PROGRAM ROZWOJOWY
POLITECHNIKI WARSZAWSKIEJ

Wstęp do fizyki ciała stałego

Zadania z rozwiązaniami

KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY

Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

Zadanie 1

Zakładając liniową dyspersję fononów akustycznych (teoria Debye), wyprowadź wyrażenie na średnią dowolnej wielkości fizycznej *A* po zespole statystycznym.

Rozwiązanie

Debye zaproponował, aby zastosować liniową dyspersję (relację między częstością a wektorem falowym) fononów akustycznych (poprzecznych i podłużnych):

$\omega_T = u_T q,$ $\omega_L = u_L q,$

gdzie: u_i – prędkość fazowa,

q – wektor falowy.

Gęstość stanów w przestrzeni 3D opisana jest wyrażeniem:

$$\rho(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3}$$

W wyrażeniu na gęstość stanów w *i*-tej gałęzi w funkcji modułu wektora falowego wykorzystamy różniczkową „objętość” sfery w przestrzeni *q* o promieniu *q* i grubości *dq*:

$$Z_i(q)dq = \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi q^2 dq = \frac{q^2 dq}{2\pi^2}$$

Bardziej praktyczne będzie wyrażenie na gęstość stanów we wszystkich modach drgań (dwa poprzeczne i jeden podłużny) w funkcji częstości:

$$Z(\omega) = \sum_i Z_i(\omega) = \sum_i Z_i(q)\tfrac{dq}{d\omega} = \sum_i \frac{\omega^2}{2\pi^2 u_i^3} = \frac{\omega^2}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2}{u_T^3} + \frac{1}{u_L^3} \right) = \frac{3\omega^2}{2\pi^2 u^3}$$

gdzie: u – wypadkowa prędkość fazowa.

Fonony są bozonami, zatem opisuje je rozkład Bosego-Einsteina:

$$f_{B-E}(\omega)=\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)-1}$$

Możemy zatem przystąpić do obliczenia wartości średniej dowolnej wielkości fizycznej *A* zgodnie z wyrażeniem:

$$\overline{A}=\int_0^{\omega_m} Z(\omega)\cdot f_{B-E}(\omega)\cdot A(\omega)d\omega$$

gdzie: ω_m – maksymalna częstość fononów.

$$\overline{A}=\frac{3}{2\pi^2u^3}\int_0^{\omega_m} A(\omega)\cdot\frac{\omega^2 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)-1}=\frac{3}{2\pi^2(u\hbar)^3}\int_0^{\hbar\omega_m} A(\hbar\omega)\cdot\frac{(\hbar\omega)^2 d(\hbar\omega)}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)-1}$$

Wprowadźmy teraz temperaturę Debye Θ powiązaną z maksymalną częstością fononów ω_m wg poniższej zależności:

$$\Theta=\frac{\hbar\omega_m}{k_B}$$

Podstawiając $x=\dfrac{\hbar\omega}{k_B T}$ przekształcamy powyższą całkę:

$$\overline{A}=\frac{3}{2\pi^2}\cdot\left(\frac{k_B T}{u\hbar}\right)^3\cdot\int_0^{\Theta/T} A(x)\cdot\frac{x^2 dx}{\exp(x)-1}$$

Teraz stosujemy następującą zależność, której wyprowadzenie będzie celem zadania do samodzielnego rozwiązania:

$$\omega_m=u\cdot\sqrt[3]{6\pi^2N}\quad\Rightarrow\quad\frac{1}{(u\hbar)^3}=\frac{6\pi^2N}{(\Theta k_B)^3}$$

Ostatecznie otrzymujemy:

$$\overline{A}=\frac{3}{2\pi^2}\cdot\left(\frac{k_B T}{k_B\Theta}\right)^3\cdot 6\pi^2N\cdot\int_0^{\Theta/T}\frac{A(x)\cdot x^2 dx}{\exp(x)-1}=9N\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\cdot\int_0^{\Theta/T}\frac{A(x)\cdot x^2 dx}{\exp(x)-1}$$

Korzystając z wyprowadzonego przed chwilą wzoru, wyznaczmy wyrażenie na średnią energię drgań kryształu *U*.

