
ЛЕКЦИЯ 5

НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ОДНО- И ДВУМЕРНЫХ РЕШЕТОК. ФОНОННЫЙ ГАЗ

Еще раз отметим, что осциллятором в твердом теле является не атом, а фонон — квант нормального колебания. Одно нормальное колебание — это смещение всех атомов, также как и смещение отдельного атома является результатом всех нормальных колебаний. Поскольку колебания у нас нормальные — независимые друг от друга, то мы по сути построили базис. Теперь разложим смещение атома по этому базису, чтобы оценить величину среднеквадратичного смещения отдельного атома.

Понятно, что в случае гармонических колебаний $\overline{U_n(t)} = 0$, значит, имеет смысл говорить о $\overline{U_n^2(t)}$ — это уже не нулевая величина.

До этого мы искали решение в комплексном виде: $U_n = A e^{i(kx_n - \omega t)}$, и нас не интересовала величина A . Но, поскольку при вычислении среднеквадратичного смещения мы будем ее использовать, и смещение — это действительная величина, то мы должны написать следующим образом:

$$U_n(t) = \text{Re} \{ A e^{i(kx_n - \omega t)} \} \quad \text{или} \quad U_n(t) = A e^{i(kx_n - \omega t)} + A^* e^{-i(kx_n - \omega t)} .$$

Введем следующую величину:

$$A \Rightarrow A(\omega_k) = A e^{ikx_n} .$$

Поскольку

$$U_n = U_n^* = \sum_k A_n(\omega_k) e^{-i\omega_k t} = \sum_k A_n^*(\omega_k) e^{+i\omega_k t} .$$

Отсюда получаем: $A_n(\omega_k) = A_n^*(-\omega_k)$.

Смещение нужно просуммировать по всем разложениям:

$$U_n(t) = \sum_k A_n(\omega_k) e^{-i\omega_k t} .$$



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Теперь нужно найти средний квадрат смещения, причем важно, что суммирование нужно производить по разным индексам, чтобы ничего не потерять:

$$\overline{U_n^2} = \sum_k (\dots) \sum_l (\dots),$$

$$\overline{U_n^2(t)} = \sum_{k,l} A_n(\omega_k) A_n(\omega_l) e^{-i(\omega_k + \omega_l)t}.$$

При усреднении нам нужно взять промежуток, стремящийся к бесконечности и вычислить на нем интеграл по dt , а затем поделить на длину промежутка. Экспонента, разложенная на синус и косинус, будет быстро осциллировать, и при делении на сам промежуток получится ноль. И единственный случай, когда такого не произойдет, будет при равенстве нулю показателя экспоненты. В таком случае интеграл будет просто равен единице. Поэтому:

$$\overline{U_n^2(t)} = \sum_{k,l} A_n(\omega_k) A_n(\omega_l) \delta_{\omega_k, -\omega_l},$$

$$\overline{U_n^2(t)} = \sum_k |A_n(\omega_k)|^2.$$

Причем ясно, что никакой зависимости от n на самом деле нет.

Теперь нам нужно вычислить энергию колеблющегося кристалла через найденную величину. Воспользуемся теоремой вириала:

$$\overline{E_n(t)} = 2 \frac{m \overline{\dot{U}_n^2(t)}}{2} = m \sum_k \omega_k |A_k(\omega)|^2 = \sum_k \hbar \omega_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right).$$

Но, поскольку нам нужна энергия всего кристалла, то вместо m будет M — масса всего кристалла.

Теперь, приравнивая почленно ряды, получаем:

$$|A_n(\omega)|^2 = \frac{\hbar}{M \omega_k} \left(\bar{n}_k + \frac{1}{2} \right),$$

$$\overline{U_n^2(t)} = \sum_k \frac{\hbar}{M \omega_k} \left(\bar{n}_k + \frac{1}{2} \right).$$

Рассмотрим теперь частный случай, когда температура равна нулю.

$T = 0$; $\bar{n}_k = 0$, то есть есть только нулевые колебания.

В этом случае:

$$\overline{U_n^2(t)} = \frac{\hbar}{2M} \sum_k \frac{1}{\omega_k}.$$

В одномерном случае для первой зоны Бриллюэна:

$$\sum_k \Rightarrow \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{L}{2\pi} 2dk_{>0} \frac{1}{\omega_k} \equiv \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{k}.$$



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Но этот интеграл расходится в нуле (здесь $\omega = sk$). На самом же деле случай $k = 0$ соответствует бесконечно большому кристаллу, чего быть не может. Минимальное k зависит от граничных условий, но можно принять $k_{min} \sim \frac{\pi}{l}$.

