# Fizyka Fazy Skondensowanej

# Spis treści

1	Zestaw:			
	1.1	Pierwszy	3	
		1.1.1	3	
		1.1.2	3	
		1.1.3	3	
		1.1.4	3	
	1.2	Drugi	4	
		1.2.1	4	
		1.2.2	4	
		1.2.3	5	
		1.2.4	8	
	1.3	Trzeci	9	
		1.3.1	9	
		1.3.2	9	
		1.3.3	9	
		1.3.4	2	
		1.3.5	2	
	1.4	Czwarty	3	
		1.4.1	3	
		1.4.2	4	
		1.4.3	4	
		1.4.4	4	
		1.4.5	6	
		1.4.6	6	
		1.4.7	6	

# 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 dowolna 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:

pierwsza pochodna:

$$\frac{\partial U}{\partial r} = \frac{n\alpha}{r^{n+1}} - \frac{m\beta}{r^{m+1}} = 0 \to \frac{n\alpha}{r^{n+1}} = \frac{m\beta}{r^{m+1}} \tag{1}$$

$$\frac{r^{m+1}}{r^{n+1}} = r^{m-n} = \frac{m\beta}{n\alpha} \tag{2}$$

druga pochodna:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} = -\frac{n(n+1)\alpha}{r^{n+2}} + \frac{m(m+1)\beta}{r^{m+2}} > 0$$

$$\frac{n(n+1)\alpha}{r^{n+2}} < \frac{m(m+1)\beta}{r^{m+2}}$$
(3)

$$n(n+1)\alpha\left(\frac{r^{m+2}}{r^{n+2}}\right) = n(n+1)\alpha r^{m-n} < m(m+1)\beta$$

z(2):

$$n(n+1)\alpha \frac{m\beta}{n\alpha} = (n+1)m\beta = nm\beta + m\beta < m^2\beta + m\beta$$
$$nm < m^2 \to n < m$$

#### 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  $R_0 \to R_0(1-\delta)$ . 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:

$$U(R) = N\left(\frac{A}{R^n} - \frac{\alpha q^2}{R}\right) \tag{4}$$

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

$$\frac{\partial U}{\partial R} = 0 \tag{5}$$

stąd:

$$\frac{\partial U}{\partial R} = N \left( -\frac{nA}{R_0^{n+1}} + \frac{\alpha q^2}{R_0^2} \right) = 0 \tag{6}$$

$$\frac{nA}{R_0^{n+1}} = \frac{\alpha q^2}{R_0^2} \to \frac{A}{R_0^n} = \frac{\alpha q^2}{nR_0}$$
 (7)

Wstawiając wyrażenie (7) do (4) oraz  $\alpha = 2 \ln(2)$  otrzymuje się:

$$U(R_0) = N\left(\frac{\alpha q^2}{R_0^n} - \frac{\alpha q^2}{R_0}\right) = \frac{2Nq^2 \ln(2)}{R_0} \left(\frac{1}{n} - 1\right)$$
(8)

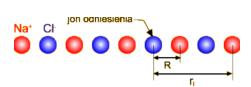
2. Rozwijając w szereg wokół  $R_0$  ( $\frac{\partial U}{\partial R} = 0$ ):

$$U(R_0 - \delta R_0) = R_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial R^2} R_0 (\delta R_0)^2$$
 (9)

#### 1.2.3

Obliczyć stałą Madelunga dla kryształu NaCl:

1. przypadek jednowymiarowy (nić krystaliczna NaCl)

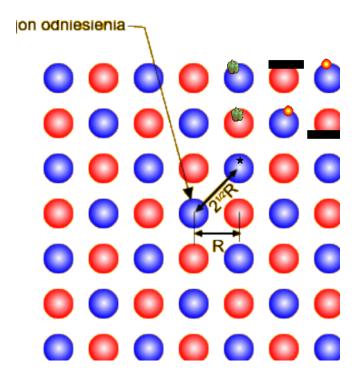


2. przypadek dwuwymiarowy (siatka płaska NaCl)

#### Rozwiązanie:

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

wzór ogólny:



$$\alpha = \sum \frac{\pm}{p_i} \tag{10}$$

W naszym przypadku:

$$\frac{\alpha}{R} = 2(\frac{1}{R} - \frac{2}{R} + \frac{1}{3R}) - \frac{1}{4R} + \frac{1}{5R}$$
 (11)

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

używając rozwinięcia w szereg Maclurina możemy udowodnić, że szereg:

$$x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} \dots ag{12}$$

którego wzór ogólny ma postać:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} x^n \tag{13}$$

jest zbierzny do funkcji ln(1+x), gdzie x=1.

