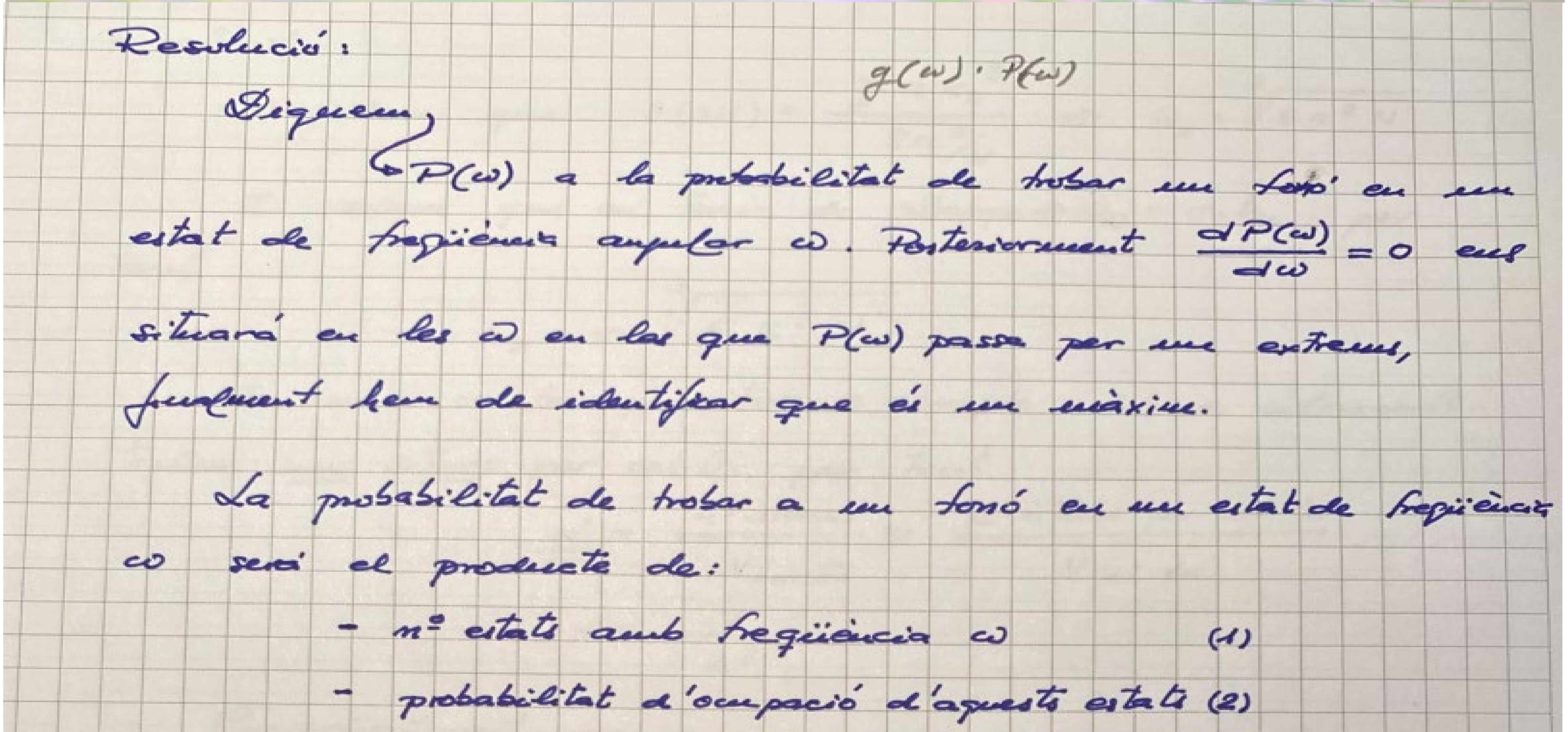
Exercicis de Física d'Estat Sòlid. Propietats tèrmiques

Exercici 1.- En un sòlid a temperatura T, trobar la freqüència més probable dels fonons utilitzant l'aproximació de Debye



Resolució:

$g(\omega) \cdot P(\omega)$

Diguem $P(\omega)$ a la probabilitat de trobar un fonó en un estat de freqüència angular ω. Posteriorment $\frac{dP(\omega)}{d\omega} = 0$ ens situarà en les ω en las que $P(\omega)$ passa per un extrem, finalment hem de identificar que és un màxim.

La probabilitat de trobar a un fonó en un estat de freqüència ω serà el producte de:

- nº estats amb freqüència ω (1)
- probabilitat d'ocupació d'aquests estats (2)

(1) és la densitat d'estats: $g(\omega)$

$$g(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3}$$ ← demostrada a classe de teoria

(2) es tracte de bosons per tant la probabilitat d'ocupació és:

$$\frac{1}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}$$

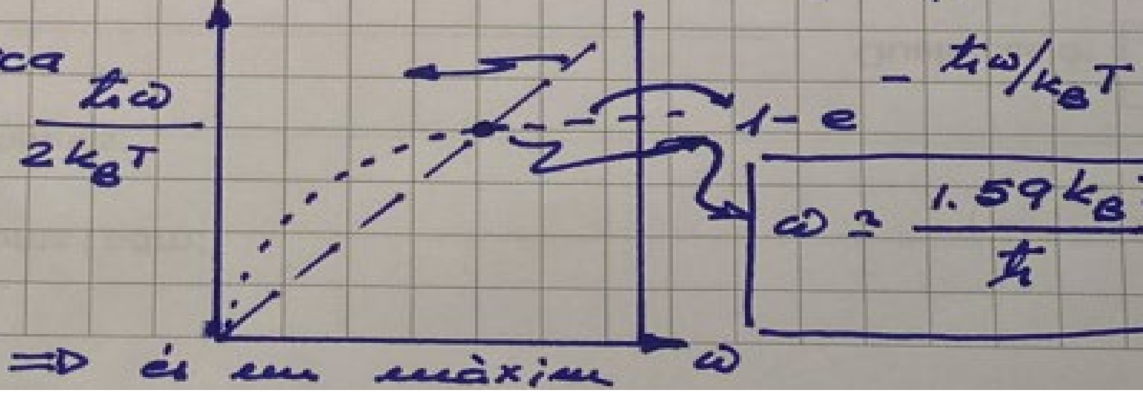
Conseqüentment

$$P(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v^3}\,\frac{\omega^2}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}$$

$$\frac{dP}{d\omega} = 0 \Rightarrow \frac{\hbar\omega}{2k_BT} = 1 - e^{-\hbar\omega/k_BT}$$

sense solució analítica! eq. trascendent!

→ solució numèrica



$$\boxed{\omega \simeq \frac{1.59\,k_BT}{\hbar}}$$

Aquí la 2ona derivada es (−) ⇒ és un màxim

Exercici 2.- Utilitzant el model de Debye, calculeu la freqüència màxima dels modes de vibració d'una xarxa cúbica simple de constant *a* = 3 *Å* en què la velocitat del so és c = 4.2 x10⁵ cm/s.

