

# Fizyka Fazy Skondensowanej

## Spis treści

# 1 Zestaw:

## 1.1 Pierwszy

### 1.1.1

1. Sieć krystaliczna, węzły sieci, proste sieciowe, płaszczyzny sieciowe, wskaźniki Millera (hkl), Komórka elementarna i typy układów krystalograficznych
2. Operacje symetrii, grupy punktowe.
3. Sieć prosta a sieć odwrotna. Objętości komórki elementarnej w sieci odwrotnej. Odległości międzypłaszczyznowe. Strefy Brillouina.

### Rozwiązanie:

#### 1.1.2

Obliczyć objętość komórki elementarnej dla układu regularnego, romboedrycznego, heksagonalnego, jednoskośnego.

### Rozwiązanie:

#### 1.1.3

Wykaż, że:

1. dla prostej sieci regularnej o stałej sieciowej  $a$ , odległość międzypłaszczyznowa

$$d_{hkl}^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}$$

2. obliczyć  $\frac{1}{d_{hkl}^2}$  dla układu heksagonalnego oraz rombowego

### Rozwiązanie:

#### 1.1.4

Struktura diamentu zawiera dwa identyczne atomy w położeniach 000 i  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$  związane z każdym węzłem sieci powierzchniowo centrowanej (*fcc*). Obliczyć czynnik strukturalny dla tej struktury. Pokaż, że dozwolone odbicia spełniają warunek  $h + k + l = 4n$ , gdzie wszystkie wskaźniki są parzyste, a  $n$  jest dowolną liczbą całkowitą, albo wszystkie składniki są nieparzyste.

### Rozwiązanie:

## 1.2 Drugi

### 1.2.1

Energia oddziaływania między dwoma atomami w cząsteczce opisywana jest wzorem:

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$$

Pokazać, że  $m > n$ .

**Rozwiązanie:**

### 1.2.2

Rozważ liniowy układ  $2N$  jonów o ładunku równym na przemian  $\pm q$ . Załóż, że energia potencjalna odpychania między najbliższymi sąsiadami ma postać  $\frac{A}{R^n}$ .

1. Pokaż, że dla odległości między jonami odpowiadającej stanowi równowagi

$$U(R_0) = -\frac{2Nq^2 \ln(2)}{R_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

2. Załóżmy, że kryształ został ściśnięty tak, że  $R_0 \rightarrow R_0(1 - \delta)$ . Pokaż, że w wyrażeniu na pracę związaną ze ściśnięciem kryształu największy wkład opisuje człon  $\frac{C\delta^2}{2}$  gdzie:

$$C = \frac{(n-1)q^2 \ln(2)}{R_0}$$

**Rozwiązanie:**

1. Energia potencjalna oddziaływania między dwoma atomami dana jest przez:

$$U(R) = N \left( \frac{A}{R^n} - \frac{\alpha q^2}{R} \right) \quad (1)$$

gdzie  $\alpha$  jest stałą Madelunga wynoszącą dla przypadku liniowego  $\alpha = 2 \ln 2$ .  
Dla stanu równowagi spełniony musi być warunek:

$$\frac{\partial U}{\partial R} = 0 \quad (2)$$

stąd:

$$\frac{\partial U}{\partial R} = N \left( -\frac{nA}{R_0^{n+1}} + \frac{\alpha q^2}{R_0^2} \right) = 0 \quad (3)$$

$$\frac{nA}{R_0^{n+1}} = \frac{\alpha q^2}{R_0^2} \rightarrow \frac{A}{R_0^n} = \frac{\alpha q^2}{nR_0} \quad (4)$$

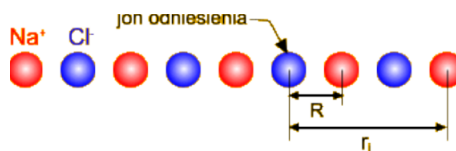
Wstawiając wyrażenie (4) do (3) oraz  $\alpha = 2 \ln(2)$  otrzymuje się:

$$U(R_0) = N \left( \frac{\alpha q^2}{R_0^n} - \frac{\alpha q^2}{R_0} \right) = \frac{2Nq^2 \ln(2)}{R_0} \left( \frac{1}{n} - 1 \right) \quad (5)$$

