

ادامه فصل پنجم

فونونها (2). ویژگیهای گرمایی

۱- شمارش مدهای بهنجار

۲- چگالی حالتها - مدل دبی و مدل اینشتین

طرح دیگری برای محاسبه چگالی حالتها

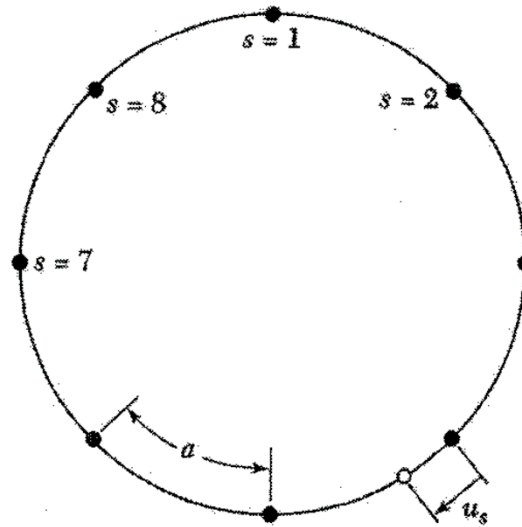
طرح دیگری برای شمارش مدها وجود دارد که به اندازه طرح اول معتبر است. در این طرح محیط را نامحدود فرض می‌کنیم، با این شرط که پاسخها در یک فاصله بزرگ L دوره‌ای باشند. بنابراین، برای یک دستگاه بزرگ روش شرایط مرزی دوره‌ای (شکل‌های ۴ و ۵) در فیزیک مسئله تغییر اساسی ایجاد نمی‌کند. در پاسخ موج رونده $u_s = u(0) \exp[i(sKa - \omega_K t)]$ ، مقادیر مجاز K عبارت‌اند از:

$$K = 0, \quad \pm \frac{2\pi}{L}, \quad \pm \frac{4\pi}{L}, \quad \pm \frac{6\pi}{L}, \dots, \frac{N\pi}{L} \quad (14)$$

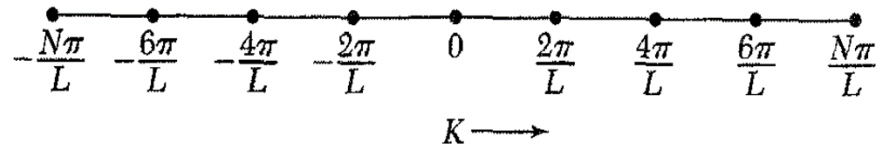
نکته: موج برخلاف حالت قبل، رونده است و می‌تواند روی حلقه دور بزند.

اعمال شرایط مرزی و استنتاج رابطه (۱۴):

$$\begin{aligned} u(sa) = u(sa + L) &\rightarrow e^{iska} = e^{i(sa+L)k} \rightarrow e^{ikL} = 1 \\ &\rightarrow kL = \pm 2\pi n \rightarrow k = \pm \frac{2\pi n}{L} \end{aligned}$$

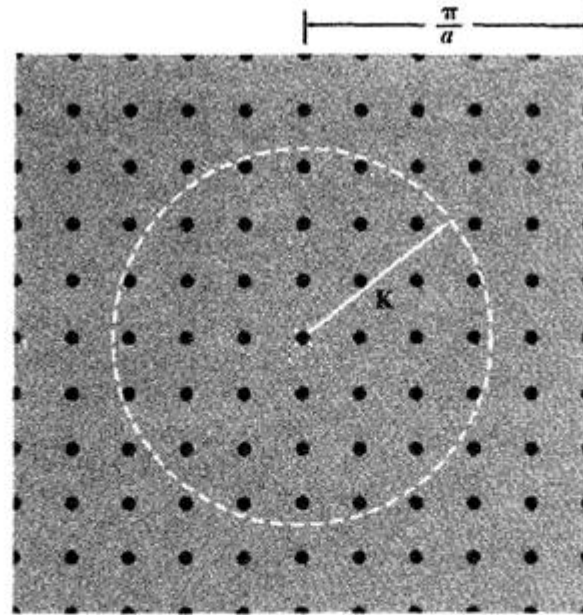


شکل ۴. N ذره را در نظر بگیرید که مقید به لغزش روی یک حلقه دایره‌ای باشند.