Resolució :

Recordem que $3(2N) = \dfrac{\frac{4}{3}\pi k_D^3}{8\pi^3/V} \Rightarrow k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 N'}$

I sabem que en teoria de Debye $\Rightarrow \omega_D = v \cdot k_D$, per tant

$$\omega_D = v\sqrt[3]{6\pi^2 N'}$$

En una cel·la primitiva ≡ simple cúbica solament tenim un àtom per cel·la per tant

$$\underline{\underline{N'}} = \frac{\text{n° àtoms}}{V_{\text{mostra}}} = \frac{\text{n° àtoms per cel·la}}{V_{\text{cel·la}}}$$

$$N' = \frac{1}{a^3}$$

Conseqüentment

$$\omega_D = v\sqrt[3]{6\pi^2 a^{-3}} = v\, a \sqrt[3]{6\pi^2}$$

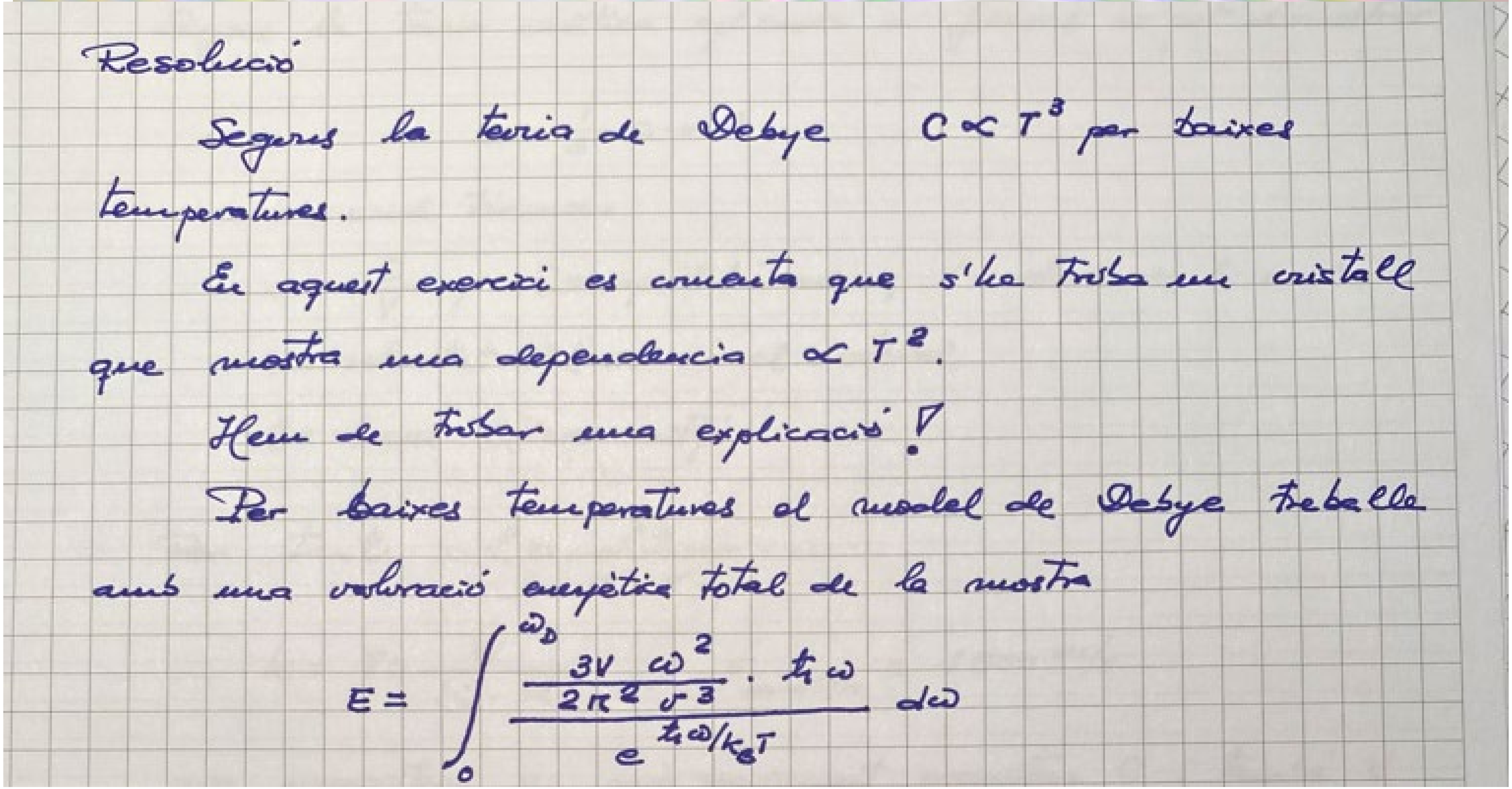
$v = 4.2 \times 10^5$ cm/s

$a = 3$ Å

$$\omega_D = 8\ 54.7 \cdot 10^{12}\,\text{Hz} \Rightarrow \nu_D = 8.7 \times 10^{12}\,\text{Hz}$$

$$\boxed{\nu_D = 8.7\ \text{THz}}$$

Exercici 3.- La calor específica de la xarxa cristal·lina d'una determinada forma de carboni s'ha mesurat experimentalment i per un rang de temperatures molt baixes és proporcional a T^2. Què podem dir sobre l'estructura d'aquesta fase particular del carboni?



Resolució

Segons la teoria de Debye $C \propto T^3$ per baixes temperatures.

En aquest exercici es comenta que s'ha troba un cristall que mostra una dependencia $\propto T^2$.

Hem de trobar una explicació!

Per baixes temperatures el model de Debye treballa amb una valoració energètica total de la mostra

$$E = \int_0^{\omega_D} \frac{\frac{3V \omega^2}{2\pi^2 v^3} \cdot \hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T}} \, d\omega$$

La "raó matemàtica" de $E \propto T^4$ i per tant $C \propto T^3$ segons teoria de Debye és que un canvi de variable que implica

$$\omega \Longrightarrow x = \frac{\hbar\omega}{k_B T} \qquad \Big(\overset{\text{en definitiva}}{\text{de } \omega \rightarrow \frac{\omega}{T}}\Big)$$

ens separa de l'exponent la ω i la T: emarfeix a T amb la seva T^4 i desapareix la ω com variable i l'integral es converteix en un simple número $n! = 3! = 6$

Per tant la veritable raó matemàtica està ω^3 a l'integrand

$$\Rightarrow \Big[\Big(\frac{\omega}{T}\Big)\frac{\hbar}{k_B}\Big]^3 \Rightarrow \int\Big[\qquad\Big] \Rightarrow \propto T^4 \Longrightarrow C \propto T^3$$

De on provenen les ω^3 $\begin{cases} \text{una de } \hbar\omega \text{ (realitat quàntica} \\ \text{dos de la funció "densitat d'estats"} \end{cases}$

Com podem generar una $g(\omega) \propto \omega$ en lloc de $g(\omega) \propto \omega^2$?

$4\pi k^2 \propto \omega^2$. Si suposem un cristall bidimensional: 2D (per exemple el grafè) $\Rightarrow 2\pi k \propto \omega \Longrightarrow C \propto T^2$.

Exercici 4.- Estimar el recorregut lliure mitjà dels fonons al Ge a 300 K, utilitzant les dades següents: $k = 80$ W/mK, $\theta_D = 360$ K, massa atòmica 72.6 g/mol, $\rho = 5500$ Kg/m^3, $c = 4500$ m/s.

Resolució:

Segons la teoria cinètica aplicada a fonons es pot demostrar

$$k = \frac{1}{3}\, c \cdot v \cdot l$$

k = cond. tèrmica

$c = \frac{C}{V}$; C = capacitat tèrmica ; V = volum de la mostra

v = velocitat del so en el material

l = camí lliure mitjà

Per tant. $l = \frac{3k}{c \cdot v}$ . . . . .

