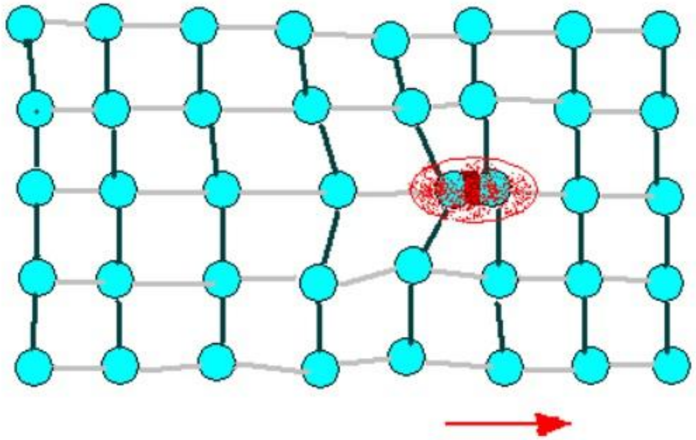


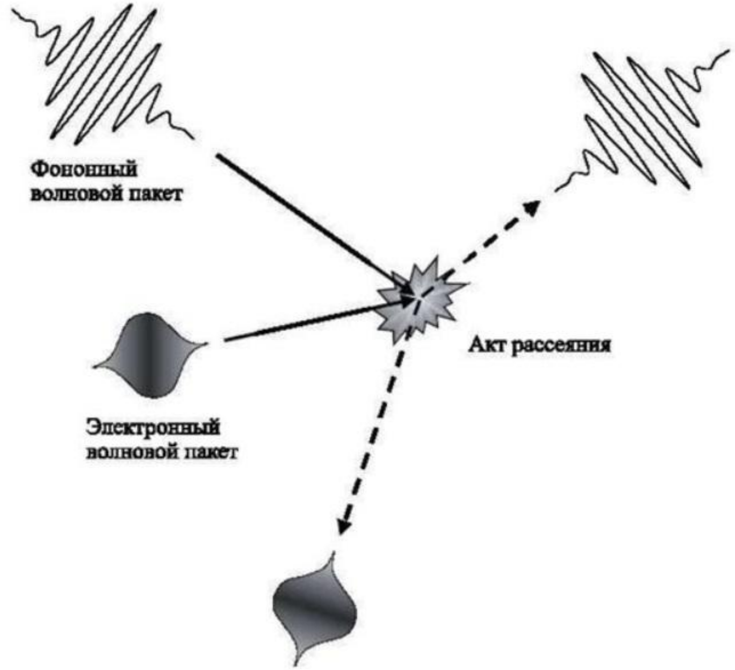
Энергия фонона

$$\varepsilon = h\nu$$

Импульс фонона

$$p = \hbar k$$

Фононы в твердом теле наблюдались в опытах по рассеянию частиц на фононах



Семинар №2

Фононы. Модель Дебая

Кубышкин А.В. для 2-885 и 4-841 - февраль 2021

Энергия кристалла как сумма энергий плоских волн

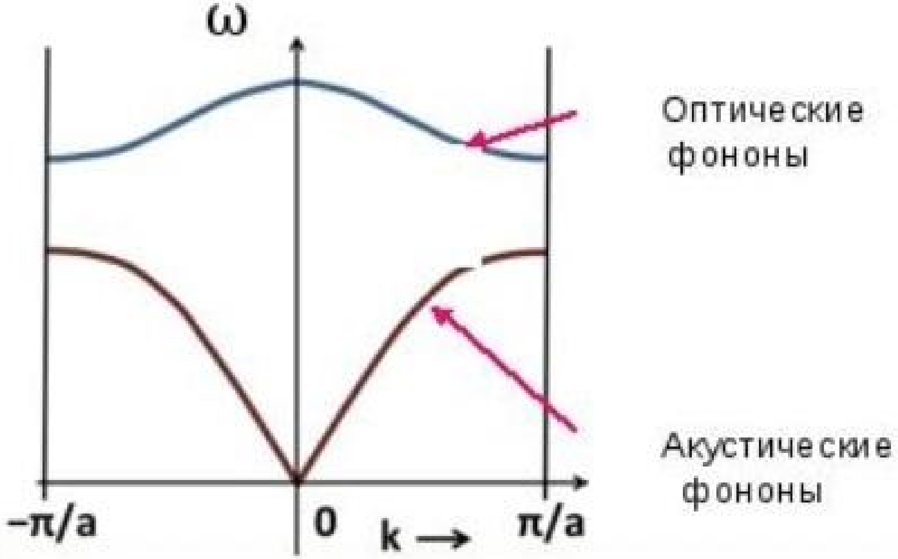
$$U = V\sum_{\mathbf{k},s} E_{\mathbf{k},s}, \quad E_{\mathbf{k},s} = \hbar\omega_{\mathbf{k},s}\left(n_{\mathbf{k},s} + 1/2\right)$$

