

ادامه فصل پنجم

فونونها (2). ویژگیهای گرمایی

۳- نتیجه عمومی برای تابع چگالی فونونی

۴- برهمکنش های ناهماهنگ در بلورها

۵- انبساط گرمایی

نتیجه عمومی برای تابع چگالی فونونی

می‌خواهیم با داشتن رابطه پاشیدگی، $\omega(\mathbf{K})$ ، فونونها یک رابطه عمومی برای $D(\omega)$ ، یعنی تعداد حالتها در واحد گستره بسامد، پیدا کنیم. تعداد مقادیر مجاز \mathbf{K} ، که برای آنها بسامد فونونی بین ω و $\omega + d\omega$ باشد، برابر است با

$$D(\omega) = dN/d\omega \quad D(\omega)d\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{\text{پوسته}} d^3K \quad \downarrow \quad (35)$$

در اینجا انتگرال روی حجم پوسته‌ای در فضای \mathbf{K} گرفته می‌شود که با دو سطحی که روی آنها بسامد فونون ثابت است محصور می‌شود، روی یکی از این سطوحها بسامد ω است و روی دیگری $\omega + d\omega$ مسئله واقعی محاسبه حجم این پوسته است. در فضای \mathbf{K} ، عنصر مساحت روی سطحی را که دارای بسامد انتخابی ثابت ω است، با dS_ω نشان می‌دهیم (شکل ۱۲). عنصر حجم بین دو سطح با بسامدهای ثابت ω و $\omega + d\omega$ ، استوانه قائمی است که قاعده‌اش برابر dS_ω و ارتفاعش dK_\perp باشد، در نتیجه

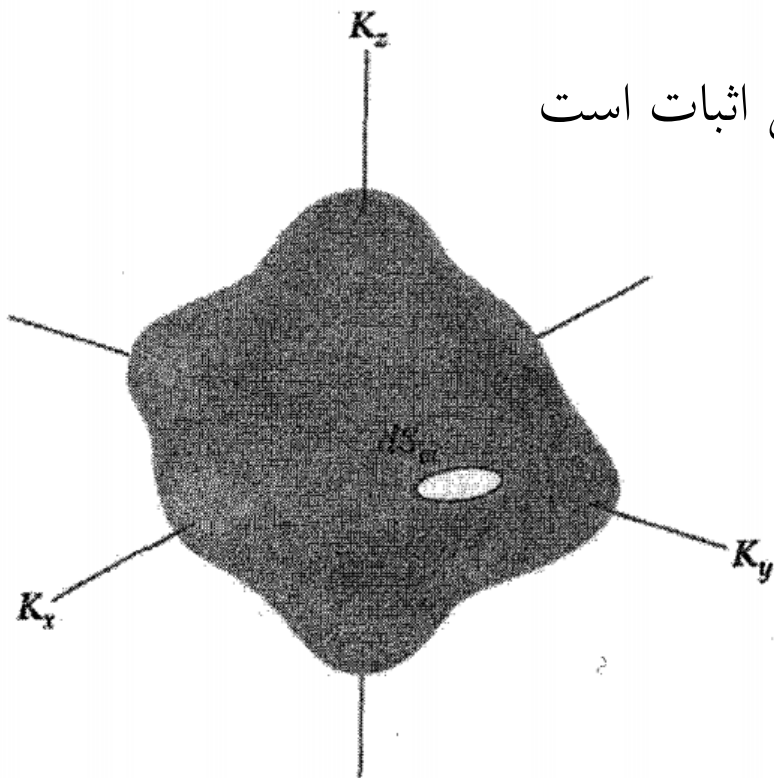
$$\int_{\text{پوسته}} d^3K = \int dS_\omega dK_\perp \quad (36)$$

در اینجا dK_{\perp} فاصله عمودی بین سطح با بسامد ثابت ω و سطح با بسامد ثابت $\omega + d\omega$ است (شکل ۱۳). مقدار dK_{\perp} از یک نقطه به نقطه دیگر سطح تغییر می‌کند.

