فصل پنجم

فونونها (2). ویژگیهای گرمایی

۱– ظرفیت گرمایی فونون

۲–توزیع پلانک

۳– شمارش مدهای بهنجار

۴– چگالی حالتها – مدل دبی و مدل اینشتین

۵– انبساط گرمایی و رسانندگی گرمایی

ظرفیت گرمایی فونون و تابع توزیع پلانک

در این فصل ظرفیت گرمایی گاز فونونی و سپس آثار برهم‌کنشهای ناهماهنگ شبکه را بر فونونها و بلور بررسی می‌کنیم.

مقصود از ظرفیت گرمایی معمولاً ظرفیت در حجم ثابت است که از ظرفیت گرمایی در فشار ثابت اساسیتر است.[1] ظرفیت گرمایی در فشار ثابت از طریق آزمایش تعیین می‌شود: ظرفیت گرمایی در حجم ثابت به‌صورت $C_V \equiv (\partial U/\partial T)_V$ تعریف می‌شود، که در آن U انرژی و T دماست.

سهم فونونها در ظرفیت گرمایی بلور را ظرفیت گرمایی شبکه می‌گویند و با C_{lat} نمایش می‌دهند.

۱. بین این دو ظرفیت گرمایی، رابطهٔ سادهٔ ترمودینامیکی $C_p - C_V = 9\alpha^2 BVT$ وجود دارد که در آن α ضریب انبساط خطی، V حجم و B مدول حجمی است. اختلاف نسبی بین C_p و C_V معمولاً در جامدات کوچک است و غالباً می‌توان از آن صرف‌نظر کرد. مشاهده می‌شود که وقتی $T \to 0$، اگر α و β ثابت باشند، $C_p \to C_V$.

انرژی کل فونونها داخل بلور در دمای $\tau(\equiv k_BT)$ را می‌توان به‌صورت مجموع انرژیهای کل مدهای فونونی بیان کرد، که با بردار موج K و قطبش p شاخص‌گذاری شده‌اند:

$$U_{\text{lat}} = \sum_K \sum_p U_{K,p} = \sum_K \sum_p \langle n_{K,p} \rangle \hbar\omega_{K,p} \qquad (۱)$$

که در آن $\langle n_{K,p} \rangle$ ضریب اشغال فونونها با بردار موج K و قطبش p در تعادل گرمایی است. تابع توزیع پلانک شکل $\langle n_{K,p} \rangle$ را می‌دهد:

$$\langle n \rangle = \frac{۱}{\exp(\hbar\omega/\tau) - ۱} \qquad (۲)$$

که در آن $\langle \cdots \rangle$ مقدار میانگین در تعادل گرمایی است.

سئوال: چرا انرژی حالت پایه در رابطه (1) وارد نشده است؟

توزیع پلانک

we will derive the so-called **Planck Distribution** and demonstrate that it describes two completely different phenomena: (1) Black-body radiation (BBR); and (2) Einstein model of a solid

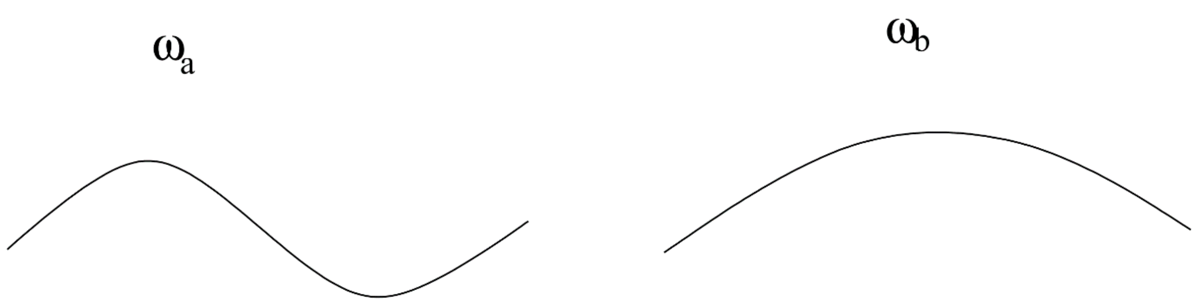
Description of Einstein model and Black-Body Radiation

1. A "black body" absorbs all radiation falling on it.

From a statistical point of view, we will derive an expression for the spectrum of electromagnetic radiation in thermal equilibrium within a cavity.