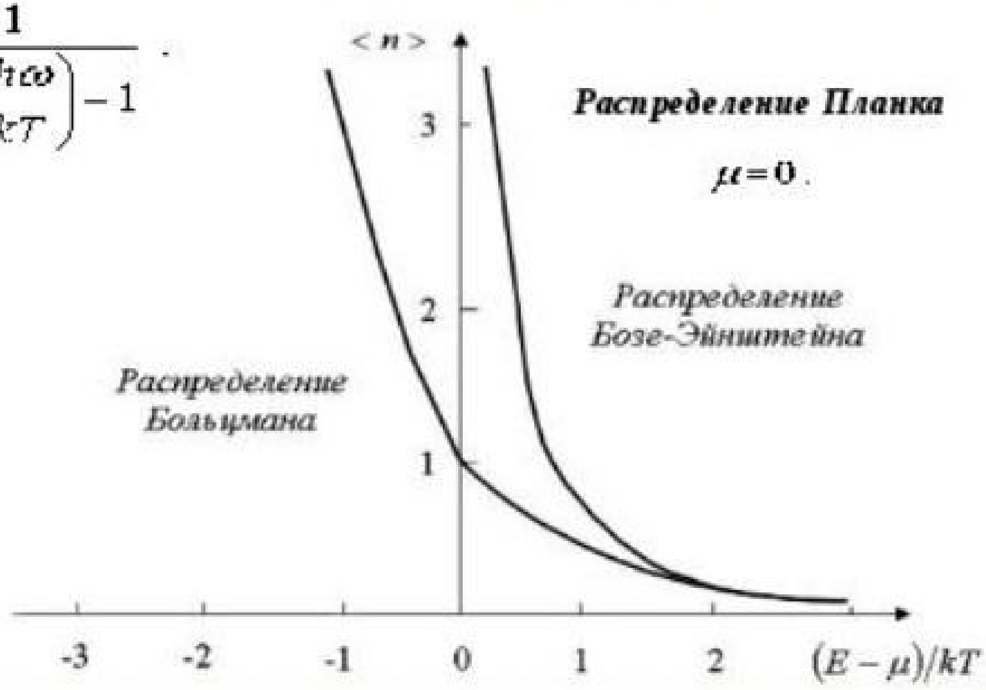
Квазиимпульс $\vec{k}\,' = \vec{k} + \vec{G}$

Колебания атомов кристалла заменяются распространением в веществе системы нормальных волн, квантами которых являются фононы. Фонон принадлежит к числу бозонов и описывается статистикой Бозе-Эйнштейна.

$$E_n = \hbar\omega_n$$
$$p_n = \hbar k_n$$

$$\langle n \rangle^{фон} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$

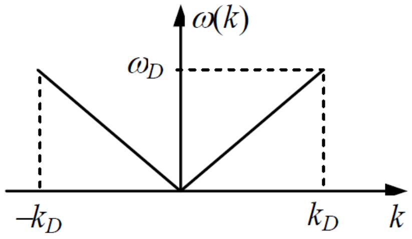




Энергия фононного газа в модели Дебая

Закон дисперсии волн

$$\omega = s|k|$$



Спектральное распределение фононного газа

$$\rho_\omega d\omega = g_\omega d\omega \cdot \hbar\omega \cdot n(\omega) = \frac{3}{2\pi^2 s^3}\frac{\hbar\omega^3 d\omega}{\exp(\hbar\omega/k_Б T)-1}$$

