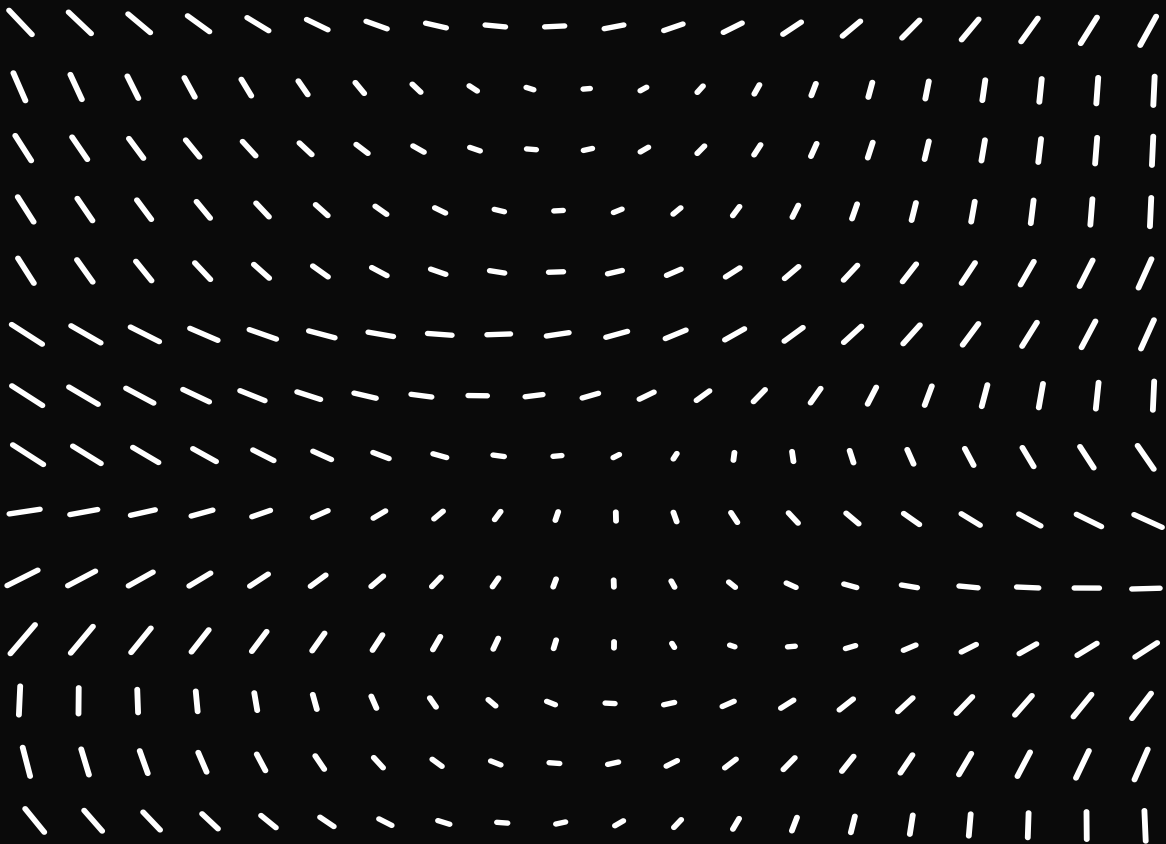


Statistische Physik Theo Fb

Th. Schwetz-Mangold (KIT SS2021)

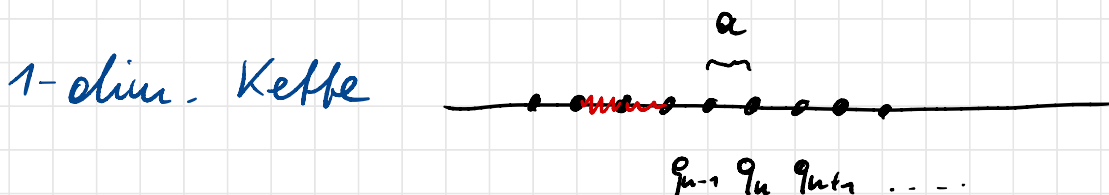
VO 08 - Phonongas



Phonon gas

Schwingungen im Kristallgitter

Einfaches Modell für Kristall:



