

Modul II Fononer

Kandidatnummer: 15

Opgave 2 a) Vi skal analysere foton density of states (DOS).

Et fonon er en elastisk bølge - ramm. Det betyr at bølgen på lattisen har "slivs" på denne formen:

$$u_s = A \exp(-i\omega t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}) \quad (1)$$

i (1) er u_s deformasjonen på plass s , A = amplitde
 ω = frekvens, \mathbf{k} = bølgeverktor og \mathbf{d} = lattice konstant

Vi har da periodiske grunnebetingelser i forhold
til. En 1D kjede av N atomer gir

$$u_s = u_{s+N} \text{ som fører til}$$

$$\begin{aligned} u_s &= A \exp(-i\omega t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}(s+N)) \\ &= A \exp(-i\omega t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}s) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}N) \end{aligned} \quad (2)$$

Så ser vi på (1) og legger merke til at de
to siste leddene i (2) gir (1). Dette føres
da til at (2) blir til

$$u = u_s \cdot \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}N)$$

Derfor er $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}N) = 1$, slik at

(1)

$$kdN = 2\pi n, \text{ hvor } n=1, 2, 3, \dots, N$$

Dette gir da

$$k = \frac{2\pi n}{dN},$$

Enden dN en lengde til systemet, setter vi det lik L . Måså $dN = L$

Det sører til:

$$k = \frac{2\pi n}{L}$$

Vi har et modus for hvert intervall $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$

$$\text{og at } k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L} \dots \pm \frac{N\pi}{L}$$

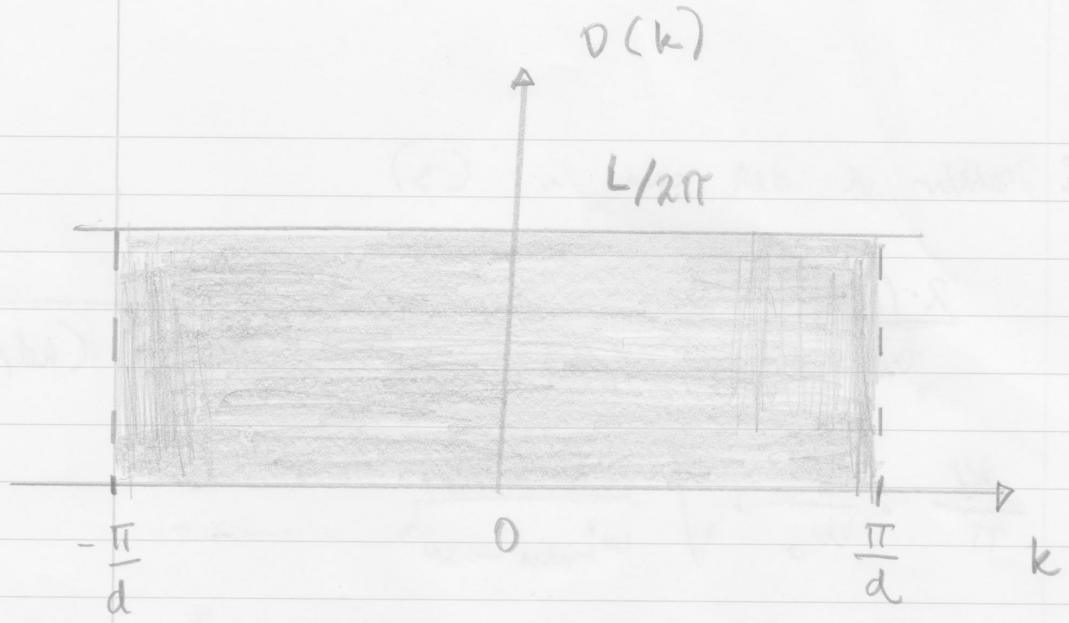
DOS i k -rom blir da:

$$D(k) = \frac{L}{2\pi} \quad \text{for } -\pi/d \leq k \leq \pi/d$$

$$D(k) = 0 \quad \text{for alle andre verdier}$$

Siden dedd i oppgaven er å pløne DOS(k). Jeg gjorde for hånd og skreven følger nærmeste side.