$k = 80 \frac{W}{K \cdot m}$; $v_{acústica} = 4500$ m/s

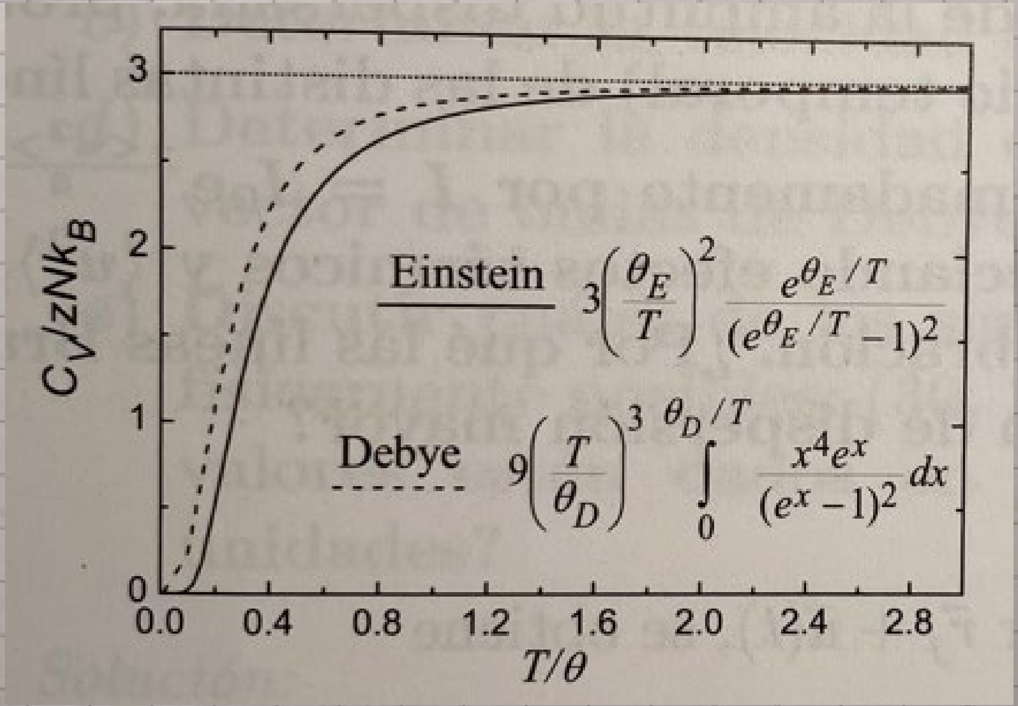
ara necessitem c, però prèviament necessitem C i també V

Suposem una mostra de 1 mol = 72.6 g

$$V = \frac{72{,}6 \cdot 10^{-3}\ \text{kg}}{5500\ \text{kg/m}^3} = 13.2 \times 10^{-6}\ \text{m}^3$$

i per determinar C, utilitzem la gràfica $C/2Nk_B\,(T/\theta_D)$

$$T/\theta_D = \frac{300}{360} = 0.8$$



Fent lectura sobre la gràfica $\dfrac{C}{2Nk_B} = 2.65$

Per tant per la mostra de: 1mol

$$\underbrace{\left.\begin{array}{l} zN = 6.0 \times 10^{23} \text{ àtoms} \\ k_B = 1.58 \times 10^{-23}\ \mathrm{J/K} \end{array}\right\} \begin{array}{l} C = 2.65 \times 6 \times 1.38\ \mathrm{J/K} \\ C = 21{,}9\ \mathrm{J/K} \end{array}}$$

$$\Downarrow$$

$$c = \frac{C}{V} = \frac{21.9\ \mathrm{J/K}}{13.2 \cdot 10^{-6}\ \mathrm{m^3}} = \frac{21.9}{13{,}2} 10^{6} \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K \cdot m^3}}$$

Finalment

$$l = \frac{3 \cdot 80\ \frac{\mathrm{W}}{\mathrm{K \cdot m}}}{\frac{21.9}{13.2} 10^{6} \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K\ m^3}} \cdot 4500 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}} = 32\ \mathrm{nm}$$

Exercici 5.- La relació de dispersió d'una cadena de longitud L de N àtoms de massa M es pot aproximar per $w^2(k) = A(1-\cos(ka))+B(1-\cos(2ka))]$, on *a* és el paràmetre de xarxa i *A i B* constants d'acoblament entre els primers i els segons veïns, respectivament.

a) Determinar la velocitat de grup de les ones elàstiques a la cadena.

b) Determinar quines longituds d'ona produeixen ones estacionàries.

c) Determinar la velocitat de propagació del so.

d) Determinar la densitat general de modes, la de Debye i el vector d'ones de Debye.

e) Discutir quins dels parells de valors següents (A, B) són físicament possibles: (30, 15), (30,-15), (30, 5), (30,-5). Aquests valors estan donats en unitats MKS, quines són aquestes unitats?

Resolució:

$$\omega^2(k) = [A(1-\cos ka) + B(1-\cos 2ka)]\,\frac{2}{M}$$

a = paràmetre de xarxa

A = cte acoblament primers veïns

B = cte acoblament segons veïns

a) Velocitat de grup

$$v_g = d\omega/dk \;;\quad \omega = \sqrt{\frac{2}{M}[A(1-\cos ka)+B(1-\cos 2ka)}$$

llavors

$$v_g = \frac{1}{2}\,\frac{\frac{2}{M}(Aa\sin ka + B2a\sin 2ka)}{\sqrt{}}$$

$$v_g = \frac{a\,[\ \ A\sin ka + B\sin 2ka)}{\sqrt{2M[A(1-\cos ka)+B(1-\cos 2ka)}}$$

recordem: $1-\cos\alpha = 2\sin^2\frac{\alpha}{2}$

$$\boxed{v_g = a\,\frac{A\sin ka + B\sin 2ka}{\sqrt{4M(A\sin^2\frac{ka}{2}+B\sin^2 ka}}}$$

b) Les λ que produeixen ones estacionàries són aquelles que no no propaguen energia $\Rightarrow v_g = 0$

Hem d'imposar condicions d'angle que anul·lin el numerador però que no anul·lin el denominador, perquè sinó seria indeterminat el valor v_g i volem que sigui zero. També hem d'evitar $\alpha = 0$.

