіла (АЧТ) Г. Кіргофа, Д. Джінса, В.О. Міхельсона, Б.Б. Голіцина, Дж. Релея, В. Віна і нарешті М. Планка. Вчені використовували результати експериментальних даних, потім будували модель АЧТ, після цього вибирали параметри для опису спектру і узагальнювали дослідження у вигляді формул. Ми пропонуємо студентам дослідити хід думки М. Планка, коли він аналізував протікання процесів у АЧТ [3: 145-151]. Досліджуючи спектр випромінювання АЧТ М. Планк у своїх міркуваннях зобразив атоми як гармонічні осцилятори. На основі такої моделі розподіл енергії у спектрі АЧТ можна було привести до формули Планка через припущення, що осцилятори випромінюють дискретні значення енергії, кванти дії. З точки зору квантової теорії рівноважне теплове випромінювання розглядалось як газ, утворений квантами світла, що мають енергію $E = h\omega$ і володіють імпульсом $p = \dfrac{h\omega}{c}$, де c – швидкість світла.

Ми пропонуємо студентам скористатись методом аналогій і розглянути хід думки І.Є. Тамма. В його міркуваннях кристал має форму кристалічної решітки, що складається з зв'язаних між собою внутрішніми силами взаємодії атомів. Такий підхід дозволяв І.Є. Тамму [1: 9] розглядати теплові коливання решітки як лінійні гармонійні осцилятори. Тоді логічною є необхідність накладання на таку систему певних умов. Зокрема, кожне з нормальних коливань решітки повинно мати тільки дискретні значення енергії. Енергія нормального коливання решітки, що володіє частотою ω дорівнює $E_n = (n+2)h\omega$, де $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$. Спектр цього коливання повинен описуватись спектром осциляторів. Мінімальна порція енергії, яку може поглинути або випустити решітка за теплових коливань, відповідає переходу нормального коливання осцилятора з даного рівня на найближчий сусідній рівень і визначається формулою $E_ф = h\omega$. Далі необхідно підвести студентів до думки, що такий підхід дав змогу І.Є. Тамму теплові коливання решітки розглядати як поле пружних хвиль, що заповнюють кристал. Наступне припущення полягало у тому, що таке поле вчений розглядав як газ, утворений квантами нормальних коливань, які і назвав фононами (phonon). Вони мають енергію $E = h\omega$ та імпульс $p = \frac{h\omega}{\upsilon} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{k}$, де υ – фазова швидкість; λ – довжина пружної хвилі; k – хвильове число. З цієї точки зору кристал можна уявити як ящик, заповнений фононним газом. Якщо не здійснити такого аналізу припущень, то важко досягти свідомого уявлення студентів про структуру самого кристала і спосіб опису його властивостей через поняття фонон математичними методам.

Ми пропонуємо розглянути зі студентами основні характеристики фононного газу.

Кристалічні решітки можуть коливатися з різними частотами ω. Відповідно енергія фононів у кристалі є різною, визначається ймовірнісним характером і обраховується за формулою $h\omega$. Тоді число фононів з даною енергією $h\omega_1$ буде визначатись ймовірнісно за ступенем збудження нормального коливання з частотою ω_1. Якщо має місце збудження n-го рівня, тобто має енергію $\left(n + \frac{1}{2}\right)h\omega_n$, то говорять, що у решітці є n фононів з енергією $h\omega$ кожний.

Після цього необхідно обрати функцію, за якою можна буде описати розподіл частинок за обраними параметрами. Нагадуємо студентам основні відомі ймовірнісні розподіли [5: 55, 56, 805].

У фізиці найбільш поширеними є три основні розподіли частинок за різними параметрами. Розподіл Бозе-Ейнштейна визначає розподіл тотожних частинок зі спіном рівним нулю чи цілому значенню спіну (0, 1, 2, 3, … в одиницях $\hbar$) за рівнем енергії у випадку статистичної рівноваги [5: 55]. Середнє число частинок $\overline{n}_i$ зі станом енергії E_i у випадку вище виродженої температури визначається формулою:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) - 1},$$

де μ – термодинамічна функція стану, визначає зміну термодинамічних потенціалів при зміні числа частинок у системі і необхідна для опису властивостей частинок у системі відкритих систем (систем із змінним числом частинок). Хімічний потенціал виражає зміну внутрішньої енергії ізольованої системи зі сталим об’ємом при зміні числа частинок у ній на одиницю. Така статистика у 1924 році запропонована індійським ученим Ш. Бозе для квантів світла і використана А. Ейнштейном для молекул ідеального газу.

