FIZIKA ČVRSTOG STANJA I

Drugi kolokvij 15.05.2020.

1. Razmotrite lanac identičnih atoma u kojem su atomi na krajevima lanca učvršćeni i ne mogu titrati. Neka je a udaljenost susjednih atoma, m masa atoma i K konstanta elastičnosti hamonijske sile među atomima. Uzmite u obzir samo interakciju između najbližih susjeda i nađite:
(a) jednadžbe gibanja;
(b) spektar karakterističnih valnih vektora k;
(c) disperziju $\omega = \omega(k)$ ovog lanca;
(d) ukupni broj dozvoljenih titranja, odnosno, različitih frekvencija;
(e) najvišu frekvenciju i odgovarajuću valnu duljinu;
(f) faznu brzinu kao funkciju valnog vektora;
(g) omjer faznih brzina za najdužu ($k \to 0$) i najkraću valnu duljinu ($k = \pi/2$);
(h) broj karakterističnih titranja lanca u intervalu (ω, $\omega + d\omega$), odnosno, $g(\omega)d\omega$ gdje je $g(\omega)$ fononska gustoća stanja. OPREZ: udaljenost između dva valna vektora je π/L, a ne $2\pi/L$!
***Uputa*:** pod (a): ako postoji $N + 1$ atom u lancu i duljina lanca je $L = Na$, primijetite da za pomak prvog (0-tog) i posljednjeg (N-tog) atoma u lancu iz ravnotežnog položaja vrijedi

$$u_0 = u_N = 0$$

Rješenje koje zadovoljava rubni uvjet $u_0 = 0$ potražite u obliku:

$$u_n = A\sin\left(nka\right)e^{-i\omega t}$$

2. Olovo ima fcc rešetku konstante $a = 0{,}494$ nm. Youngov modul elastičnosti za olovo iznosi $E_Y = 1{,}6 \cdot 10^{10}$ $\mathrm{N{\cdot}m^{-2}}$. Ako se olovo tali kad je prosječna amplituda atomskih vibracija 12 % razmaka između atoma, izračunajte:
(a) Udaljenost susjednih atoma u fcc rešetki.
(b) Debye-vu temperaturu θ_D za olovo ako fazna brzina c širenja fonona za longitudinalne i transverzalne modove u fcc rešetki ima jednaku vrijednost

$$c^2 = \frac{E_Y}{\rho}$$

gdje je ρ masena gustoća olova. Usporedite izračunatu temperaturu θ_D s vrijednošću očitanom iz tablica.
***Uputa*:** prisjetite se da je Debye-ev valni vektor k_D povezan s gustoćom atoma $n = N/V$ formulom

$$k_D^3 = 6\pi^2 n$$

(c) Temperaturu tališta olova T_t pomoću Lindemann-ovog kriterija

$$T_t = \frac{m\omega_D^2 x_0^2}{9k_B}$$

gdje je x_0 amplituda titranja pri kojoj dolazi do taljenja. Debye-evu frekvenciju ω_D računamo pomoću eksperimentalno dobivenih vrijednosti za θ_D .
(d) Točna vrijednost temperature tališta za olovo je 600,6 K. Kolika je relativna pogreška u odnosu na rezultat pod (c)?

$\boxed{1.}$

(a) Potencijalna energija između najbližih susjednih atoma

$$U = \frac{1}{2} K \sum_n (u_n - u_{n+1})^2$$

gdje je

$$u_n = u(na)$$

$$u_{n+1} = u[(n+1)a]$$

Sila na j-ti atom

$$F_j = -\frac{\partial U}{\partial u_j} = -\frac{1}{2} K \sum_n 2(u_n - u_{n+1})\left(\frac{\partial u_n}{\partial u_j} - \frac{\partial u_{n+1}}{\partial u_j}\right)$$

$$\frac{\partial u_n}{\partial u_j} = \delta_{nj}$$

$$\frac{\partial u_{n+1}}{\partial u_j} = \delta_{n+1,j}$$

$$F_j = -K \sum_n (u_n - u_{n+1}) \delta_{nj} + K \sum_n (u_n - u_{n+1}) \delta_{n+1,j}$$

$$= -K(u_j - u_{j+1}) + K(u_{j-1} - u_j)$$

$$= -K(2u_j - u_{j-1} - u_{j+1})$$

Prema tome, za atome $2 \leq j \leq N-2$ vrijedi

$$m\ddot{u}_j = -K(2u_j - u_{j-1} - u_{j+1})$$

Za atom $j=1$ je

$$m\ddot{u}_1 = -K(2u_1 - \overset{=0}{u_0} - u_2) = -K(2u_1 - u_2)$$

Za atom $j = N-1$

$$m\ddot{u}_{N-1} = -K(2u_{N-1} - u_{N-2} - \overset{=0}{u_N}) = -K(2u_{N-1} - u_{N-2})$$

(b) Iz rubnih uvjeta za pretpostavljeno rješenje

$$u_N = A \sin(Nka)\, e^{-i\omega t} = 0$$

Odavdje je

$$\sin(Nka) = 0$$

$$Nka = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \ldots, N$$

$$\boxed{K = \frac{\pi}{Na} n}$$

Negativne vrijednosti za k ne možemo uključiti jer ćemo dobiti linearno zavisna rješenja. Također, uzmemo li $n > N$, dobit ćemo isto linearno zavisna rješenja. Prema tome, valnih vektora ima onoliko koliko i atoma, odnosno, primitivnih ćelija.

