فصل پنجم

فونونها (2). ویژگیهای گرمایی

۱– شمارش مدهای بهنجار

۲– چگالی حالتها – مدل دبی و مدل اینشتین

۳– انبساط گرمایی و رسانندگی گرمایی

شمارش مدهای بهنجار

انرژی مجموعه‌ای از نوسانگرها با بسامد $\omega_{K,p}$ در تعادل گرمایی از رابطه‌های (۱) و (۲) به‌دست می‌آید:

$$U = \sum_K \sum_p \frac{\hbar\omega_{K,p}}{\exp(\hbar\omega_{K,p}/\tau) - ۱} \qquad (۸)$$

معمولاً مناسبتر است که جمع روی K با انتگرال تعویض شود. فرض کنید بلور دارای $D_p(\omega)d\omega$ مد با قطبش خاص p در گسترهٔ بسامدی ω تا $\omega + d\omega$ باشد. در این‌صورت انرژی برابر است با

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega}$$

$$U = \sum_p \int d\omega D_p(\omega) \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/\tau) - ۱} \qquad (۹)$$

ظرفیت گرمایی شبکه، با دیفرانسیل‌گیری نسبت به دما به‌دست می‌آید. فرض کنید

$$x = \hbar\omega/\tau = \hbar\omega/k_B T$$

در این‌صورت، $\partial U/\partial T$ می‌دهد:

$$C_{\text{lat}} = k_B \sum_p \int d\omega D_p(\omega) \frac{x^{۲} \exp x}{(\exp x - ۱)^{۲}} \qquad (۱۰)$$

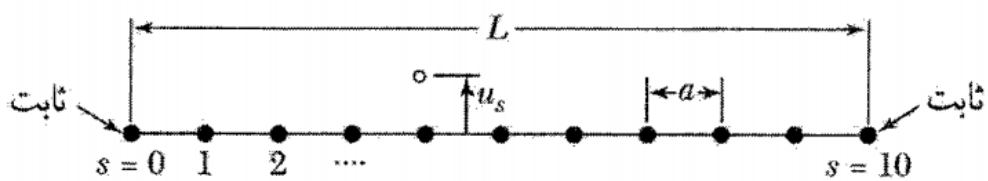
مسئلهٔ اساسی یافتن $D(\omega)$، یعنی تعداد مدها در واحد گسترهٔ بسامد است. این تابع را چگالی مدها یا، غالباً، چگالی حالتها می‌نامند.

چگالی حالتها در یک بعد

مسئلهٔ مقدار مرزی را برای خطی یک‌بعدی (شکل ۲) به طول L، که شامل $N + ۱$ ذره به فاصلهٔ a از یکدیگر است، در نظر بگیرید. فرض کنید ذرات $s = ۰$ و $S = N$ در دو انتها ثابت نگه‌داشته شوند. هر مُد ارتعاشی بهنجار با قطبش p به شکل موج ایستاده است، که در آن u_s جابه‌جایی ذرهٔ s است:

$$u_s = u(۰) \exp(-i\omega_{K,p}t) \sin sKa. \qquad (۱۱)$$

که در آن $\omega_{K,p}$ و K با یک رابطهٔ پاشیدگی مناسب به‌هم مربوط می‌شوند.



شکل ۲. خط کشسانی از $N + ۱$ اتم، با $N = ۱۰$ برای شرایط مرزیی که در آن اتمهای انتهایی $s = ۰$ و $s = ۱۰$ ثابت‌اند. جابه‌جایی ذرات در مدهای بهنجار، هم برای جابه‌جاییهای طولی و هم برای جابه‌جاییهای عرضی، به شکل $u_s \alpha \sin Ka$ است. این عبارت به‌خودی خود برای اتم واقع در انتهای $s = ۰$ صفر است، و K را به‌گونه‌ای برمی‌گزینیم که جابه‌جایی انتهای دیگر، یعنی $s = ۱۰$، نیز صفر شود.

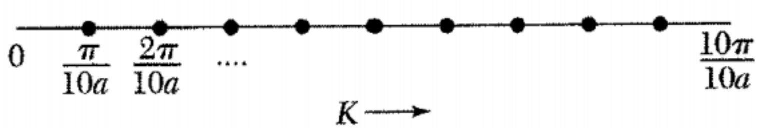
همان‌گونه که در شکل ۳ نشان داده شده است، شرایط مرزی انتها ثابت، K را به مقادیر زیر محدود می‌کنند

$$K = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \frac{3\pi}{L}, \cdots, \frac{(N-1)\pi}{L} \qquad (12)$$

شرط (۱۲) را می توان بصورت زیر استناج کرد:

$$u_0 = 0 \quad \text{و} \quad u_N = 0 \quad \rightarrow \sin(Nka) = 0 \;\rightarrow\; Nka = n\pi$$

$$\rightarrow \; k = \frac{n\pi}{Na} = \frac{n\pi}{L}$$



شکل ۳. شرط مرزی $\sin sKa = 0$ به‌ازای $s = 10$ را می‌توان با گزینش $K = \pi/10a, 2\pi/10a, 9\pi/10a$ برآورده کرد، که در آن $10a$ برابر طول خط، یعنی L، است. این شکل در فضای K رسم شده است. نقطه‌ها اتم نیستند، بلکه مقادیر مجاز Kاند. از تعداد $N+1$ ذره واقع بر خط، فقط $N-1$ عدد از آنها مجاز به حرکت‌اند، و عمومی‌ترین حرکت آنها را می‌توان برحسب $N-1$ مقدار مجاز K بیان کرد. این کوانتیدگی به‌هیچ‌وجه ربطی به مکانیک کوانتومی ندارد، بلکه به‌طور کلاسیکی از این شرایط مرزی نتیجه می‌شود که اتمهای انتهایی باید ثابت باشند.