Розподіл Фермі-Дірака описує розподіл тотожних частинок з напівцілим спіном в одиницях $\hbar$ за енергетичними рівнями [5: 805]. У випадку статистичної рівноваги середнє число частинок у стані з енергією E_i визначається формулою:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1},$$

де μ – хімічний потенціал. При температурі абсолютного нуля температури всі рівні енергії нижче деякої максимальної, яка називається рівнем Фермі заповнені, а стан вище цієї температури є вільними.

В обох статистиках повинна виконуватись умова, що взаємодія є слабкою і нею можна знехтувати, тобто виконується умова для ідеального газу.

Розподіл Больцмана визначається формулою, яка описує розподіл частинок за імпульсами p і координатами r ідеального газу, молекули якого підкоряються законам класичної механіки у потенціальному полі:

$$n_i(\vec{p}, \vec{r}) = A\exp\left\{\frac{-\left[\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\right] + U(\vec{r})}{kT}\right\},$$

де $U(r)$ – потенціальна енергія молекули в зовнішньому полі, m – маса молекули, p – імпульс частинки, A – постійна нормування, яка визначається з умови, що сумарне число частинок, які знаходяться у різних можливих станах, рівне повному числу частинок у системі [3: 56].

Для сильно розріджених газів статистика Бозе-Ейнштейна та статистика Фермі-Дірака переходять у статистику Больцмана.

У всіх трьох статистиках частинки можна звести до ідеального газу. Тоді можна здійснювати моделювання різних процесів за єдиною методикою їх дослідження.

Пропонуємо студентам вибрати статистику для Таммівських фононів. Вузли кристалічної решітки можна представити як ідеальний газ, частинки якого коливаються. Частинки будуть тотожними, спін буде цілим, слабка взаємодія не враховується. Тоді можна скористатись статистикою Бозе-Ейнштейна. Коливанням решітки, згідно квантової механіки, можна зіставити квазічастинки, названі фононами. Кожному коливання відповідає один стан фонона з імпульсом $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ та енергією $\varepsilon_j\left(\vec{k}\right) = \left(\hbar\omega_{jk}\right)$.

Розподіл фононів за енергіями описується функцією Бозе-Ейнштейна, графік якої наведений на рис. 1. З цього графіка видно, що при температурі T в решітці мають місце збуджені нормальні коливання практично лише до частоти $\omega >> \dfrac{kT}{h}$. Вищих частот у решітках майже немає.

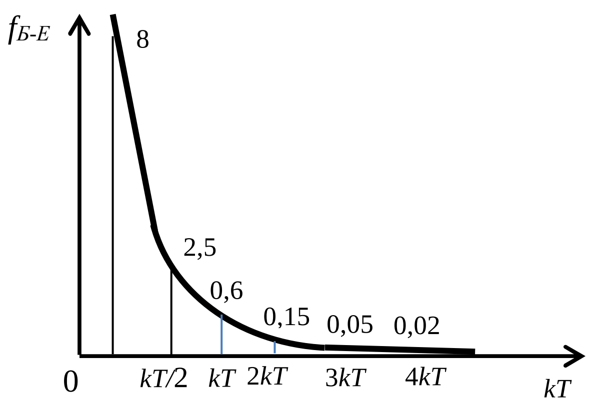

Рис. 1. Розподіл фононів за енергіями

Таким чином, між світлом і тепловими коливаннями кристалічної решітки можна провести аналогію – пружні хвилі розглядаються як поширення віртуальних квазіпружних частинок – фононів.

У 1929 р. Р. Паерлс, аналізуючи теорію Дебая, ввів до неї квантові (фононні) явища і показав, що тепловий опір решітки обумовлено взаємодією фононів [2]. На відміну від звичайних частинок фонон, може існувати лише у деякому середовищі. Таке середовище має перебувати у стані теплового збудження. Втрачається зміст, коли уявити**,** що фонон поширюється у вакуумі. Адже за його допомогою описується квантовий характер теплових коливань решітки, і він «навічно» замкнутий у кристалі. Тому необхідно наголосити, що якраз корпускулярний аспект малих коливань атомів решітки кристала приводить до поняття фонона. Лише тоді поширення пружних теплових хвиль у кристалі можна розглядати як перенесення фононів.