Per tant el primer angle vàlid és: π

$ka = \pi$ → compleix $k \neq 0$
→ compleix $\sin\pi = 0$ i $\sin 2\pi = 0$
→ compleix $\sin\frac{\pi}{2} \neq 0$ (denominador)

El segon angle vàlid serà $\pi + 2\pi$

El tercer " " $\pi + 4\pi$

El quart " " $\pi + 6\pi$

Aquesta seqüència (serie) la podem expresar :

$$ka = \pi\,(1 + 2n)\,, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad n \in \mathbb{Z}$$

c) Velocitat el so

$$v_g = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k \to 0} = \frac{\omega}{k} = v_f$$

Per tant donat que fent el $\lim_{k \to 0}$ en l'expressió de v_g ens surt indeterminat recorrim a la velocitat de fase

$$\omega^2 = \frac{2}{M}\left[A\,(1 - \cos ka) + B\,(1 - \cos 2ka)\right]$$

$$\Downarrow$$

$$\omega^2 = \frac{2}{M}\left[A \cdot 2 \sin^2 \frac{ka}{2} + B \cdot 2 \sin^2 ka\right]$$

$$\omega^2 = \frac{4}{M}\left(A \sin^2 \frac{ka}{2} + B \sin^2 ka\right)$$

$$\lim_{k \to 0}\left[\omega = \sqrt{\frac{4}{M}\left(A \sin^2 \frac{ka}{2} + B \sin^2 ka\right.}\;\right] \xRightarrow{\sin\alpha \simeq \alpha}$$

$$\omega \simeq \sqrt{\frac{4}{M}\left(A \frac{k^2a^2}{4} + B\, k^2a^2\right)}$$

$$\omega \simeq \sqrt{\frac{4}{M}\left(\frac{A}{4} + B\right)} \cdot k a$$

$$\omega \simeq ka\sqrt{\frac{A+4B}{M}} \Rightarrow \boxed{\frac{\omega}{k} \simeq a\sqrt{\frac{A+4B}{M}}}$$

d) Determinació de la densitat de modes

En una cadena (xarxa) unidimensional les ones (els modes) només són "longitudinals". I si són monoatòmiques no tindran bandes "òptiques". Per tant per estar uniformement distribuïts

$$g(\omega)\cdot d\omega = g(k)\cdot dk \Rightarrow g(\omega)\,d\omega = \frac{N/2}{\pi/a}\,dk = \frac{L}{2\pi}\,dk \Rightarrow$$

$$\boxed{g(\omega) = \frac{L}{2\pi}\,\frac{dk}{d\omega} = \frac{L/2\pi}{d\omega/dk}}$$

$$g(\omega) = \left[\frac{A\sin ka + 2B\sin 2ka}{\left(4M\left(A\sin^2\frac{ka}{2} + B\sin^2 ka\right)\right)^{1/2}}\right]^{-1}\cdot\frac{L}{2\pi\cdot a}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{g(\omega) = \frac{L}{2\pi a}\cdot\frac{\sqrt{4M\left(A\sin^2\frac{ka}{2} + B\sin^2 ka\right)}}{A\sin ka + 2B\sin 2ka}}$$

densitat general de modes per la funció de dispersió donada.

També ens demana pel cas de les condicions de Debye:

El model de Debye → $\omega = v \cdot k \Rightarrow \frac{d\omega}{dk} = v$, en aquest cas la densitat de modes serà:

$$\boxed{g_D(\omega) = \frac{L/2\pi}{v} = \frac{L}{2\pi \cdot v}}$$

També ens demana que determinem el vector d'ones de Debye

Raonant de la mateixa manera que hem raonat per 3D (en classe de teoria), però ara en 1D

$$3\,2N \Rightarrow \left\{ \begin{matrix} 3 \to 1 \\ 2 \to 1 \end{matrix} \right\} \Rightarrow 3\,2N \to N$$

$$\underbrace{\frac{4}{3}\pi k_D^2}_{3D} \Rightarrow \underbrace{2k_D}_{1D} \; ; \; \underbrace{\frac{8\pi^3}{V}}_{\text{volum del espai recíproc associat a cada estat}} \Rightarrow \frac{2\pi}{L}$$

$$N = \frac{2k_D}{2\pi/L} \Rightarrow$$

$$\boxed{k_D = \underbrace{\frac{N}{L}}\pi = n\pi}$$

densitat numèrica d'àtoms o de cel·les.

e) Els paràmetres A i B, són paràmetres relacionades amb les forces que realitzen els primers veïns i els segons, però quina és la seva equació de dimensions

Si observem

$$\omega^2 = \frac{2}{M}\left[A\underbrace{(1-\cos ka)}_{\text{adimensional}} + B\underbrace{(1-\cos 2ka)}\right]$$

$$[\omega^2] = \left[\frac{2}{M}A\right] = \left[\frac{2}{M}B\right]$$

$$\boxed{[A]=[B]} = [M\omega^2] = \boxed{[M\,T^{-2}]} \quad i$$

conseqüentment en el SI les seves unitats de mesura seran

$$\boxed{kg\cdot s^{-2}}$$

Seria una possible solució de $(A,B) \Rightarrow 30\,\frac{kg}{s^2},\ 15\,\frac{kg}{s^2}$?

En funció del treball fet en els anteriors apartats d'aquest exercici trobem que a l'apartat c) relacionat amb la velocitat del so hem obtingut que

$$v = a\sqrt{\frac{A+4B}{M}}$$

No tindria sentit físic que aquesta expressió ens donés un número complex, per tant hem d'imposar

$$A+4B \geq 0$$

Llavors la solució $(\underline{30,15})$ es possible i totes en les que $A, B \geq 0$ com per exemple $(\underline{30,5})$. La $(30,-5)$ també es possible malgrat $B<0$, però compleix $|4B|<A$.

La que no pot ser es la $(\overset{A}{30}, \overset{B}{-15}) \Rightarrow \underbrace{A+4B<0}_{n^{\circ}\text{ complex}}$

Exercici 6.- Raonar breument la veracitat o falsedat de les afirmacions següents:

a) Per una T 80 K, la capacitat calorífica d'un sòlid amb temperatura de Debye $\theta_D = 100$ K serà més gran que la d'un altre amb $\theta_D = 200$ K.

b) La mínima longitud d'ona dels fonons en un sòlid és menor com més gran sigui la constant de xarxa.

Resolució:

a) La C d'una mostra respon a la següent expressió:

$$C = 9\,2N k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \underbrace{\int_0^x \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2}\,dx \quad \text{amb } x = \theta_D/T}_{(*)}$$

per tant depen de:

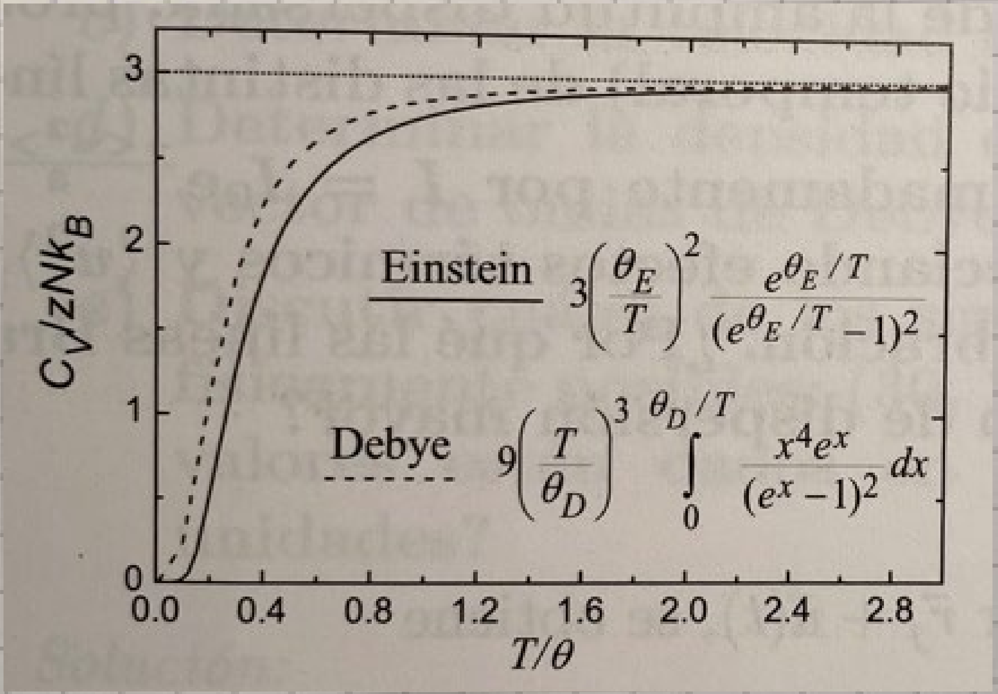
2N: nº àtoms de la mostra

i de $\frac{T}{\theta_D}$

Si eliminem la dependència de 2N, ~~es~~ o el que es equivalent representem

$$\frac{C}{2Nk_B}\left(T/\theta_D\right) = 9\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \cdot (*)$$

representem $\frac{C}{2Nk_B}\left(T/\theta_D\right) = 9\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \cdot (*)$



podem afirmar que $\frac{C}{2Nk_D}\left(T/\theta_D\right)$ es creixent (pendent +, $\forall\ T/\theta_D$)

