Fononi v 1D

Mihaly, naloga 6.5.

Mitja Štimulak

19. oktober 2011

1 Naloga

Kakšna je karakteristična nizko in visoko temperaturna odvisnost *števila fononov* (N), *fononske energije* (E) in *specifične toplote* (C_v) za enodimenzionalni fononski plin, če energijsko disperzijsko relacijo opišemo z Debyevo aproksimacijo.

1.1 Debyeva aproksimacija

Z Debyevo aproksimacijo poskušamo opisati nizko in visoko temperaturno limito specifične toplote. To dosežemo tako, da predpostavimo **linearno disperzijsko zvezo**

$$\omega = ck \tag{1}$$

in integrala v k-prostoru ne izvedemo samo v prvi Brillouinovi coni, ampak po **sferi z radijem** k_D.
Radij k_D izberemo tako, da vsebuje natančno M dovoljenih valovnih vektorjev, kjer je M število atomov v kristalu. Za 1D kristal tako zapišemo

$$\frac{2\pi}{L}M = k_D \tag{2}$$

$$k_D = 2\pi n \tag{3}$$

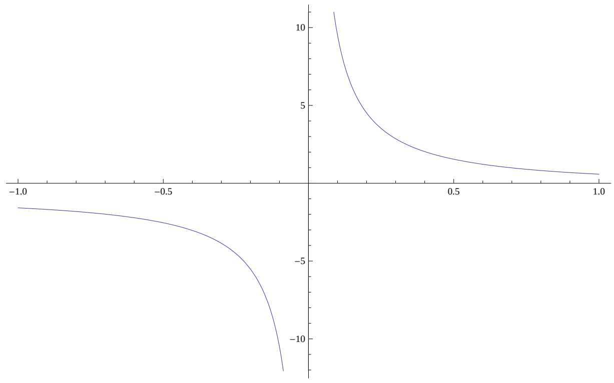
kjer je n številska gostota delcev.
Gostoto stanj lahko potem zapišemo kot

$$D(\omega)d\omega = \frac{L}{\pi}\frac{dk}{d\omega}d\omega = \frac{L}{c\pi}d\omega \tag{4}$$

1.2 Število fononov

Povprečno zasedenost enodelčnega stanja n_k zapišemo z Bose-Einsteinovo statistiko.

$$< n_k >= \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_k} - 1} \tag{5}$$



Slika 1: $\frac{1}{e^x-1}$

Število fononov torej dobimo tako, da seštejemo po vseh enodelčnih stanjih.

$$N = \sum_k < n_k > \tag{6}$$

V skladu z zgornjo aproksimacijo lahko vsoto nadomestimo z integralom.

$$N = \int_0^{\omega_D} D(\omega) \frac{d\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \tag{7}$$

1.2.1 Nizka limita

Za lažje računanje najprej uvedemo novo spremenljivko $x = \beta\hbar\omega$.

$$N = \frac{L}{c\pi} \int_0^{\frac{x}{\beta\hbar}} \frac{dx}{\beta\hbar} \frac{1}{e^x - 1} = \infty \tag{8}$$

Slika 1 prikazuje graf funkcije $1/(e^x - 1)$. Vidimo, da integral za $x \to 0$ divergira. $\lim_{x\to 0} \frac{1}{e^x-1} = \infty$.

1.2.2 Visoka limita

Iz istega razloga kot zgoraj tudi za visoke temperature integral divergira. Kar vidimo tudi tako, da imenovalec razvijemo. Ker integrand divergira kot $1/x$ v limiti $x \to 0$ je integral enako ∞.

$$N = \frac{L}{c\pi\beta\hbar} \int_0^{\frac{x}{\beta\hbar}} \left(\frac{1}{x} + ...\right) = \infty \tag{9}$$

1.3 Energija

Energijo zapišemo kot

$$E = \int_0^{\omega_D} d\omega D(\omega) f\_\hbar\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{L}{\pi c} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} d\omega \tag{10}$$

Nizka temperatura Zgornjo mejo postavimo v neskončnost. Uvedemo novo spremenljivko $x \equiv \beta\hbar\omega$.

$$E = \frac{L}{\pi c}\frac{1}{\beta^2\hbar}\int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1}dx = \frac{\pi L}{6c\hbar}(k_B T)^2 \tag{11}$$

Visoka temperatura Za visoke temperature zopet uporabimo zgornji razvoj.

$$\begin{aligned} E &= \frac{L}{c\pi}\int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega d\omega}{\beta\hbar\omega + \frac{(\beta\hbar\omega)^2}{2} + \frac{(\beta\hbar\omega)^3}{6} + ...} = \frac{L}{\pi c}\int_0^{\omega_D} \frac{\beta\hbar\omega}{\beta}\frac{1}{\beta\hbar\omega}(1 - \frac{(\beta\hbar\omega)}{2} + \frac{(\beta\hbar\omega)^2}{12})d\omega \\ &= \frac{L}{\pi c}(k_B T)\Big(\omega_D - \frac{\beta\hbar\omega_D^2}{4} + \frac{(\beta\hbar)^2\omega_D^3}{36}\Big) \end{aligned} \tag{12}$$

1.4 Specifična toplota

Če postavimo $x \equiv \beta\hbar\omega$, zapišemo specifično toploto z

$$C = k_B \int_0^{\omega_D} d\omega D(\omega)\frac{x^2}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} \tag{13}$$

Še lažje jo izračunamo direktno iz energije.

$$c_V = \frac{\partial E}{\partial T} \tag{14}$$

Nizka temperatura

$$C = \frac{\pi L}{3c\hbar}k_B^2 T \tag{15}$$

Specifična temperatura pri nizkih temperaturah narašča linearno, v nasprotju s 3D kristalom, kjer je odvisnost $\propto T^3$.

Visoka temperatura

$$C = \frac{L}{\pi c}(k_B\omega_D - \frac{\hbar^2\omega^3}{k_B T^2} + ...) \tag{16}$$

Za visoke temperature pa prav tako, kot pri 3D kristalu dobimo konstantno vrednost. (Dulong–Petit)