Пропонуємо студентам визначити формулу розподілу для цих віртуальних частинок. Раніше ми визначили, що фонони є бозе-частинками. Для певного конкретного коливання число фононів може бути яким завгодно великим. Це й буде число фононів одного певного стану. Коли має місце стан термодинамічної рівноваги, то середнє число n_{jk} фононів гілки j із хвильовим вектором $\vec{k}$ буде залежати лише від енергії фонона, тобто від частоти коливання:

$$\bar{n}_{jk} = \bar{n}\left(\varepsilon_j\left(\vec{k}\right)\right) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_j\left(\vec{k}\right)}{kT}\right) - 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{j\vec{k}}}{kT}\right) - 1},$$

де k – стала Больцмана. З точки зору як класичної, так і квантової механіки, нормальні коливання решітки будуть вести себе подібно незалежним гармонійним осциляторам. Амплітуда коливань буде відігравати роль координати осцилятора, а число фононів визначає рівень енергії осцилятора. Середня енергія кожного коливання визначається $\varepsilon_j\left(\vec{k}\right)\bar{n}_{j\vec{k}} = \hbar\omega_{j\vec{k}}\bar{n}_{j\vec{k}}$. Для повного опису системи до цієї енергії треба додати енергію нульових коливань основного стану коливання. У випадку звичайного традиційного гармонійного осцилятора вона рівна $\frac{1}{2}\hbar\omega_{jk}$. Слід зауважити, що енергію нульових коливань кристал має завжди. Тому логічно прийняти її за початок відліку. Коли маємо високі температури $k_b T >> \hbar\omega$, то число фононів буде пропорційне температурі $\bar{n}_{j\vec{k}} \approx \frac{kT}{\hbar\omega_{j\vec{k}}}$. Відповідно середня енергія коливань дорівнює *kT*. Таке значення має місце у класичній статистичній механіці для середньої енергії гармонічного осцилятора. Тому можна зробити висновок, що поки температура перевершує енергію фонона, квантові ефекти не грають помітної ролі. Інша справа, коли є низькі температури. Коли $kT << \hbar\omega$, тоді середня кількість фононів невелика $\bar{n}(\vec{k}) \approx \left(-\frac{\hbar\omega_{j\vec{k}}}{kT} - 1\right)$. Пропонуємо студентам зробити висновок, який полягає у тому, що коливання, частота яких перевершує величину $\frac{kT}{\hbar\omega}$ «вимерзають». Енергія коливання не може бути меншою енергії одного фонона $\hbar\omega_{j\vec{k}}$, а енергія фонона набагато більше характерної теплової енергії *kT*. Тому такі коливання практично не порушуються.

Для більш системного вивчення матеріалу пропонуємо студентам з'ясувати характеристики фононів. Спочатку одержимо середню енергію нормального коливання. Раніше ми підкреслили, що функція розподілу Бозе-Ейнштейна $f_{B\text{-}E}(E)$ виражає середнє число фононів, які мають енергію $E_ф = h\omega$. Для визначення середньої енергії нормального коливання $E_{нк}$ домножимо $h\omega$ на середнє число рівнів $f_{B-E} = \frac{1}{\exp\left(\frac{h\omega}{kT}\right) - 1}$. Енергія збудженого нормального коливання у решітках при температурі *T* і частоті ω буде рівна $\bar{E} = \frac{h\omega}{\exp\left(\frac{h\omega}{kT}\right) - 1}$.

При звичайній скінченній температурі у кристалічній решітці атоми хаотично рухаються, тобто зміщуючись від положень рівноваги. Пропонуємо студентам розглянути поведінку окремого атома згідно законів класичної фізики. Якщо атом змістити, то він штовхає сусідні атоми. Ті, у свою чергу, теж зміщуються і штовхають наступні. Так у кристалі виникають коливання, які поширюються у вигляді хвилі зміщень. Вона називається фононом. За невеликих коливань вони описуються класичною системою лінійних диференціальних рівнянь. Аналіз цих рівнянь та їх розв'язок можна знайти у будь-якому систематичному курсі фізики твердого тіла. Цікавим є і їх розв'язок. Він дає закон дисперсії (рис. 2) $\omega^2 = \frac{2\gamma}{M}[1 - \cos ka] = \frac{4\gamma}{M}\sin^2\frac{ka}{2}$, де a – відстань між атомами порядку 10^{-8} см, M – маса атома, як правило, береться як 10 мас протона, де $M_p \approx 1{,}67 \cdot 10^{-27}$ кг – маса атома, $\gamma = 160$ Дж/м^2 – коефіцієнт жорсткості середовища. Як бачимо, ми маємо квадратне рівняння, яке має два розв'язки.

