Практическое занятие № 8

Спектр нормальных колебаний решетки кристалла

Одной из основных проблем теории колебаний кристаллической решетки является распределение нормальных колебаний по частотам. Рассмотрим простейшие колебания линейной цепочки атомов. Длины волн нормальных колебаний, которые могут возникать в такой цепочке, равны

$$\lambda_n = 2\boldsymbol{L}/\boldsymbol{n} \quad (\boldsymbol{n} = 1, 2, 3, \ldots, \boldsymbol{N}), \tag{4.20}$$

где $\boldsymbol{N}$ – число атомов в одномерной цепочке;

$\boldsymbol{L}$ – длина цепочки (размер кристалла).

Если считать, что колебанию атомов с длиной волны λ_n, определяемой формулой (4.20), соответствует одно нормальное колебание всей кристаллической решетки, то значит, число нормальных колебаний в кристаллической одномерной цепочке будет равно $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{n} = 2\boldsymbol{L}/\lambda_n$. Число нормальных колебаний в кристалле с объемом $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{L}^3$ (куб с ребром $\boldsymbol{L}$) имеет вид $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{n} = (2\boldsymbol{L})^3/\lambda_n^3$.

Более точный расчет числа нормальных колебаний с учетом квантования координатно-импульсного фазового пространства Гильберта дает выражение

$$\boldsymbol{Z} = 4\pi\boldsymbol{V}/\lambda^3$$

Действительно, полный координатно-импульсный фазовый объем для нормальных колебаний, распадающихся на фононы с квазиимпульсом $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{\kappa}$ и спином $\boldsymbol{s} = 1$, с учетом их поляризации $g = 2s + 1 = 3$, есть $\Gamma = gV\dfrac{4\pi}{3}\hbar^3\kappa^3$.

Поскольку объем элементарной ячейки в фазовом пространстве Гильберта равен $(2\pi\hbar)^3$, то полное число таких ячеек в фазовом объеме $\boldsymbol{\Gamma}$, в котором сосредоточены все нормальные колебания с длинами волн вплоть до λ определяется как

$$Z = \frac{\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{4\pi V}{\lambda^3}$$

Известно, что $\lambda = 2\pi v_s/\omega$ где v_s — скорость звука в кристалле, поэтому для Z получаем выражение

$$Z = \frac{V\omega^3}{2\pi^2 v_s^3}. \tag{4.21}$$

После дифференцирования выражения (4.21) по $\boldsymbol{\omega}$ будем иметь число нормальных колебаний, заключенных в интервале от $\boldsymbol{\omega}$ до $\boldsymbol{\omega} + \mathrm{d}\boldsymbol{\omega}$:

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

где функция

$$g(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v_s^3} \tag{4.22}$$

определяет плотность заполнения спектрального отрезка частот **ω** нормальными колебаниями. Иначе говоря, функция g(**ω**) есть ***частотный спектр нормальных колебаний решетки кристалла***, или функция распределения нормальных колебаний по частотам. Поскольку общее число нормальных колебаний в кристаллической решетке равно 3***N*** (число степеней свободы атомов кристалла), то функция g(**ω**) отвечает условию нормировки

$$\int_0^{\omega_D} \mathrm{g}(\omega)\mathrm{d}\omega = 3N\,, \tag{4.23}$$

где $\boldsymbol{\omega}_D$ — максимальная частота, ограничивающая спектр этих колебаний сверху (см. далее).

Из уравнений (4.22) и (4.23) получаем $\dfrac{V\omega_D^3}{2\pi^2 v_s^3} = 3N$, откуда находим выражение для предельно возможной частоты нормальных колебаний в кристаллической решетке:

$$\boldsymbol{\omega}_D = v_s(6\pi^2 \boldsymbol{n})^{1/3}. \tag{4.24}$$

Частота $\boldsymbol{\omega}_D$ называется ***характеристической дебаевской частотой***. Соответствующая ей температура $\Theta_D = \dfrac{\hbar\omega_D}{k_B}$ есть *характеристическая температура Дебая*.