Energia pojedynczego fononu wynosi:

$$E = \hbar\omega = x \cdot k_B T$$

Stąd:

$$U = \overline{E} = 9N\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{E(x)\cdot x^2 dx}{\exp(x)-1} =$$

$$= 9N\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x\cdot k_B T \cdot x^2 dx}{\exp(x)-1} =$$

$$= 9k_B N\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{\exp(x)-1} =$$

$$= 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{\exp(x)-1}$$

Zadanie 2

Oblicz wyrażenie na energię drgań kryształu wynikającą z teorii Debye w przybliżeniu niskich temperatur.

Rozwiązanie

Rozpoczynamy od wyprowadzonego uprzednio wyrażenia na średnią energię:

$$U = 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{\exp(x)-1}$$

Zauważmy, że gdy T → 0, wówczas Θ/T → +∞, co wpływa na górną granicę całki i umożliwia jej analityczne rozwiązanie. Mamy więc:

$$U(T \to 0) \approx 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{+\infty} \frac{x^3 dx}{\exp(x)-1} = 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{+\infty} \frac{\exp(-x)}{1-\exp(-x)} \cdot x^3 dx$$

Zauważmy, że ułamek pod całką, po przekształceniu, jest równy sumie nieskończonego szeregu o wyrazie początkowym e^{-x} i takim samym ilorazie:

$$\frac{\exp(-x)}{1-\exp(-x)} = \sum \exp(-nx)$$

Możemy teraz znak sumy wyłączyć przed całkę:

$$U(T \to 0) \approx 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{+\infty} \sum \exp(-nx) \cdot x^3 dx = 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \sum \frac{1}{n^4} \cdot \int_0^{+\infty} (xn)^3 \exp(-nx) d(nx)$$

Zauważmy, że dla każdego niezerowego n, całka w poprzednim wyrażeniu jest równa – z definicji – funkcji gamma Eulera:

$$\int_0^{+\infty} (xn)^3 \exp(-nx) d(nx) = \int_0^{+\infty} t^3 \exp(-t) dt = \Gamma(4)$$

Ponadto szereg $1/n^4$ jest zbieżny i jego suma wynosi:

$$\sum \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}$$

Stąd:

$$U(T \to 0) \approx 9R\Theta \left(\frac{T}{\Theta} \right)^4 \cdot \sum \frac{1}{n^4} \cdot \Gamma(4) = 9R\Theta \left(\frac{T}{\Theta} \right)^4 \cdot \frac{\pi^4}{90} \cdot 3! = \frac{3\pi^4}{5} \cdot R\Theta \left(\frac{T}{\Theta} \right)^4$$

Zadanie 3

Oblicz wyrażenie na energię drgań kryształu wynikającą z teorii Debye w przybliżeniu wysokich temperatur.

Rozwiązanie

Ponownie wychodzimy od równania na średnią energię drgań kryształu:

$$U = 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3dx}{\exp(x)-1}$$

Przez wysoką temperaturę rozumiemy temperaturę taką, że $T >> \Theta$. Wówczas $x << 1$. Rozwijamy e^x w szereg Taylora i ograniczamy się do wyrazu liniowego:

$$\exp(x) = 1 + x + \tfrac{x^2}{2} + ... \approx 1 + x$$

Rozwinięcie podstawiamy do mianownika pod całką i otrzymujemy wynik:

$$U(T >> \Theta) \approx 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3dx}{1+x-1} = 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} x^2dx = 9R\Theta\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \tfrac{1}{3}x^3\Big|_0^{\Theta/T} = 3RT$$

Zadania do samodzielnego rozwiązania

Zadanie 1

Obliczyć maksymalną częstość kołową oraz minimalną długość fali fononów akustycznych, zakładając że liczba drgań własnych wynosi 3*N*.

Wskazówka: Wykorzystać zależność $\int_0^{\omega_m} Z(\omega)d\omega = 3N$

Odp. $\omega_m = u \cdot \sqrt[3]{6\pi^2 N}$ $\qquad \lambda_{\min} = \frac{2\pi}{\sqrt[3]{6\pi^2 N}}$

Zadanie 2

Oblicz ciepło właściwe wynikające z teorii Debye w przybliżeniu niskich temperatur. Czy otrzymany wynik jest zgodny z tw. Nernsta $C_V(T=0) = 0$?

Wskazówka: $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$

Odp. $C_V = 12\pi^4/5 \cdot (T/\Theta)^3$; $C_V(0) = 0$

Zadanie 3

Oblicz ciepło właściwe wynikające z teorii Debye w przybliżeniu wysokich temperatur.

Odp. $C_V = 3R$ – prawo Dulonga-Petita