Можно записать:

$$\overline{U_n^2(t)} \simeq \frac{L\hbar}{Ms\pi} \ln \frac{L}{a}.$$

Отношение L/M перейдет просто в отношение a/m , так как и то, и то пропорционально длине. А логарифм с ростом длины будет увеличиваться. Таким образом, в какой-то момент правая часть станет больше a . То есть амплитуда нулевых колебаний превысит межатомное расстояние. Это можно образно назвать «квантовое плавление». То есть одномерная система неустойчива. Это называется **теоремой Мермина-Вагнера**, которая говорит, что невозможно существование чисто одномерных объектов, т. к. они даже при нулевой температуре неустойчивы.

В трехмерном случае нулевые колебания не столь заметны, но, например, жидкий гелий при низких температурах не может закристаллизоваться, потому что его нулевые колебания сравнимы с размером решетки.

Теперь рассмотрим двумерный случай при ненулевой температуре:

$$\overline{U^2(t)} = \frac{\hbar}{M} \int 2 \frac{s}{(2\pi)^2} \frac{d^2k}{(e^{\frac{\hbar\omega_k}{\kappa T}} - 1)\omega_k}.$$

Рассмотрим высокую температуру, при которой кристалл еще не плавится $\frac{\hbar\omega_k}{\kappa T} \ll 1$, и сделаем разложение по температуре:

$$\overline{U^2(t)} = \frac{\hbar}{M} \frac{\kappa T}{\hbar \frac{2s}{(2\pi)^2}} \int \frac{d^2k}{\omega_k^2},$$

тогда

$$\int \frac{2\pi k dk}{s^2 k^2} \simeq \int \frac{dk}{k}.$$

Получили тот же интеграл, значит, опять появится логарифм, и колебания могут стать больше постоянной решетки. Тут кристалл будет неустойчив при температурах меньше температуры плавления. Поэтому двумерных кристаллов тоже не существует. Графен на самом деле не является чисто двумерной системой, в нем есть некоторые колебания, и он является квазидвумерной системой.

В задании есть задача для трехмерного случая $T \rightarrow 0$, и в результате должно получиться: $\overline{U_{T=0}^2} \ll a^2$.

Мы же рассмотрим случай высоких температур: $T \gg \theta$, тогда получим:

$$\overline{U_n^2(t)} = \frac{3\theta}{2\pi^2 \hbar \rho s^3} T.$$

Из этого условия выводится **критерий Линдемана**:

При температуре плавления выполняется: $\sqrt{\overline{U_n^2(t)}} = \xi a$.

Были проведены эксперименты, в результате которых было получено, что для большинства веществ: $\xi = 0, 1 \div 0, 2$.

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Тогда можно записать связь между температурой плавления и дебаевской температурой:

$$T_{pl} = \frac{2\pi\hbar\rho s^3 a^2}{3\theta} \xi^2.$$

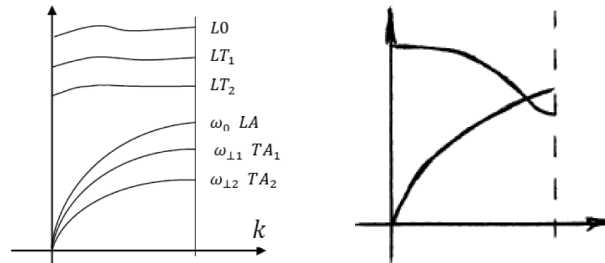


Рис. 5.1

Если же мы возьмем не решетку Бравэ, то появятся еще оптические ветки колебаний. Нужно учесть и их вклад. Важно, что мы рассматриваем только выбранные направления (вдоль высоких осей симметрии) кристалла. Для разных направлений возможны различные взаимные расположения оптических и акустических ветвей.

Модель Эйнштейна, про которую мы уже говорили, имеет место для оптических ветвей. Поэтому акустические мы заменим дебаевским приближением, а оптические — эйнштейновским.

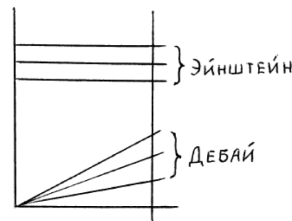


Рис. 5.2

Если в элементарной ячейке s атомов, то из них 3 — акустические, а остальные — оптические. Поэтому суммирование будем производить следующим образом:

$$\sum_{j=3(s-1)}^{3s} \left(\frac{\hbar\omega_j}{e^{\frac{\hbar\omega_j}{kT}} - 1} + \frac{\hbar\omega_j}{2} \right) = \epsilon.$$

При малых значениях k , дебаевская и оптическая частота отличаются на порядок: $\omega_D \lesssim 10^{13} \text{c}^{-1}$, $\omega_{opt} \gtrsim 10^{14} \text{c}^{-1}$, поэтому при малых значениях температуры нужно учитывать только акустические колебания:

$C^{acust} = 3N_{ych}\kappa$, где N_{ych} — количество ячеек. При переходе к более высоким температурам разложим экспоненту и посчитаем теплоемкость оптических колебаний:

$$C^{opt} = 3(s-1)N_{ych}\kappa.$$

Суммарно получим:



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

$C = 3N_{ych}sk = 3N\kappa$ — закон Дюлонга-Пти. А существование таких областей, где можно считать вклад в теплоемкость только от акустических ветвей — **правило Неймана**.