При температуре Дебая в твердом теле возбуждается весь спектр нормальных колебаний, включая колебания с максимальной частотой $\boldsymbol{\omega}_D$ Поэтому дальнейшее повышение температур ($T > \Theta_D$) не может вызвать появления новых нормальных колебаний. Действие температуры в этом случае сводится лишь к увеличению степени возбуждения каждого нормального колебания, приводящего к возрастанию его энергии. Температуры $T > \Theta_D$ принято называть высокими.

Подстановка выражения (4.24) в формулу (4.22) дает следующий вид функции распределения нормальных колебаний:

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

Функция распределения фононов по энергиям

Каждое нормальное колебание несет с собой энергию и импульс. Энергия одного нормального колебания решетки равна энергии осциллятора, колеблющегося с частотой, равной частоте нормального колебания. Такие осцилляторы называются ***нормальными.*** Обозначим энергию *i*-го нормального колебания с частотой $\boldsymbol{\omega}_i$, через $\boldsymbol{E}_{i\text{нк}}$. Полная энергия кристалла, в котором возбуждены все 3***N***

нормальных колебаний, равна $E = \sum_{i=1}^{3N} E_{i\text{нк}}$

С другой стороны, полная энергия кристалла, состоящего из ***N*** атомов, совершающих связанные колебания, равна энергии *3**N*** независимых нормальных линейных гармонических осцилляторов. Поэтому система из ***N*** колеблющихся атомов эквивалентна набору из 3***N*** нормальных осцилляторов, и *средняя энергия системы равна средней энергии* 3***N*** *нормальных осцилляторов*.

Каждый осциллятор представляет собой одно нормальное колебание решетки, в котором участвуют все атомы кристалла, колеблющиеся с одной и той же частотой $\boldsymbol{\omega}$. Энергию квантового гармонического осциллятора, находящегося на уровне $\boldsymbol{n}$, можно представить в виде

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

где $\hbar\omega/2$ — нулевая энергия.

На рис. 4.9 показан энергетический спектр линейного гармонического осциллятора.