(c) Disperziju ćemo naći tako da uvrstimo rješenje u jednadžbe

$$m\ddot{u}_j = -m\omega^2 \sin(jka)\, e^{-i\omega t} \cdot A$$

$$= -K \{ 2 \cdot A \cdot \sin(jka) - A \sin[(j-1)ka] - A \sin[(j+1)ka] \} e^{-i\omega t}$$

$$\sin[(j-1)ka] + \sin[(j+1)ka] = 2 \sin(jka) \cos(ka)$$

Prema tome,

$$-m\omega^2 = -K \{ 2 + 2\cos(ka) \}$$

$$= -2K(\underbrace{1 - \cos(ka)}_{2\sin^2(ka/2)}) = -4K \sin^2(ka/2)$$

Dobijemo jednak rezultat uvrstimo li u jednadžbe za u_1 i u_{N-1}.
Disperzija glasi:

$$m\omega^2 = 4K \sin^2(ak/2)$$

$$\boxed{\omega = 2\sqrt{\frac{K}{m}} \sin(ka/2)}$$

jer je $\sin(ka/2)$ pozitivan za k-ove iz navedenog intervala.

(d) Vidimo da za svaki k dobijemo jednu frekvenciju titranja. Za $k=0$ i $k=\frac{\pi}{a}$ nemamo titranje; atomi miruju.
Prema tome, imamo ukupno $N-1$ titranja, odnosno frekvencija za koje je amplituda titranja općenito različita od nule.

(e) Najvišu frekvenciju dobijemo za

$$\sin(ka/2) = 1$$

$$k_{max} = \frac{\pi}{a}$$

Tada je

$$\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{K}{m}}$$

$$\lambda_{min} = \frac{2\pi}{k_{max}} = 2a$$

(f) Fazna brzina

$$v = \frac{\omega}{k} = 2\sqrt{\frac{K}{m}} \cdot \frac{\sin(ka/2)}{k}$$

(g) Minimalnu valnu duljinu dobijemo za maksimalan $k_{max} = \frac{\pi}{a}$;
Maksimalnu valnu duljinu dobijemo za minimalan valni vektor $k_{min} \to 0$;

$$\lim_{k\to 0} \frac{\sin(ka/2)}{ka/2} = 1$$

Odavdje,

$$v_{min} = 2\sqrt{\frac{\varkappa}{m}} \cdot \frac{a}{2} = \sqrt{\frac{\varkappa}{m}}\, a$$

Za v_{max} dobijemo

$$v_{max} = 2\sqrt{\frac{\varkappa}{m}} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a}\cdot\frac{a}{2}\right)}{\pi/a} = \frac{2a}{\pi}\sqrt{\frac{\varkappa}{m}}$$

Njihov je omjer

$$\boxed{\frac{v_{min}}{v_{max}} = \frac{\pi}{2}}$$

(h) Fononska gustoća stanja ($\underline{\text{OPREZ}}$: $\Delta k = \frac{\pi}{L}$, a ne $\frac{2\pi}{L}$)

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/a} \delta\left[\omega - \omega_m \sin(ka/2)\right] dk$$

gdje

$$\omega_m = 2\sqrt{\frac{\varkappa}{m}}$$

Promijenimo varijablu integracije:

$$x = \frac{ka}{2}$$

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a}\int_0^{\pi/2} dx\, \delta(\omega - \omega_m \sin x)$$

Za delta funkciju vrijedi

$$\delta\left[h(x)\right] = \sum_{\substack{x_0,\, h(x_0)=0 \\ h'(x_0)\neq 0}} \frac{\delta(x-x_0)}{|h'(x_0)|}$$

$$h(x) = \omega - \omega_m \sin x$$

Nule za $h(x)$:
$$x_0 = \arcsin \frac{\omega}{\omega_m}$$

$$h'(x) = -\omega_m \cos x$$

$$h'(x_0) = -\omega_m \cos\left[\arcsin\left(\frac{\omega}{\omega_m}\right)\right]$$

Dakle,
$$\delta(\omega - \omega_m \sin x) = \frac{\delta(x - \arcsin(\omega/\omega_m))}{\omega_m |\cos[\arcsin(\frac{\omega}{\omega_m})]|}$$