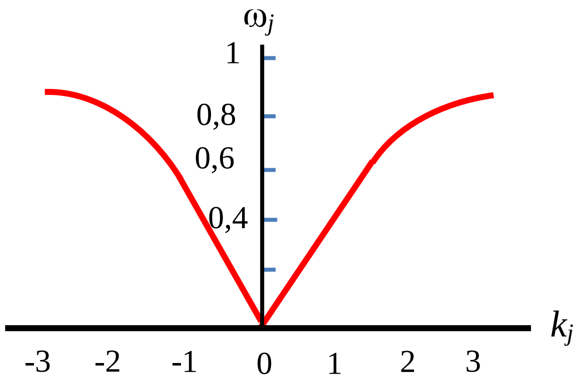

Рис. 2. Закон дисперсії для одного атома

На нашу думку, після введення поняття фонону доцільно розкрити його характеристики:

- рівняння коливань та хвилі;
- квазіімпульс, яким визначається напрямок поширення та довжина хвилі;
- частота коливань ω;
- хвильовий вектор $\vec{k}$;

– закон дисперсії для довгохвильових коливань $\omega_j = \upsilon_j \vec{k}$ (υ_j – швидкість звуку в середовищі), який визначає залежність частоти від квазіімпульсу.

Ми вважаємо, що студентам доцільно наголосити на відмінності властивостей реальних частинок та віртуальних квазічастинок, до яких відносяться і фонони, таблиця 1.

Таблиця 1

Властивості частинок та квазічастинок

Частинки/ ознаки	Закон збереження енергії		Реальність у		Утворюють атоми, молекули, речовину
	енергії	імпульсу	кристалах	вакуумі	
Частинки	Виконується	Виконується	Існують	Існують	Так
Квазічастинки	Виконується	Не завжди	Існують віртуально	Не існують	Ні

Таким чином, для кожного хвильового вектора $\vec{k}$, має місце дві частоти ω, згідно дисперсійного рівняння. Звертаємо увагу студентів, що є дві безперервні функції ω(k), які відрізняються знаком перед коренем. Відповідно існують дві гілки коливань. розглядаємо обидві гілки. Наголошуємо, що хвильові вектори, які відрізняються на вектор оберненої решітки, описують одне і те ж коливання. Тоді функція ω(k) є періодичною зі зворотнім періодом решітки $\frac{2\pi}{a}$. У тривимірному випадку буде трансляційна симетрія оберненої решітки. На основі цього робимо висновок, що хвильовий вектор розташований у межах першої зони Брілюена $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$, рис. 3.

Звертаємо увагу студентів на два важливих факти.

Перший полягає в тому, що у випадку коливання заряджених атомів, має місце змінний дипольний момент. Останній взаємодіє з електромагнітним полем. Відповідно коливання легко збуджуються електромагнітними хвилями відповідних частот. Тоді гілка коливань буде називається оптичною.

Другий свідчить про те, що за довгохвильових акустичних коливань виокремленні атоми рухаються у фазі. Тоді ніякого дипольного моменту не виникає. У цьому випадку з електромагнітним полем акустичні коливання взаємодіють слабо. Порядок величини енергії довгохвильового оптичного та акустичного фонона з максимальною частотою має однаковий порядок величини. Ця енергія оцінюється у 0,05 еВ.

У напівпровідникових кристалах енергія оптичних кристалів лежать в діапазоні 0,03–0,1 еВ.

Якщо довжина хвилі мінімальна, то хвильовий вектор лежить на межі зони Брілюена. У випадку акустичних хвиль $k = \frac{\pi}{a}$ коливаються важкі атоми, а легкі нерухомі. Коли мають місце оптичні хвилі, то коливаються легкі атоми, а важкі є нерухомими.

Якщо примітивна комірка одномірного ланцюжка містить q атомів, тоді спектр коливань виділяє l гілок, одна з яких є акустичною, а інші – оптичними. У довгохвильовому ланцюжку границі закону дисперсії змінюються. У випадку ланцюжка з одним атомом у примітивній комірці, закон описує акустичні коливання. З цієї причини вся гілка (рішення зі знаком « - ») називається акустичної, рис. 3.

