مکانیک آماری

جلسه هجدهم

محمدرضا مظفری

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

اسفند ۹۹

فونون

۱ در یک جامد ، انرژی می تواند در ارتعاشات اتمهای مرتب شده در یک شبکه ذخیره شود. به همان روشی که فوتون ها امواج الکترومغناطیسی کوانتیزه هستند که برانگیختگی ابتدایی میدان الکترومغناطیسی را توصیف می کنند، فونون ها نیز امواج شبکه کوانتیزه هستند که برانگیختگی ابتدایی ارتعاشات شبکه را توصیف می کنند.

۲ به جای بررسی رفتار ارتعاشی هر اتم بطور جدا، تمرکز بر روی normal mode های سیستم است که به طور مستقل از یکدیگر نوسان می کنند.

۳ با هر normal mode ، می توان بصورت یک نوسانگر هارمونیک ساده رفتار کرد و بنابراین می تواند حاوی تعداد صحیحی از کوانتوی انرژی باشد.

فونون

۴ این کوانتوهای انرژی می توانند "ذرات" گسسته‌ای در نظر گرفته شوند، که بصورت فونون شناخته می‌شوند. با ارزیابی مکانیک آماری مجموعه‌ای از نوسانگرهای هارمونیک ساده می‌توان خصوصیات ترمودینامیکی یک جامد را به همان روشی که برای فوتون ها در فصل قبل انجام شد محاسبه کرد.

۵ برای توصیف جامدات معمولاً از دو مدل استفاده می شود:

- انیشتین
- دبای

ما به ترتیب هر دو بخش را در اینجا ارزیابی می‌کنیم.

مدل انیشتن

۱ به طور دقیق، هر جامد اتمی، دارای $3N-6$ حالت ارتعاشی است. چون هر اتم می تواند در هر یک از سه جهت حرکت کند، سیستم دارای $3N$ درجه آزادی است. شش حالت را کم کرده‌ایم چون مربوط به انتقال و چرخش کلی جامد است. وقتی بزرگ باشد، می‌توان از شش در مقابل $3N$ صرفه‌نظر کرد.

۲ مدل اینشتین با فرض اینکه تمام مدهای ارتعاشی ماده جامد دارای فرکانس یکسانی ω_E هستند، مسئله را بررسی می کند. ما فرض خواهیم کرد که این normal mode ها مستقل هستند و با یکدیگر برهمکنش ندارند. در این حالت، تابع پارش Z را می‌توان بصورت حاصلضرب زیر نوشت،

$$Z = \prod_{k=1}^{3N} Z_k$$

مدل انیشتن

تابع پارش

$$Z = \prod_{k=1}^{3N} Z_k$$

Z_k تابع پارش یک مد واحد است.

$$Z_k = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\left(n+\frac{1}{2}\right)\beta\hbar\omega_E}$$

با گرفتن لگاریتم از طرفین تابع پارش

$$\ln Z = \ln \prod_{k=1}^{3N} Z_k \Rightarrow \ln Z = \sum_{k=1}^{3N} \ln Z_k$$

مدل انیشتن

تابع پارش

$$\ln Z = \sum_{k=1}^{3N} \ln Z_k, \qquad Z_k = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\left(n+\frac{1}{2}\right)\beta\hbar\omega_E}$$

$$Z_k = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\left(n+\frac{1}{2}\right)\beta\hbar\omega_E} = e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_E} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega_E}$$

$$\boxed{\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}, \quad |x| \ll 1}$$

$$Z_k = \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_E}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}}$$

مدل انیشتن

تابع پارش

$$\ln Z = \sum_{k=1}^{3N} \ln Z_k, \qquad Z_k = \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_E}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}}$$

عبارت $\frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_E}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_E}}$ مستقل از k است. یعنی،

$$Z_1 = Z_2 = \cdots = Z_k = \cdots$$

بنابراین،

$$\sum_{k=1}^{3N} \ln Z_k = \ln Z_1 + \ln Z_2 + \cdots + \ln Z_{3N} = 3N \ln \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_E}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}}.$$