Vratimo u integral za $g(\omega)$

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a \omega_m} \int_0^{\pi/2} \frac{\delta(x - \arcsin(\omega/\omega_m))}{\cos[\arcsin(\frac{\omega}{\omega_m})]} dx$$

gdje je $0 < \omega < \omega_m$.

$$\cos\left[\arcsin\left(\frac{\omega}{\omega_m}\right)\right] = \sqrt{1 - \sin^2\left[\arcsin\left(\frac{\omega}{\omega_m}\right)\right]}$$
$$= \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_m}\right)^2}$$

pa je
$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a} \cdot \frac{1}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}} \Theta(\omega)\, \Theta(\omega_m - \omega)$$

Prema tome, traženi broj je

$$g(\omega) d\omega$$

DODATAK

Ovaj dio nije bio potreban! Provjerimo da li dobijemo jednake disperzije za jednadžbe za u_1 i u_{N-1}.

Uvrstimo pretpostavljeno rješenje u

$$m\ddot{u}_1 = -\Gamma K(2u_1 - u_2)$$

$$-m\omega^2\sin(ka) = -\Gamma K\Big(2\sin ka - \underbrace{\sin(2ka)}_{2\sin ka\cos ka}\Big)$$

$$-m\omega^2\sin(ka) = -\Gamma K\cdot 2\sin ka\,(\underbrace{1-\cos ka}_{2\sin^2(ka/2)})$$

$$\omega^2 = \frac{\Gamma K}{m}\cdot 4\sin^2(ka/2) \checkmark$$

Uvrstimo pretpostavljeno rješenje u

$$m\ddot{u}_{N-1} = -\Gamma K(2u_{N-1} - u_{N-2})$$

$$u_{N-1} = A\sin[\underbrace{(N-1)ka}_{Nka-ka}]\,e^{-i\omega t}$$

No, iz rubnog uvjeta

$$Nka = n\pi, \quad n = 1,2,\dots$$

pa je

$$u_{N-1} = A\sin(n\pi - ka)\,e^{-i\omega t}$$
$$= -A\cos(n\pi)\sin ka\,e^{-i\omega t}$$

Slično,

$$u_{N-2} = -A \cos n\pi \sin(2ka)\, e^{-i\omega t}$$

Prema tome, dobijemo jednadžbu istu kao i za u_1

$$-m\omega^2 \sin ka = -\mathcal{K}\left(2\sin ka - \sin 2ka\right)$$

$$\omega^2 = \frac{\mathcal{K}}{m}\, 4 \sin^2(ka/2)$$ ✓

$\boxed{2.}$

(a) Udaljenost susjednih atoma u fcc rešetki je

$$d = \frac{a\sqrt{2}}{2} = 3{,}49 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m}$$

(b) Iz formula

$$\hbar\omega_D = \hbar c k_D = k_B \Theta_D$$

$$c = \sqrt{\frac{E_Y}{\rho}}$$

imamo

$$\Theta_D = \frac{\hbar c}{k_B} k_D = \frac{\hbar}{k_B} \cdot \sqrt{\frac{E_Y}{\rho}} \cdot \sqrt[3]{6\pi^2 n}$$

Treba nam veza između ρ i n

$$\rho = \frac{m_0 N}{V} = m_0 n$$

$$m_0 = \frac{M}{N_A}$$

$\rho = 11{,}4\ \mathrm{g \cdot cm^{-3}}$

$M = 207{,}19\ \mathrm{g\,mol^{-1}}$ $\quad n = \frac{\rho N_A}{M}$

Debyeva temperatura je

$$\Theta_D = \frac{\hbar}{k_B} E_Y^{1/2} \cdot \left(6\pi^2 \frac{N_A}{M}\right)^{1/3} \cdot \rho^{-\frac{1}{6}}$$

Račun

$$\Theta_D = \frac{1{,}05 \cdot 10^{-34}}{1{,}38 \cdot 10^{-23}} \cdot \left(1{,}6 \cdot 10^{10}\right)^{1/2} \cdot \left(6\pi^2 \frac{6{,}022 \cdot 10^{23}}{207{,}19 \cdot 10^{-3}}\right)^{1/3} \cdot \left(11{,}4 \cdot 10^{3}\right)^{-1/6}$$

$$= 113{,}35\ \mathrm{K}$$

Eksperimentalno mjerene vrijednosti daju $\Theta_D = 88\ \mathrm{K}$.

(c) Iz Lindemannovog kriterija

$$T_t = \frac{m \omega_D^2 x_0^2}{9 k_B}$$

$m = 207,19\, u$

$\omega_D = 88\ K$

$x_0 = 0,12 \cdot d$

Rezultat:

$$T_t = \frac{207,19 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \cdot (88)^2 \cdot (0,12 \cdot 3,49 \cdot 10^{10})}{9 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}}$$

$$= 645,74\ K$$

(d) Relativna pogreška

$$\frac{645,74 - 600,6}{600,6} = 7,5\%$$