پاسخ مربوط به $K = N\pi/L = \pi/a = K_{\max}$ به‌صورت $u_s \alpha \sin s\pi$ خواهد بود. از آنجا که $\sin s\pi$ در روی هر اتم صفر می‌شود، این پاسخ هیچ حرکتی را برای اتمها مجاز نمی‌دارد. بنابراین، در رابطهٔ (۱۲)، $N - ۱$ مقدار مجاز مستقل برای K وجود دارد. این عدد برابر تعداد ذراتی است که مجاز به حرکت‌اند. هر مقدار مجاز K به یک موج ایستاده مربوط می‌شود.

بعبارتی به ازای هر k در رابطه ۱۲ به یک موج ایستاده می رسیم که فقط در s=0 و s=L صفر است ولی به ازای k فوق به ازای تمامی s ها صفر است.

مثال

پاسخ به‌ازای $K = \pi/L$ به‌صورت زیر است

$$u_s \alpha \sin(s\pi a/L) \qquad (۱۳)$$

و همان‌گونه که لازم است برای $s = ۰$ و $s = N$ برابر صفر می‌شود.

محاسبه چگالی حالتها یا تعداد مدها در گستره واحد k در یک بعد

در ابتدای اسلاید قبلی گفته شد که بیشترین مقدار k برابر $\frac{\pi}{a}$ می باشد بنابراین برای k های بزرگتر از این مقدار چگالی حالتها صفر است و برای مقادیر کمتر از این میزان، تناسبی به شکل زیر می بندیم:

یک مد $\quad \Delta k = \frac{\pi}{L}$

؟ $\quad$ گستره واحد k

از رابطه فوق:

چگالی حالتها = $\frac{L}{\pi}$

طرح دیگری برای محاسبه چگالی حالتها

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

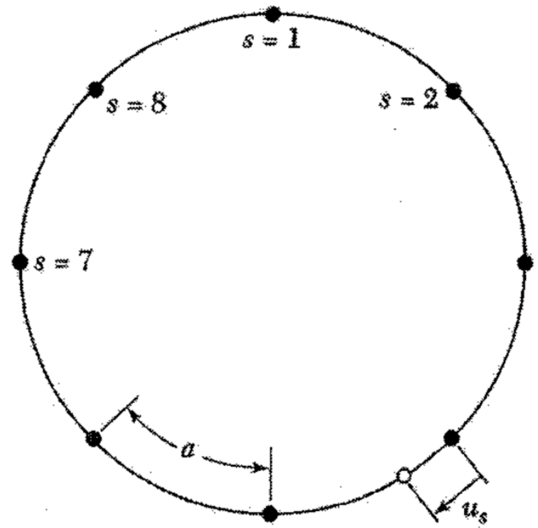
$$K = \circ, \quad \pm\frac{۲\pi}{L}, \quad \pm\frac{۴\pi}{L}, \quad \pm\frac{۶\pi}{L}, \cdots, \frac{N\pi}{L} \qquad (۱۴)$$

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

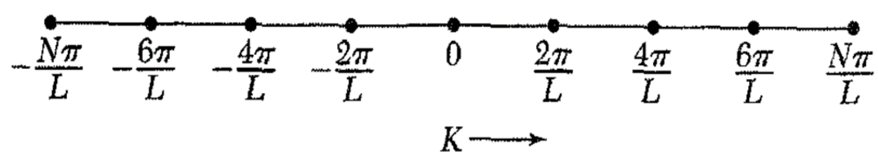
اعمال شرایط مرزی و استنتاج رابطه (١٤):

$$u(sa) = u(sa+L) \rightarrow e^{iska} = e^{i(sa+L)k} \rightarrow e^{ikL} = 1$$

$$\rightarrow kL = \pm 2\pi n \rightarrow k = \pm\frac{2\pi n}{L}$$



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



شکل ۵. مقادیر مجاز بردار موج K که از اعمال شرایط مرزی دوره‌ای در مورد شبکهٔ خطی با دورهٔ $N = ۸$ اتم روی خطی به طول L به‌دست آمده است. پاسخ $K = ۰$ مُد یکنواخت است. نقاط ویژهٔ $\pm N\pi/L$ فقط یک تک‌پاسخ نمایش می‌دهند، زیرا $\exp(i\pi s)$ با $\exp(-i\pi s)$ یکسان است. بنابراین هشت مُد مجاز وجود دارد