Fononska gostota stanj v dveh dimenzijah
Domača naloga pri Fiziki trdne snovi

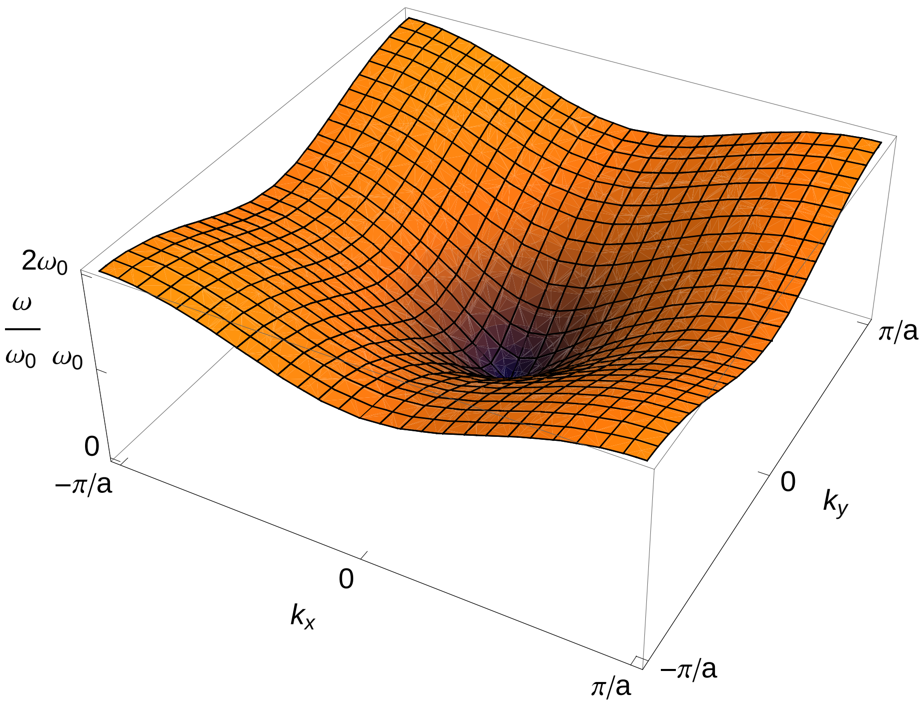
Marko Mravlak

25. maj 2008

Naloga: Za dvodimenzionalen fononski sistem z disperzijsko relacijo

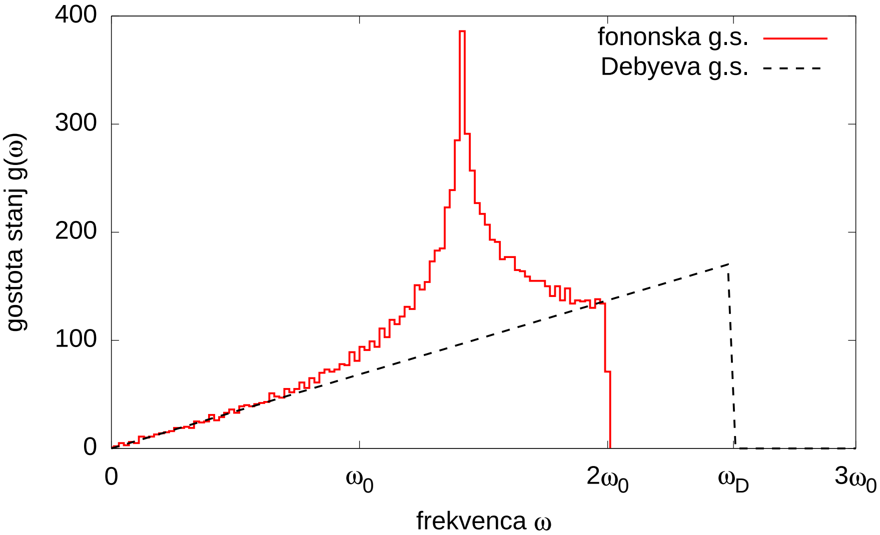
$$\omega^2 = \omega_0^2[2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)] \tag{1}$$

izračunaj fononsko gostoto stanj s pomočjo računalnika. Razdeli veljavna območja za vrednosti k_x in k_y na enake dele. Razdeli tudi energijsko območje na enake dele. Preštej koliko k-stanj pade v dan energijski interval in naredi histogram. Z uporabo enakih območij nariši še primerno Debyevo gostoto stanj ([1] *nal 4.6*).



Slika 1: Dvodimenzionalna fononska disperzija, ki jo podaja enačba 1.

Rešitev: Gostota stanj izračunamo numerično po postopku opisanem v navodilu. Pri računanju sem uporabil vrednosti $a = 1$, $\omega_0 = 1$ in k-ravnino razdelil na mrežo 100×100 točk za območje $k_x \in [0, \pi]$ in $k_y \in [0, \pi]$. Gostota stanj je prikazana v histogramu na sliki 2.



Slika 2: Gostota stanj za dvodimenzionalen fononski sistem z disperzijsko relacijo 1 za $a = 1$ in $\omega_0 = 1$ ter Debyeva gostota stanj. Enote za gostoto stanj niso normalizirane.

Debyevo gostoto stanj dobimo tako, da razvijemo disperzijsko zvezo 1 za majhne k:

$$\omega^2 = \omega_0^2[2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)] \approx \frac{(\omega_0 a)^2}{2}(k_x^2 + k_y^2) \tag{2}$$

$$\omega = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} a|k| \; . \tag{3}$$

Gostoto stanj lahko zapišemo s pomočjo grupne hitrosti $\mathbf{v} = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$ kot

$$g = Z \int \frac{\mathrm{d}S}{8\pi^3} \frac{1}{\hbar|\mathbf{v}(\mathbf{k})|} \; , \tag{4}$$

kjer poteka integral po površini s konstantno energijo. Za fonone v dveh dimenzijah to zapišemo kot

$$g = \int \frac{\mathrm{d}l}{4\pi^2} \frac{1}{\hbar|\mathbf{v}|} \; , \tag{5}$$

kjer je $\mathrm{d}l = \sqrt{(\mathrm{d}k_x)^2 + (\mathrm{d}k_y)^2}$ in integriramo po poti s konstantno frekvenco v k-ravnini.

Upoštevamo, da je velikost grupne hitrosti $|\mathbf{v}| = \omega_0 a/\sqrt{2}$ ter uvedemo polarne koordinate $\mathrm{d}l = k\mathrm{d}\varphi$ in dobimo za Debyevo gosototo stanj:

$$g_D = \frac{1}{4\pi^2\hbar} \int_0^{2\pi} \frac{k\mathrm{d}\varphi}{a\omega_0/\sqrt{2}} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{2}{a^2\omega_0^2}\omega \; . \tag{6}$$

Debyevo frekvenco izračunamo po definiciji:

$$\int_0^{\omega_D} g_D(\omega)\mathrm{d}\omega = \int g(\omega)\mathrm{d}\omega \;, \tag{7}$$

kjer je $g(\omega)$ dejanska gostota stanj. Od tod dobimo:

$$\omega_D = \sqrt{2\pi}\omega_0 \;. \tag{8}$$

Gornji rezultat za Debyevo gostoto stanj je prikazan na sliki 2. Opazimo, da se gostoti stanj ujemata pri nizkih frekvencah in pri $\omega = 2\omega_0$. Debyeva frekvenca je večja kot največja zastopana frekvenca pri dejanski gostoti stanj.

Literatura

[1] L. Mihály in M. C. Martin, *Solid State Physics, Problems and Solution* (Wiley, New York, 1996).