Тема 5. Фононы

П.1. Квантовая модель твердого вещества

П.2. Модель связанных осцилляторов

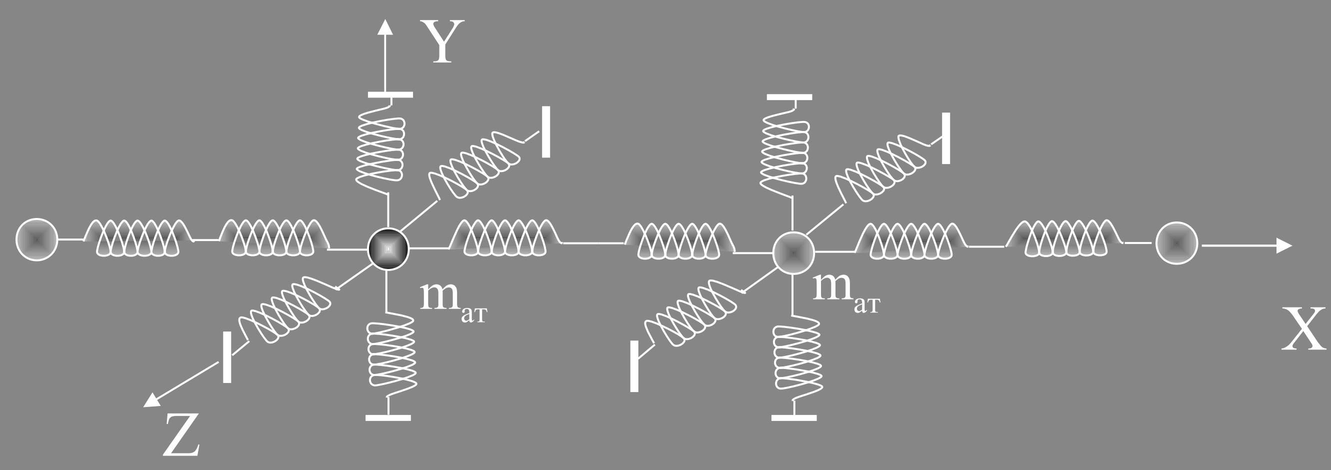
П.3. Фононы

П.4. Теплоемкость твердого тела

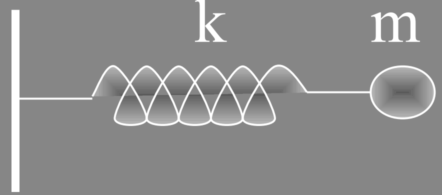
П.1. Квантовая модель твердого вещества

Проблема: Как моделировать кристаллическое вещество?

Атомы (ионы), расположенные в узлах кристаллической решетки совершают колебательное тепловое движение.

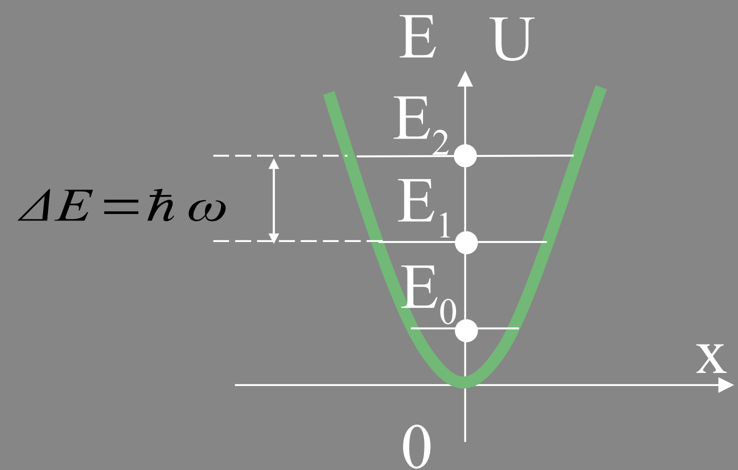


Вспомним: квантовый осциллятор – шарик на пружинке, подчиняющийся квантовым законам, т.е. у которого энергия квантуется.



Потенциальная энергия

$$U=\frac{kx^2}{2}.$$



$$\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}.$$

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$

- уровень энергии с номером n, где n = 0, 1, 2, …

Энергия у одного осциллятора будет постоянно меняться со временем.

Набор осцилляторов, моделирующих вещество, является макросистемой. Ее основная характеристика – температура.

