مکانیک آماری

جلسه بیست

محمدرضا مظفری

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

اسفند ۹۹

رابطه پاشندگی فونونی

چگالی حالتهای فونونی

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

$$\ln Z = \int_0^{\omega_D} \ln \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1 - e^{\beta\hbar\omega}} g(\omega)\mathrm{d}\omega$$

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

رابطه پاشندگی فونونی

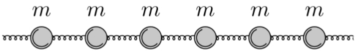
$$\omega = \omega(q)$$

رابطه پاشندگی فونونی

تا اینجا فرض کردیم که رابطه پراکندگی فونون توسط معادله

$$\omega = v_s q$$

داده شده است. اجازه دهید ابتدا ارتعاشات روی یک زنجیره خطی تک اتمی را در نظر بگیریم، هر اتم با جرم m توسط یک فنر با ثابت نیرو K به نزدیکترین همسایه متصل می شود. جابجایی از موقعیت تعادل جرم nام با کمیت u_n داده می شود.



لاگرانژ جرم nام بصورت

$$\mathcal{L}_n = \frac{1}{2} m\dot{u}_n^2 - \frac{1}{2} K(u_{n+1} - u_n)^2 - \frac{1}{2} K(u_n - u_{n-1})^2$$

داده می‌شود.

رابطه پاشندگی فونونی

$$\mathcal{L}_n = \frac{1}{2}m\dot{u}_n^2 - \frac{1}{2}K(u_{n+1} - u_n)^2 - \frac{1}{2}K(u_n - u_{n-1})^2$$

معادله حرکت جرم nام توسط رابطه زیر بدست می‌آید،

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}_n}{\partial \dot{u}_n}\right) = \frac{\partial \mathcal{L}_n}{\partial u_n}$$

$$m\ddot{u}_n = K(u_{n+1} - u_n) - K(u_n - u_{n-1})$$

$$m\ddot{u}_n = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})$$

جواب پیشنهادی برای جابجایی جرم nام بصورت

$$u_n = Ae^{i(qna - \omega t)}$$

داده می‌شود.

رابطه پاشندگی فونونی

$$m\ddot{u}_n = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})$$

$$\begin{cases} u_n & = Ae^{i(qna-\omega t)} \\ u_{n-1} & = Ae^{i(q(n-1)a-\omega t)} \\ u_{n+1} & = Ae^{i(q(n+1)a-\omega t)} \end{cases}$$

$$-m\omega^2 Ae^{i(qna-\omega t)} = K(e^{iqa} - 2 + e^{-iqa})Ae^{i(qna-\omega t)}$$

$$-m\omega^2 \color{red}{Ae^{i(qna-\omega t)}} = K(e^{iqa} - 2 + e^{-iqa})\color{red}{Ae^{i(qna-\omega t)}}$$

$$-m\omega^2 = K(e^{iqa} - 2 + e^{-iqa})$$

$$m\omega^2 = K(2 - 2\cos qa) = 2K(1 - \cos qa) = 4K\sin^2\frac{qa}{2}$$

رابطه پاشندگی فونونی

$$m\omega^2 = 4K\sin^2\frac{qa}{2}$$

$$\boxed{\omega^2 = \frac{4K}{m}\sin^2\frac{qa}{2}}$$

در طول موجهای بلند $q \to 0$

$$\omega^2 \to \frac{4K}{m}\left(\frac{qa}{2}\right)^2 = a^2\frac{K}{m}q^2$$

$$\omega \to a\sqrt{\frac{K}{m}}q$$

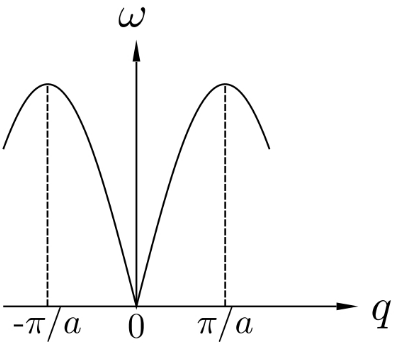
اگر نتیجه بدست آمده را با رابطه پاشندگی خطی فونونها (یعنی $\omega = v_s q$) مقایسه کنیم، سرعت انتشار موج فونونی در امتداد زنجیره بصورت زیر داده می‌شود،

$$v_s = \frac{\partial\omega}{\partial q} = a\sqrt{\frac{K}{m}}.$$

رابطه پاشندگی فونونی

$$\omega^2 = \frac{4K}{m}\sin^2\frac{qa}{2}$$

$$\boxed{\omega = \sqrt{\frac{4K}{m}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|}$$