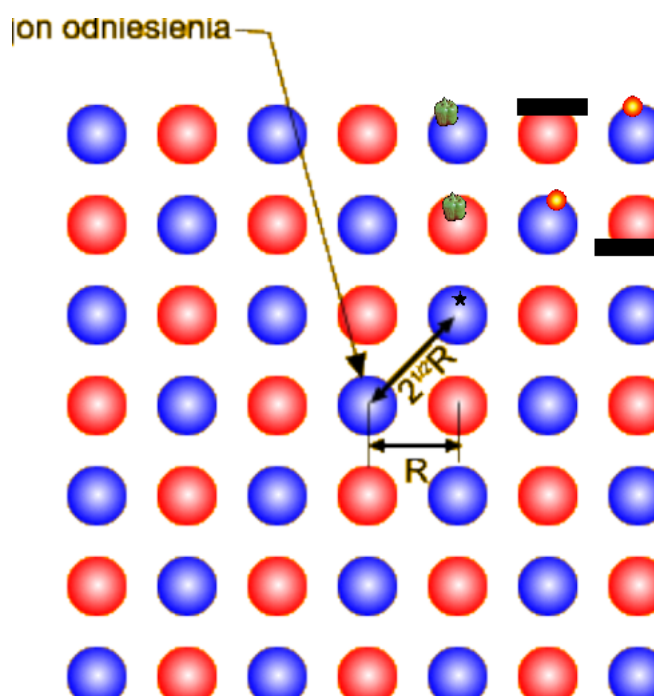
## 1.2.3

Obliczyć stałą Madelunga dla kryształu  $NaCl$ :

1. przypadek jednowymiarowy (nie kryształowa  $NaCl$ )



2. przypadek dwuwymiarowy (siatka płaska  $NaCl$ )



**Rozwiązanie:**

**przypadek 1** Stała Madelunga jest używana do wyznaczania potencjału elektrostatycznego pojedynczych jonów w kryształach, przez zbliżanie się jonów przez ładunki punktowe.

wzór ogólny:

$$\alpha = \sum \frac{\pm}{p_i} \quad (6)$$

W naszym przypadku:

$$\frac{\alpha}{R} = 2\left(\frac{1}{R} - \frac{2}{R} + \frac{1}{3R}\right) - \frac{1}{4R} + \frac{1}{5R} \quad (7)$$

gdzie jako jon odniesienia bierzemy jon zaznaczony na rysunku, następnie odejmujemy lub dodajemy w zależności od znaku jonu w mianowniku są wielokrotności odległości od jonu odniesienia.

używając rozwinięcia w szereg Maclurina możemy udowodnić, że szereg:

$$x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} \dots \quad (8)$$

którego wzór ogólny ma postać:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} x^n \quad (9)$$

jest zbieżny do funkcji  $\ln(1+x)$ , gdzie  $x=1$ .

Rozwinięcie:

$$f(x) = \ln(x+1) \Rightarrow f(0) = \ln(1) = 0$$

$$f'(x) = -\frac{1}{(x+1)^2} \Rightarrow f'(0) = -1$$

$$f''(x) = \frac{2}{(x+1)^3} \Rightarrow f''(0) = 2$$

$$f'''(x) = -\frac{6}{(x+1)^5} \Rightarrow f'''(0) = -6$$

$$= 0 + 1 * \frac{x}{1} - 1 * \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} - \frac{x^4}{4}$$

ogólny wynik:  $\alpha = 2\ln 2$

### przypadek drugi

Odległości obliczymy w następujący sposób:

-jako jon odniesienia bierzemy jon w środku.

-dzielimy przestrzeń na cztery kwadraty i wszystko liczymy dla jednego kwadratu potem mnożymy razy cztery.

-pierwsze trzy wartości w nawiasie są to odległości od jonu odniesienia w prawo (liczymy je tak jak poprzednio, w liczniku znak, a w mianowniku wielokrotność odległości od jonu odniesienia)

-następnie liczymy odległość jonu oznaczone gwiazdką, mnożymy przez odpowiedni znak i dodajemy do sumy (liczymy ze wzoru Pitagorasa)

następnie liczymy odległości dwóch jonów oznaczonych paprykami i mnożymy razy dwa ponieważ na prawo od jonu z gwiazdką też mamy papryki.

-potem liczymy jony oznaczone słońcami

-a na końcu jon oznaczony prostokątem i mnożymy razy dwa bo po prawej też jest prostokąt.