↓ گرادینان ω ، یعنی $\nabla_{\mathbf{K}}\omega$ ، نیز بر سطح با بسامد ثابت ω عمود است، و این مقدار برابر تفاضل بسامد دوسطحی است که dK_{\perp} آنها را به هم مربوط کرده است.

$$|\nabla_{\mathbf{K}}\omega|dK_{\perp} = d\omega$$

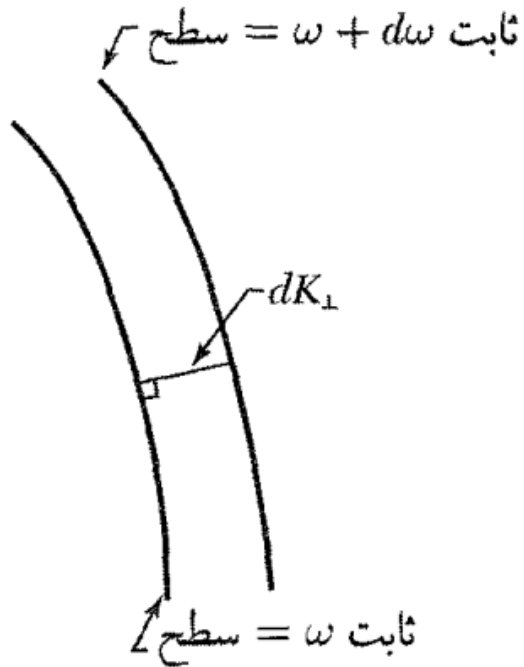
برای حالت تک بعدی رابطه فوق به راحتی قابل اثبات است



شکل ۱۲. عنصر مساحت dS_{ω} بر روی سطحی با بسامد ثابت در فضای \mathbf{K} . حجم بین سطوح با بسامد ثابت در ω و $\omega + d\omega$ برابر با $\int dS_{\omega}d\omega/|\Delta_{\mathbf{K}}\omega|$ است.

در نتیجه عنصر حجم برابر است با

$$dS_{\omega} dK_{\perp} = dS_{\omega} \frac{d\omega}{|\nabla_{\mathbf{K}} \omega|} = dS_{\omega} \frac{d\omega}{v_g}$$



شکل ۱۳. کمیت dK_{\perp} فاصله عمودی بین دو سطح با بسامد ثابت در فضای \mathbf{K} است. یک سطح دارای بسامد ω و دیگری دارای بسامد $\omega + d\omega$ است.

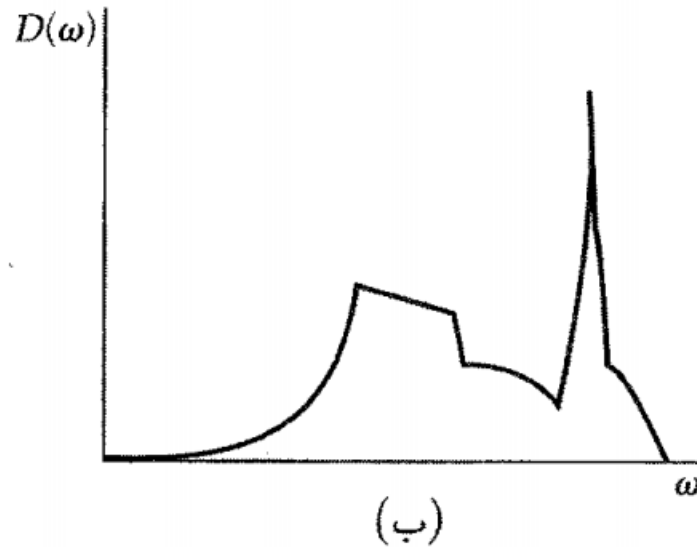
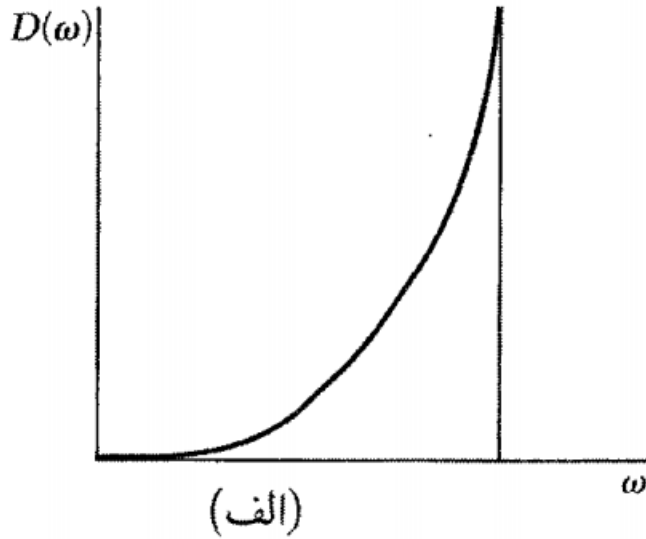
که در آن $v_g = |\nabla_{\mathbf{K}}\omega|$ بزرگی سرعت گروه فونون است. رابطه (۳۵) به صورت زیر درمی آید

$$D(\omega)d\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int \frac{dS_\omega}{v_g} d\omega \quad \downarrow$$