Средняя энергия осциллятора имеет вид:

$$\text{¿}E_{осц}> = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{exp(\frac{\hbar\omega}{\kappa T}) - 1}.$$

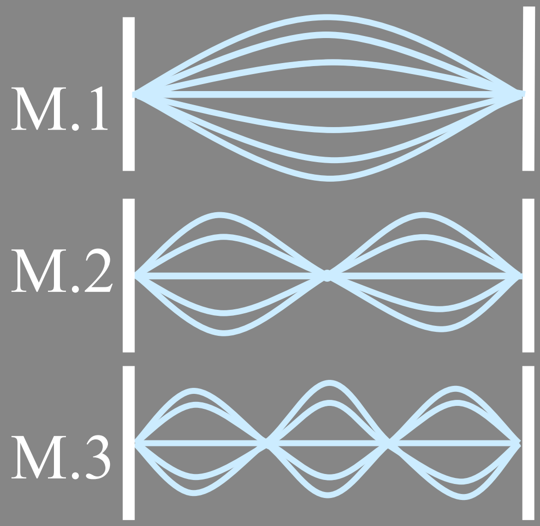
ЗАМЕЧАНИЕ: У любого осциллятора имеется нулевая энергия, меньше которой энергия не может быть. Ее величина равна первому слагаемому в данной формуле.

П.2. Модель связанных осцилляторов

Значительно более точной является модель связанных квантовых осцилляторов. Рассмотрим ее подробнее.

Поскольку атомов в линейке очень много, то каждую линейку атомов можно заменить струной.

Известно, что в струне возможны стоячие волны. Каждая стоячая волна – нормальное колебание струны.



Результат вычисления концентрации МОД с частотами от ω до ω + dω :

$$\frac{dN_\omega}{dv} \equiv n_\omega = \frac{\omega^2 d\omega}{2\pi^2 v^3},$$

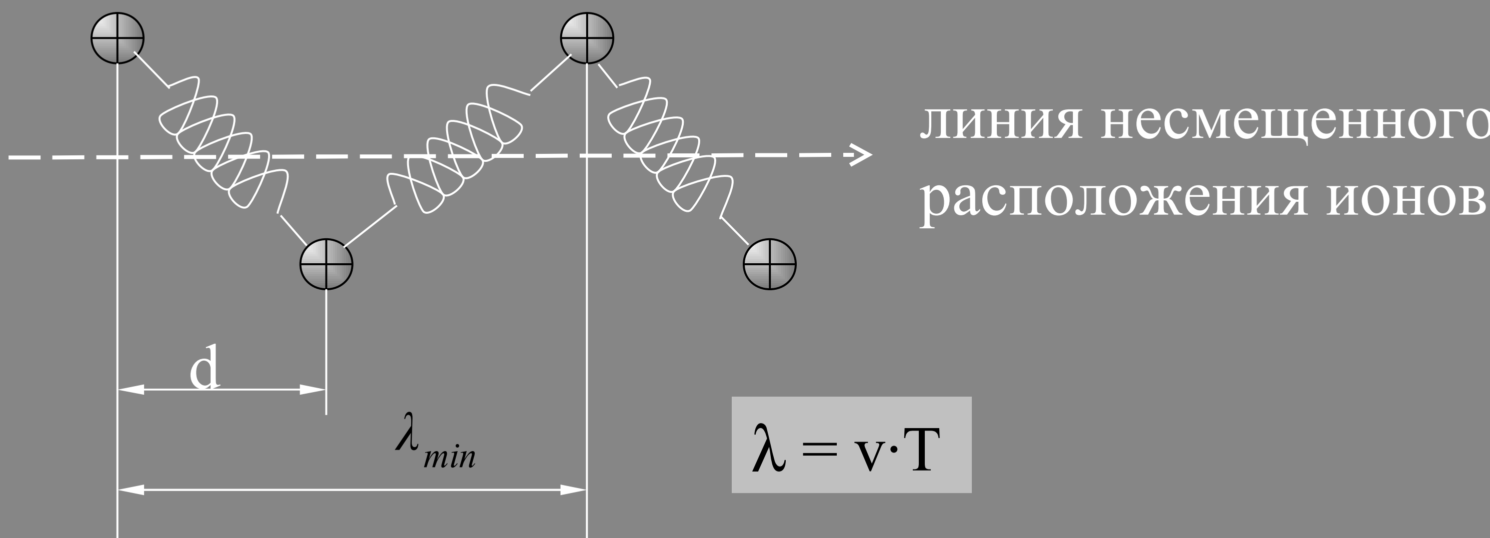
где v – фазовая скорость распространения звуковой волны в веществе.

Выводы:

1.Система атомов в кристалле – совокупность связанных осцилляторов.

2.Любое тепловое движение атомов в кристаллах есть суперпозиция нормальных колебаний («стоячих волн», нормальных МОД).