②



b) Vi skal bruke dispersjonsrelasjonen fra oppgave 1 til å finne DOS som funksjon av ω . Den aktuelle relasjonen er $\omega = \omega_0 \cdot \sin(kd/2)$

Fra oppgave 1 har vi at (Oppgave 1 er ikke med i denne øvingen): $\omega = \sqrt{\frac{4C}{m}} \cdot \sin(kd/2)$

Dermed $C = \text{fjærkonstant}$ og $M = \text{masse}$. Vi setter

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}} \quad \text{og} \quad \text{så} \quad \omega = 2\omega_0 \cdot \sin(kd/2)$$

Videre har vi at $D(\omega)$ er gitt

$$(3) D(\omega) = \frac{2D(k)}{dw/dk}, \quad \text{så vi finner først}$$

$$\frac{dw}{dk} = \frac{2 \cdot d \cdot \omega_0}{2} \cdot \cos(kd/2) = \underline{d \cdot \omega_0 \cdot \cos(kd/2)}$$

(3)

Så setter vi det inn i (3)

$$\frac{2 \cdot (Nd / 2\pi)}{w_0 \cdot d \cdot \cos(hd/2)} = \frac{N}{\pi} \cdot \frac{1}{w_0 \cdot \cos(hd/2)}$$

$$1 = \frac{N}{\pi} \cdot \frac{1}{w_0} \cdot \sqrt{\frac{w_{\text{maks}}^2}{w_{\text{maks}}^2 - w^2}}$$

Her er den trigonometriske identiteten $w_{\text{maks}} = w_0$ siden vi har en cosinus-funksjon. Dette gir

$$D(w) = \frac{N}{\pi} \cdot \frac{1}{w_0} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{w}{w_0}\right)^2}}$$

Så skal vi plottet funksjonen $D(w)$.

Dette ble gjort på MATLAB og grafen

folger som vedlegg (attachment på engelsk), mens koden
folger nedenfor. Bør nevnes at det er et script
fremfor funksjon.

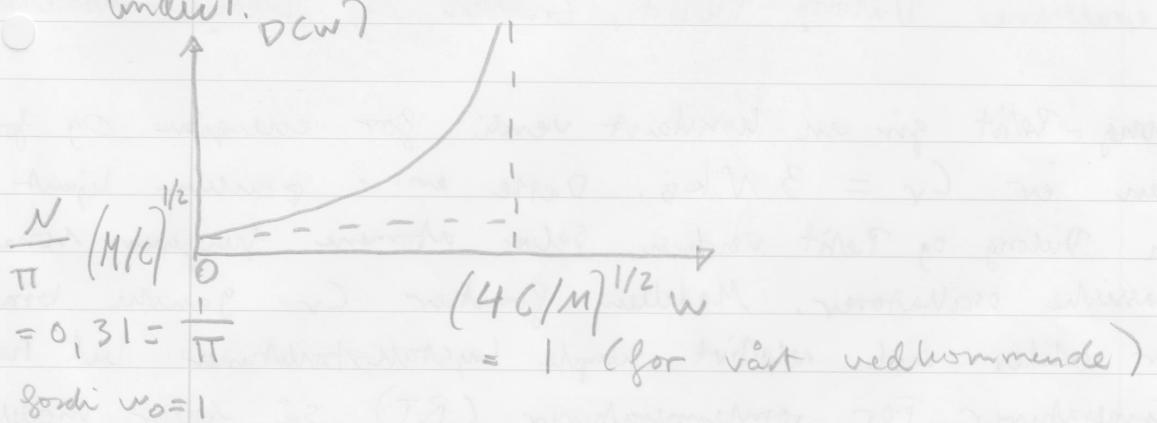
$$w = linspace(0, 1); \\ D = ((1). / (pi) * ((1). / ((sqrt(1 - (w.^2))))$$

plot(w, D);
xlabel('w');
ylabel('D(w)');

(4)

title ('Plot of D(w)');

Som en kommentar til grafen, så bør jeg nevne at jeg satte $w_0 = 1$ og dette gav de karakteristiske verdiene vi fikk i plottet. Dette skyldes at jeg ikke ønsket å få frem hvordan etningen av plottet var. Verdiene er irrelevant. Vi har også en teoretisk antagelse å ta hensyn til (a sigeren under).



a) I denne deloppgaven skal jeg gi et argument for den simplicistiske $D(h)$ sammenliknet med den komplekse $D(w)$.

Først er det nødvendig å påpeke at DOS til et system beskriver antall tilstander (states) på enghet per intervall til energien vel hvilket energinivå som er tilgjengelig til å bli observert.

Når vi skal sammenligne DOS(h) og DOS(w) ser

(b)

vi at DOS(h) er konstant, mens DOS(w) varierer.
Dette gjør at DOS(h) er mye enklere å bruke.
Og da spesielt innen kalkulatorer. Utanom dette
er det også en lettare relasjon til det
resiprokale gitteret og til lydbølgjer.

Oppgave 3

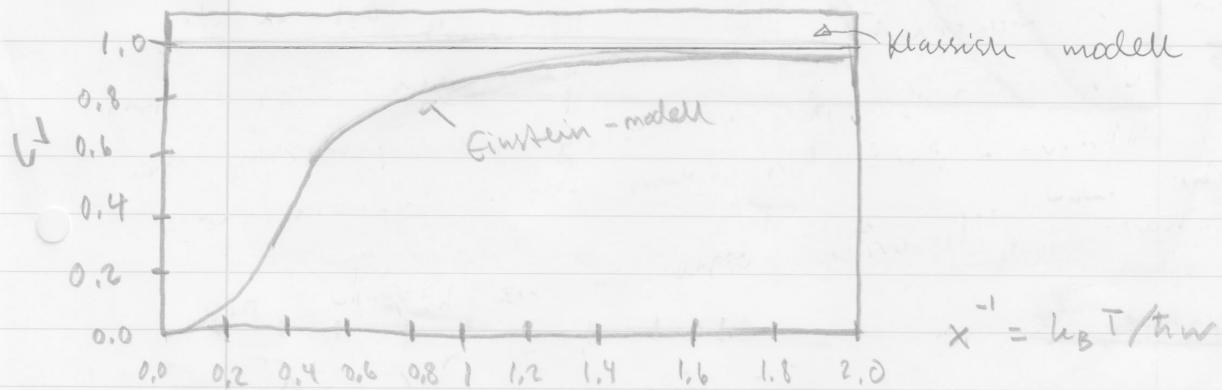
I denne oppgaven skal vi sammenligne
og evaluere Dulong - Petit, Einstein og Debye - modellene.

Dulong - Petit gir en konstant verdi for energien og formelen er $C_v = 3Nk_B$. Dette er i prinsippet kjent som Dulong og Petit verdien. Selve atomene fungerer som klassiske oscillatører. Modellen funker C_v ganske bra for solider med relativt simple krysstellstrukturer ved høye temperaturer. For romtemperaturer (RT), så gir modellen for dette atomer som er sterkt bundet til hverandre. Mens ved utdrikk lav temperaturer (deryogeniske = -150°C) feiler den for alle substanser. Dette skyldes at ved det stadiet har kvantiseringen av energi større og større effekt.

Einstein introduserte kvante - oppsats og viste hvorfor C_v ble temperaturavhengig ved lave temperaturer. Samtidig stemte det med Dulong og Petit verdien ved høye temperaturer og som derav var kontinuerlig. Man har N identiske oscillatører av frekvens w og alle atomer i krysellen sees på som oscillatører. De vibrerer

havhengig av hverandre og det er ingen relasjon mellom atomene.

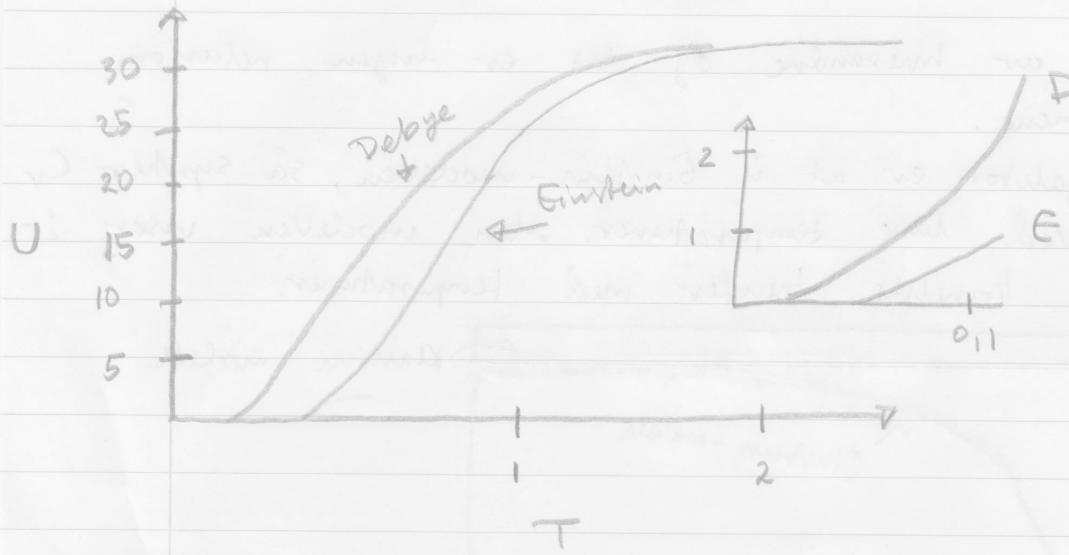
En siste faktor er at i Einstein-modellen, så synker C_V for fort ved høye temperaturer. Men modellen viser imidlertid ikke korrekte frende med temperaturer.



I figuren over har jeg sammenkjørt den klassiske modellen (Dulong-Petit) og Einstein-modellen.

Debye-modellen gir korrelat T^3 avhengighet av C_V ved høye temperaturer. Den ser på krysstellen som en enhet der vibrasjonene går gjennom krysstellen som følger med kvantiske k-vektorer på grunn av krysstallgrensene. Oscillasjonene har forhjellige kvantiteter (i motretning til Einstein-modellen som påpekt ovenfor) og gir derav forhjellige energispekter. Som en følge av dette får man korrelat modell for C_V .

Figuren på neste side viser modellene Debye og Einstein for eksperimentelle data for Ag (solv)



Coefficienten foran $\propto \frac{1}{T}$ er største nedenfor.

Opgave 6

Tabel 1

Tabel 1

	C_V	λ	κ
lav T	$\propto T^3$	$\lambda \rightarrow 0$	$\propto T^3$
høg T	$3Nk_B$	$\propto 1/T$	$\propto 1/T$

- Vi har allerede funnet at C_V er best modellert med T^3 ved lave temperaturer. Samtidig ser vi i følgende oppgave at ved høye temperaturer blir det best modellert med $3Nk_B$ (hvor man kan si N).

- For mean free path har vi ved lave temperaturer at denne er begrenset av grunnen til prisen. Her eksempelviset av lengden l . For høye temperaturer er antall fononer proporsjonal til T og mean free

path er proporsjonal til $1/T$

- For termal kondensiteten har vi at ved lav temperatur er denne proporsjonal til T^3 , mens ved høy temperatur er K proporsjonal til $1/T$

Så skal vi gjøre det samme for "umhapp"-prosessen og sammenligne temperaturavhengigheten til K i en plott for dem begge.

- Ved lave temperaturer er fononer populert ved lav k mode. Det gjør at umhapp prosesser ikke kan foretakne. Mens for høye temperaturer er det slik at Umhapp prosesser gjordes ved

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega_D \text{ som gir } = \frac{1}{2} k_B \theta_D$$

fordi $\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}$ som igjen gir ved at

$$\langle n(E) \rangle = e^{-\frac{E}{k_B T}} \text{ og at } A \propto \frac{1}{\langle n(E) \rangle}$$