Gitterkonstante a

$q_n \dots$ Auslenkung um Ruhelage

Kraft auf n -te Atom

$$F_n = f(q_{n+1} - q_n) - f(q_n - q_{n-1}) = m \ddot{q}_n$$

System v. gekoppelten harm. Oszillat.

ds.g.: Ansatz $q_n(t) = A e^{i(\omega t - k n a)}$ (*)

$$\Rightarrow -m\omega^2 = f[e^{ika} + e^{-ika} - 2] = -4f \sin^2 \frac{ka}{2}$$

⇒ Dispersionsrelation:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4f}{m}} \sin \frac{|k|a}{2}$$

(*) ist periodisch in $k \rightarrow k + \frac{2\pi}{a}$

⇒ Beschränkung auf $-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$
und $\omega > 0$

$$\underline{k_{\max} = \frac{\pi}{a}} \Rightarrow \lambda_{\min} = \frac{2\pi}{k_{\max}}$$

→ für $\lambda \gg a \hat{=} \text{kleine } |k|$:

benachbarte Atome schwingen in Phase

→ für $\lambda_{\min} \hat{=} k_{\max}$:

benachbarte Atome: gegenphasig

endliche Kette: N Atome

periodische Randbedingungen: $q_1 = q_{N+1}$

$$(*) \Rightarrow e^{ikaN} = 1$$

$$\Rightarrow k_j = \frac{2\pi}{aN} j, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N-2}{2}, \pm \frac{N}{2}$$

mit $-\frac{\pi}{a} < k_j \leq \frac{\pi}{a} \Rightarrow$ N diskrete
 k -Werte

$$\text{mit } \Delta k = \frac{2\pi}{L}, \quad L = aN$$

System mit N Freiheitsgrade $\Rightarrow$
 N Schwingungsmoden

Verallg. zu 3-dim. Kristall:

$k \rightarrow \vec{k}$, Auslenkung d. Schwingung
 kann $\parallel$ od. $\perp$ auf $\vec{k}$ stehen $\Rightarrow$

1 longitudinale und

2 transversale Polarisationen

(vgl. Photonen: nur 2 transvers. Pol.)

sei $V = L^3 \Rightarrow \Delta k = \frac{2\pi}{L}$

-) endl. Volumen $\Leftrightarrow$ Diskretisierung von $\vec{k}$
-) $|\vec{k}| < \frac{\pi}{a}$: Gitterstruktur $\Leftrightarrow$
 $k < k_{\max}$ (minimaler Wellenlänge)

Anzahl der möglichen Schwingungsmoden

$$\sum_{\text{Pol}} \sum_{\vec{k}} 1 = 3 \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk_x}{\Delta k} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk_y}{\Delta k} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk_z}{\Delta k} = \frac{3V}{a^3} = 3N$$

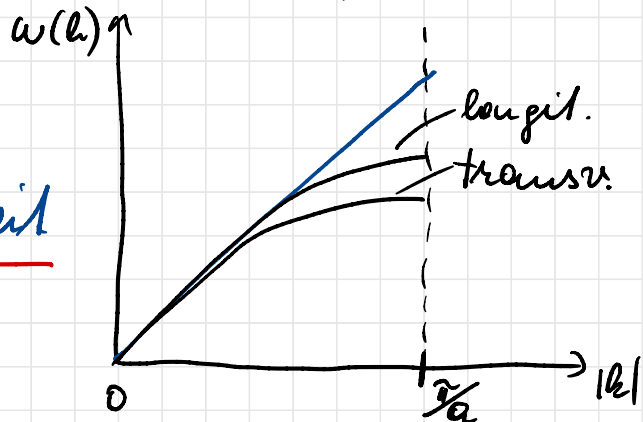
Debye - Modell

-) vereinfachende Ann. für Dispersion

$$\omega(k) = c_s |\vec{k}|$$



Schallgeschwindigkeit



$$\bullet) \omega \leq \omega_{\max} \equiv \omega_D \sim \frac{\pi}{a C_s}$$

Abzählen d. Moden:

$$3N = \sum_{\text{Pol}} \int \frac{d^3k}{\Delta k} \rightarrow \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_{\max}} 4\pi k^2 dk =$$

$$= \frac{3V}{2\pi^2} \frac{1}{C_s^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \omega^2 = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{\omega_D}{C_s} \right)^3 \int_0^{\infty} d\omega z(\omega)$$

$$z(\omega) = \begin{cases} \frac{3\omega^2}{\omega_D^3} & \text{für } \omega \leq \omega_D \\ 0 & \omega > \omega_D \end{cases}$$