Чтобы заменить сумму

$$\sum_{j=3(s-1)}^{3s} \sum_k \left(\frac{\hbar\omega_j}{e^{\frac{\hbar\omega_j}{\kappa T}} - 1} \right)$$

на интеграл, нужно иметь в виду, что $dN = N_j \delta(k)$.

Еще раз отметим схему. Рассматриваем гармоническое приближение. Отбрасываем члены выше второй степени в разложении потенциальной энергии и ищем решения дифференциальных уравнений в определенном виде. Мы сводим энергию взаимодействующих атомов к энергии невзаимодействующих гармонических осцилляторов. Аналогия с фотонами. Мы вводим нормальные колебания и кванты этих колебаний — фононы.

Средняя энергия атомов в кристалле:

$$\bar{\epsilon} = \sum_1^{3N} \left(\frac{m\bar{U}_i^2}{2} + \frac{kU_i^2}{2} \right).$$

Здесь N — число атомов.

Можно получить выражение для частоты одного нормального колебания $\omega_j(\vec{k})$. В изотропном теле может быть 3 акустических, а все остальные — оптические ветви.

Поскольку зависимость частоты от волнового вектора периодическая, то нам нужно рассмотреть только один период — первую зону Бриллюэна.

Количество одинаковых блоков назовем N_{yach} — количество ячеек. В случае решетки Бравэ в элементарной ячейке один атом, в общем случае s — число атомов в ячейке. $sN_{yach} = N$.

Поскольку средние механические равны средним квантовомеханическим, то

$$\bar{\epsilon} \rightarrow E_{kv} = \sum_{i=1}^{3N} \hbar\omega_i \left(N_i + \frac{1}{2} \right) = \sum_{j=1}^{3s} \sum_k \hbar\omega_j(\vec{k}) \left[N_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right].$$

Теперь нужно провести усреднение по температуре. Сделаем замену для среднего числа заполнения осциллятора:

$$N_j(\vec{k}) \rightarrow \bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_j}{\kappa T}} - 1}.$$

Числа заполнения состояния могут быть произвольными, именно поэтому среднее числа квантов данного осциллятора описывается функцией Бозе–Эйнштейна. В общем случае там еще должен стоять химический потенциал. Если он равен нулю, это значит, что количество осцилляторов не сохраняется.

$$\langle E_{kv} \rangle = \sum_{i=1}^{3s} \sum_k \hbar\omega_j(\vec{k}) \bar{n}(\omega_j(\vec{k}), T).$$

Здесь опущена $\frac{1}{2}$, потому что нас интересует энергия возбуждения кристалла над основным состоянием.

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

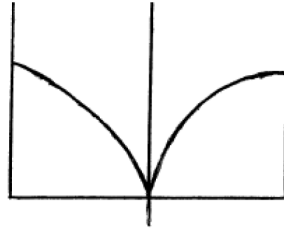


Рис. 5.3

Нужно сделать переход к интегралу. Тогда если $L \gg a$, то можно считать, что квантовые числа являются квазинепрерывными.

$$\langle E_{kv} \rangle = \sum_{i=1}^{3s} \int_{1zone} \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k \hbar \omega_j(\vec{k}) \bar{n}(\omega_j(\vec{k}), T).$$

В зависимости от размерности будет разный фазовый объем:

$$d_k^{III} = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k; \quad d_k^{II} = \frac{S}{(2\pi)^2} d^2k; \quad d_k^I = \frac{L}{2\pi} dk.$$

Если нас интересует теплоемкость при низких температурах, то нужно рассматривать только маленькие k . Поскольку T стоит в знаменателе показателя экспоненты, то можно интегрирование продлить на бесконечность.

Если у нас всего три ветви колебаний, то

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \frac{3V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k^2 dk}{e^{\frac{\hbar\omega(k)}{kT}} - 1} \hbar \omega(k).$$

Этот интеграл будет пропорционален T^4 , а теплоемкость — T^3 .

Удобно воспользоваться плотностью состояний. Мы переходим от распределения осцилляторов по волновому числу k к распределению по частоте:

$$dN_k^{III} = V g^{III}(\omega) d\omega.$$

Акустические волны:

$$3 \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k, \quad d^3k = 4\pi(k_{\parallel}^2 dk_{\parallel} + k_{\perp}^2 dk_{\perp}),$$

$$\omega = s_{\parallel} k_{\parallel} = s_{\perp} k_{\perp},$$

$$3 \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k = \frac{V4\pi}{(2\pi)^3} \omega^2 d\omega \left(\frac{1}{s_{\parallel}^3} + \frac{2}{s_{\perp}^3} \right).$$

Тогда заменим: $\frac{3}{s^3} = \frac{1}{s_{\parallel}^3} + \frac{2}{s_{\perp}^3}$.