I wychodzi nam:

$$\frac{\alpha}{R} = \frac{4}{R} \left( 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{5}} - \frac{2}{\sqrt{10}} - \frac{1}{2\sqrt{2}} - \frac{1}{3\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{13}} \right) \quad (10)$$

opisane wyżej odległości, które znajdują się w licznikach liczymy ze wzoru pitagorasa, np. dla jonu z gwiazdką:

$$R^2 + R^2 = R^2 \quad (11)$$

$$2R^2 = R^2 \quad (12)$$

$$R = \sqrt{2}R \quad (13)$$

#### 1.2.4

Obliczyć jakie ciśnienie należy przyłożyć do kryształu jonowego, aby odległość między jonami zmniejszyła się o 1 procent.

**Rozwiązanie:**

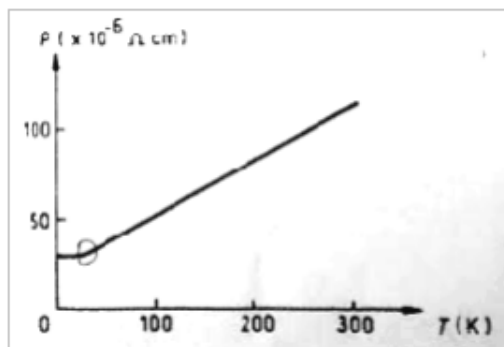
## 1.3 Trzeci

### 1.3.1

Poniższy rysunek przedstawia temperaturową zależność oporu elektrycznego. Określ, czy jest to zależność dla metali czy izolatorów. Opisz proces fizyczny, który opisuje tę zależność w zakresie temperatur: a) blisko 0 K, b) około 25 K, c) około 300 K. Oszacuj średnią drogę swobodną i czas w  $T = 0\text{K}$  i  $T = 300\text{K}$ . Przydatne stałe:  $n = 10^{23}\text{cm}^{-3}$ ,  $m = 10^{-27}\text{kg}$ ,  $v_f = 108\frac{\text{cm}}{\text{s}}$ ,  $e = 4.8 \cdot 10^{10}\text{esu}$  ( $e = 1,6^{19}\text{C}$ ),  $1(\Omega\text{cm})^2 = 9 \cdot 10^{11}\text{esu}$ .

**Rozwiązanie:**

### 1.3.2



**Rozwiązanie:**

### 1.3.3

Rozpatrzyć falę podłużną  $u_s = u(0) \cos(\omega t - sKa)$ , która rozchodzi się w jednoatomowej sieci liniowej składającej się z atomów o masach  $M$  oddległych od siebie o  $a$ ; stała siłowa oddziaływania między najbliższymi sąsiadami wynosi  $C$ .

- Wykazać, że całkowita energia fali wynosi:

$$E = \frac{1}{2}M \sum_s \left( \frac{du_s}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}C \sum_s (u_s - u_{s+1})^2$$

- Podstawiając wyrażenie na  $u_s$  do powyższego wzoru wykazać, że uśredniona w czasie energia całkowita przypadająca na jeden atom wynosi:

$$\frac{1}{4}M\omega^2 u^2(0) + \frac{1}{2}C(1 - \cos(Ka))u^2(0) = \frac{1}{2}M\omega^2 u^2(0)$$

**Rozwiązanie:**

**podpunkt a**

fala podłużna:



$$U_s = U \cos(\omega t - ska) \quad (14)$$

a-odległość pomiędzy atomami,  $\omega$ -częstotliwość, s-pozycja atomu,  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

prędkość:

$$v = \frac{dU_s}{dt} = \frac{d}{dt}(U \cos(\omega t - ska)) \quad (15)$$

energia kinetyczna:

$$E_k = \frac{1}{2} M v^2 = \frac{1}{2} M \left( \frac{dU_s}{dt} \right)^2 \quad (16)$$

całkowita energia kinetyczna fali- suma energii poszczególnych atomów:

$$E_k = \sum \frac{1}{2} M \left( \frac{dU_s}{dt} \right)^2 \quad (17)$$

energia potencjalna:

$$E_p = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} C (U_s - U_{s+1})^2 \quad (18)$$

c-stała siłowa

całkowita energia potencjalna:

$$E_p = \sum \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} C \sum (U_s - U_{s+1})^2 \quad (19)$$

całkowita energia:

$$E = \frac{1}{2} \sum M \left( \frac{dU_s}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} C \sum (U_s - U_{s+1})^2 \quad (20)$$

