

# Kvantová fyzika pevných látek

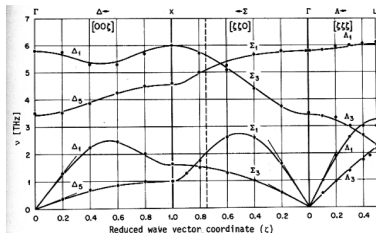
## Přednáška 8: Tepelná kapacita, hustota stavů

Pavel Márton

30. října 2013

# Tepelná kapacita fononového plynu

- Kde v materiálu je teplo/energie vlastně uchována? Je schopnost absorbovat teplo stejná při všech teplotách?
- *Tepelná kapacita za konstantního objemu* je definována jako  $C_V = (\partial U / \partial T)_V$ ,  $U$  je energie,  $T$  je teplota.
- $C_V$  může obsahovat různé příspěvky. Energie/teplo (v kovech také v excitovaných elektronech) se ukládá do vibrací krystalové mřížky ...  $C_{lat}$
- Otázka zní: kolik energie může být uloženo do vibrací? Může být  $C_{lat}$  odvozeno teoreticky?
- Energie fononových módů v závislosti na  $K$  je známá, otázka je kolik fononů je přítomno v konkrétním bodě Fourierova prostoru.



Obr: disperzen NaCl

<http://wolf.ifj.edu.pl/phonondb/nacl.htm>

# Tepelná kapacita fononového plynu

- Energie mřížky může být psána jako

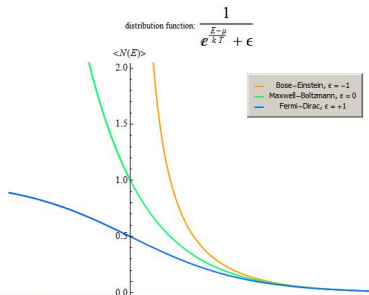
$$U_{\text{lat}} = \sum_K \sum_p U_{K,p} = \sum_K \sum_p \langle n_{K,p} \rangle \hbar \omega_{K,p} \quad (1)$$

- Je to součet energií všech fononových módů, indexovaných vlnovým vektorem  $K$  a polarizací  $p$ .  $\langle n_{K,p} \rangle$  je termálně-rovnovážné obsazení daného módu, tedy počet *fononů*.
- Fonony jsou bosony. Energetické hladiny jsou obsazovány podle tzv. *Bose-Einsteinovy statistiky*; Obsazení hladiny s energií  $\hbar \omega$  je

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp[\hbar \omega / k_B T] - 1}, \quad (2)$$

kde  $k_B$  je *Boltzmannova konstanta*  
 $k_B = 1.3806503 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ .

- Porovnej s reálnými fononovými disperzemi, několik větví je v každém  $K$ -bodě.



Obr: Střední hodnota počtu částic  $\langle n(E) \rangle$  jako funkce  $(E - \mu) / k_B T$  pro Fermi-Diracovu, Bose-Einsteinovu and Maxwell-Boltzmannovu statistiku.

- Energie souboru oscilátorůs frekvencemi  $\omega_{k,p}$  může být nalezena z (1) a (2)

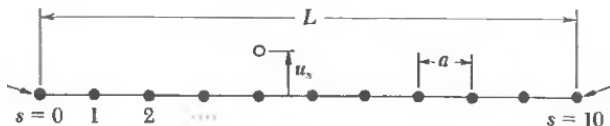
$$U_{\text{lat}} = \sum_K \sum_p \frac{\hbar\omega_{K,p}}{\exp[\hbar\omega_{K,p}/k_B T] - 1}$$

- Sumace může být nahrazena integrálem

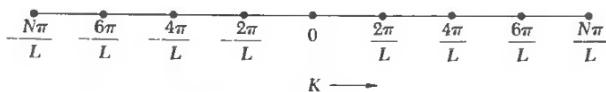
$$U_{\text{lat}} = \sum_p \int d\omega D_p(\omega) \frac{\hbar\omega}{\exp[\hbar\omega/k_B T] - 1}$$

- kde  $D_p(\omega)d\omega$ , je počet módů dané polarizace  $p$  v intervalu  $\omega$  to  $\omega + d\omega$ .
- Hlavním problémem je vyhodnocení funkce  $D(\omega) = \sum_p D_p(\omega)$ . Tato funkce se nazývá *hustota módů* nebo též *hustota stavů (DOS)*.

## Hustota stavů v 1D



- Periodické (Born-Kármánovy) okrajové podmínky
- Řešení ve tvaru postupné vlny  $u_s = u(0)\exp[i(sKa - \omega_K t)]$
- Povolené hodnoty  $K$  jsou  $K = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \pm \frac{6\pi}{L}, \dots, \pm \frac{N\pi}{L}$ .

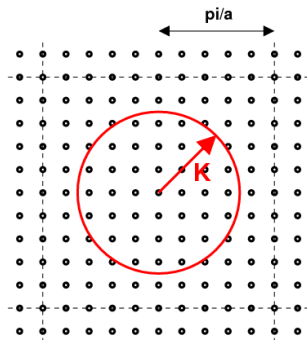


- Počet bodů  $N$  vede k  $N$  módům ( $N$  povoleným hodnotám  $K$ ).
- Počet módů v jednotkovém intervalu  $K$  je  $L/2\pi$  for  $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$ , 0 jinak
- Počet módů (dané polarizace)  $D(\omega)d\omega$  v  $d\omega$  pro  $\omega$  v 1D je

$$D_1(\omega)d\omega = \frac{L}{2\pi} \cdot \frac{dK}{d\omega} d\omega = \frac{L}{2\pi} \cdot \frac{d\omega}{d\omega/dK} = \frac{L}{2\pi} \cdot \frac{d\omega}{dv_g}$$

- Singularita v  $D_1(\omega)$  kdykoli je disperze v závislosti na  $K$   $\omega(K)$  plochá ( $= v_g = 0$ ).

# Husotota stavů ve 2D



- Povolené hodnoty ve fourierově prostoru pro čtvercovou mřížku s mřížkovou konstantou  $a$ , s periodickými okrajovými podmínkami aplikovanými na čtverec se stranou  $L = 10a$ .
- Jedna povolená hodnota  $K$  na oblast  $(2\pi/10a)^2 = (2\pi/L)^2$
- Mnoho bodů, vyhlazený počet povolených bodů na plochu  $\pi K^2$  je  $N = \pi K^2 L^2 / (2\pi)^2$  (uvnitř kruhu o poloměru  $K$ ).
- Hustota stavů pro každou polarizaci je

$$D(\omega) = dN/d\omega = (VK/2\pi)(dK/d\omega)$$

# Hustota stavů ve 3D

- Jedna povolená hodnota  $K$  na objem  $(2\pi/L)^3$
- Celkový počet módů s vlnovým vektorem menším než  $K$  je  $N = (L/2\pi)^3 \cdot \frac{4}{3}\pi K^3$ .
- Hustota stavů pro každou polarizaci je

$$D(\omega) = dN/d\omega = (VK^2/2\pi^2)(dK/d\omega)$$

- Problém: vyhodnocení členu  $dK/d\omega$  pro reálné fononové disperze.