Число возможных волновых векторов в диапазоне

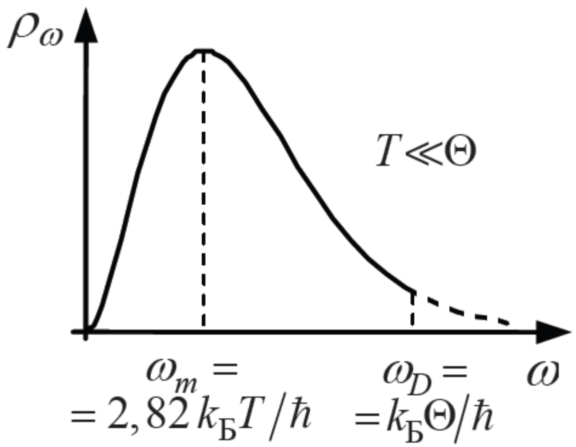
$$k_x \div k_x + dk_x,\ k_y \div k_y + dk_y,\ k_z \div k_z + dk_z$$

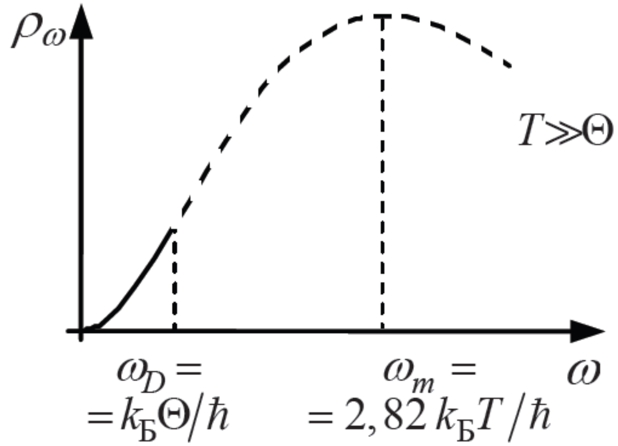
равно

$$dN_{\mathbf{k}} = V\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

Вывод?

где $d^3k \to 4\pi k^2 dk$





Дебаевская частота

$$\int_0^{\omega_D} V g_\omega d\omega = \int_0^{\omega_D} V\frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 s^3} = 3N \Rightarrow \frac{\omega_D^3}{2\pi^2 s^3} = 3\frac{N}{V} \Rightarrow \omega_D = \left(6\pi^2\frac{N}{V}\right)^{1/3} s$$

Функция Дебая и ее асимптоты

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

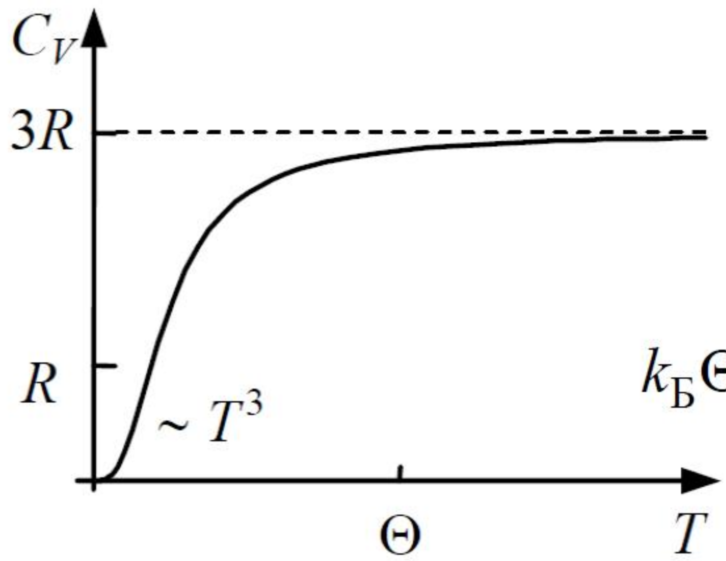
$$D(y)\big|_{y\gg 1} \approx \frac{\pi^4}{5y^3}$$

$$D(y)\big|_{y\ll 1} = \frac{3}{y^3}\int_0^y \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \approx \frac{3}{y^3}\int_0^y \frac{x^3 dx}{\left(1 + x + x^2/2\right) - 1} \approx \frac{3}{y^3}\int_0^y x^2\left(1 - \frac{x}{2}\right)dx = 1 - \frac{3}{8}y$$

Энергия кристалла и теплоёмкость

$$U = 3NkT \cdot D(\Theta/T)$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$