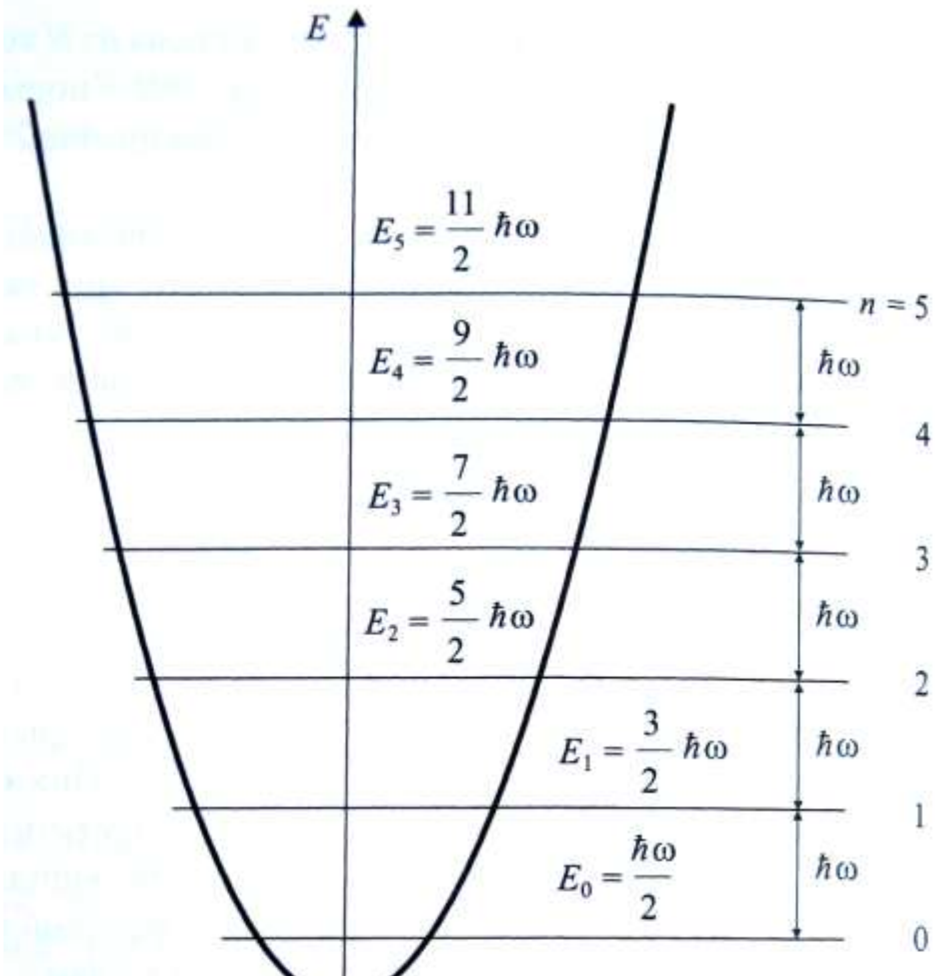

Рис. 4.9. Энергетический спектр линейного гармонического осциллятора

Он состоит из совокупности дискретных уровней, отстоящих друг от друга на величину $\hbar\omega$. Минимальная порция энергии, которую может поглотить или испустить решетка при тепловых колебаниях, соответствует переходу осциллятора с данного энергетического уровня на ближайший соседний уровень. С энергетической точки зрения эта порция, или квант, энергии тепловых колебаний решетки является *фононом.*

При распространении фононы образуют поле упругих волн, заполняющих кристалл, — *фононный газ.* Фононы обладают энергией $\boldsymbol{E}$, а их среднее число с этой энергией при температуре $\boldsymbol{T}$ соответственно равно

$$< n >= f(E) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}.$$

В зависимости от степени теплового возбуждения или иных факторов может испускаться или поглощаться то или иное количество фононов. Так, если нормальное колебание возбуждено до 3-го уровня (см. рис. 4.9), то его энергия определяется как $\boldsymbol{E}_3 = 7/2\hbar\omega$. При этом можно считать, что данное нормальное колебание «порождает» фонона с энергией $\varepsilon_ф = \hbar\omega$ и один фонон с энергией $\hbar\omega/2$. На рис. 4.10 представлена функция распределения $f(\boldsymbol{E})$ фононов по энергиям.

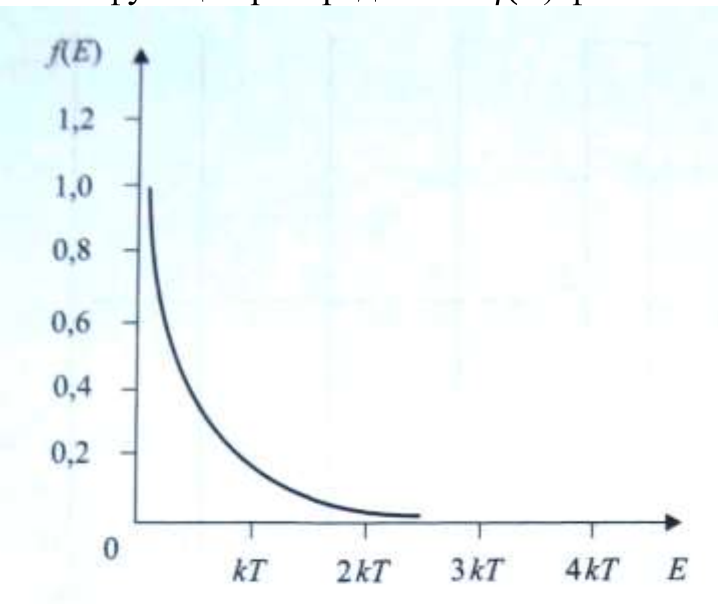

Рис. 4.10. Распределение фононов $f(\boldsymbol{E})$ по энергиям (функция Бозе-Эйнштейна)

Заметим, что при данной температуре $\boldsymbol{T}$ в кристалле возбуждены все нормальные колебания с энергией $\hbar\omega < \boldsymbol{k}_B\boldsymbol{T}$, а колебания с более высокими частотами $\hbar\omega > \boldsymbol{k}_B\boldsymbol{T}$ практически не возбуждаются.