شکل ۵. مقادیر مجاز بردار موج K که از اعمال شرایط مرزی دوره‌ای در مورد شبکه خطی با دوره $N = 8$ اتم روی خطی به طول L به دست آمده است. پاسخ $K = 0$ مد یکتواخت است. نقاط ویژه $\pm N\pi/L$ فقط یک تک‌پاسخ نمایش می‌دهند، زیرا $\exp(i\pi s)$ با $\exp(-i\pi s)$ یکسان است. بنابراین هشت مد مجاز وجود دارد

این روش شمارش، همان تعداد مدهایی (یکی به ازای هر اتم متحرک) را ارائه می‌دهد که از رابطه (۱۲) به دست می‌آید. ولی در اینجا مقادیر K هم مثبت‌اند و هم منفی و بازه بین مقادیر متوالی K برابر $\Delta K = 2\pi/L$ است. برای شرایط مرزی دوره‌ای، تعداد مدها در واحد گستره واحد K برای $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$ و در غیر این صورت صفر است. این وضعیت در مورد شبکه دوبعدی در شکل ۶ نشان داده شده است.



$$N = \frac{\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} = \pi k^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2$$



شکل ۶. مقادیر مجاز بردار موج K ی فونونها در فضای فوریه برای یک شبکه مربعی یا ثابت شبکه a ، که در مورد آن شرایط مرزی دوره‌ای روی مربعی به ضلع $L = 10a$ اعمال شده است. حد یکنواخت با ضربدر مشخص شده است. در هر سطحی به مساحت $(2\pi/L)^2 = (2\pi/10a)^2$ یک مد مجاز موجود است، در نتیجه تعداد گردشده نقاط مجاز در دایره‌ای به مساحت πK^2 برابر است با $\pi K^2 (L/2\pi)^2$.

چگالی حالتها در سه بعد

شرایط مرزی دوره‌ای را روی N^3 یاخته بسط در مکعبی به ضلع L به کار می‌بریم. بنابراین، \mathbf{K} با این شرط معین می‌شود:

$$\exp[i(K_x x + K_y y + K_z z)] \equiv \exp\{i[K_x(x+L) + K_y(y+L) + K_z(z+L)]\} \quad (16)$$

در نتیجه

$$K_x, K_y, K_z = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots; \pm \frac{N\pi}{L} \quad (17)$$

بنابراین در هر حجم $(2\pi/L)^3$ از فضای \mathbf{K} یک مقدار مجاز \mathbf{K} وجود خواهد داشت، یا به عبارت دیگر، تعداد مقادیر مجاز \mathbf{K} در واحد حجم فضای \mathbf{K} برای هر قطبیدگی و برای هر شاخه عبارت است از

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{V}{8\pi^3} \quad (18)$$

حجم نمونه برابر است با $V = L^3$.

با استفاده از رابطه (18) تعداد کل مدهایی که بردار موجی کوچکتر از \mathbf{K} دارند برابر است با $(L/2\pi)^3$ ضربدر حجم کره‌ای به شعاع \mathbf{K} . در نتیجه برای هر نوع قطبیدگی داریم

$$N = (L/2\pi)^3 (4\pi K^3/3) \quad (19)$$

چگالی حالتها برای هر قطبیدگی برابر است با

$$D(\omega) = dN/d\omega = (VK^2/2\pi^2)(dK/d\omega) \quad (20)$$

استنتاج دقیق رابطه ۱۹:

$$N = \frac{4}{3}\pi k^3 \frac{V}{(2\pi)^3} = (19) \rightarrow N = \frac{k^3 V}{6\pi^2}, \quad V = L^3$$

تعداد حالتها در واحد گستره k

$$\frac{V}{8\pi^3} d^3k$$

$$\rightarrow \frac{dN}{d^3k} = \frac{V}{8\pi^3}$$

مدل دبی در مورد چگالی حالتها

در تقریب دبی سرعت صوت، همانند پیوستارکشسان مکانیکی، برای هر نوع قطبیدگی ثابت فرض می شود. رابطه پاشیدگی به این صورت نوشته می شود

$$\omega = vK \quad (21)$$

که در آن v سرعت ثابت صوت است.

چگالی حالتها با استفاده از روابط ۲۰ و ۲۱ بصورت زیر خواهد بود:

$$D(\omega) = V\omega^2 / 2\pi^2 v^3 \quad (22)$$



اگر N یاخته بسیط در نمونه وجود داشته باشد، تعداد کل مدهای فونونی اکوستیکی برابر N است.