مدل انیشتن

تابع پارش

$$\ln Z = 3N \ln \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_E}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}}$$

$$\ln Z = 3N \left(-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_E - \ln[1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}] \right)$$

انرژی داخلی

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z$$

$$U = 3N\hbar\omega_E \left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega_E}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}} \right)$$

مدل انیشتن

انرژی داخلی

$$U = 3N\hbar\omega_E\left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega_E}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}}\right)$$

$$\frac{e^{-\beta\hbar\omega_E}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}} \times \frac{e^{\beta\hbar\omega_E}}{e^{\beta\hbar\omega_E}} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_E} - 1}$$

$$\boxed{U = 3N\hbar\omega_E\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_E} - 1}\right)}$$

مدل انیشتن

انرژی داخلی

$$U = 3N\hbar\omega_E \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_E} - 1}\right)$$

حالتهای حدی:

- $T \longrightarrow \infty$

$$e^{\beta\hbar\omega_E} = 1 + \beta\hbar\omega_E + \cdots$$

$$\lim_{T\longrightarrow\infty} \frac{U}{3N\hbar\omega_E} \longrightarrow \frac{k_B T}{\hbar\omega_E}$$

- $T \longrightarrow 0$

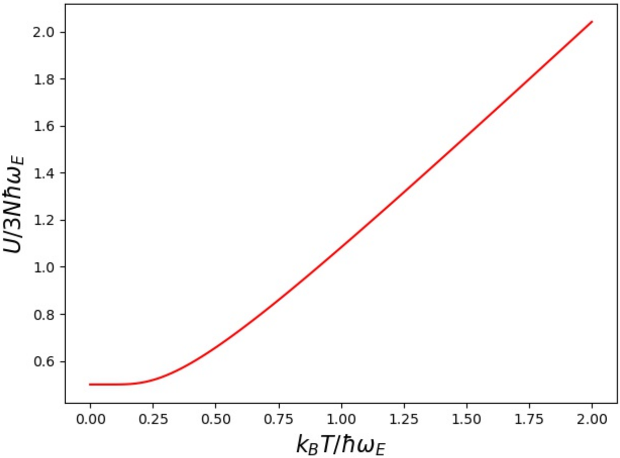
$$\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_E} - 1} \longrightarrow 0$$

$$\lim_{T\longrightarrow 0} \frac{U}{3N\hbar\omega_E} \longrightarrow \frac{1}{2}$$

مدل انیشتن

انرژی داخلی

$$\frac{U}{3N\hbar\omega_E} = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_E} - 1}$$



مدل انیشتن

انرژی داخلی

$$U = 3N\hbar\omega_E\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_E} - 1}\right)$$

ظرفیت گرمایی

$$C = \frac{\partial U}{\partial T}$$

$$C = -3N\hbar\omega_E \frac{e^{\beta\hbar\omega_E}}{(e^{\beta\hbar\omega_E} - 1)^2}\left(-\frac{\hbar\omega_E}{k_B T^2}\right)$$

$$\boxed{C = 3Nk_B\left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\beta\hbar\omega_E}}{(e^{\beta\hbar\omega_E} - 1)^2}}$$

مدل انیشتن
ظرفیت گرمایی

$$C = 3Nk_B\left(\frac{\hbar\omega_E}{k_BT}\right)^2\frac{e^{\beta\hbar\omega_E}}{(e^{\beta\hbar\omega_E}-1)^2}$$

حالتهای حدی:

- دماهای بالا $T \longrightarrow \infty$

$$e^{\beta\hbar\omega_E} = 1+\beta\hbar\omega_E+\cdots\,, \qquad \frac{e^{\beta\hbar\omega_E}}{(e^{\beta\hbar\omega_E}-1)^2} \approx \frac{1+(\beta\hbar\omega_E)}{(\beta\hbar\omega_E)^2}$$

$$\lim_{T\longrightarrow\infty}\frac{C}{3Nk_B} \longrightarrow 1$$

- دماهای پایین $T \longrightarrow 0$

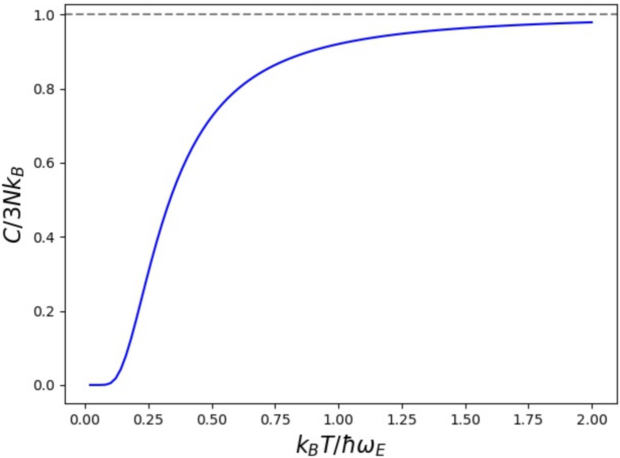
$$\frac{e^{\beta\hbar\omega_E}}{(e^{\beta\hbar\omega_E}-1)^2}\times\frac{e^{-2\beta\hbar\omega_E}}{e^{-2\beta\hbar\omega_E}} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega_E}}{(1-e^{-\beta\hbar\omega_E})^2} \longrightarrow e^{-\beta\hbar\omega_E}$$

$$\lim_{T\longrightarrow 0}\frac{C}{3Nk_B} \longrightarrow \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_BT}\right)^2 e^{-\beta\hbar\omega_E}$$

مدل انیشتن

ظرفیت گرمایی

$$C = 3Nk_B\left(\frac{\hbar\omega_E}{k_BT}\right)^2\frac{e^{\beta\hbar\omega_E}}{(e^{\beta\hbar\omega_E}-1)^2}$$

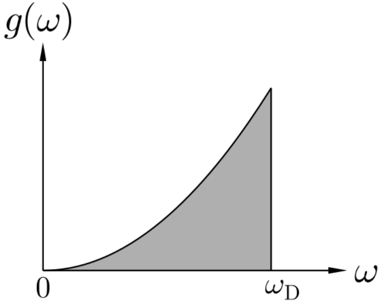


مدل دبای

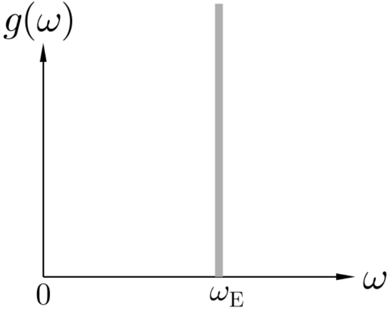
تعداد کل حالتها را می‌توان با انتگرالگیری از چگالی حالتها بدست آورد،

