

Γιατί η συγκέντρωση των φωνονίων (n_{phonons}) σε θερμοκρασίες υψηλότερες της θερμοκρασίας Debye (θ_D) είναι ανάλογη της θερμοκρασίας T και σε χαμηλότερες από την θ_D ανάλογη του T^3 .- Νόμος Dulong-Petit

έστω ο αριθμός των φωνονίων ενέργειας E_i είναι $N = A e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$

Η μέση ενέργεια του φωνονίου θα είναι: $\overline{E_{ph}} = \frac{\sum_i N(E_i) \times E_i}{\sum_i N(E_i)}$

Προκύπτει ότι $\overline{E_{ph}} = \hbar\omega (e^{\hbar\omega/kT} - 1)^{-1}$

όταν $\hbar\omega < kT$ τότε $\overline{E_{ph}} = \hbar\omega (e^{\hbar\omega/kT} - 1)^{-1} = \hbar\omega \left(1 + \frac{\hbar\omega}{kT} + \dots\right)^{-1} \approx kT$

Ας θεωρήσουμε θερμοκρασία T η οποία είναι μικρότερη από τη θερμοκρασία Debye, όπου δεν έχουν διεγερθεί όλοι οι δυνατοί τρόποι ταλάντωσης των ατόμων του κρυστάλλου παρά μόνο φωνόνια με συχνότητα $\omega = \frac{kT}{\hbar}$

Ο αριθμός των διεγερμένων φωνονίων θα είναι:

$$z = \int_0^{kT/\hbar} g(\omega) d\omega \approx \int_0^{kT/\hbar} \omega^2 d\omega \sim \int T^2 dT = T^3$$

όπου η πυκνότητα των κανονικών τρόπων ταλάντωσης δίνεται από: $g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \omega^2$

V =όγκος και $v=\omega/k$

επομένως $n_{\text{phonons}} z/V \sim T^3$ και η ενέργεια του πλέγματος $E_{\text{πλέγμα}} = \overline{E_{ph}} z \sim T^4$

Σε θερμοκρασίες $T > \theta_D$ βρίσκουμε ότι $E_{\text{πλέγματος}} = 3NkT$. Αυτό γιατί για κάθε άτομο η μέση ενέργεια είναι η δυναμική και η κινητική (κάθε άτομο στον κρύσταλλο συνδέεται με τα διπλανά του με τη μορφή «ελατηρίων») μαζί που προκύπτει να είναι για κάθε διάσταση ίση με kT . Επομένως για τα N άτομα και στις τρεις διαστάσεις είναι $3NkT$.

Το κάθε φωνόνιο πάνω από τη θερμοκρασία Debye έχει ενέργεια $\hbar\omega_D$

Επομένως ο αριθμός των φωνονίων θα είναι $z = E_{\text{πλέγμα}} / \overline{E_{ph}} \sim T$ και συνεπώς $n_{\text{phonons}} = z/V \sim T$

Η ενέργεια του πλέγματος λύνοντας επ' ακριβώς το πρόβλημα βάσει της θεωρίας Debye για τα φωνόνια είναι:

$$E_{\text{πλέγματος}} = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3 d\omega}{(e^{\hbar\omega/kT} - 1)}$$

θέτοντας $x = \hbar\omega/kT$ παίρνουμε:

$$E_{\text{πλέγματος}} = 9Nk\theta \left(\frac{T}{\theta}\right)^4 \int_0^{\theta/T} \frac{x^3 dx}{(e^x - 1)}$$

όπου Θ είναι η θερμοκρασία Debye.

Για χαμηλότερες θερμοκρασίες από την Θ , δηλ. $T \ll \Theta$

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{(e^x - 1)} = \frac{\pi^4}{15}$$

Επομένως:

$$E_{\text{πλέγματος}} = \frac{3\pi^4}{5} Nk\Theta \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \sim T^4$$

η θερμοχωρητικότητα δίνεται τότε:

$$C_V = \frac{\partial E_{\text{πλέγματος}}}{\partial T} = \frac{12\pi^4}{5} Nk \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \sim T^3$$

Πάνω από τη θερμοκρασία Debye, για T μεγάλο δηλ. $x \ll 1$ ισχύει $e^x = 1 + x + \dots \approx 1 + x$

Άρα $e^x - 1 = 1 + x + \dots - 1 \approx x$

Επομένως:

$$E_{\text{πλέγματος}} = 9Nk\Theta \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{x} = 3NkT \sim T$$

και

$$C_V = \frac{\partial E_{\text{πλέγματος}}}{\partial T} = 3Nk$$