معرفی بردار موج قطع و بسامد قطع:

$$N = \frac{k_D^3 V}{6\pi^2} \rightarrow k_D = \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \quad \omega_D = vk_D = v \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$$

رابطه (۱۹) یک بسامد قطع ω_D را تعیین می‌کند:

$$\omega_D^3 = 6\pi^2 v^3 N/V \quad (23)$$

به این بسامد یک بردار موج قطع در فضای \mathbf{K} مربوط می‌شود:

$$K_D = \omega_D/v = (6\pi^2 N/V)^{1/3} \quad (24)$$

در اسلاید قبلی
بدست آمدند

بر مبنای مدل دبی مدهای بردار موجی که بزرگتر از K_D است مجاز نیستند. تعداد مدهای با $K \leq K_D$ ، تعداد درجات آزادی شبکه تک‌اتمی را کامل می‌کند.

انرژی گرمایی رابطه (۹) برای هر نوع قطبیدگی به این صورت بیان می‌شود

$$U = \int d\omega D(\omega) \langle n(\omega) \rangle \hbar\omega = \int_0^{\omega_D} d\omega \left(\frac{V\omega^2}{2\pi^2 v^3} \right) \left(\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/\tau} - 1} \right) \quad (25)$$

برای اختصار فرض می‌کنیم که سرعت فونون از نوع قطبیدگی مستقل باشد، در نتیجه طرف راست رابطه بالا را در ۳ ضرب می‌کنیم و خواهیم داشت

$$U = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/\tau} - 1} = \frac{3Vk_B^3 T^3}{2\pi^2 v^3 \hbar^3} \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \quad (26)$$

که در آن $x \equiv \hbar\omega/\tau \equiv \hbar\omega/k_B T$ و

$$x_D \equiv \hbar\omega_D/k_B T \equiv \theta/T \quad (27)$$

این رابطه دمای دبی θ را برحسب ω_D تعریف می‌کند که با رابطه (۲۳) تعریف شده است. θ را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\theta = \frac{\hbar v}{k_B} \cdot \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (28)$$

$$U = \sum_K \sum_p \frac{\hbar\omega_{K,p}}{\exp(\hbar\omega_{K,p}/\tau) - 1} \quad (8)$$

$$U = \sum_p \int d\omega D_p(\omega) \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/\tau) - 1} \quad (9)$$

در نتیجه انرژی کل فونونی برابر است با

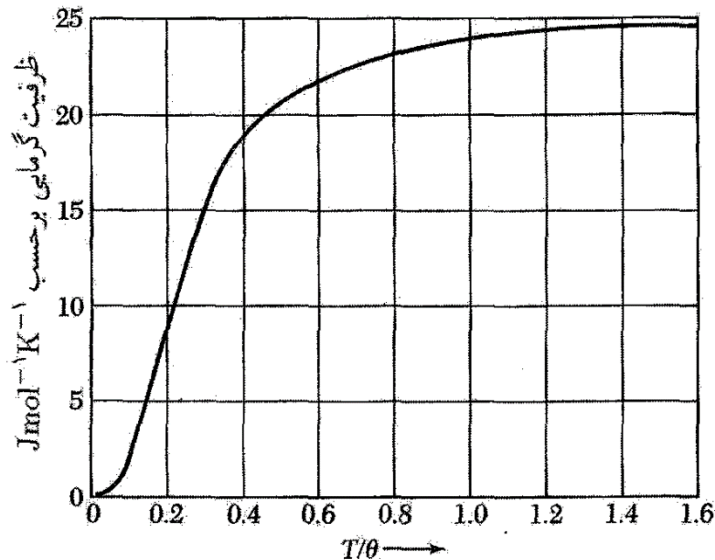
$$U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \quad (29)$$

که در آن N تعداد اتمهای موجود در نمونه و $x_D = \theta/T$ است.

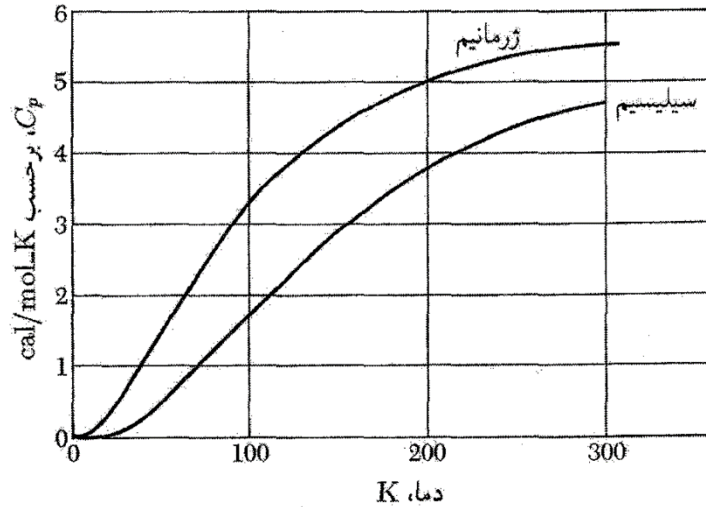
ظرفیت گرمایی به آسانی از بخش میانی رابطه (26) نسبت به دما به دست می آید. به این ترتیب،