دو طرف این رابطه را بر $d\omega$ تقسیم می‌کنیم و حجم بلور را به صورت $V = L^3$ می‌نویسیم: در نتیجه چگالی حالتها برابر است با

$$\boxed{D(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS_\omega}{v_g}} \quad (37)$$

این انتگرال روی مساحت سطحی با بسامد ثابت ω در فضای \mathbf{K} گرفته می‌شود. این نتیجه به یک تک شاخه از رابطه پاشیدگی مربوط است. این نتیجه را می‌توانیم در نظریه نواری الکترون نیز به کار ببریم. در $D(\omega)$ سهم ناشی از نقاطی که در آنها سرعت گروه صفر است اهمیت ویژه‌ای دارد. این نقاط بحرانی تکینه‌هایی را (که به نام تکینه‌های وان هوف معروف‌اند) در تابع توزیع ایجاد می‌کنند (شکل ۱۴).



شکل ۱۴. چگالی حالتها به صورت تابعی از بسامد. (الف) برای جامد دبی و (ب) برای ساختار بلوری واقعی. برای بلور، طیف به ازای ω های کوچک به صورت ω^2 شروع می شود. ولی در نقاط تکین ناپیوستگیهایی پدیدار می شوند.

برهمکنش های ناهماهنگ در بلورها

- در نظریه ارتعاشهای شبکه مورد بحث، تاکنون انرژی پتانسیل برحسب جابه‌جاییهای بین‌اتمی به جملات درجه دوم محدود شده است. این نظریه، نظریه هماهنگ است و برخی از پیامدهای آن عبارت‌اند از:
- دو موج شبکه برهم‌کنش ندارند؛ یک تک‌موج نسبت به زمان فرو نمی‌افتد و تغییر شکل نمی‌دهد.
 - ثابتهای کشسان تک‌دما و بی‌دررو با هم برابرند.
 - ثابتهای کشسان از فشار و دما مستقل‌اند.
 - ظرفیت گرمایی در دماهای بالا، $T > \theta$ ، ثابت می‌شود.
- در بلورهای واقعی هیچ‌یک از این نتایج دقیقاً صادق نیست. انحراف از این نتایج را می‌توان به علت چشم‌پوشی از جملات ناهماهنگ برحسب جابه‌جاییهای بین‌اتمی (با توانهای بیش از دو) دانست. درباره برخی از جنبه‌های ساده‌تر اثرهای ناهماهنگ بحث خواهیم کرد.

انبساط گرمایی

انبساط گرمایی را می‌توان در مورد نوسانگر کلاسیکی با در نظر گرفتن اثر جملات ناهماهنگ در انرژی پتانسیل روی فاصله متوسط یک زوج اتم در دمای T درک کرد. انرژی پتانسیل اتمهایی را که در صفر مطلق به اندازه x از فاصله تعادلشان جابه‌جا شده‌اند، به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4 \quad (38)$$

جابه‌جایی میانگین را با استفاده از تابع توزیع بولتزمن محاسبه می‌کنیم که در آن وزن مقادیر ممکن x بر مبنای احتمال ترمودینامیکی‌شان تعیین می‌شود:

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx \, x \exp[-\beta U(x)]}{\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp[-\beta U(x)]} \quad (39)$$

که در آن، $\beta \equiv 1/k_B T$. برای جابه‌جاییهایی که جملات ناهماهنگ در انرژی در مقایسه با $k_B T$ کوچک باشند، انتگرالدها را می‌توان به این صورت بسط داد:

توضیحات بیشتر در مورد توزیع بولتزمن:

$$\rightarrow e^{(\beta gx^3 + \beta fx^4)} \cong 1 + (\beta gx^3 + \beta fx^4) \quad (۴۰)$$

با افزایش توان x بدلیل اینکه میزان جابجایی اتمها (x) خیلی زیاد نیست برای توانهای بیشتر از x^2 می توانیم از بسط زیر استفاده کنیم یعنی وقتی y کوچک باشد:

$$e^y = 1 + y$$

با فرض فوق، صورت کسر رابطه (۳۹) بصورت زیر خواهد بود.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-\beta U} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-\beta cx^2} e^{(\beta gx^3 + \beta fx^4)}$$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-\beta U} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta cx^2} [x(1 + (\beta gx^3 + \beta fx^4))]$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx (x + \beta gx^4 + \beta fx^5) e^{-\beta cx^2} \quad (۴۱)$$

فرد زوج فرد

انتگرالهایی که انتگرالده آنها فرد باشند در بازه متقارن صفر می شوند لذا فقط یک انتگرال که انتگرالده آن زوج است، باقی خواهد ماند.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-\beta U} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \beta g x^4 e^{-\beta c x^2} \quad (42)$$

از جدول انتگرال ها داریم:

$$\int_0^{+\infty} x^{2n} e^{-ax^2} = \frac{1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2n - 1)}{2^{n+1} a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (43)$$

از روابط (42) و (43) و با توجه به اینکه حدود انتگرال (42) دوبرابر حدود انتگرال (43) می باشد، خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-\beta U} = 2 \times \frac{3\beta g}{8\beta^2 c^2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta c}} = \frac{3g}{4\beta c^2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta c}} \quad (44)$$

حال مخرج رابطه (۳۹) را با توجه به روابط (۳۸) و (۴۰) ساده می کنیم:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta U} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta cx^2} e^{(\beta gx^3 + \beta fx^4)} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta cx^2} (1 + \beta gx^3 + \beta fx^4) \end{aligned} \quad (۴۵)$$

جمله وسطی به دلیل فرد بودن که قبلا گفته شد حذف می شود و همچنین با صرف نظر از جمله سوم در مقابل ۱ (بازه تغییرات x کوچک فرض شده است) خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta U} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta cx^2} \quad (۴۶)$$

همچنین با استفاده از رابطه انتگرالی زیر:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (۴۷)$$

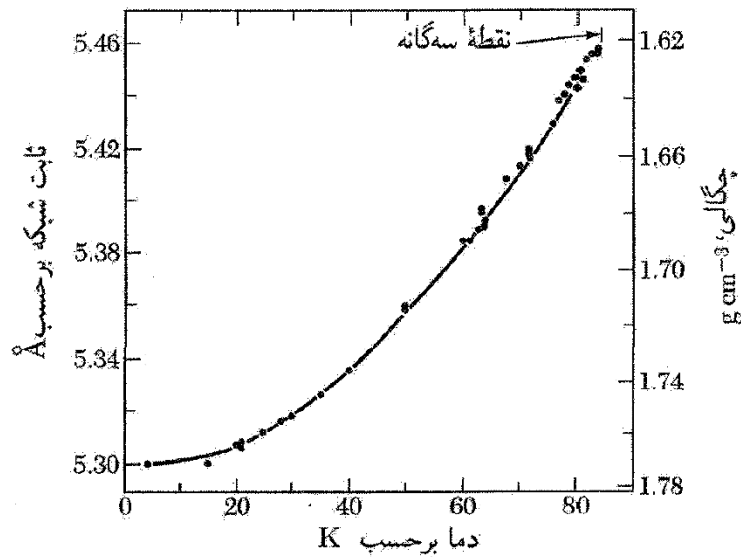
$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta U} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta c x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\beta c}} \quad (48)$$

با استفاده از روابط (39)، (44) و (48) خواهیم داشت:

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-\beta U}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta U}} = \frac{\frac{3g}{4\beta c^2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta c}}}{\sqrt{\frac{\pi}{\beta c}}} = \frac{3g}{4\beta c^2} = \frac{3g}{4c^2} k_B T$$

$\langle x \rangle$ متناسب با T است که نشان دهنده خطی بودن انبساط گرمایی در ناحیه کلاسیکی است. ضریب T بیانگر ضریب انبساط گرمایی نمونه مورد بررسی است. دلیل کلاسیکی بودن این است که این نتیجه را به شرط بزرگ بودن $k_B T$ در مقایسه با جملات ناهماهنگ بدست آورده ایم که بزرگ بودن $k_B T$ بیانگر این است که در محدوده کلاسیکی (دمای بالا) قرار داریم.

اندازه‌گیری‌های ثابت شبکه آرگون جامد در شکل ۱۵ نشان داده شده‌اند. شیب منحنی با ضریب انبساط گرمایی متناسب است.



شکل ۱۵. ثابت شبکه آرگون جامد به صورت تابعی از دما.

دلیل اینکه تغییرات ثابت شبکه رسم شده است، این است که ثابت شبکه بیانگر فاصله بین یاخته‌هاست که در واقع تغییرات آن مبین تغییرات فاصله صفحات اتمی و یا عبارتی تغییرات بین هر اتم و اتمهای همسایه آن می‌باشد.