$$q = 0 \Rightarrow \omega = 0$$

$$\frac{\partial\omega}{\partial q} = 0 \Rightarrow qa = \pm\pi$$

$$\omega_{\text{max}} = \sqrt{\frac{4K}{m}}$$

$$\text{FBZ}: \quad -\pi/a \le q \le \pi/a$$

رابطه پاشندگی فونونی

$$\omega = \sqrt{\frac{4K}{m}}|\sin\frac{qa}{2}|$$

چگالی حالتها

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

$$\sum_{q\in\mathrm{FBZ}} \to \frac{L}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \mathrm{d}q, \quad L = Na$$

$$g(\omega) = \frac{L}{2\pi}\int \delta(\omega - \omega(q))\mathrm{d}q = 2\frac{L}{2\pi}\int_0^{\pi/a} \delta(\omega - \omega(q))\mathrm{d}q$$

$$\omega - \omega(q_0) = 0 \Rightarrow \omega - \sqrt{\frac{4K}{m}}\sin\frac{q_0 a}{2} = 0 \Rightarrow \sin\frac{q_0 a}{2} = \sqrt{\frac{m}{4K}}\omega$$

$$\delta(\omega - \omega(q)) = \delta(\omega - \sqrt{\frac{4K}{m}}\sin\frac{qa}{2}) = \frac{\delta(q - q_0)}{\frac{a}{2}\sqrt{\frac{4K}{m}}\cos\frac{q_0 a}{2}}$$

رابطه پاشندگی فونونی

چگالی حالتها

$$g(\omega) = 2\frac{L}{2\pi}\int_0^{\pi/a}\delta(\omega-\omega(q))\mathrm{d}q$$

$$\delta(\omega-\omega(q)) = \frac{\delta(q-q_0)}{\frac{a}{2}\sqrt{\frac{4K}{m}}\cos\frac{q_0 a}{2}}$$

$$g(\omega) = 2\frac{L}{2\pi}\frac{1}{\frac{a}{2}\sqrt{\frac{4K}{m}}\cos\frac{q_0 a}{2}}\int_0^{\pi/a}\delta(q-q_0)\mathrm{d}q$$

$$\int_0^{\pi/a}\delta(q-q_0)\mathrm{d}q = 1$$

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a}\frac{1}{\sqrt{\frac{4K}{m}}\cos\frac{q_0 a}{2}}$$

رابطه پاشندگی فونونی

چگالی حالتها

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a} \frac{1}{\sqrt{\frac{4K}{m}} \cos \frac{q_0 a}{2}}$$

$$\sin \frac{q_0 a}{2} = \sqrt{\frac{m}{4K}} \omega$$

$$\cos \frac{q_0 a}{2} = \sqrt{1 - \left(\frac{m}{4K}\right) \omega^2}$$

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a} \frac{1}{\sqrt{\frac{4K}{m} - \omega^2}}$$

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a} \left(\frac{4K}{m} - \omega^2\right)^{-1/2}$$

رابطه پاشندگی فونونی

چگالی حالتها

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a}\left(\frac{4K}{m} - \omega^2\right)^{-1/2}$$

$$\frac{4K}{m} - \omega^2 > 0 \Rightarrow \omega < \sqrt{\frac{4K}{m}}$$

بنابراین

$$\boxed{g(\omega) = \begin{cases} \frac{2L}{\pi a}\left(\frac{4K}{m} - \omega^2\right)^{-1/2} & ,\omega < \sqrt{\frac{4K}{m}} \\ 0 & ,\omega \geq \sqrt{\frac{4K}{m}} \end{cases}}$$