Per tant $\frac{C}{2Nk_B}\left(\frac{80}{100}\right) > \frac{C}{2Nk_B}\left(\frac{80}{200}\right)$

En aquest sentit la frase serà veritat.

b) Els vectors d'ona i la longitud d'ona estan relacionats

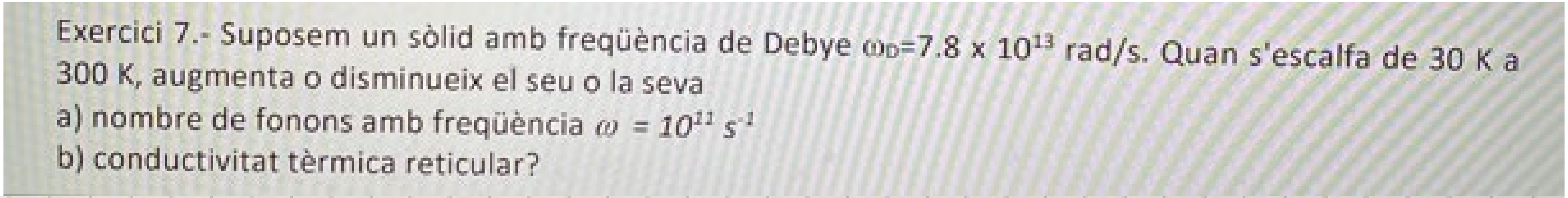
$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

per tant $\lambda_{min} \Rightarrow k_{max}$.

Agafant ara referent la PZB: $k_{max} = \frac{\pi}{a}$; a = paràmetre de xarxa

conseqüentment : $\frac{2\pi}{\lambda_{min}} = \frac{\pi}{a} \Rightarrow \frac{\lambda_{min}}{2} = a \Rightarrow \underline{\lambda_{min} = 2a}$

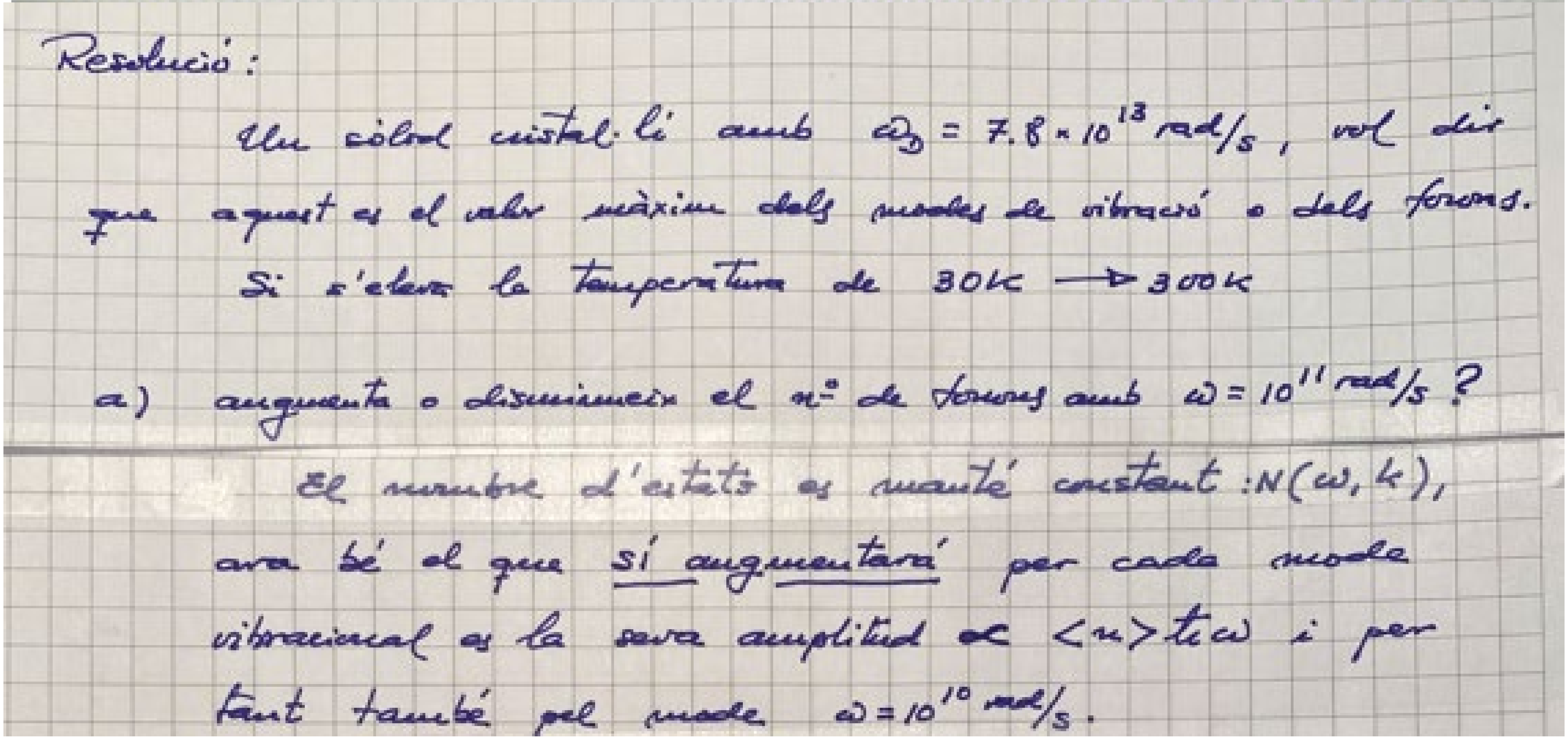
Aquesta relació ens indica que la afirmació expressada en l'exercici no es veritat, al contrari son proporcionals.



Exercici 7.- Suposem un sòlid amb freqüència de Debye $\omega_D=7.8 \times 10^{13}$ rad/s. Quan s'escalfa de 30 K a 300 K, augmenta o disminueix el seu o la seva

a) nombre de fonons amb freqüència $\omega = 10^{11}\ s^{-1}$

b) conductivitat tèrmica reticular?



Resolució:

Un sòlid cristal·lí amb $\omega_D = 7.8 \times 10^{13}$ rad/s, vol dir que aquest es el valor màxim dels modes de vibració o dels fonons.

Si s'eleva la temperatura de 30K $\longrightarrow$ 300K

a) augmenta o disminueix el nº de fonons amb $\omega = 10^{11}$ rad/s ?