Физический смысл температуры Дебая и полезное соотношение для нее

$$k_Б\Theta = \hbar\omega_D = \left(6\pi^2 N/V\right)^{1/3}\hbar s$$

Концентрация и средняя энергия фононов

$$dn_{\text{ф}} = g_\omega d\omega \cdot n(\omega) = \frac{3}{2\pi^2 s^3}\frac{\omega^2 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT)-1}$$

$$n_{\text{ф}} = \frac{3}{2\pi^2 s^3}\int_0^{\omega_D}\frac{\omega^2 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT)-1} = \frac{3}{2\pi^2}\left(\frac{kT}{\hbar s}\right)^3\int_0^{\Theta/T}\frac{x^2 dx}{e^x-1}$$

$$T \ll \Theta \quad \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^x-1} = 2\sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^3} = \Gamma(3)\zeta(3) \approx 2,4$$

$$n_{\text{ф}} = 2,4\cdot 3\cdot \frac{\omega_D^3}{\underbrace{2\pi^2 s^3}_{3N_1}}\left(\frac{kT}{\hbar\omega_D}\right)^3 \approx 21,6 N_1\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3$$

$$\varepsilon_{\text{ф}} = \frac{\rho}{n_{\text{ф}}} = \frac{3\pi^4}{5\cdot 21,6}kT = 2,7kT$$

Растет с ростом температуры, близка к максимуму спектральной плотности энергии

$$\hbar\omega_m = 2,82kT$$

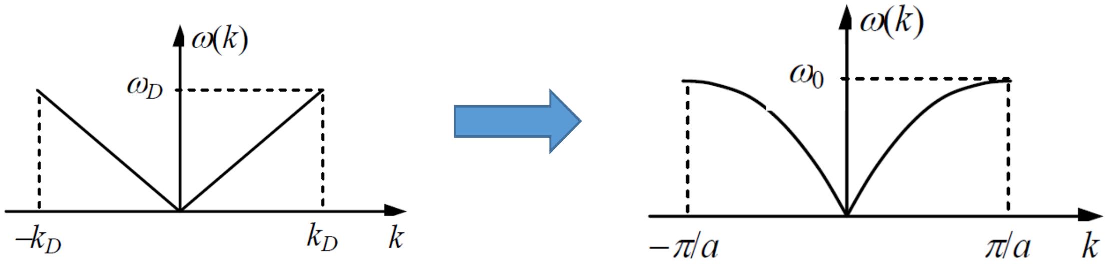
$$T \gg \Theta \quad \int_0^{\Theta/T}\frac{x^2 dx}{e^x-1} \approx \int_0^{\Theta/T}\frac{x^2 dx}{x} = \frac{1}{2}\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2$$

$$n_{\text{ф}} = \frac{3}{4\pi^2}\left(\frac{kT}{\hbar s}\right)^3\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 = \frac{3\omega_D^3}{4\pi^2 s^3}\left(\frac{kT}{\hbar\omega_D}\right)^3\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 = \frac{9}{2}N_1\frac{T}{\Theta}$$

$$\varepsilon = \frac{\rho}{n_{\text{ф}}} = \frac{3N_1 kT}{\frac{9}{2}N_1\frac{T}{\Theta}} = \frac{2}{3}k\Theta = \frac{2}{3}\hbar\omega_D$$

Выходит на постоянное значение порядка максимально возможной энергии $\hbar\omega_D$

Пример обхода модели Дебая



$$\omega(k)=\omega_0\left|\sin\frac{ka}{2}\right|,\quad \omega_0=2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$$

$$k=\frac{2}{a}\arcsin\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right),\quad 0\le k\le \pi/2;$$

Закон дисперсии и плотность состояний

$$d\omega=\frac{\omega_0 a}{2}\cos\frac{ka}{2}dk\ \Rightarrow\ dk=\frac{2}{\omega_0 a}\frac{d\omega}{\cos(ka/2)}=\frac{2}{a}\frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}}$$

$$\frac{dk}{2\pi}\to 2\left(\frac{dk}{2\pi}\right)_{k\ge 0}=\frac{2}{\pi a}\frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}}=g(\omega)d\omega$$

Полное число разрешенных состояний

$$G=L\int_0^{\omega_0}g(\omega)d\omega=\frac{2L}{\pi a}\int_0^{\omega_0}\frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2-\omega^2}}=\frac{L}{a}=N$$

Число степеней свободы в волнах автоматически равно числу степеней свободы атомов, образующих цепочку!