Domača naloga pri Fiziki trdne snovi: Mrežna nihanja verige z alternirajočo konstanto vzmeti

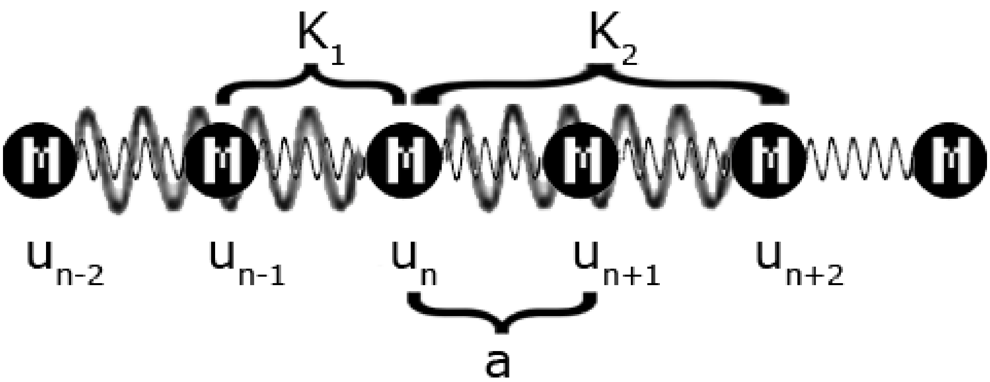
Matjaž Ličar 28030549

25s.5.2012

1 Navodilo

Pri nalogi je bilo potrebno obravnavati longitudinalna mrežna nihanja enodimenzionalne verige atomov z maso M, kjer so najbližji sosedi povezani z vzmetjo s konstanto K_1, drugi najbližji sosedi pa z vzmetmi s konstanto K_2. Najprej je bilo potrebno določiti primitivno celico ter zapisati enačbe gibanja za majhne odmike iz ravnovesnih leg. Iz tega je bilo potrebno izračunati disperzijo mrežnih nihanj ter hitrost zvoka. Izračunati je bilo potrebno tudi prispevek mrežnih nihanj k nizkotemperaturni specifični toploti v primeru, ko je $K_2 = -\frac{1}{4}K_1 < 0$.

2 Disperzija nihanja verige



Slika 1: Skica problema

V verigi imamo enake atome mase M, zato je v primitivni celici en atom, njena dolžina pa je enaka a. Sedaj lahko zapišemo silo na n-ti atom; ta bo imela prispevka zaradi skrčka vzmeti K_1, s katero sta povezana najbljižja soseda in pa zaradi skrčka vzemti K_2, s katero sta povezana druga najbljižja soseda:

$$F_n = K_1[(u_{n+1} - u_n) + (u_{n-1} - u_n)] + K_2[(u_{n+2} - u_n) + (u_{n-2} - u_n)] \quad (1)$$

Da dobimo gibalno enačbo za n-ti atom uporabimo Newtonov zakon $M\ddot{u}_n = F_n$:

$$M\ddot{u}_n = -2(K_1 + K_2)u_n + K_1(u_{n+1} + u_{n-1}) + K_2(u_{n+2} - u_{n-2}) \tag{2}$$

Rešitev te enačbe pričakujemo v obliki ravnih valov:

$$u_n = u_0 e^{ikna - i\omega t} \tag{3}$$

Ko vstavimo nastavek (3) v (2), lahko izrazimo ω^2:

$$\begin{aligned} -M\omega^2 &= -2(K_1 + K_2) + K_1(e^{ika} + e^{-ika}) + K_2(e^{i2ka} + e^{-i2ka}) \\ -\frac{M}{2}\omega^2 &= K_1(1 - \cos ka) + 2K_2(1 - \cos^2 ka) \\ \omega^2 &= \frac{2}{M}[K_1(1 - \cos ka) + 2K_2 \sin^2 ka] \end{aligned} \tag{4}$$

V dolgovalovni limiti ($ka \ll 1$) lahko sinus in kosinus po Taylorju razvijemo do kvadratnega člena:

$$\omega^2 \simeq \frac{2}{M}\Big[K_1\Big(1 - 1 + \frac{(ka)^2}{2}\Big) + 2K_2(ka)^2\Big] = \Big(\frac{K_1 + 4K_2}{M}\Big)(ka)^2 \tag{5}$$