Получим выражение для плотности состояний в трехмерном случае:

$$g^{III}(\omega) = \frac{3}{2} \frac{\omega^2}{\pi^2 s^3} - \text{фононы},$$

$$g^{III}(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} - \text{фотоны}.$$

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

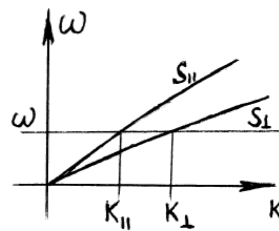


Рис. 5.4

Получаем, что при малых температурах отличие фотонов и фононов в скоростях — соответственно света и звука, а также в коэффициенте $3/2$. Он появляется из-за того, что у фотонов в вакууме нет продольных колебаний.

Теперь посмотрим, какая будет теплоемкость в двумерном случае. Запишем энергию:

$$\langle \epsilon \rangle_{T \rightarrow 0} = \int_0^{\infty} \frac{2s}{(2\pi)^2} d^2 k \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega(k)}{kT}} - 1}.$$

Тогда

$$\langle \epsilon \rangle_{T \rightarrow 0}^{\text{II}} \propto T^3 \Rightarrow C_{T \rightarrow 0} \propto T^2.$$

В одномерном случае: $\langle \epsilon \rangle_{T \rightarrow 0}^{\text{I}} \propto T^2 \Rightarrow C_{T \rightarrow 0} \propto T$.

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Можно измерить теплоемкость реального тела, структура которого неизвестна и на основании этого получить какую-то информацию о ней. Графит является таким телом, теплоемкость которого находится между теплоемкостью двумерного и трехмерного. Это связано с его структурой: в плоскости слоя сильные связи, а между слоями связь слабая.

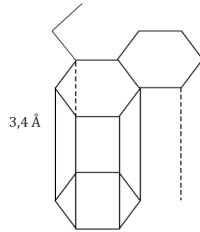


Рис. 5.5

Рассмотрим вещества у которых есть магнитный момент. В случае спинового момента: $g_s \mu \vec{S} = \vec{\mu}$, в общем случае: $\vec{\mu} = g \mu \vec{J}$.

С точки зрения намагниченности существует несколько типов веществ: ферромагнетики, если спины соседних атомов сонаправлены, и антиферромагнетики, если противоположнонаправлены. Нельзя локализованно отклонить один спин, т. к. за одним последуют следующий и так далее — получится волна.

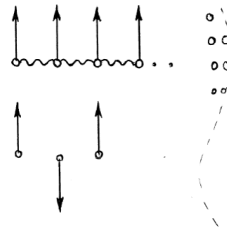


Рис. 5.6

Можно найти зависимость частоты такой волны от волнового вектора. Тогда получим для ферромагнетиков $\omega = \alpha k^2$, и $\omega = \beta k$ — для антиферромагнетиков. При изменении температуры произойдет отклонение спинов от первоначальных состояний, и это внесет свой вклад в теплоемкость. Будем считать независимыми отклонения атомов и спинов. Посчитаем, какой вклад сделают отклонения спинов в теплоемкость. Рассмотрим низкие температуры.

Энергия магнитных колебаний:

$$E_{mag} \propto \int_0^{\infty} d\omega g(\omega) \hbar \omega \bar{n}(\omega, T).$$

Кванты магнитной волны — магноны.

$$\bar{n}(\omega, T) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{\kappa T}} - 1},$$

$$d^3 k = 4\pi k^2 dk = 2\pi \sqrt{k^2} dk^2 = 2\pi \sqrt{\omega} d\omega.$$



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Тогда:

$$E_{mag} \propto \int_0^{\infty} d\omega g(\omega) \hbar \omega \bar{n}(\omega, T) \propto \int_0^{\infty} \frac{\omega^{3/2} d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \propto T^{5/2}.$$

А значит, магнитная теплоемкость $C_{t \rightarrow 0}^{mag} \propto T^{3/2}$ — **Закон Блоха**.

В эксперименте получается итоговая теплоемкость, получаемая из магнитной и упругой частей — $C = AT^{3/2} + BT^3$. Экспериментаторы научились отделять эти величины построением следующего графика. На нем легко получают константы A и B .

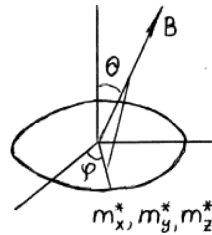


Рис. 5.7

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu