Appunti di Fisica della Materia - 1

Fononi: densità degli stati nel modello di Debye (appunto schematico)

E. Silva, *Dipartimento di Fisica "E.Amaldi", Università Roma Tre*

Questo breve appunto, avvalendosi di risultati precedentemente ottenuti, presenta una trattazione leggermente diversa e più snella rispetto al testo [1]. Argomenti esposti a lezione seguendo le linee del testo adottato non vengono qui ripetuti. Dettagli maggiori possono essere trovati in testi più avanzati di Fisica dei Solidi, quali ad esempio [3, 4].

Nel seguito dell'esposizione si farà uso, senza ulteriori richiami, di notazioni e concetti sviluppati durante la parte precedente del corso, in particolare per quanto attiene alla Fisica Atomica e alla Fisica Statistica.

Il modello di Debye considera una legge di dispersione drasticamente semplificata. Si considera infatti una legge di dispersione limitata a tre branche acustiche (il ché significa ridurre il cristallo a un cristallo cubico con un atomo per cella), per ciascuna delle quali in approssimazione di grandi lunghezze d'onda (piccoli k) si scrive:

$$\omega_n(\overrightarrow{k}) = v_n k \tag{1.1}$$

Una raffigurazione di questa approssimazione è riportata in Fig. 7.1 di [1].

La densità dei modi è ottenibile dall'espressione generale:

$$g(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{S(E=cost)} \frac{dS^{(k)}}{|\nabla_k E|} \tag{1.2}$$

da cui, con ovvia estensione,

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{S(\omega=cost)} \frac{dS^{(k)}}{|\nabla_k \omega|} \tag{1.3}$$

D'altra parte in questo caso si ha:

$$\nabla_k \omega = v_n \tag{1.4}$$

per la $n-$esima branca ($n = 1, 2, 3$). Per la 1.1, la superficie a ω costante implica k (modulo) costante, e quindi le $S(\omega = cost)$ sono sfere a k costante. Pertanto:

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{S(\omega=cost)} \frac{dS^{(k)}}{|\nabla_k \omega|} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{v_n} 4\pi k^2 = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_n^3} \tag{1.5}$$

per una branca, avendo usato la 1.1 per esprimere k in funzione di ω. L'espressione ottenuta per la densità degli stati diverge, in maniera non fisica, ad alti ω (conseguenza dell'approssimazione di Debye); è quindi necessario introdurre una pulsazione massima oltre la quale la densità degli stati è nulla. Facendo riferimento alla Fig. 7.1 di [1], si definisce una ω_D, detta frequenza di Debye (in realtà si tratta di una pulsazione), in corrispondenza della quale si ha il massimo numero d'onda, k_D (da determinare). Si noti che questo corrisponde a considerare k anche oltre la prima zona di Brillouin.

Pertanto, considerando le tre branche (una longitudinale, L, e due trasversali, T) a cui si è ridotto il problema, si ha:

$$g(\omega) = \begin{cases} \frac{V}{2\pi^2} \sum_n \frac{\omega^2}{v_n^3} & \omega \leq \omega_D \\ \\ 0 & \omega_D < \omega \end{cases} \tag{1.6}$$

Si veda Fig. 7.2 di [1].

Per determinare la relazione fra ω_D e k_D uguagliamo il numero dei modi ottenuti dalla densità degli stati $g(\omega)$ (si noti l'estremo superiore in ω_D) e dal volume in spazio $\overrightarrow{k}$: problema, si ha:

$$\begin{aligned} \textstyle\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega &= \tfrac{\textit{volume dello spazio k accessibile}}{\textit{cella nello spazio k}} \cdot \textit{numero branche} \\ &= \tfrac{4}{3}\pi k_D^3 \tfrac{V}{(2\pi)^3} \cdot 3 \end{aligned} \tag{1.7}$$

avendo preso come volume accessibile in spazio k la sfera di raggio k_D. Si ottiene quindi:

$$\frac{1}{3} \sum_n \frac{1}{v_n^3} \omega_D^3 = k_D^3 \tag{1.8}$$

da cui:

$$\omega_D = v_0 k \tag{1.9}$$

dove la velocità del suono è definita come:

$$\frac{1}{v_0^3} = \frac{1}{3} \sum_n \frac{1}{v_n^3} = \frac{1}{3} \left[\frac{1}{v_L^3} + \frac{2}{v_T^3} \right] \tag{1.10}$$

dove L e T indicano le branche longitudinale e trasversali, rispettivamente.

La $g(\omega)$ si può mettere in forma compatta come segue. Poiché il numero totale di modi deve equivalere al numero di atomi $\times$ il numero di polarizzazioni, ovvero $3N$ in totale nell'approssimazione di Debye, si ha (usando la 1.6):

$$3N = \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \sum_n \frac{1}{v_n^3} \cdot \frac{\omega_D^3}{3} \tag{1.11}$$

per cui, sostituendo nella 1.6, si ha infine:

$$g(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \sum_n \frac{1}{v_n^3} \omega^2 = 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3} \tag{1.12}$$

Bibliografia

[1] M. Razeghi, Fundamentals of solid state engineering, *Fundamentals of solid state engineering*, Kluwer Academic Publishers, 2002

[2] R. Marcon, *Proprietà elettromagnetiche della materia - Guida alle lezioni*, ed. CISU

[3] C. Kittel, *Introduzione alla Fisica dello Stato Solido*, Casa Editrice Ambrosiana, 2008

[4] N.W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, HRW International Editions, 1981