**podpunkt b**

$$U_s = U \cos(\omega t - ska)$$

$$U_{s+1} = U \cos(\omega t - (s+1)ka)$$

korzystamy z zależności  $\cos(\alpha - \beta) = \cos\alpha\cos\beta + \sin\alpha\sin\beta$

$$U_{s+1} = U[\cos(\omega t - ska - ka)] = U[\cos(\omega t - ska)\cos(ka) + \sin(\omega t - ska)\sin(ka)]$$

$$U_s - U_{s+1} = U\cos(\omega t - ska) - U[\cos(\omega t - ska - ka)] = U[\cos(\omega t - ska)\cos(ka) + \sin(\omega t - ska)\sin(ka)]$$

$$= U\cos(\omega t - ska)[1 - \cos(ka)] + \sin(\omega t - ska)\sin(ka)$$

$$E = \frac{1}{2}M\left(\frac{d}{dt}U\cos(\omega t - ska)\right)^2 + \frac{1}{2}C[U\cos(\omega t - ska)[1 - \cos(ka)] + \sin(\omega t - ska)\sin(ka)]^2$$

$$= \frac{1}{2}M[-U\omega\sin(\omega t - ska)]^2 + \frac{1}{2}C[U\cos(\omega t - ska)[1 - \cos(ka)] + \sin(\omega t - ska)\sin(ka)]^2$$

podstawiamy:

$$\omega t - ska \rightarrow A$$

$$ka \rightarrow B$$

$$E = \frac{1}{2}M[-u\omega\sin A]^2 + \frac{1}{2}CU^2[\cos A(1 - \cos B) + \sin A\sin B]^2$$

$$= \frac{1}{2}M\omega^2U^2\sin^2 A + \frac{1}{2}CU^2[\cos^2 A(1 - \cos B)^2 + \sin^2 A\sin^2 B + 2\cos A(1 - \cos B)\sin A\sin B]$$

$$= \frac{1}{2}M\omega^2U^2\sin^2 A + \frac{1}{2}CU^2[\cos^2 A(1 - 2\cos B + \cos^2 B) + \sin^2 AB + 2\cos A(1 - \cos B)\sin A\sin B]$$

$$= \frac{1}{2}M\omega^2U^2\sin^2 A + \frac{1}{2}CU^2[\cos^2 A - 2\cos^2 A\cos B + \cos^2 A\cos^2 B + \sin^2 A\sin^2 B + 2\cos A(1 - \cos B)\sin A\sin B]$$

$$\langle \cos^2 \rangle = \frac{1}{2}$$

$$\langle \sin^2 \rangle = \frac{1}{2}$$

$$\langle \sin\cos \rangle = 0$$

$$E = \frac{1}{2}M\omega^2U^2\frac{1}{2} + \frac{1}{2}CU^2\left[\frac{1}{2} - \cos B + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + 2 * 0 * \sin B - 2 * 0 * 0\right]$$

$$= \frac{1}{4}M\omega^2U^2 + \frac{1}{2}CU^2\left[\frac{1}{2} - \cos B + \frac{1}{2}\right] = \frac{1}{4}M\omega^2U^2 + \frac{1}{2}[1 - \cos B]$$

B → ka

$$E = \frac{1}{4}M\omega^2U^2 + \frac{1}{2}CU^2(1 - \cos(ka))$$

relacja dyspersyjna:

$$\omega^2 = \frac{2C}{M}(1 - \cos(ka))$$

$$\frac{M\omega^2}{2C} = (1 - \cos(ka))$$

$$E = \frac{1}{4}M\omega^2 U^2 + \frac{1}{4}U^2 \frac{M\omega^2}{2}$$

$$E = \frac{1}{2}M\omega^2 U^2$$

### 1.3.4

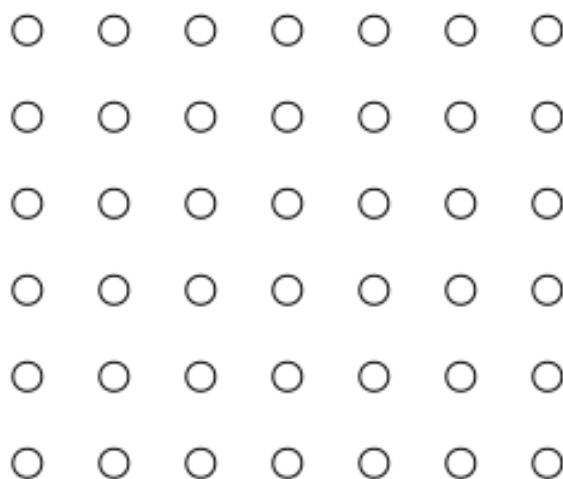
Wyznaczyć podłużny fonon akustyczny oraz widmo optyczne dla sieci liniowej o stałej  $a$  zawierającej w komórce dwa jednakowe atomy o masach  $M$ , których odległość w położeniu równowagi wynosi  $\delta < \frac{1}{a}$ .

**Rozwiązanie:**

**Rozwiązanie:**

### 1.3.5

Dana jest sieć:



- Wykazać, że

$$M \frac{d^2 u_{lm}}{dt^2} = C \left( (u_{l+1,m} - u_{l-1,m} - 2u_{lm}) + (u_{l,m+1} - u_{l,m-1} - 2u_{lm}) \right)$$

- Przyjąć:  $u_{lm} = u(0) \exp(i(lK_x a + mK_y a - \omega t))$  i wykazać, że:

$$\omega^2 M = 2C(2 - \cos(K_x a) - \cos(K_y a))$$

- Wykazać, że przedział wartości wektora  $K$ , dla których istnieją niezależne rozwiązania można przyjąć kwadrat o boku  $\frac{2\pi}{a}$
- Dla  $Ka \ll 1$  wykazać, że:

$$\omega = \left( \frac{Ca^2}{M} \right)^{\frac{1}{2}} (K_x^2 + K_y^2) = \left( \frac{Ca^2}{M} \right) K$$

**Rozwiązanie:**

## 1.4 Czwarty

### 1.4.1

Wyprowadzić wzory na funkcję gęstości stanów dla łańcucha jednoatomowego zakładając, że  $\omega = v \cdot k$ . Określić częstotliwość Debye'a.

**Rozwiązanie:**

**funkcja gęstości stanów**  $D(\omega)$  jest to liczba modów różnych drgań przypadająca na jednostkowy zakres częstotliwości.

przemieszczenia atomu w drganiach podłużnych i poprzecznych określa zależność:

$$U_s \sin(sKa)$$

dobieramy tak wartości  $K$  żeby atomy na końcu i początku łańcucha były unieruchomione.

wartości wektora falowego, które są dozwolone:

$$K = +/\frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L}, \dots$$

Gęstość stanów opisuje wzór:

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} \quad (21)$$

gdzie  $N$  to całkowita liczba modów drgań o wartości wektora falowego mniejszego od  $k$ .

$$K = \frac{N\pi}{L}$$

$$N = \frac{KL}{\pi}$$

$$D(\omega) = \frac{d}{d\omega} \frac{KL}{\pi} = \frac{L}{\pi} \frac{dK}{d\omega} = \frac{L}{\pi v} = \frac{LK}{\pi \omega}$$

gdzie  $\frac{dK}{d\omega}$  - prędkość grupowa,  $k = \frac{\omega}{v}$

częstotliwość Debaya jest to teoretyczna najwyższa możliwa częstotliwość drgań atomów sieci krystalicznej.

$$N = \frac{KL}{\pi} = \frac{\omega L}{v\pi}$$

$$\omega_D = \frac{Nv\pi}{L}$$

### 1.4.2

Wyprowadzić wzory na funkcję gęstości stanów dla sieci kwadratowej zakładając, że  $\omega = v \cdot k$ . Określić częstotliwość Debye'a.

#### Rozwiązanie:

Jedna dozwolona wartość wektora  $K$  przypada na element płaszczyzny o powierzchni:

$$P = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$$

zatem wewnątrz koła (rys 6. str 141 Kittel) o powierzchni:

$$P = \pi K^2$$

liczba drgań na jednostkowy przedział  $k$  wynosi:

$$N = \pi K^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \quad (22)$$

$$D(\omega) = \frac{d}{d\omega} \pi K^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 = \frac{d}{d\omega} \frac{k^2 L^2}{4\pi} = \frac{L^2 K}{2\pi} \frac{dK}{d\omega} = \frac{L^2}{2\pi} k \frac{1}{v} = \frac{L^2 \omega}{2\pi v^2} \quad (23)$$

częstotliwość Debaya:

$$N = \frac{k^2 L^2}{4\pi} = \frac{\omega^2 L^2}{4\pi v^2} \quad (24)$$

$$\omega_D = \left(\frac{4\pi N v^2}{L^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (25)$$

### 1.4.3

Korzystając z wyników zadań ?? i ?? wyprowadzić wzory na molowe ciepło właściwe.