El nombre d'estats es manté constant: $N(\omega, k)$, ara bé el que sí augmentarà per cada mode vibracional es la seva amplitud $\propto \langle n \rangle \hbar\omega$ i per tant també pel mode $\omega = 10^{10}$ rad/s.

b) augmenta o disminueix la conductivitat tèrmica?

Sabem que $k_{\text{tèrmica}} = \frac{1}{3} c_v \cdot v \cdot \ell$

$c_v(T)$, però $\lesssim T/\theta_D$

$\omega_D \rightarrow \theta_D$; $\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} =$

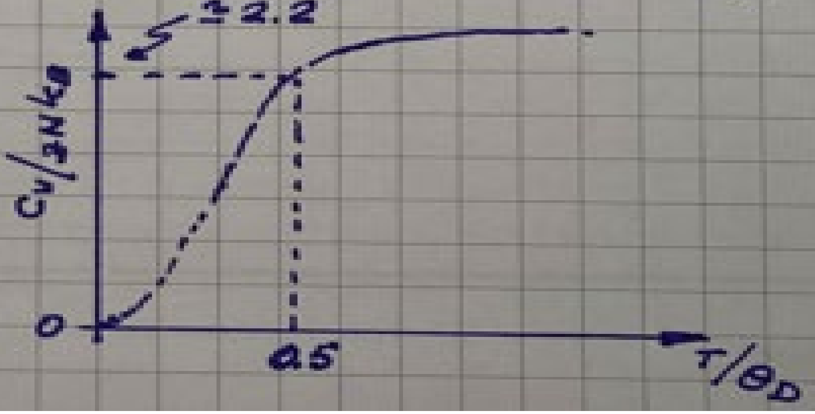
$k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$; $\hbar = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} J \cdot s}{2\pi} = 1.06 \cdot 10^{-34} J \cdot s$

per tant per aquest material $\rightarrow \theta_D = \frac{1.06 \cdot 10^{-34} \cdot 7.8 \cdot 10^{13} \, rad/s \cdot J \cdot s}{1.38 \cdot 10^{-23} \, J/K} =$

$\theta_D = \frac{1.06 \cdot 7.8}{1,38} 10^2 \; K = 600 \, K$

$\Downarrow$

$\frac{T_1}{\theta_D} = \frac{30}{600} = \frac{1}{20} = 0,05 \longrightarrow \frac{T_2}{\theta_D} = \frac{300}{600} = \frac{1}{2} = 0.5$



Exercici 8. Pronunciar-se sobre la veracitat o falsedat de les afirmacions següents relatives a un sòlid cristal·lí a temperatura T

a) Els fonons de baixa freqüència són els més abundants, ja que l'energia associada *hw/2π* és menor.

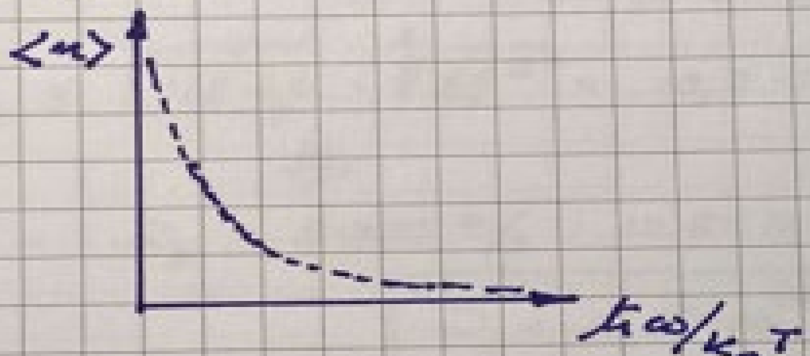
b) Hi ha tants tipus de fonons possibles com àtoms.

c) Els fonons es mouen a la velocitat del so al sòlid.

Resolució

a) Es fals. En el model de Debye la densitat d'estats es constant: $g(\omega) = \frac{L}{2\pi v}$ (apartat d) de l'exercici 5 d'aquest full)

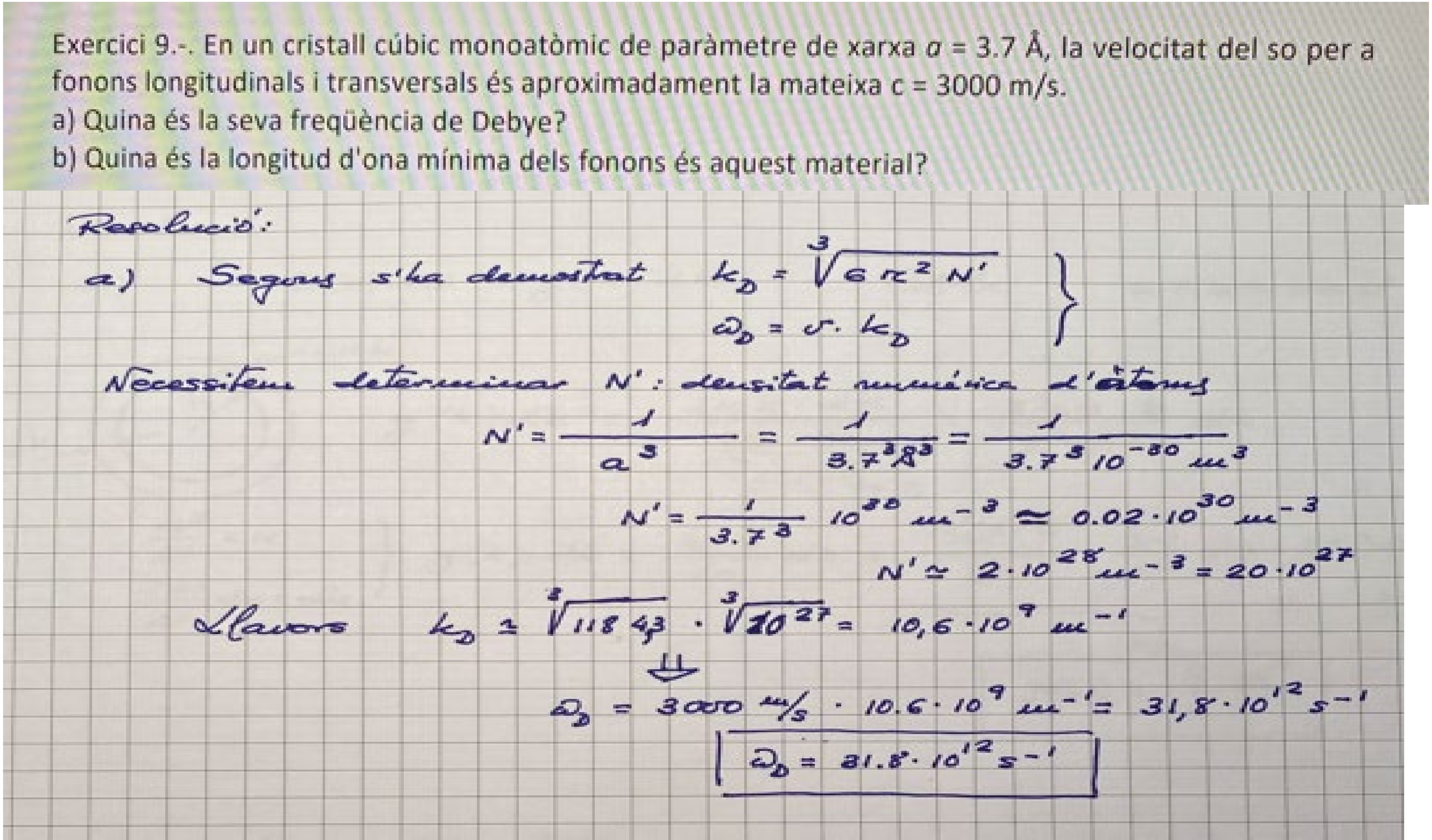
Però es que a més a més el seu nivell d'ocupació per una T donada (distribució de Bose-Einstein) disminueix amb la seva energia:



b) Es fals. Solament seria veritat per una xarxa lineal monoatòmica

Per xarxes 2D o 3D en la mida que existeixen varies corves de dispersió tindrem més tipus de fonons que àtoms.

c) També es fals. En el model de Debye sí seria veritat, però en la mida que la xarxa mostri corves de dispersió no lineals ⇒ $d\omega/dk$ serà variable i la del so no ho és.