$$C_V = \frac{3V\hbar^2}{2\pi^2 v^3 k_B T^2} \int_0^{w_D} dw \frac{\omega^2 e^{\hbar\omega/\tau}}{(e^{\hbar\omega/\tau} - 1)^2} = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (30)$$

در شکل ۷ ظرفیت گرمایی دبی رسم شده است. در $T \gg \theta$ ظرفیت گرمایی به مقدار کلاسیکی $3Nk_B$ نزدیک می شود. مقادیر تجربی برای سیلیسیم و ژرمانیم در شکل ۸ ترسیم شده است.



شکل ۷. ظرفیت گرمایی C_V جامد، طبق تقریب دبی. مقیاس عمودی برحسب $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ است. مقیاس افقی دماست که نسبت به دمای دبی θ بهنجار شده است. ناحیه مربوط به قانون T^3 پایین دمای θ است. به ازای مقادیر بزرگ T/θ مقدار مجانبی برابر $24.943 \text{ J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ است.



شکل ۸. ظرفیت گرمایی سیلیسیم و ژرمانیم. به کاهش در دماهای پایین توجه کنید. برای تبدیل $\text{cal/mol}\cdot\text{K}$ به $\text{J/mol}\cdot\text{K}$ آن را در ۱۸۶ ضرب می‌کنیم.

قانون T^3 دیبی

در دماهای بسیار پایین به طور تقریبی می‌توان حد بالای انتگرال را در رابطه (۲۹) بینهایت فرض کرد. بنابراین خواهیم داشت:

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \int_0^{\infty} dx x^3 \sum_{s=1}^{\infty} \exp(-sx) = 6 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s^4} = \frac{\pi^4}{15} \quad (31)$$

که جمع‌زنی روی s^{-4} در جدولهای استاندارد موجود است. بنابراین برای $T \ll \theta$ داریم:

$$U \cong \frac{3\pi^4}{5} Nk_B T^4 / \theta^3$$

$$C_V \cong \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 = 234 Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \quad (32)$$

این رابطه تقریب T^3 دیبی است: نتایج تجربی برای آرگون در شکل ۹ ترسیم شده است.

مدل اینشتین در مورد چگالی حالتها

انرژی گرمایی N نوسانگر را، که همه دارای بسامد یکسان ω در یک بعدند، در نظر بگیرید. چگالی حالت‌های اینشتین برابر است با $D(\omega) = N\delta(\omega - \omega_0)$ ، که تابع دلتا در ω متمرکز است. انرژی گرمایی دستگاه برابر است با

$$U = N\langle n \rangle \hbar\omega = \frac{N\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/\tau} - 1} \quad (33)$$

که اکنون برای سادگی از ω به جای ω_0 استفاده شده است. ظرفیت گرمایی این نوسانگرها به گونه‌ی زیر بیان می‌شود و نمودارش در شکل ۱۱ بیان شده است.

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{\tau} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/\tau}}{(e^{\hbar\omega/\tau} - 1)^2} \quad (34)$$

این رابطه نتیجه‌ی مدل اینشتین (۱۹۰۷) برای سهم N نوسانگر با بسامد یکسان، در ظرفیت گرمایی جامد است. در سه بعد به جای N ، $3N$ قرار می‌دهیم، زیرا هر نوسانگر دارای سه بعد خواهد بود. حد C_V در دماهای بالا برابر $3Nk_B$ می‌شود که به مقدار دولون و پتی مشهور است.

در دماهای پایین، رابطه (۳۴) به گونه‌ی $\exp(-\hbar\omega/\tau)$ کاهش می‌یابد، در حالی که معلوم شده است شکل تجربی سهم فونونی به گونه‌ی T^3 است، که پیش از این با مدل دبی توجیه شد. به هر حال، مدل اینشتین اغلب برای تقریب زدن بخش فونون اپتیکی طیف فونونی به‌کار می‌رود.