#### Rozwiązanie:

### 1.4.4

Znaleźć zależność poziomu Fermiego w temperaturze zera bezwzględnej od gęstości elektronowej  $n$ :

$$E_F(T = 0) = \frac{\hbar^2}{2m} (3n\pi^2)^{\frac{2}{3}}$$

oraz zależność średniej energii na elektron od energii Fermiego.

$$\overline{E}(T = 0) = \frac{3}{5} E_F$$

### Rozwiązanie:

Energia Fermiego dana jest wzorem:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \quad (26)$$

Na każdy element objętości  $v_1 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$  przypada jeden wektor falowy  $k$ .

Stąd dla objętości  $v_2 = \frac{4}{3}\pi k_F^3$  całkowita liczba stanów wynosi (2 dozwolone stany spinowej liczby kwantowej):

$$N = 2 \frac{v_2}{v_1} = 2 \frac{4\pi k_F^3 L^3}{3 \cdot 8\pi^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \quad (27)$$

czyli

$$k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} = (3\pi n)^{\frac{1}{3}} \quad (28)$$

gdzie gęstość stanów  $n = \frac{N}{V}$ .

Podstawiając wyrażenie (28) do równania (26) otrzymuje się:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (2n\pi)^{\frac{2}{3}} \quad (29)$$

---

W przypadku 1D energia elektronu w stanie  $n$  wynosi:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (30)$$

Dla  $N$  poziomów średnią energię można wyrazić przez:

$$\overline{E} = 2 \frac{\sum_{n=1}^N E_n}{2N} \quad (31)$$

gdzie energia ostatniego elektronu jest energią Fermiego:

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} N^2 \quad (32)$$

Stosując przybliżenie:

$$\sum_{n=1}^N n^2 = \frac{1}{6} (2N^2 + 3N + 1) = \frac{N^3}{3} + \frac{N^2}{2} + \frac{N}{6} \sim \frac{N^3}{3} \quad (33)$$

oraz (33), średnia energia elektronu wyraża się przez:

$$\overline{E} = \frac{2}{2N} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \sum_{n=1}^N n^2 = \frac{2}{2N} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \frac{N^3}{3} = \frac{1}{3} E_F \quad (34)$$

**1.4.5**

Wyprowadzić wzór na funkcję gęstości stanów elektronów swobodnych w przypadku jednowymiarowym.

**Rozwiązanie:**

Energia fermiego- energia najwyższego obsadzonego układu  $N$  elektronów:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n_f \pi}{L} \right)^2 \quad (35)$$

$n_f$ -najwyższy obsadzony poziom energii

przyjmując, że  $N$  jest liczbą parzystą:  $2n_f = N$  otrzymujemy:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{N\pi}{2L} \right)^2 \quad (36)$$

$$N = \frac{2L}{\hbar\pi} \sqrt{2mE_f} \quad (37)$$

$D\omega$ -gęstość stanów-liczba orbitali przypadająca na jednostkę energii.

$$\frac{dN}{d\omega} = L \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{E_f}} \quad (38)$$

**1.4.6**

Wyprowadzić wzór na funkcję gęstości stanów  $g(E)$  gazu elektronowego dla sieci kwadratowej.

**Rozwiązanie:**

Pole koła:  $\pi k_f^2$

element powierzchni:  $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$

$$N = \frac{L^2 k_f^2}{4\pi} \quad (39)$$

$$f_f = \frac{4\pi N}{L^2} \quad (40)$$

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi N}{L^2} \quad (41)$$

$$N = \frac{mL^2 E_f}{2\pi\hbar^2} \quad (42)$$

$$\frac{dN}{d\omega} = \frac{mL^2}{2\pi\hbar^2} \quad (43)$$

#### 1.4.7

Korzystając z wyników zadania ?? wyprowadzić wzór na molowe ciepło właściwe gazu Fermiego w przypadku jednowymiarowym.

**Rozwiązanie:**



**Spis rysunków**

**Kod źródłowy**