↳ Frequenzspektr. des Debye-Modells
 $\hat{=}$ Anzahl d. Moden in $[\omega, \omega + d\omega]$

in realen Kristallen:

$z(\omega)$ kompliziertere Form

Bed.: $\int_0^{\infty} d\omega z(\omega) = 1$

Ersetzung $\sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{l}} \rightarrow 3N \int_0^\infty d\omega z(\omega)$

Quantenmechan. Beschreibung

$3N$ QM harm. Oszillatoren

$\Rightarrow$ Eigenwerte der Mode $\vec{k}$:

$$e_j = \hbar \omega_j \left(n_j + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega(k) \left(n_{\vec{k}}^m + \frac{1}{2} \right)$$

$j = (\vec{k}, m)$ $\vec{k} \dots$ diskrete Wellenvekt.
 $m = 1, 2, 3$ Polarisationen

$$n_{\vec{k}}^m = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Mikrozust. r durch $\{n_{\vec{k}}^m\}$ festgelegt

$$\begin{aligned} E_r &= \sum_j e_j = \sum_{m, \vec{k}} \hbar \omega(k) \left(n_{\vec{k}}^m + \frac{1}{2} \right) \\ &= E_0(V) + \sum_{m, \vec{k}} \underbrace{\hbar \omega(k)}_{\epsilon_k} n_{\vec{k}}^m \end{aligned}$$

$E_0(V)$... Nullpunktenergie d. Gitters
kann zusätzl. Beiträge enthalten

$\Rightarrow$ gleiche Form wie ideales Quantengas

$n_{\vec{k}}$... Anregungen des Osz. der Mode $\vec{k}$

$\hookrightarrow 0, 1, 2, \dots \Rightarrow$ Bosestatistik

$\Leftrightarrow$ Besetzungszahl der Bosonen mit
Energie $\hbar\omega$, Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

$\Rightarrow$ Phonon

3 Polarisationen $\rightarrow S=1, S_z = -1, 0, 1$

Phonon: Spin 1 „Teilchen“

Anzahl d. Phononen N_{Ph} ($\neq N$)

$$N_{Ph} = \sum_{n, \vec{k}} n_{\vec{k}} \quad \text{nicht fest}$$

E_n sel. unabh. von $N_{Ph} \Rightarrow$

$$\mu = \overline{\frac{\partial E_n}{\partial N_{Ph}}} = 0 \quad \dots \text{analog Photonen}$$

$$\Rightarrow \overline{n_{\vec{e}}} \equiv \overline{n_{\vec{e}}} = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_{\vec{e}}} - 1}$$

$$E(T, V) \equiv \overline{E_{\vec{e}}} = E_0(V) + \sum_{\vec{e}} \epsilon_{\vec{e}} \overline{n_{\vec{e}}}$$

$$E(T, V) = E_0(V) + 3N \int_0^{\infty} d\omega z(\omega) \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

Debye-Mod.:

$\frac{3\omega^2}{\omega_D}$ f. $\omega < \omega_D$

$$E(T, N) = E_0(V) + 9N \frac{(kT)^4}{(\hbar \omega_D)^3} \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1}$$

$$x = \frac{\hbar \omega}{kT}, \quad x_D = \frac{\hbar \omega_D}{kT} = \frac{T_D}{T}$$

$$\underline{T_D = \frac{\hbar \omega_D}{k}} \quad \dots \quad \underline{\text{Debye Temperatur}}$$

Grenzfälle:

•) $T \gg T_0$, $x_0 \ll 1$

$$\int_0^{x_0} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \approx \int_0^{x_0} dx x^2 = \frac{1}{3} x_0^3$$

$$E(T, V) = E_0(V) + \underline{3NkT} , \quad \underline{C_V = 3Nk}$$

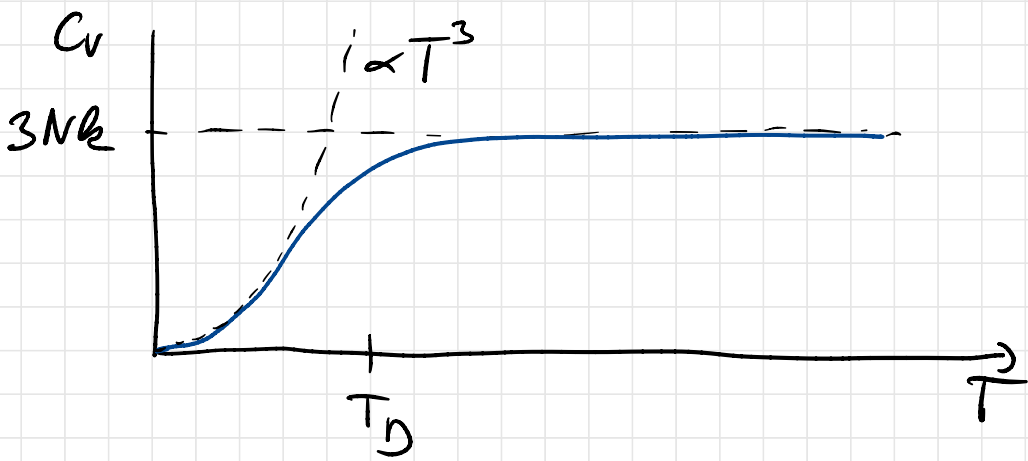
klass. Gleichverteilungssatz:

$3N$ ham. Dsz., je 2 Freiheitsg., $\frac{dT}{T}$
Gesetz v. Dulong-Petit

•) $T \ll T_0$, $x_0 \gg 1$ $\int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$

$$E(T, V) = E_0(V) + \frac{3\pi^4}{5} N \frac{(kT)^4}{(kT_0)^3}$$

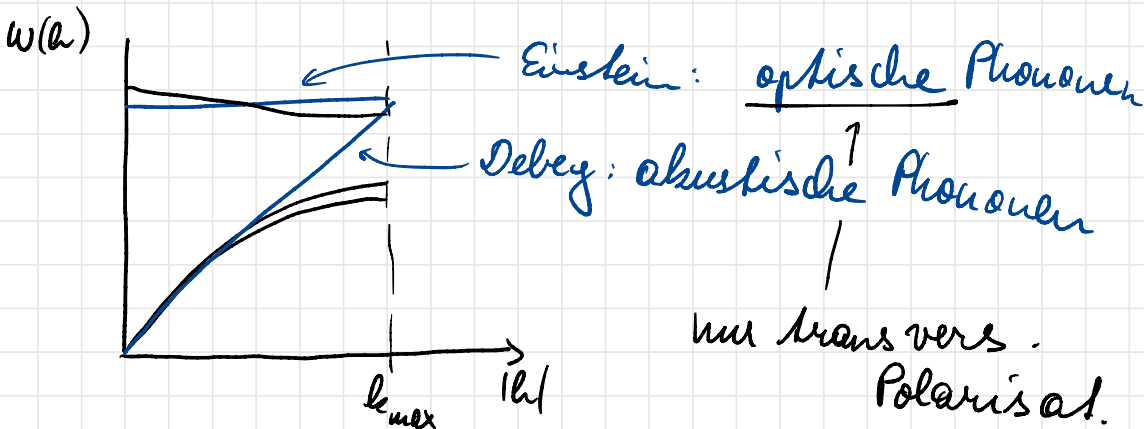
$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} Nk \left(\frac{T}{T_0}\right)^3$$



Debye-Modell für $T \gg T_D$, $T \ll T_D$ gut
für $T \sim T_D$ Abweichungen in realen
Kristallen

Einstein-Modell

Ausatz für $z(\omega) = \delta(\omega - \omega_E)$



$$E = E_0 + 3N \frac{\hbar \omega_E}{e^{\hbar \omega_E / 2kT} - 1}$$

UE

$$C_V = 3Nk \left(\frac{\hbar \omega_E}{2kT} \right)^2 \frac{1}{\sinh^2 \frac{\hbar \omega_E}{2kT}}$$

→ $3Nk$ für $T \gg T_E$

→ exponentiell unterdr. für $T \ll T_E$