Это показывает также рис. 4.11, на котором представлен энергетический спектр нормальных колебаний, возбуждаемый тепловой энергией $\boldsymbol{k}_B\boldsymbol{T}$ [6]. На этом рисунке горизонтальными штрихами изображены энергетические уровни нормальных коле баний, соответствующие частотам $\omega_1 = \frac{k_B T}{8\hbar}$; $\omega_2 = \frac{k_B T}{4\hbar}$; ; $\omega_3 = \frac{k_B T}{2\hbar}$; ; $\omega_4 = \frac{k_B T}{\hbar}$; ; $\omega_5 = \frac{2k_B T}{\hbar}$..

Пунктиром показан энергетический уровень, отвечающий энергии $\boldsymbol{k}_B\boldsymbol{T}$.

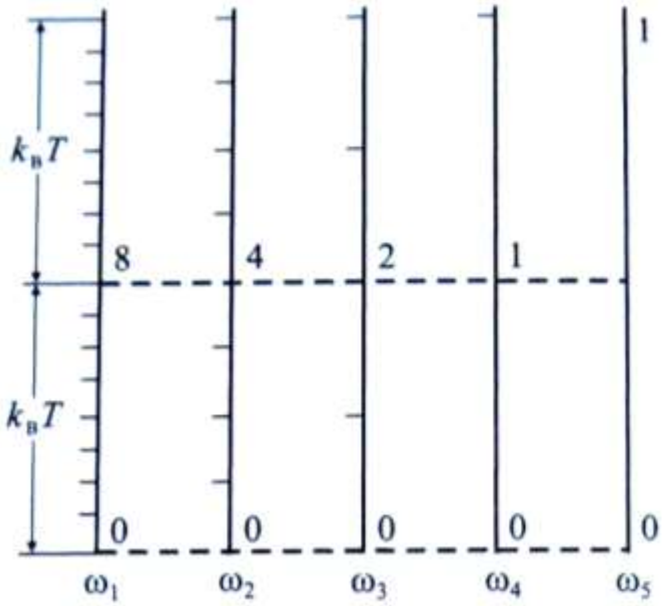

Рис. 4.11. Энергетические спектры нормальных колебаний, порождающих фононы с частотами $\boldsymbol{\omega}_1 - \boldsymbol{\omega}_5$

Из рис. 4.11 видно, что при данной температуре $\boldsymbol{T}$ нормальны колебания с частотой $\boldsymbol{\omega}_1$ возбуждены до 8-го уровня. Это означает, что одно нормальное колебание с частотой $\boldsymbol{\omega}_1$ «порождает» в среднем 8 одинаковых фононов с энергией $\boldsymbol{k}_\text{B}\boldsymbol{T}/8$ каждый.

Нормальное колебание с частотой $\boldsymbol{\omega}_2$ возбуждено до 4-го уровня, порождая при этом 4 фонона с энергией $\boldsymbol{k}_\text{B}\boldsymbol{T}/4$;

нормальное колебание с частотой $\boldsymbol{\omega}_3$ возбуждено до 2-го уоовня. что соответствует рождению двух фононов с энергией $\boldsymbol{k}_\text{B}\boldsymbol{T}/2$.

наконец, нормальное колебание с частотой $\boldsymbol{\omega}_4$ возбуждено до 1-го уровня, что эквивалентно появлению одного фонона с энергией $\boldsymbol{k}_\text{B}\boldsymbol{T}$.

Первый уровень нормального колебания с частотой $\boldsymbol{\omega}_5$ требует для своего возбуждения энергии 2 $\boldsymbol{k}_\text{B}\boldsymbol{T}$, поэтому при температуре $\boldsymbol{T}$ оно появиться не может. Аналогично практически не могут возбудиться и другие нормальные колебания с более высокими энергиями (более высокими частотами).

Следовательно, приближенно можно считать, что при данной температуре $\boldsymbol{T} < \Theta_\text{D}$ в твердом теле возбуждаются нормальные колебания с частотами вплоть до частоты со, которой соответствует квант фонона $\hbar\omega = \boldsymbol{k}_\text{B}\boldsymbol{T}$.