Our sun is a good example of a black body and we will consider the emission spectrum for such a case.

- ❖ Lets begin by considering electromagnetic waves within a box (just like a string inside a box attached to two ends).
- ❖ These waves can be in different modes, $\omega = 2\pi f$ each mode



Different wave patterns corresponding to different modes for electromagnetic radiation in a cavity

- These modes can be “excited” in units of the quantum of energy $\hbar\omega$ such that the energy can be written as,

$$\epsilon_s = (s + 1/2)\hbar\omega$$

where we have explicitly included the zero-point energy (but, as noted before, only energy differences are physically significant so we may just consider the zero-point energy to be zero.

- The figure above depicts different modes for a *single* photon. If we “stuff” (انباشتن) more photons in to the box, then there will be a greater contribution to any given mode.

Einstein Model of a Solid

❖ Recall our simple model for an Einstein solid which is composed of atoms which can vibrate about their quilibrium or “frozen” positions.

<u>Key Assumptions:</u>

(a) each atom can vibrate independently and,

(b) the atoms vibrate with simple harmonic motion. This crude (خام) model does not account for coupling between the atoms which we will later address with the **Debye Model**

Differences between the Einstein model and BBR

❖ The harmonic oscillators treated in the Einstein model are localized whereas the E&M waves of our cavity mode are distributed throughout the interior of the box.

- ❖ For the oscillator, the label s in the energy $\epsilon_s = s\hbar\omega$ Denotes the quantum number, whereas for a given E&M mode s gives the number of photons in the mode.
- ❖ Nonetheless(با اینحال), the statistical physics of the two problems is similar, since the photons do not interact with each other.

Planck Distribution

1. What is our partition function (for either model)?

$$Z = \sum_{s=0}^{\infty} e^{-s\beta\hbar\omega}.$$

If we let $x = \exp(-\beta\hbar\omega)$, then we note that since $x < 1$ the above infinite series converges and when summed (show in assignment) gives us,

$$Z = \frac{1}{1-\exp(-\beta\hbar\omega)},$$

which, you will note is *independent* of s.

2. What about probabilities? The probability that the system is in the state s with energy $\epsilon_s = s\hbar\omega$ is simply,

$$P(s) = \frac{e^{-s\beta\hbar\omega}}{Z} \tag{10.4}$$

3. How do we calculate the thermal average of s?

$$\langle s\rangle = \sum_{s=0}^{\infty} sP(s) \tag{10.5}$$

If we let $y = \beta\hbar\omega$ then we may write,

$$\begin{aligned}\sum_{s=0}^{\infty} se^{-sy} &= -\frac{d}{dy}\sum e^{-sy} = -\frac{dZ}{dy} \\ &= -\frac{d}{dy}\left(\frac{1}{1-\exp(-y)}\right) \\ &= \frac{e^{-y}}{(1-e^{-y})^2}\end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned}
\langle s \rangle \frac{\sum_{s=0}^{\infty} s e^{-sy}}{Z} &= \frac{e^{-y}}{(1-e^{-y})^2}(1-e^{-y}) \\
&= \frac{e^{-y}}{1-e^{-y}} = \frac{1}{e^{y}-1}
\end{aligned}$$

Thus, we arrive at the **Planck Distribution function**:

$$\boxed{\langle s \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}} \tag{10.6}$$

This equation describes the thermal average number of photons in a single mode of frequency ω. Alternatively, it is the average number of *phonons* (lattice vibrations) for a given mode in an elastic solid.

4. The average energy for a given mode ω is then given as,

$$\boxed{\langle \epsilon \rangle = \langle s \rangle \hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}} \tag{10.7}$$