Exercici 9.-. En un cristall cúbic monoatòmic de paràmetre de xarxa a = 3.7 Å, la velocitat del so per a fonons longitudinals i transversals és aproximadament la mateixa c = 3000 m/s.

a) Quina és la seva freqüència de Debye?

b) Quina és la longitud d'ona mínima dels fonons és aquest material?

Resolució:

a) Segons s'ha demostrat
$$\left.\begin{aligned} k_D &= \sqrt[3]{6\pi^2 N'} \\ \omega_D &= c \cdot k_D \end{aligned}\right\}$$

Necessitem determinar N': densitat numèrica d'àtoms

$$N' = \frac{1}{a^3} = \frac{1}{3.7^3 Å^3} = \frac{1}{3.7^3\, 10^{-30}\, m^3}$$

$$N' = \frac{1}{3.7^3}\, 10^{30}\, m^{-3} \simeq 0.02 \cdot 10^{30}\, m^{-3}$$

$$N' \simeq 2 \cdot 10^{28}\, m^{-3} = 20 \cdot 10^{27}$$

Llavors $k_D \simeq \sqrt[3]{118{,}43} \cdot \sqrt[3]{10^{27}} = 10{,}6 \cdot 10^{9}\, m^{-1}$

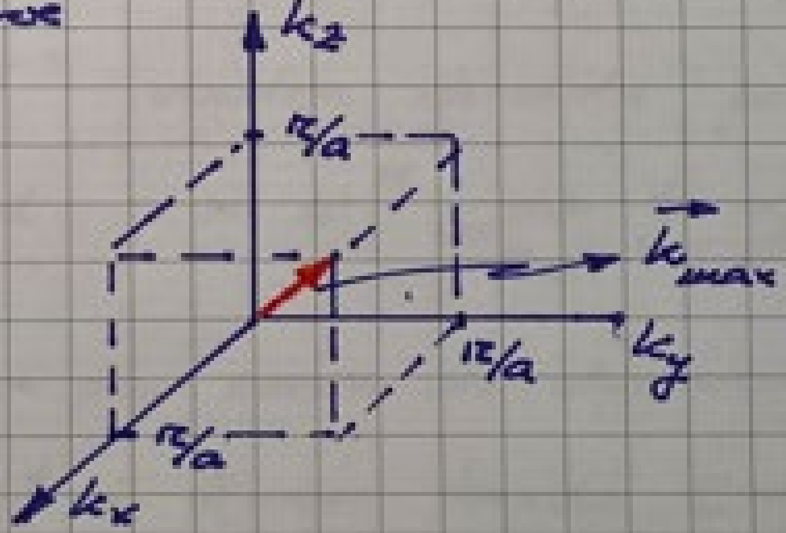
$$\Downarrow$$

$$\omega_D = 3000\, m/s \cdot 10.6 \cdot 10^{9}\, m^{-1} = 31{,}8 \cdot 10^{12}\, s^{-1}$$

$$\boxed{\omega_D = 31.8 \cdot 10^{12}\, s^{-1}}$$

b) Sabem que $k_{max} = \frac{2\pi}{\lambda_{min}}$

La k_{max} correspondrà al vector d'ones en la direcció [1 1 1] de l'espai reciproc



$$k_{max} = \sqrt{k_{x_{max}}^2 + k_{y_{max}}^2 + k_{z_{max}}^2}$$

$$k_{x_{max}} = k_{y_{max}} = k_{z_{max}} = \pi/a$$

$$\Downarrow$$

$$k_{max} = \sqrt{3} \cdot \frac{\pi}{a}$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{2\pi}{\lambda_{min}} = \sqrt{3} \cdot \frac{\pi}{a} \Rightarrow \boxed{\lambda_{min} = \frac{2a}{\sqrt{3}} = 4.27\,Å}$$

Exercici 10.- Sigui un cristall bidimensional en què els fonons longitudinals tenen una relació de dispersió $w(k) = A(k)^{1/2}$ (aquí A = cte).

a) Determineu la densitat d'estats $D(w)$.

b) Al límit T→0, la contribució dels fonons longitudinals a la calor específica és de la forma $C \propto T^n$. Quin és el valor de n?

Resolució

a) $D(\omega)d\omega = g(k)dk$. Cel·la bidimensional

$$g(k)dk = \frac{2\pi k \cdot dk}{\underbrace{\frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\pi}{b}}_{S}} = \frac{\cancel{2}\cancel{\pi} k \cdot S}{2^{\cancel{2}} \cdot \pi^{\cancel{2}}} dk$$

$$\left.\begin{array}{l} \dfrac{\omega^2}{A^2} = k \\ \dfrac{2\omega}{A^2} d\omega = dk \end{array}\right\} g(k) \cdot dk = \frac{k \cdot S}{2\pi} dk = \underbrace{\frac{\omega^2/A^2 \cdot S}{\cancel{2}\pi} \cdot \frac{\cancel{2}\omega}{A^2} d\omega = D(\omega)d\omega}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{D(\omega) = \frac{S \cdot \omega^3}{\pi A^4}}$$

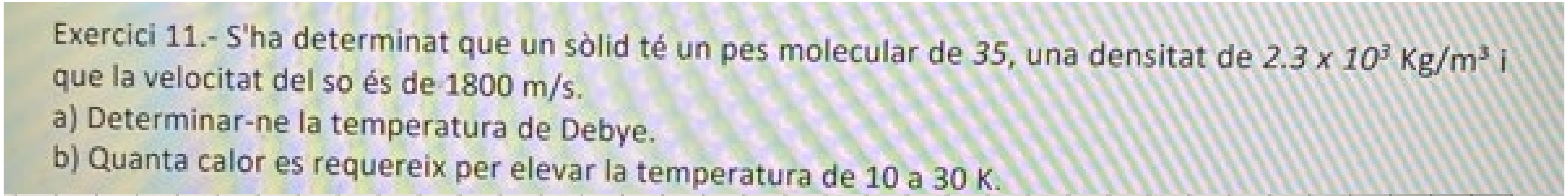
b) La capacitat calorífica

$$C = \frac{\partial}{\partial T} \sum \hbar\omega \cdot \langle n \rangle = \frac{\partial}{\partial T} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{2 polaritzacions}}}{2} \cdot \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \cdot \frac{D(\omega)\, d\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

Tal i com hem raonat en l'exercici nº 3 la dependencia $C \propto T^n$ vindrà donada per la potencia de ω a l'integrand: si $\omega^n \underset{E \propto T^{n+1}}{\Rightarrow} C \propto T^n$

