

27. Фонони

1. Енергия и квазиимпулс

Фононът е:

- ✚ Квазичастица.
- ✚ Колективно елементарно възбуждане (трептене) в КР.
- ✚ Квант на полето на трептения на КР.

Като всяка квазичастица се характеризира с:

➤ Енергия

(1) $\varepsilon = \hbar\omega$

➤ Квазиимпулс

(2) $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

ЗЗИ е изпълнен с точност до адитивния член $\hbar(2\pi\vec{b}_v)$.

В КР от N - ЕК и s -базис има общо $3sN$ фонони или различни фононни състояния (с различни честоти ω), които отговарят на различни клонове на трептения на КР (оптични и акустични).

2. Идеален фононен газ

В хармонично приближение поведението на фононите в КР наподобява това на идеален газ (ИГ):

- ✚ КР е съд, в който се движат независимо точкови частици в \vec{k} - пространството и вътрешната им енергия е функция само на температурата - $f(T)$.
- ✚ За разлика от ИГ, при който общият брой частици е постоянна величина, броят на фононите в КР е функция на температурата:
 - При нарастване на температурата, КР получава топлина и се ражда фонон.
 - При намаляване на температурата, КР отдава топлина и се унищожава фонон.
 - Така се осъществява преход на дадено нормално трептене в съседно по-високо или по-ниско енергетично ниво: $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.

Метод на елементарни възбуждания: Прилага се за описване на възбуденото състояние на трептенията на КР чрез фонони. Слабо възбудените състояния на система от силно взаимодействащи частици (частиците, изграждащи КР) се описва от друга система от невзаимодействащи или слабовзаимодействащи квазичастици (фонони) – фононен газ.

Фононите са:

- ✚ Квазичастица, съответстваща на *колективни елементарни възбуждания* в КР, при които частиците от системата извършват колективно движение, възникнало вследствие на силното взаимодействие по между им.
- ✚ Ако взаимодействието между частиците /атомите в КР/ изчезне ще изчезнат нейните трептения, а следователно и фононите.
- ✚ Силновзаимодействащите си частици /атоми/ на КР създават колективните възбуждания или трептения на КР, които се описват чрез елементарни възбуждания - фонони, които са невзаимодействащи си квазичастици.

3. Реален фононен газ

Когато концентрацията на фононите нарастне, фононният газ не може вече да се разглежда като ИГ, а трябва да се отчитат взаимодействията на фононите помежду им. Освен това фононите взаимодействат и с електроните и с дефектите на КР.

За да се отчетат тези взаимодействия им се приписват определени величини:

⚡ време на живот: τ

⚡ среден свободен пробег: $\Lambda = V\tau$

Когато времето на живот τ е голямо, фононите са квазичастици с напълно определена енергия. С намаляването на τ неопределеността на енергията нараства.

Съгласно принципа за неопределеност на Хайзенберг:

$$(3) \quad \Delta E \cdot \tau \approx \hbar, \text{ където } \Delta E - \text{неопределеност в енергията}$$

Ако $\Delta E \approx \hbar\omega$ ($\hbar\omega$ - енергия на фонона), фононът като квазичастица губи физическия си смисъл. Следователно, трябва да е изпълнено условието: $\Delta E \ll \hbar\omega$. Тогава:

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} \ll \hbar\omega \Rightarrow \frac{1}{\tau} \ll \omega \text{ или}$$

$$(4) \quad \omega\tau \gg 1,$$

при което фононите са достатъчно добре определени. Това условие е спазено в целия спектър на собствените трептения на КР, чак до $T_{\text{топене}}$ на кристалите.

4. Механизми на разсейване на фононите

Те обуславят величините: време на живот - τ и среден свободен пробег - Λ .

4.1 Аморфни и стъклообразни тела – Могат да се разглеждат като съставени от хаотично разположени области на близко подреждане, чиито размери определят средния свободен пробег на фононите $\Rightarrow \Lambda$ не зависи от температурата до много ниски температури /както при течностите/.

4.2 Кристали

4.2.1 Разсейване на фононите от примеси и дефекти на КР

Силно намалява Λ с увеличаване на концентрацията примесите и дефектите в КР.

4.2.2 Разсейване фонон от фонон

Обяснява разсейването при напълно свършени КР. При тях трептенията не са напълно хармонични. Анхармоничността или нелинейността на трептенията на КР им създава възможност за разсейване на вълни от вълни или на фонони от фонони.

4.2.3 Разсейване на фононите от стените на КР

Играе роля при достатъчно ниска температура, когато плътността на фононите намалява. Λ зависи от геометричните размери на КР.

4.2.4 Разсейване на фононите от свободни носители на заряда и обратно

Такива са свободните електрони и дупки. Важна роля играе при електропроводимостта на метали и полупроводници.

4.2.5 Разсейване на фононите от други видове елементарни възбуждения

Такива са магнони, екситони и др.

5. N-, U- процеси на разсейване на фонони от фонони

Разсейването на фонон от фонон се разглежда съгласно законите за запазване на енергията и импулса.

5.1 Нормални или N- процеси

От ЗЗЕ и ЗЗИ:

$$(5) \quad \begin{aligned} \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 &= \hbar\omega_3 \\ \hbar\vec{k}_1 + \hbar\vec{k}_2 &= \hbar\vec{k}_3 \end{aligned}$$

ω_1, \vec{k}_1 и ω_2, \vec{k}_2 - честоти и вълнови вектори на двата фонона,

ω_3, \vec{k}_3 - честота и вълнов вектор на възникналия в резултат на нееластичен удар фонон.

Това разсейване играе роля при ниските температури.