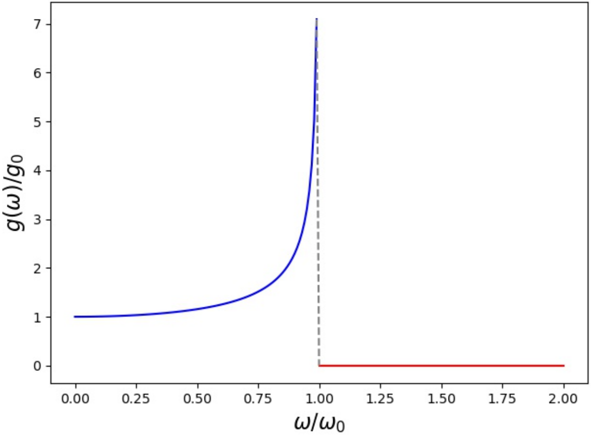
$$\omega_0 = \sqrt{\frac{4K}{m}}$$

$$g_0 = \frac{2L}{\pi a}\sqrt{\frac{m}{4K}}$$

رابطه پاشندگی فونونی

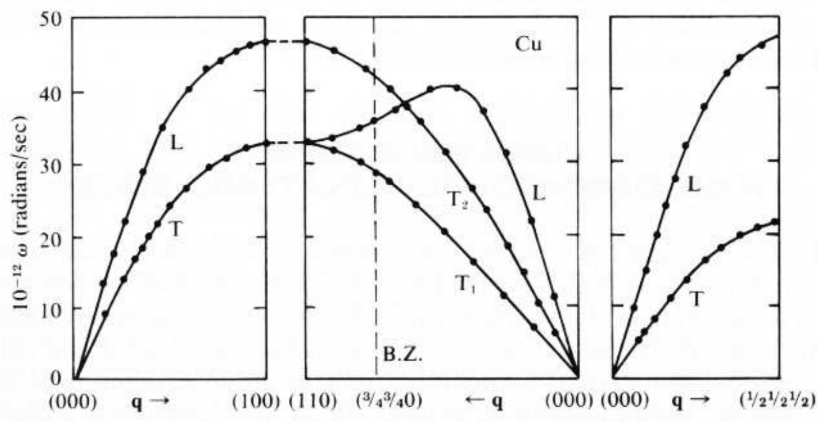
چگالی حالتها

$$g(\omega) = \begin{cases} g_0 \left(1 - (\omega/\omega_0)^2\right)^{-1/2} & , \omega < \omega_0 \\ 0 & , \omega \geq \omega_0 \end{cases}$$

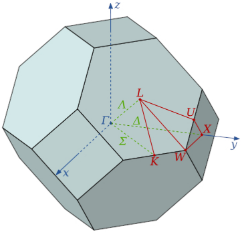


رابطه پاشندگی فونونی

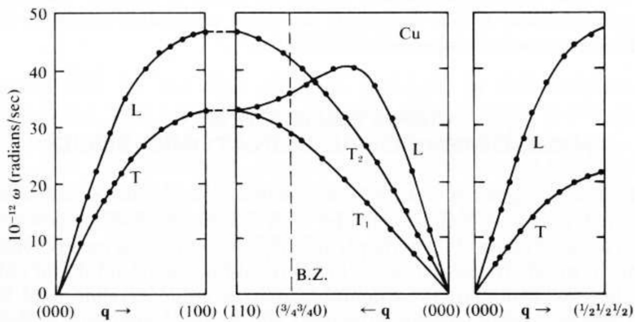
مس یک فلز سه‌بعدی است. رابطه پاشندگی فونون آنرا می‌بایست در سه‌بعد بررسی کرد. در آزمایشگاه وقتی مس تحت تابش نوترونهای آهسته قرار می گیرد. اندازه‌گیری تغییرات اندازه حرکت و انرژی نوترونهای پراکنده شده، نمودار پاشندگی فونونی را می‌دهد.



رابطه پاشندگی فونونی



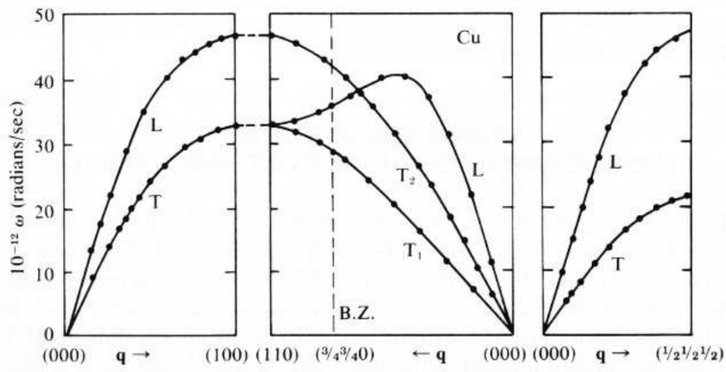
در شکل محور افقی اشاره به مسیری در ناحیه اول بریلوئن (FBZ) دارد و محور قائم فرکانس زاویه فونونی بلور است(ناحیه‌ی اول بریلوئن شبکه fcc)(draft).



رابطه پاشندگی فونونی

برای بردار موج‌های کوچک ($q \to 0$)، فرکانس زاویه‌ای ω متناسب با بردار موج q است، یعنی $\omega = v_s q$ تقریب مناسبی است. نمودار شامل مدهای طولی و عرضی می‌باشد که سرعت صوت در آنها از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید،

$$\frac{3}{v_s^3} = \frac{2}{v_{s,T}^3} + \frac{1}{v_{s,L}^3}$$



رابطه پاشندگی فونونی

چگالی حالتها