Функция распределения фононов $f(\boldsymbol{E})$ определят среднее число фононов, приходящихся на квантовое состояние, которое характеризуется энергией $\varepsilon_\text{ф} = \hbar\omega$ при данной температуре T.

Поэтому среднюю энергию возбужденного нормального колебания с частотой со при заданной температуре T можно записать в виде следующей формулы:

$$< E >= \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_\text{B}T} - 1}. \tag{4.25}$$

ЗАДАЧИ, РЕКОМЕНДУЕМЫЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

Задача 1.

Определить скорость звука в кристалле.

Температура Дебая $\Theta_D = \Theta_i$ *К*;

плотность $\rho = 7{,}31 \cdot 10^3$ *кг/м*^{3};

молярная масса $\mu = 115 \cdot 10^{-3}$ *кг/моль*;

число Авогадро $N_a = 6 \cdot 10^{23}$ *моль*$^{-1}$.

Вариант	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**	**11**
Θ_i, *К*	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98

Вариант	**12**	**13**	**14**	**15**	**16**	**17**	**18**	**19**	**20**	**21**	**22**
Θ_i, *К*	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109

Задача 2.

Вычислить число нормальных колебаний в кристалле объемом $V = 1$ см^3 для спектра частот ω_{T_1} — ω_{T_2}, соответствующих температурам $T_1 = \boldsymbol{a}_i\Theta_D$ $T_2 = \boldsymbol{b}_i\Theta_D$.

Температура Дебая $\Theta_D = 1160$ *К*.

Скорость звука v_i, *м/сек* — результат решения задачи № 1.

Вариант	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**	**11**
$\boldsymbol{a}_i$	0,1	0,14	0,18	0,22	0,26	0,3	0,34	0,38	0,42	0,46	0,5
$\boldsymbol{b}_i$	0,2	0,24	0,28	0,32	0,36	0,4	0,44	0,48	0,52	0,56	0,6

Вариант	**12**	**13**	**14**	**15**	**16**	**17**	**18**	**19**	**20**	**21**	**22**
$\boldsymbol{a}_i$	0,54	0,58	0,62	0,66	0,7	0,74	0,78	0,82	0,86	0,9	0
$\boldsymbol{b}_i$	0,64	0,68	0,72	0,76	0,8	0,84	0,88	0,92	0,96	1	0,1

Задача 3.

В кристалле при температуре $T_2 = \boldsymbol{b}_i\Theta_D$ *К* ($\boldsymbol{b}_i$ из условий задачи № 2) рождаются нормальные колебания, при каждом испускается 8 фононов частоты ω_1. Определить энергию рождаемых фононов и среднюю энергию возбуждаемого нормального колебания с частотой ω_1 при заданной температуре.

Температура Дебая $\Theta_D = 1000$ *К*.

Задача 4.

Найти длину волны λ, до которой в кристалле возбуждаются нормальные колебания, если;

температура Дебая $\Theta_D = \Theta_i$ *К* (условия задачи 1);

$T_1 = \boldsymbol{a}_i\Theta_D$ (условия задачи 2);

плотность $\rho = 7{,}31 \cdot 10^3$ *кг/м*^{3};

молярная масса $\mu = 115 \cdot 10^{-3}$ *кг/моль*;

число Авогадро $N_a = 6 \cdot 10^{23}$ *моль*$^{-1}$.

Величина	Обозначение	Значение
1. Атомная единица массы	1 а.е.м.=10^{-3} кг $моль^{-1}/N_A$	1,6605655 10^{-27} кг
2. Элементарный заряд	e	1,6021892 10^{-19} Кл
3. Масса покоя электрона	m_e	0,9109534 10^{-30} кг
4. Постоянная Больцмана	$k_Б=R/N_A$	1,38066 10^{-23} Дж/К
5. Универсальная газовая постоянная	R	8,31441 Дж/моль К
6. Постоянная Планка	$\hbar = \frac{h}{2\pi}$	1,0545887 10^{-34} Дж/Гц
7. Постоянная Планка	h	6,626176 10^{-34} Дж/Гц
8. Число Авогадро	N_A	6,0220943 10^{23} $моль^{-1}$
1 эВ = 1,602 176 565(35)·10^{-19} Дж		