En aquest cas (i degut a una corba de dispersió "especial") l'integrand de Debye $\rightarrow \omega^4$ i llavors també $C \propto T^4$

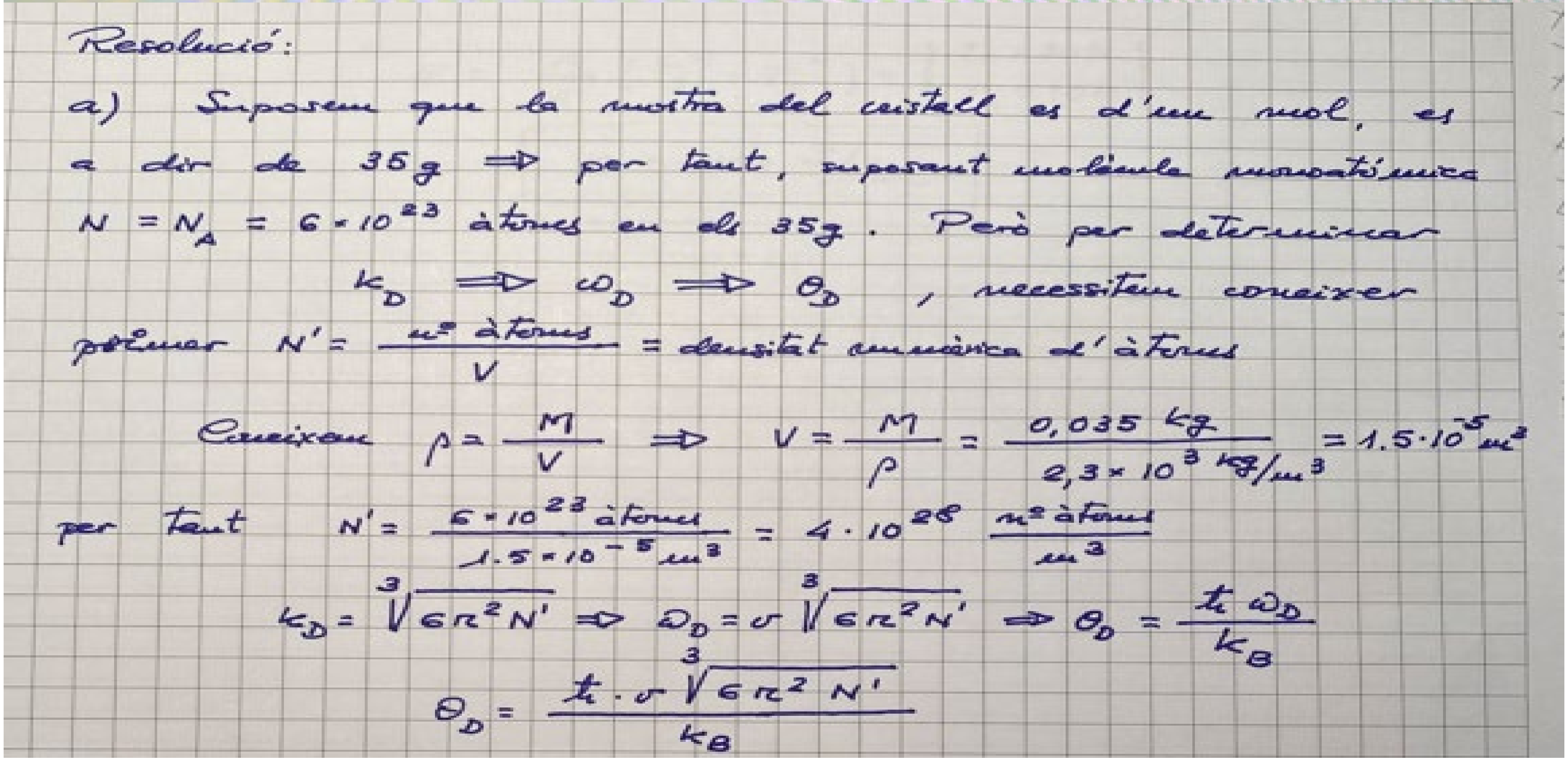
Per tant el resultat es $\boxed{n = 4}$



Exercici 11.- S'ha determinat que un sòlid té un pes molecular de 35, una densitat de 2.3×10^3 Kg/m³ i que la velocitat del so és de 1800 m/s.

a) Determinar-ne la temperatura de Debye.

b) Quanta calor es requereix per elevar la temperatura de 10 a 30 K.



Resolució:

a) Suposem que la mostra del cristall es d'un mol, es a dir de 35g ⇒ per tant, suposant molècula monoatòmica $N = N_A = 6 \times 10^{23}$ àtoms en els 35g. Però per determinar

$k_D \Rightarrow \omega_D \Rightarrow \theta_D$, necessitem conèixer

primer $N' = \frac{\text{nº àtoms}}{V}$ = densitat numèrica d'àtoms

Coneixem $\rho = \frac{M}{V} \Rightarrow V = \frac{M}{\rho} = \frac{0{,}035\ \text{kg}}{2{,}3 \times 10^3\ \text{kg/m}^3} = 1.5 \cdot 10^{-5}\ \text{m}^3$

per tant $N' = \frac{6 \times 10^{23}\ \text{àtoms}}{1.5 \times 10^{-5}\ \text{m}^3} = 4 \cdot 10^{28}\ \frac{\text{nº àtoms}}{\text{m}^3}$

$$k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 N'} \Rightarrow \omega_D = v \sqrt[3]{6\pi^2 N'} \Rightarrow \theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}$$

$$\theta_D = \frac{\hbar \cdot v \sqrt[3]{6\pi^2 N'}}{k_B}$$

$$\theta_D = \frac{1.05 \times 10^{-34}\,J \cdot s \times 1800\ m/s \left(\sqrt[3]{6\pi^2 \cdot 40\,10^{27}} \right) m^{-1}}{1.38 \times 10^{-23}\ J/K} =$$

$$\theta_D = \frac{1.05 \times 1.8}{1.38} \times 13.33\ K = 183\ K$$

$$\boxed{\theta_D = 183\,K}$$

b) Necessitem determinar primer C_{molar} (baixes temperatures)

C_{molar} (baixes temperatures)! veure teoria :

$$C_{molar}\ (\text{baixa } T) = \frac{36\, V\, k_B^4}{\pi^2\, \hbar^3\, v^3}\, T^3$$

$$C_{molar}\,(T\downarrow) = \underbrace{\frac{36 \times 1.5 \cdot 10^{-5}\, m^3 \cdot (1{,}38 \cdot 10^{-23}\ J/K)^4}{\pi^2 \cdot (1{,}05 \cdot 10^{-34}\ J \cdot s)^3 \cdot (1800\ m/s)^3}}_{A}\, T^3 \Rightarrow C_{molar} = A\,T^3$$

Allora l'energia necessaria sarà:

$$E = \int_{T_1}^{T_2} \frac{\partial E}{\partial t}\Big)_{\text{molar}} \cdot dT = \int_{T_1}^{T_2} C \cdot dT = \int_{T_1}^{T_2} A T^3 dT$$

$$E = \frac{A}{4}\left(T_2^4 - T_1^4\right) = \left\{ \begin{matrix} T_2 = 30K \\ T_1 = 10K \end{matrix} \right\}$$

$$\boxed{E = 58.9 \ J/mol}$$