$$\boxed{\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = 3N}$$

$$g(\omega) = 3\sum_q \delta(\omega - \omega_q)$$

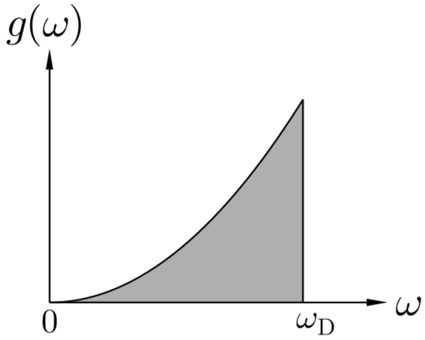


$$g(\omega) = 3N\delta(\omega - \omega_E)$$



مدل دبای

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = 3N$$



$$g(\omega) = 3\sum_q \delta(\omega - \omega_q)$$

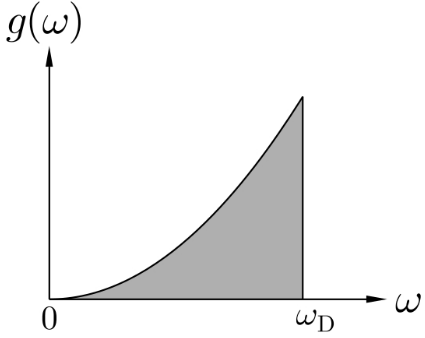
$$\omega_q = v_s q$$

$$g(\omega) = 3\sum_q \delta(\omega - v_s q)$$

$$g(\omega) = 3\sum_q \frac{\delta(q - \omega/v_s)}{v_s}$$

مدل دبای

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = 3N$$



$$g(\omega) = 3\sum_q \frac{\delta(q-\omega/v_s)}{v_s}$$

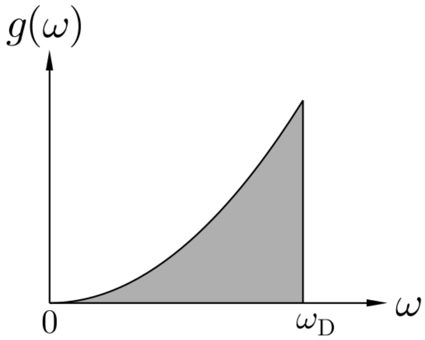
$$\sum_q \longrightarrow V\int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3}$$

$$g(\omega) = \frac{3V}{(2\pi)^3 v_s}\int \mathrm{d}^3 q\delta(q-\omega/v_s)$$

$$g(\omega) = \frac{3V}{(2\pi)^3 v_s}\int 4\pi q^2\,\mathrm{d}q\delta(q-\omega/v_s)$$

مدل دبای

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = 3N$$



$$g(\omega) = \frac{3V}{(2\pi)^3 v_s}\int 4\pi q^2\,\mathrm{d}q\delta(q-\omega/v_s)$$

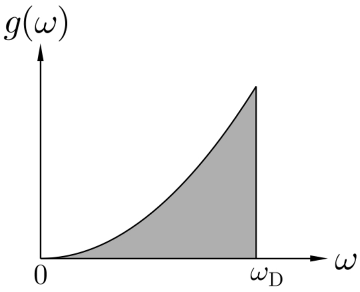
$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_s}\int q^2\,\mathrm{d}q\delta(q-\omega/v_s)$$

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_s}\left(\frac{\omega}{v_s}\right)^2$$

$$\boxed{g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3}\omega^2}$$

مدل دبای

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = 3N$$



$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3}\omega^2$$

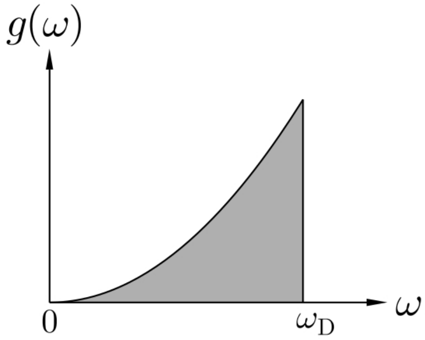
$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = 3N$$

$$\frac{3V}{2\pi^2 v_s^3}\int_0^{\omega_D} \omega^2\mathrm{d}\omega = 3N$$

$$\frac{V}{2\pi^2 v_s^3}\omega_D^3 = 3N \Rightarrow \boxed{\omega_D = \left(\frac{6N\pi^2 v_s^3}{V}\right)^{1/3}}$$

