Fizyka Fazy Skondensowanej

Spis treści

1	Zestaw:		
	1.1	Pierwszy	
		1.1.1	
		1.1.2	
		1.1.3	
		1.1.4	
	1.2	Drugi	
		1.2.1	
		1.2.2	
		1.2.3	
		1.2.4	
	1.3	Trzeci	
	1.0	1.3.1	
		1.3.2	
		1.3.3	
		1.3.4	
		1.3.5	
	1.4	Czwarty	
	1.4	1.4.1	
		1.4.0	
		1.4.0	
		1.4.4	
		1.4.5	
		1.4.6	
		1.4.7	

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:

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:

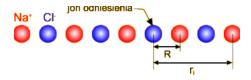
$$C = \frac{(n-1)q^2\ln(2)}{R_0}$$

Rozwiązanie:

1.2.3

Obliczyć stałą Madelunga dla kryształu NaCl:

1. przypadek jednowymiarowy (nić krystaliczna NaCl)

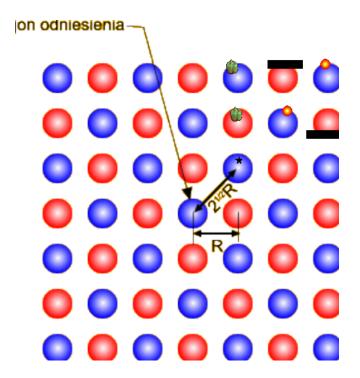


2. przypadek dwuwymiarowy (siatka płaska NaCl)

Rozwiązanie:

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

wzór ogólny:



$$\alpha = \sum \frac{\pm}{p_i} \tag{1}$$

W naszym przypadku:

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

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:

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

którego wzór ogólny ma postać:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} x^n \tag{4}$$

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:

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

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

$$R^2 + R^2 = R^2 (6)$$

$$2R^2 = R^2 \tag{7}$$

$$R = \sqrt{2}R\tag{8}$$

1.2.4

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

Rozwiązanie:

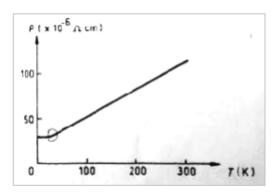
1.3 Trzeci

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:

$$U_s = U\cos(\omega - ska) \tag{9}$$

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

prędkość:

$$v = \frac{dU_s}{dt} = \frac{d}{dt}(U\cos(\omega t - ska)) \tag{10}$$

energia kinetyczna:

$$E_k = \frac{1}{2}Mv^2 = \frac{1}{2}M(\frac{dU_s}{dt})^2 \tag{11}$$

całkowita energia kinetyczna fali- suma energi poszczególnych atomów:

$$E_k = \sum_{s} \frac{1}{2} M \left(\frac{dU_s}{dt}\right)^2 \tag{12}$$

energia potencjalna:

$$E_p = \frac{1}{2}kx^2 - > \frac{1}{2}C(U_s - U_{s+1})^2$$
(13)

c-stała siłowa

całkowita energia potencjalna:

$$E_p = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{2}kx^2 - \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{2}C(U_s - U_{s+1})^2$$
(14)

całkowita energia:

$$E = \frac{1}{2} \sum M(\frac{dU_s}{dt})^2 + \frac{1}{2}C \sum (U_s - U_{s+1})^2$$
 (15)

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

 $\langle sincos \rangle = 0$

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

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

B->ka

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

relacja dyspersyjna:

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

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

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

1.3.4

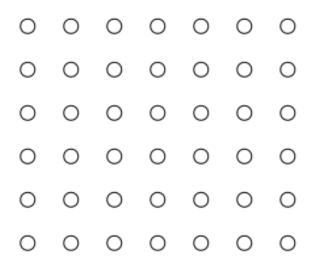
Wyznaczyć podłużny fonon akustyczny oraz widmo optyczne dla sieci liniowej o stałej a zawierającej w komórce dwa jednakowe atomy o masach M, których odległość w położeniu równowagi wynosi $\delta < \frac{1}{a}$.

Rozwiązanie:

Rozwiązanie:

1.3.5

Dana jest sieć:



• Wykazać. że

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

• 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:

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} \tag{16}$$

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:

$$N = \pi K^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \tag{17}$$

$$D(\omega) = \frac{d}{d\omega} \pi K^2 (\frac{L}{2\pi})^2 = \frac{d}{d\omega} \frac{k^2 L^2}{4\pi} = \frac{L^2 K}{2\pi} \frac{dK}{d\omega} = \frac{L^2}{2\pi} kv = \frac{L^2 \omega}{2\pi v^2}$$
(18)

częstotliwość Debaya:

$$N = \frac{k^2 L^2}{4\pi} = \frac{\omega^2 L^2}{4\pi v^2} \tag{19}$$

$$\omega_D = (\frac{4\pi N v^2}{L^2})^{\frac{1}{2}} \tag{20}$$

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:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \tag{21}$$

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):

$$N = 2\frac{v_2}{v_1} = 2\frac{4\pi k_F^3 L^3}{3 \cdot 8\pi^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3$$
 (22)

czyli

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} = (3\pi n)^{\frac{1}{3}}$$
 (23)

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

Podstawiając wyrażenie (23) do równania (21) otrzymuje się:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (2n\pi)^{\frac{2}{3}} \tag{24}$$

W przypadku 1D energia elektronu w stanie n wynosi:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \tag{25}$$

Dla N poziomów śrenią energię można wyrazić przez:

$$\overline{E} = 2\frac{\sum^{N} E_n}{2N} \tag{26}$$

gdzie energia ostatniego elektronu jest enegią Fermiego:

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} N^2 \tag{27}$$

Stosując przybliżenie:

$$\sum_{n=1}^{N} n^2 = \frac{1}{6} (2N^2 + 3N + 1) = \frac{N^3}{3} + \frac{N^2}{2} + \frac{N}{6} \sim \frac{N^3}{3}$$
 (28)

oraz (27), średnia energia elektronu wyraża się przez:

$$\overline{E} = \frac{2}{2N} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \sum_{m=1}^{N} n^2 = \frac{2}{2N} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \frac{N^3}{3} = \frac{1}{3} E_F$$
 (29)

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

 Kod źródłowy