Rozwinięcie:

$$f(x) = ln(x+1) => f(0) = ln(1) = 0$$

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

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

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

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

ogólny wynik:  $\alpha = 2ln2$ 

## przypadek drugi

Odległości obliczmy w natępujący sposób:

- -jako jon odniesienia bierzemy jon w środku.
- -dzielimy przestrzeń na cztery kwadraty i wszystko liczmy dla jednego kwadratu potem mnożymy razy cztery.
- -pierwsze trzy wartości w nawiasie są to odległości od jonu odniesienia w prawo (liczmy je tak jak poprzednio, w liczniku znak, a wmianowniku wielokrotność odległości od jonu odniesienia)
- -następnie liczmy odległość jonu oznaczone gwiazdką, mnożymy przez odpowiedni znak i dodajemy do sumy (liczmy ze wzoru Pitagorasa)

następnie liczmy 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:

$$\frac{\alpha}{R} = \frac{4}{R} \left( 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) = \frac{2}{\sqrt{5}} - \frac{2}{\sqrt{10}} - \frac{1}{2\sqrt{2}} - \frac{1}{3\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{13}}$$
(14)

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

$$R^2 + R^2 = R^2 (15)$$

$$2R^2 = R^2 \tag{16}$$

$$R = \sqrt{2}R\tag{17}$$

# 1.2.4

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

# Rozwiązanie:

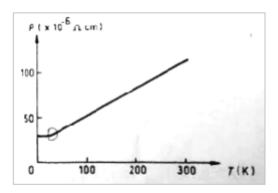
# 1.3 Trzeci

#### 1.3.1

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

## 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 odległych 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 wykaż, 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:

$$U_s = U\cos(\omega - ska) \tag{18}$$

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

prędkość:

$$v = \frac{dU_s}{dt} = \frac{d}{dt}(U\cos(\omega t - ska)) \tag{19}$$

energia kinetyczna:

$$E_k = \frac{1}{2}Mv^2 = \frac{1}{2}M(\frac{dU_s}{dt})^2$$
 (20)

całkowita energia kinetyczna fali- suma energi poszczególnych atomów:

$$E_k = \sum_{s} \frac{1}{2} M \left(\frac{dU_s}{dt}\right)^2 \tag{21}$$

energia potencjalna:

$$E_p = \frac{1}{2}kx^2 - > \frac{1}{2}C(U_s - U_{s+1})^2$$
(22)

c-stała siłowa

całkowita energia potencjalna:

$$E_p = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{2}kx^2 - \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{2}C(U_s - U_{s+1})^2$$
 (23)

całkowita energia:

$$E = \frac{1}{2} \sum M(\frac{dU_s}{dt})^2 + \frac{1}{2}C \sum (U_s - U_{s+1})^2$$
 (24)

# podpunkt b

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

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

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

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

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

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

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

podstawiamy:

$$\omega t - ska - > A$$
$$ka - > B$$

$$E = \frac{1}{2}M[-u\omega sinA]^2 + \frac{1}{2}CU^2[cosA(1-cosB) + sinAsinB]^2$$

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

$$= \tfrac{1}{2} M \omega^2 U^2 sin^2 A + \tfrac{1}{2} C U^2 [cos^2 A (1 - 2cosB + cos^2 B) + sin^2 AB + 2cosA (1 - cosB) sin A sin B + 2co$$

$$=\frac{1}{2}M\omega^2U^2sin^2A+\frac{1}{2}CU^2[cos^2A-2cos^2AcosB+cos^2Acos^B+sin^2Asin^2B+2cosA(1-cosB)sinAsinB$$

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

$$\langle sin \rangle = \frac{1}{2}$$
  
 $\langle sincos \rangle = 0$ 

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

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

B->ka

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

relacja dyspersyjna:

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

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

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

#### 1.3.4

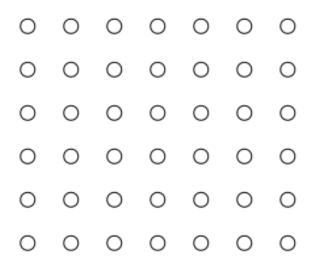
Wyznaczyć podłużny fonon akustyczny oraz widmo optyczne dla sieci liniowej o stałej a zawierającej w komórce dwa jednakowe atomy o masach M, których odległość w położeniu równowagi wynosi  $\delta < \frac{1}{a}$ .

## Rozwiązanie:

#### Rozwiązanie:

#### 1.3.5

Dana jest sieć:



• Wykazać. że

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

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

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

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

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

# 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 dragań przypadająca na jednostkowy zakres częstotliwości.

przemieszczenia atomu w drganiach podłuznych 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:

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

Gestość stanów opisuje wzór:

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} \tag{25}$$

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

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

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

$$D(\omega) = \frac{d}{d\omega} \frac{KL}{\pi} = \frac{L}{\pi} \frac{dK}{d\omega} = \frac{L}{\pi V} = \frac{L\omega}{\pi K}$$

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

częstotliwość Debaya jest to teoretyczna najwyższa możliwa częstotliwość drgań atmów wsieci 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:

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

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

$$P = \pi K^2$$

liczba drgań na jednostkowy przedział k wynosi:

$$N = \pi K^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \tag{26}$$

$$D(\omega) = \frac{d}{d\omega} \pi K^2 (\frac{L}{2\pi})^2 = \frac{d}{d\omega} \frac{k^2 L^2}{4\pi} = \frac{L^2 K}{2\pi} \frac{dK}{d\omega} = \frac{L^2}{2\pi} kv = \frac{L^2 \omega}{2\pi v^2}$$
(27)

częstotliwość Debaya:

$$N = \frac{k^2 L^2}{4\pi} = \frac{\omega^2 L^2}{4\pi v^2} \tag{28}$$

$$\omega_D = (\frac{4\pi N v^2}{L^2})^{\frac{1}{2}} \tag{29}$$

#### 1.4.3

Korzystając z wyników zadań 1.4.1 i 1.4.2 wyprowadzić wzory na molowe ciepło właściwe.

#### Rozwiązanie:

#### 1.4.4

Znaleźć zależność poziomu Fermiego w temperaturze zera bezwzględnego 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:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \tag{30}$$

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):

$$N = 2\frac{v_2}{v_1} = 2\frac{4\pi k_F^3 L^3}{3 \cdot 8\pi^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \tag{31}$$

czyli

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} = (3\pi n)^{\frac{1}{3}}$$
 (32)

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

Podstawiając wyrażenie (32) do równania (30) otrzymuje się:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (2n\pi)^{\frac{2}{3}} \tag{33}$$

W przypadku 1D energia elektronu w stanie n wynosi:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \tag{34}$$

Dla N poziomów śrenią energię można wyrazić przez:

$$\overline{E} = 2\frac{\sum^{N} E_n}{2N} \tag{35}$$

gdzie energia ostatniego elektronu jest enegią Fermiego:

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} N^2 \tag{36}$$

Stosując przybliżenie:

$$\sum_{n=1}^{N} n^2 = \frac{1}{6} (2N^2 + 3N + 1) = \frac{N^3}{3} + \frac{N^2}{2} + \frac{N}{6} \sim \frac{N^3}{3}$$
 (37)

oraz (36), średnia energia elektronu wyraża się przez:

$$\overline{E} = \frac{2}{2N} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \sum_{m=1}^{N} n^2 = \frac{2}{2N} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \frac{N^3}{3} = \frac{1}{3} E_F$$
 (38)

#### 1.4.5

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

# Rozwiązanie:

#### 1.4.6

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

# Rozwiązanie:

# 1.4.7

Korzystając z wyników zadania 1.4.4 wyprowadzić wzór na molowe ciepło właściwe gazu Fermiego w przypadku jednowymiarowym.

# Rozwiązanie:

Spis rysunków

 $\operatorname{Kod}$  źródłowy