مدل دبای

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = 3N$$



$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3}\omega^2$$

$$\frac{V}{2\pi^2 v_s^3}\omega_D^3 = 3N \Rightarrow \frac{V}{2\pi^2 v_s^3} = \frac{3N}{\omega_D^3}$$

$$g(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2$$

مدل دبای

در دوبعد

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = 2N$$

$$g(\omega) = 2\sum_q \delta(\omega - v_s q) = 2\sum_q \frac{\delta(q - \omega/v_s)}{v_s}$$

$$\sum_q \to A\int \frac{\mathrm{d}q^2}{(2\pi)^2}$$

$$g(\omega) = 2\frac{A}{(2\pi)^2 v_s}\int \delta(q - \omega/v_s)(2\pi q)\mathrm{d}q$$

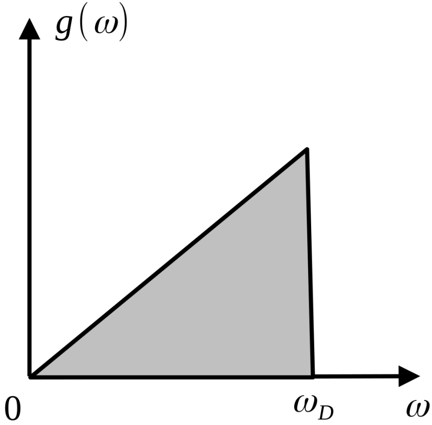
$$g(\omega) = \frac{A}{\pi v_s}\int \delta(q - \omega/v_s) q\mathrm{d}q$$

$$\boxed{g(\omega) = \frac{A}{\pi v_s^2}\omega}$$

مدل دبای

در دوبعد

$$g(\omega) = \frac{A}{\pi v_s^2}\omega$$



$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = 2N$$

$$\frac{A}{\pi v_s^2}\frac{1}{2}\omega_D^2 = 2N \Rightarrow \boxed{\omega_D = \sqrt{\frac{4N\pi v_s^2}{A}}}$$

$$g(\omega) = \frac{4N}{\omega_D^2}\omega$$

مدل دبای

در یک بعد

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = N$$

$$g(\omega) = \sum_q \delta(\omega - v_s q) = \sum_q \frac{\delta(q - \omega/v_s)}{v_s}$$

$$\sum_q \to L\int \frac{\mathrm{d}q}{(2\pi)}$$

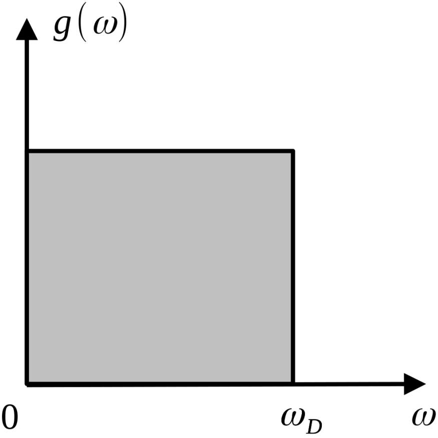
$$g(\omega) = \frac{L}{2\pi v_s}\int \delta(q - \omega/v_s)\mathrm{d}q$$

$$\boxed{g(\omega) = \frac{L}{2\pi v_s}}$$

مدل دبای

در یک بعد

$$g(\omega) = \frac{L}{2\pi v_s}$$



$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega = N$$

$$\frac{L}{2\pi v_s}\omega_D = N \Rightarrow \boxed{\omega_D = \frac{2N\pi v_s}{L}}$$

$$g(\omega) = \frac{N}{\omega_D}$$

مدل دبای

در یک بعد

$$\omega_D = \frac{2N\pi v_s}{L}, \quad g(\omega) = \frac{N}{\omega_D}$$

در دوبعد

$$\omega_D = \left(\frac{4N\pi v_s^2}{A}\right)^{1/2}, \quad g(\omega) = \frac{4N}{\omega_D^2}\omega$$

در سه بعد

$$\omega_D = \left(\frac{6N\pi^2 v_s^3}{V}\right)^{1/3}, \quad g(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2$$