Зависимостта на средния свободен пробег на фононите от температурата е:

$$(6) \quad \Lambda \sim e^{-\theta/2T}, \quad \theta = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k} \text{ - температура на Дебай}$$

5.2 Процес на разсейване с прехвърляне или U- процес

Две нормални трептения с вълнови вектори различаващи се с $2\pi\vec{b}_V$ са напълно идентични. Затова са възможни процеси на разсейване при които е изпълнен следния ЗЗИ:

$$(7) \quad \hbar\vec{k}_1 + \hbar\vec{k}_2 = \hbar\vec{k}_3 + \hbar 2\pi\vec{b}_V$$

Това разсейване играе роля при високите температури.

Зависимостта на средния свободен пробег на фононите от температурата е:

$$(8) \quad \Lambda \sim T^{-1}$$

При достатъчно чисти и съвършени кристали при понижаване на температурата, Λ първо расте според ур. (8), минава през максимум, а по нататък намалява според ур.(6).

6. Взаимодействие на хиперзвукови вълни с топлинни фонони – механизъм на Ландау-Румер

Топлинен фонон – елементарни възбуждения, дължащи се на топлинните трептения на частиците на КР при дадена температура.

Хиперзвукови вълни – еластични вълни с честоти над 10^8 Hz

Еластичните вълни, които се разпространяват в КР взаимодействат с топлинните фонони, в резултат на което затихват.

За хиперзвуковата вълна означаваме:

- Ω , честота
- T , период
- λ , дължина

За топлинните фонони означаваме:

$1/\tau$, честота на разсейването (броя удари, които претърпяват фононите за единица време)

- Λ , среден свободен пробег

(9) Ако $\Omega\tau \gg 1$, т.е. $T \ll \tau$ или $\lambda \ll \Lambda$,

то енергията на хиперзвуковите фонони е по-голяма от неопределеността в енергията на топлинните фонони \Rightarrow възможно е непосредствено взаимодействие между фононите на хиперзвуковата вълна и топлинните фонони по механизма на Ландау и Румер.

7. Теплопроводност на фононния газ

Едно неравновесно термодинамично свойство на кристалите, което се обуславя от трептенията на КРе тяхната теплопроводност. При диелектричните кристали, механизмът на теплопроводност е изцяло фононен, при металите и ПП играят роля и свободните носители на заряд.

За газовете от молекулно-кинетичната теория, коефициентът на теплопроводност е:

$$(10) \quad \chi = \frac{1}{3} c v \lambda$$

χ – коефициент на теплопроводност;

c - специфична топлина на единица обем;

λ - среден свободен пробег на молекулите;

v – средна скорост на молекулите.

Ако в ур. (10) λ заменим със средния свободен пробег на фононите - Λ ; а v със средна скорост на звука, ще получим уравнение за коефициентът на теплопроводност на кристалите. Показано е, че трябва численият коефициент да се замени с $1/4$.

$$(11) \quad \chi = \frac{1}{4} c \Lambda v$$

Като се знаят стойностите на коефициентът на теплопроводност и на специфичната топлина на кристалите от ур. (11) може да се пресметне средният свободен пробег на фононите при дадена температура.

Например:

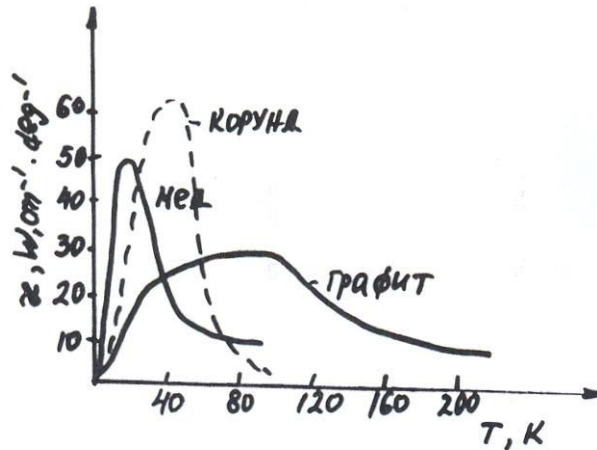
При 0°C за кварца $\Lambda = 40 \cdot 10^{-8} \text{cm}$, за NaCl $\Lambda = 23 \cdot 10^{-8} \text{cm}$.

При -190°C за кварца $\Lambda = 540 \cdot 10^{-8} \text{cm}$, за NaCl $\Lambda = 100 \cdot 10^{-8} \text{cm}$.

7.1 Зависимост на теплопроводността от температурата

За достатъчно чисти кристали и метали коефициентът на теплопроводност показва характерна зависимост от температурата. При намаляване на температурата коефициентът на теплопроводност нараства, минава през максимум при достатъчно ниски температури и отново намалява. Тази зависимост се обяснява с това, че средният свободен пробег на фононите в кристалите има подобно поведение с намаляването на температурата – ур.(6, 8).

На фигурата са представени температурните зависимости на коефициента на теплопроводност на кристали от графит, корунд и мед.



7.2 Влияние на дефектите на КР

С увеличаване на концентрацията на дефектите в кристалите намалява средният свободен пробег на фононите, а от там и коефициентът на топлопроводност. Тази зависимост е много силно изразена.

7.3 Ефект на Де Хаас-Бирмаш

При много ниски температури разсейването на фононите от стените на кристалите е преобладаващо. Коефициентът на топлопроводност вече зависи от геометричните размери на образца и по-точно от дебелината на използваната при експерименталните измервания пластина. Този ефект експериментално е установен от Де Хаас-Бирмаш. В ур. (10) се заменя Λ - средният свободен пробег на фононите с d – дебелината на пластинката:

$$(12) \quad \chi = \frac{1}{3} cvd$$