3.Для такой системы есть <u>минимальная</u> длина стоячей волны (<u>максимальная частота</u>): $\lambda_{min} \approx 2d$.



$\lambda = v \cdot T$

$$\omega_{max} = 2\pi\nu_{max} = \frac{2\pi}{T_{min}} = \frac{2\pi v}{\lambda_{min}} = \frac{\pi v}{d}.$$

Наличие максимальной частоты существенно влияет на тепловые свойства вещества.

П.3. Фононы

Движение в совокупности связанных осцилляторов характеризуется стоячими волнами, у каждой из которых своя длина волны λ_n и частота ω_n .

Стоячая волна, характеризующая движение совокупности связанных осцилляторов, называется МОДой.

У каждой моды амплитуда стоячей волны квантована, т.е. квантована энергия МОДы. Приращение энергии моды кратно величине $\Delta E = \hbar\,\omega$.

Изменение энергии моды на ΔE можно интерпретировать, как поглощение или испускание некоторой частицы, называемой фононом, т.е.

$$\Delta E = \hbar\,\omega_n = E_{ФОН}.$$

ФОНОН это частица, излучаемая и поглощаемая квантовыми осцилляторами, объединенными в цепочки.

В этой модели передача энергии от МОДы к МОДе описывает движение фонона.

Фонон имеет свою энергию, может двигаться в веществе, но не может существовать в пустоте.

Этим фононы отличаются от фотонов, которые могут существовать как в пустоте, так и в веществе (при наличии совокупности атомов).

П.4. Теплоемкость твердого тела

Проблема: Как вычисляется теплоемкость кристаллической решетки на основе модели фононного газа?

Фононный газ подчиняется статистике Бозе-Эйнштейна для бозонов.

Для бозонов не действует принцип Паули, у них спиновое квантовое число равно единице ($s_{ФОН} = 1$).

В состоянии с данной энергией может находиться сколько угодно фононов.

Рассмотрим фононный газ: для него имеется ограничение по длине волны $\lambda_{min} \approx 2\mathrm{d}$ и частоте

$$\omega_{max} = \frac{\pi v}{d} = \pi v \cdot \sqrt[3]{n_{am}}.$$

Точная формула, полученная из подробного решения данной задачи с использованием квантовой статистики, дает похожее уравнение

$$\omega_{max} = v \cdot \sqrt[3]{6\pi^2 n_{am}} = 3{,}9\, v \cdot \sqrt[3]{n_{am}}.$$

Задача: Найти характерную температуру, вблизи которой сказывается наличие ω_{max} .

Решение: Энергия фонона равна средней энергии теплового движения при этой температуре $E_{ФОН}(\omega_{max}) = E_{ТЕПЛ}(\vartheta_D)$.
Отсюда

$$\hbar\omega_{max} = k \cdot \vartheta_D, \quad где$$

$$\vartheta_D = \frac{\hbar\omega_{max}}{k}$$ называется температурой Дебая.

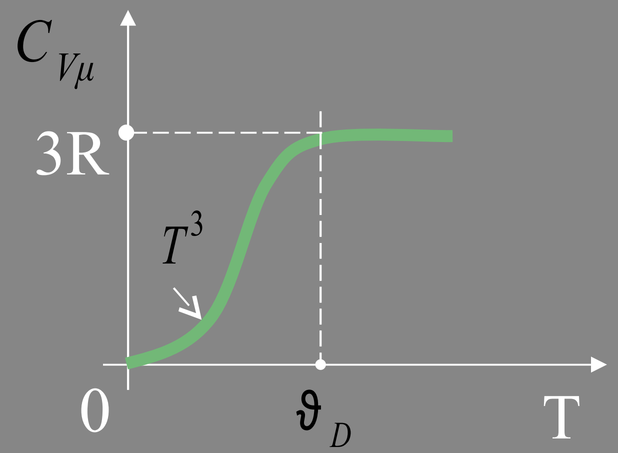
Характерные величины температуры Дебая: медь – 340К, алмаз - 2000К.

Ответ: наличие максимальной частоты сказывается при температуре, близкой к температуре Дебая.

Вычислим внутреннюю энергию фононного газа, продифференцируем ее по температуре и получим теплоемкость

$$C_V = \frac{dU}{dT}.$$

Изобразим график зависимости теплоемкости от температуры



Вывод 1: Если, $T << \vartheta_D$,

то $C_{V\mu} \sim T^3$. «Закон T^3 - Дебая».

Вывод 2: При $T >> \vartheta_D$ $C_{V\mu} = 3R$ - закон Дюлонга-Пти.