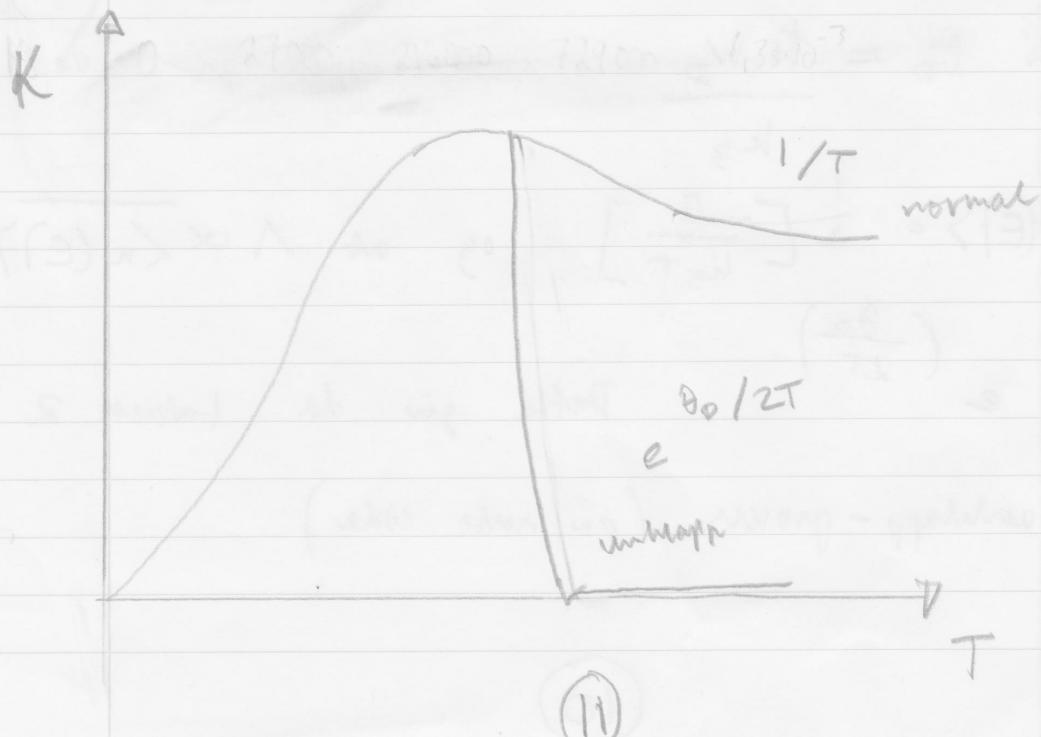
$$= e^{-\frac{\theta_D}{2T}}$$

Dette gir da Tabell 2

for umhapp-prosess (på neste side)

	C_V	λ	K
lav T	$\propto T^3$	$1 \rightarrow l$	$\propto T^3$
høy T	$3k_B$	$\propto e^{-\theta_0/2T}$	$\propto e^{-\theta_0/2T}$

Nå skal jeg pløtte temperaturavhengigheten til K . Siden den er den samme for lav T , så ser jeg veller på forhjell i umhapp og normal prosess for høy T . Vi tegner også grafen slik at det følger T^3 for lav temp. og $1/T$ for høy (normal) og T^3 for lav temp., $e^{1/2T}$ for høy for umhapp. Det er riktig at vi peker på at grafene er proporsjonale. Det vil si at de begge er proporsjonale med T^3 fra lav til høy, mens normal er proporsional med $1/T$ fra høy og umhapp er proporsional med $e^{\theta_0/2T}$.



Oppgave 7 a) Vi skal derivere ligningen for lav temperatur varmekapasitet til et enkelt 1D foton i Debye approksimasjon.

$$Vi \text{ har at } D(w) = \frac{2k}{2\pi/L} \cdot \frac{1}{V} = \frac{L}{\pi V}$$

Den totale foton energien er gitt av

$$U_{\text{Totalt}} = \int_0^{\infty} \frac{dw D(w) h w}{e^{(hw/k_B T)} - 1}$$

Ved lave temperaturer setter vi den øvre integrasjonsgrensen til uendelig (som gjort i kapittel 5).

$$= \frac{\pi L}{\pi V} \int_0^{\infty} \frac{w dw}{e^{(hw/k_B T)} - 1} = \frac{\pi L}{\pi V} \left(\frac{k_B T}{h}\right)^2$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^x - 1}$$

Fra integral-tabeller får vi at $\int_0^{\infty} \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6}$

Dette gir

$$U_{\text{Totalt}} = \frac{L k_B^2 T^2}{\pi \pi V} \cdot \frac{\pi^2}{6}$$

(12)

$$U_{\text{total}} = \frac{L \pi^2 k_B^2 T^2}{3 h v} \quad \text{fordi} \quad n = \frac{n}{2\pi}$$

Så deriverer vi for å få $C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$

$$C_V = \frac{2 L \pi^2 k_B^2 T}{3 h v}$$

b) Mens vi i 3D får en temperaturoppgjørel i T^3 ved lave temperaturer, så er C_V lineær for 1D nanoledninger. Forskjellen reflekterer antallet moduler med energier $\hbar \omega < k_B T$ eller ekvivalent med bolgevektorene $K < k_B T/hv$.

Antallet moduler skalanser som K^D , hvor D er dimensionalitet. Dette gir da T^3 i 3D og T i 1D.

Ved perfekt transmitterte fotoner gjennom ledningen, så er den termale koeffisienten kun bestemt av fundamentale konstanter og absolutt temperatur.