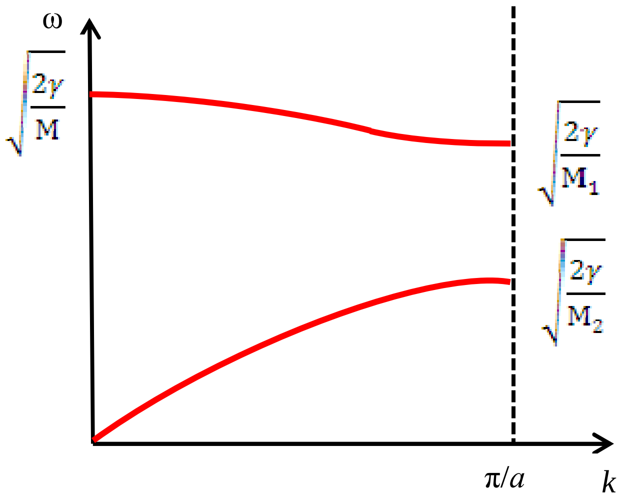

Рис. 3. Закон дисперсії коливань ланцюжка двоатомної системи

Важливість введення оптичних та акустичних фононів полягає у тому, що вони відповідають за різні властивості кристалів. Зокрема, оптичні коливання, фонони відіграють основну роль у процесах поглинання взаємодії світла з кристалом. Наприклад, поглинання інфрачервоного випромінювання іонними кристалами обумовлено якраз оптичними коливаннями решітки.

Акустичні ж коливання є провідними у визначенні теплових властивостей кристалів: теплоємності, теплопровідності, теплового розширення тощо.

Ми розглянули поняття фонона виходячи з хвильових властивостей атомів та частоти коливань. Цікавим є розподіл мінімальних порцій енергії, які поглинаються чи випускаються кристалічною решіткою, коли мають місце теплові коливання. Дослідники здійснили експериментальне визначення енергії переходу з одного енергетичного рівня на інший. У результатів утвердився факт, що перехід з одного енергетичного рівня на інший дорівнює $\hbar\omega$ і називається фононом у енергетичному вираженні, рис. 4.

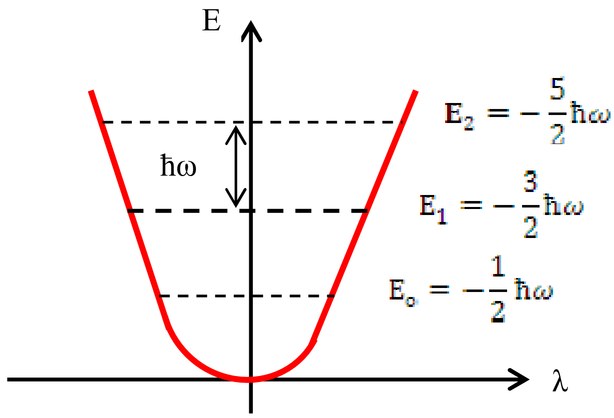

Рис. 4. Енергетичні рівні

Висновок. Таким чином, запропонована методика вивчення поняття фонона та його характеристик дає змогу студентам чітко визначити поняття фонона у його хвильовому, квазіімпульсному та енергетичному вираженнях, виокремити основні властивості фононів та їх значення для наукових та практичних досліджень.

Перспективи подальших розвідок у даному напрямі пов'язані з удосконаленням методики вивчення інших понять сучасної фізики.

ЛІТЕРАТУРА

1. Воспоминания о И.Е. Тамме / отв. ред. Е.Л. Фейнберг – [3-е изд. доп.]. – М.: ИЗДАТ, 1995. – 432 с. (Эпоха и личность).
2. Паерлс Р. Импульс и квазиимпульс света и звука / Р. Паерлс // УФН. – 1991. – Вып. 9, Т. 161. – С. 161-176.
3. Садовий М.І. Нариси з еволюції основних фізичних ідей XIX-XX, початку XXI ст.: [наук.-метод. пос. для викл. пед. ВУЗів та майбутніх учителів.] / М.І. Садовий,

Л.І. Кондратьєва, О.А. Гавриленко; За ред. Садового М.І. – Кіровоград: Ексклюзив-Систем, 2008. – 337 с.

4. Трифонова О.М. Взаємозв'язки принципів науковості та наочності в умовах кредитно-модульної системи навчання квантової фізики студентів вищих навчальних закладів: дис. … кандидата пед. наук: 13.00.02 /Трифонова Олена Михайлівна. – Кіровоград, 2009. – Т. 1. – 216 с.; Т. 2. (Додатки) – 301 с.

5. Физический энциклопедический словарь / Гл. ред. А.М. Прохоров; ред. кол. Д.М. Алексеев, А.М. Бонч-Бруевич, А.С. Боровик-Романов и др. – М.: Сов. энциклопедия, 1983. – 928 с.

ВІДОМОСТІ ПРО АВТОРА

Трифонова Олена Михайлівна – кандидат педагогічних наук, старший викладач кафедри фізики та методики її викладання Кіровоградського державного педагогічного університету імені Володимира Винниченка.