

FIZIKA ČVRSTOG STANJA

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:

- jednadžbe gibanja;
- spektar karakterističnih valnih vektora k ;
- disperziju $\omega = \omega(k)$ ovog lanca;
- ukupni broj dozvoljenih titranja, odnosno, različitih frekvencija;
- najvišu frekvenciju i odgovarajuću valnu duljinu;
- faznu brzinu kao funkciju valnog vektora;
- omjer faznih brzina za najdužu ($k \rightarrow 0$) i najkraću valnu duljinu ($k = \pi/2$);
- broj karakterističnih titranja lanca u intervalu $(\omega, \omega + d\omega)$, 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:

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

2. Olovo ima fcc rešetku konstante $a = 0,494$ nm. Youngov modul elastičnosti za olovo iznosi $E_Y = 1,6 \cdot 10^{10}$ N·m⁻². Ako se olovo tali kad je prosječna amplituda atomskih vibracija 12 % razmaka između atoma, izračunajte:

- Udaljenost susjednih atoma u fcc rešetki.
- 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 očitanoj iz tablica.

Uputa: prisjetite se da je Debye-ev valni vektor k_D povezan s gustoćom atoma $n = N/V$ formulom

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

- Temperaturu tališta olova T_i pomoću Lindemann-ovog kriterija

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

gdje je x_0 amplituda titranja pri kojoj dolazi do taljenja. Debye-evu frekvenciju ω_D računamo pomoću eksperimentalno dobivenih vrijednosti za θ_D .

- Točna vrijednost temperature tališta za olovo je 600,6 K. Kolika je relativna pogreška u odnosu na rezultat pod (c)?

1.

(a) Potencijalna energija između susjednih raspjeda 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

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

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

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

$$\begin{aligned} F_j &= -K \sum_n (u_n - u_{n+1}) (\delta_{nj} + K \sum_n (u_n - u_{n+1}) \delta_{n+1,j}) \\ &= -K(u_j - u_{j+1}) + K(u_{j-1} - u_j) \\ &= -K(2u_j - u_{j-1} - u_{j+1}) \end{aligned}$$

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

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

Za atom $j=N-1$

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

(b) Iz rubnih uvjeta za pretpostavljeno rješenje

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

Odatje je

$$\sin(Nka) = 0$$

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

$$k = \frac{\pi}{Na} n$$

Negativne vrijednosti za k ne moramo uključiti jer ćemo dobiti linearno zavisna rješenja. Također, vrijednosti $n > N$, daju isto linearno zavisna rješenja. Prema tome, valnih vektora ima dovoljno koliko i otvoreno, odnorno, prirodnih čelija.

(c) Dispersiju ćemo uaci' tako da uvrstimo rješenje u jednadžbu

$$\begin{aligned} -m\ddot{u}_j &= 1 - m\omega^2 \sin(jka) e^{-i\omega t} \cdot A \\ &= -K \left\{ 2 \cdot A \cdot \sin(jka) - A \sin[(j-1)ka] \right. \\ &\quad \left. - A \sin[(j+1)ka] \right\} e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

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

Prema tome,

$$\begin{aligned} -m\omega^2 &= -K \left\{ 2 + 2 \cos(ka) \right\} \\ &= -2K \underbrace{(1 - \cos(ka))}_{2 \sin^2(ka/2)} = -4K \sin^2(ka/2) \end{aligned}$$

Dobijemo jednak rezultat uvrstimo li u jednačinu za u_1 i u_{N-1} .

Disperzija glati:

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

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

je 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; daju minimum.

Prema tome, imamo ukupno $N-1$ titranja, odnosno frekvencije za koje je amplituda titranja općenito različita od nule.

(e) Najvišu frekvenciju dobijemo za

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

$$k = \frac{\pi}{a}$$

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) Minimalni valni duljini dobijemo za maksimalan $k_{\max} = \frac{\pi}{a}$;
Maksimalni valni duljini dobijemo za minimalan
valni vektor $k_{\min} \rightarrow 0$;

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

Odavde,

$$V_{\min} = 2 \sqrt{\frac{\pi k}{m} \cdot \frac{a}{2}} = \sqrt{\frac{\pi k}{m}} a$$

Za V_{\max} obujemu

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

Hitrost je povpreč

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

(h) Fonamla gustoča staja (OPREZ: $\Delta k = \frac{\pi}{L}$, a ne $\frac{2\pi}{L}$)

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

gde

$$\omega_m = 2 \sqrt{\frac{\pi k}{m}}$$

Promenno varjable integracije:

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

Za delta funkciji vjedi:

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

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

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,

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

Uvrtimo u integral za $g(\omega)$

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

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

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

pa je

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a} \cdot \frac{1}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}} \quad \textcircled{\ast}(\omega) \quad \textcircled{\ast}(\omega_m - \omega)$$

Prva tačka, trećem broju je

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

DODATAK

Ovaj dio nije bio potreban! Projevimo da li dobijemo jednake disperzije za redosložbe u_1, u_2, \dots, u_{N-1} .

Urtuno pretpostavimo rješenje u

$$m \ddot{u}_1 = -\tau K (2u_1 - u_2)$$
$$-m\omega^2 \sin(ka) = -\tau K (2 \sin ka - \underbrace{\sin(2ka)})$$

$$2 \sin ka \cos ka$$

$$-m\omega^2 \sin(ka) = -\tau K \cdot 2 \sin ka (1 - \underbrace{\cos ka})$$

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

Urtuno pretpostavimo rješenje u

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

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

Ne, iz razloga ujeta

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

pa je

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

Sluis,

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

Prema force) dobjemus jeduochku istu kao i za u_1

$$-m\omega^2 \sin ka = -K (2 \sin ka - \sin 2ka)$$

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

2.

(a) Udaljenost susjednih atoma u fcc kristalu je

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

(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

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

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

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

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

Debyeova temperatura je

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

Racun

$$\Theta_D = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{1,38 \cdot 10^{-23}} \cdot (1,6 \cdot 10^{10})^{1/2} \cdot \left(6\pi^2 \frac{6,022 \cdot 10^{23}}{207,19 \cdot 10^{-3}} \right)^{1/3} \cdot (11,4 \cdot 10^3)^{-1/6} = 113,35 \text{ K}$$

Ekspenimentalno mjerenje vrijednosti daje $\Theta_D = 88 \text{ K}$.

(c) Jz Lindemauuovog kutenja

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

$$m = 207,19 \text{ u}$$

$$\omega_D = 88 \text{ K}$$

$$x_0 = 0,12 \cdot d$$

Rezultat:

$$T_t = \frac{207,19 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \cdot (88)^2 \cdot (0,12 \cdot 3,49 \cdot 10^{-10})^2}{9 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}}$$
$$= 645,74 \text{ K}$$

(d) Relativna pogreška

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