

## Os fónons

- energia de cada modo normal 

parcela constante  $\Rightarrow$  energia do estado fundamental do cristal

parcela que depende do grau de excitação (temperatura) do cristal
- modos excitados  $\iff$   $n$  partículas, cada qual c/ energia  $\hbar\omega$
- o conjunto dos modos normais excitados, os quais representam as vibrações atômicas de um cristal responsáveis pelo comportamento térmico, pode ser associado a um sistema de partículas independentes, ou seja, ~~um~~ um gás de fónons (I. Tamm - 1932).
- energia interna de um sólido cristalino (não-metálico), em equilíbrio térmico à temperatura  $T$ , ignorando a energia do estado fundamental, é igual à energia média de um gás de fónons,

$$U = \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{e^{\hbar\omega_i/kT} - 1}$$

$$= \sum \langle n_i \rangle E_i$$

energia de cada fónon

$\searrow$

população média de cada estado c/ energia  $E_i = \hbar\omega_i$  (distribuição de Planck), ou no médio de fónons c/ energia  $E_i$

- Uma vez que o nº médio de fónons depende da temperatura, os fónons não obedecem ao princípio de Exclusão de Pauli, ou seja, os fónons de um cristal se comportam como um gás ideal de bósons não-massivos que obedecem à distribuição de Planck.
- Abaixo da temperatura de Debye ( $T_D$ ), o nº de fónons varia com a temperatura como os fótons em uma cavidade, ou seja, podem ser criados ou aniquilados e, portanto, não têm uma quantidade fixa ( $N_{\text{fónons}}$  depende da temperatura).
- Devido à existência de uma frequência máxima ( $\omega_D$ ), o nº de fónons é limitado <sup>(3N)</sup> e, portanto, a descrição das vibrações nos sólidos como um gás ideal de fónons acima da temperatura de Debye já não se justifica. Apenas no regime degenerado ( $T \ll T_D$ ) a descrição como um gás ideal se justifica.

• em termos da densidade de estados de Debye,

$$U = \int_0^{\omega_D} g(\omega) \langle n(\omega) \rangle \hbar \omega d\omega \quad \left\{ \begin{array}{l} g(\omega) = \frac{3}{2\pi^2} \frac{V}{c^3} \omega^2 = \frac{9N}{(\hbar T_D)^3} \omega^2 \\ \langle n(\omega) \rangle = \frac{1}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \end{array} \right. \quad T_D = \left( \frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \left( \frac{c \hbar}{k} \right)$$

• relação de dispersão na aproximação de

Debye:  $\omega = ck$  ( $\lambda v = c$ )  $\Rightarrow \underbrace{\hbar \omega}_E = c \underbrace{\hbar k}_p$  (fótons não possuem massa)

• densidade de ~~fótons~~ estados em um cristal, em termos da energia ou do momento,

$$g(\epsilon) = g(\omega) \left( \frac{d\omega}{d\epsilon} \right) = \frac{f}{2\pi} \frac{V}{c^3} \frac{\epsilon^2}{\hbar^3} = \frac{4\pi f V}{(c\hbar)^3} \epsilon^2 \quad (f=3)$$

$\Downarrow$

$$G(\epsilon) = \left( \frac{4\pi f}{3} \right) \frac{V}{(c\hbar)^3} \epsilon^3$$

$\Rightarrow$

$$G(p) = \left( \frac{4\pi f}{3} \right) \frac{V}{\hbar^3} p^3$$

no de estados p/ long e/ momento de 0 a p  
partículas vão na superfície em  
ou volume V

# Estimation do no de fónons ( $T \ll T_D$ )

$$N_{\text{fónons}} = \int_0^{\omega_D} g(\omega) \langle n(\omega) \rangle d\omega = \frac{3}{2\pi^2} \frac{V}{c^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^2}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} d\omega$$

$$= \frac{3}{2\pi^2} \frac{V}{c^3} \left( \frac{\hbar T}{k} \right)^3 \int_0^{T_D/T - 1} \frac{x^2}{e^x - 1} dx \rightarrow (2.4)$$

$$x = \frac{\hbar\omega}{kT} \begin{cases} T_D/T \\ 0 \end{cases} \quad \left( T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k} \right)$$

$$T_D = \left( 6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} \left( \frac{c\hbar}{k} \right)$$

$$N_{\text{fónons}} = \frac{2.4 \times 3}{2\pi^2} \underbrace{\left( \frac{\hbar}{ck} \right)^3}_{10^{24}} V T^3 \Rightarrow N_f \sim V T^3 \quad (c \sim 10^3 \text{ m/s})$$

Entropia:  $S = \frac{4\pi^4}{15} Nk \frac{T}{T_D^3} = \frac{2\pi^2}{15} \left( \frac{k}{ck} \right)^3 k V T^3$

$$\frac{S/k}{N_f} = \frac{4\pi^4}{15 \times 2.4 \times 3} = \frac{\pi^4}{27} \approx 3.6 \Rightarrow \boxed{S = 3.6 N_f k}$$

# Distribuição de Planck

(gases)  $\begin{cases} E = \sum_i n_i \epsilon_i \\ N = \sum_i n_i \end{cases}$

$\epsilon_i$   $n_i$

espectro da partícula  
população do nível  $i$

$(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots) \rightarrow$  estados ou partículas  
 $(n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots) \rightarrow$

distribuição canônica  $\rightarrow Z = \sum_{\text{estados}} e^{-E/kT} = \sum_{n_1, n_2, \dots} e^{-\sum_i n_i \epsilon_i / kT} = \sum_{n_1, n_2, \dots} e^{-n_1 \epsilon_1 / kT} e^{-n_2 \epsilon_2 / kT} \dots$

$= \underbrace{\sum_{n_1} (e^{-\epsilon_1 / kT})^{n_1}}_{Z_1} \underbrace{\sum_{n_2} (e^{-\epsilon_2 / kT})^{n_2}}_{Z_2} \dots = Z_1 \cdot Z_2 \cdot \dots = \prod_i Z_i$

termos não-independentes

$N$  indefinido ou infinito  $\Rightarrow Z_i$  (independentes)

$Z_i = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\epsilon_i / kT})^n = \frac{1}{1 - e^{-\epsilon_i / kT}} \Rightarrow U = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = - \sum_i \frac{\partial \ln Z_i}{\partial \beta} \quad (\beta = \frac{1}{kT})$

$U = \sum_i \frac{\epsilon_i e^{-\epsilon_i / kT}}{1 - e^{-\epsilon_i / kT}} = \sum_i \left( \frac{1}{e^{\epsilon_i / kT} - 1} \right) \epsilon_i$

$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\epsilon_i / kT} - 1}$

distribuição de Planck

$\langle n_i \rangle \rightarrow$  ne médio de ocupação (população média dos estados)

descreve a distribuição de gases com ne indefinido (ou infinito) de partículas