Disperzijska zveza je tako

$$\omega = a\sqrt{\frac{K_1 + 4K_2}{M}}k, \tag{6}$$

iz dobro poznane zveze za ravne valove $\omega = ck$ pa tudi hitrost zvoka:

$$c = a\sqrt{\frac{K_1 + 4K_2}{M}}. \tag{7}$$

3 Specifična toplota pri nizki temperaturi

V primeru, ko je $K_2 = -\frac{1}{4}K_1 < 0$ vidimo, da bo hitrost zvoka enaka 0, zato moramo enačbo (4) razviti do naslednjega višjega reda.

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{2}{M}[K_1(1 - \cos ka) + 2K_2 \sin^2 ka], \\ \sin ka &= ka - \frac{(ka)^3}{6} + \ldots, \\ \cos ka &= 1 - \frac{(ka)^2}{2} + \frac{(ka)^4}{24} - \ldots, \\ \omega^2 &= \frac{2}{M}[K_1(1 - 1 + \frac{(ka)^2}{2} - \frac{(ka)^4}{24}) + 2K_2(ka - \frac{(ka)^3}{6})^2], \\ \omega^2 &= \frac{K_1 + 4K_2}{M}(ka)^2 - \frac{K_1 + 16K_2}{12M}(ka)^4. \end{aligned} \tag{8}$$

Sedaj upoštevamo $K_2 = -\frac{1}{4}K_1 < 0$ in vidimo, da nam v enačbi (8) odpade kvadratni člen:

$$\omega(k) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{K}{M}}a^2k^2 = \gamma^2k^2, \quad \gamma^2 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{K}{M}}a^2 \tag{9}$$

Tukaj smo za voljo krajšega zapisa uvedli konstanto γ in opustili pisanje indeksov pri K-jih.

Za izračun specifične temperature potrebujemo najprej gostoto fononskih stanj. To izračunamo iz enačbe

$$D(\omega) = \frac{Na}{\pi}\frac{dk}{d\omega}, \tag{10}$$

kjer je N število vseh atomov v verigi. V to enačbo sedaj vstavimo našo disperzijsko zvezo (9):

$$D(\omega) = \frac{Na}{2\pi\gamma}\frac{1}{\sqrt{\omega}} \tag{11}$$

Za izračun energije sistema uporabimo Bose-Einsteinovo statistiko:

$$U = \int_0^{\omega_D} D(\omega)\frac{\hbar\omega d\omega}{\exp(\frac{\hbar\omega}{k_BT} - 1)} = \frac{Na}{2\pi\gamma}\int_0^{\omega_D}\frac{\hbar\sqrt{\omega}d\omega}{\exp(\frac{\hbar\omega}{k_BT} - 1)}, \tag{12}$$

kjer ω_D predstavlja Debyejevo frekvenco. Za lažje računanje sedaj uvedemo novo spremenljivko $x = \frac{\hbar\omega}{k_BT}$, mejo integrala pa postavimo v neskončnost, saj računamo specifično toploto pri nizki temperaturi. Dobimo:

$$U = \frac{Na\hbar}{2\pi\gamma}\Big(\frac{k_BT}{\hbar}\Big)^{\frac{3}{2}}\int_0^{\infty}\frac{\sqrt{x}dx}{e^x - 1} = \zeta\Big(\frac{3}{2}\Big)\frac{N}{2\sqrt{\pi\hbar}}\Big(\frac{K}{M}\Big)^{\frac{1}{4}}(k_BT)^{\frac{3}{2}}. \tag{13}$$

Vrednost integrala v enačbi (13) je $\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\zeta(\frac{3}{2}) \approx 2,31516$, kjer je $\zeta(x)$ Riemmanova zeta funkcija. Pri prehodu čez drugi enačaj smo tudi že vstavili vrednost za γ. Da dobimo specifično toploto, moramo enačbo (13) še odvajati po temperaturi:

$$C_V = \Big(\frac{\partial U}{\partial T}\Big)_V = \zeta\Big(\frac{3}{2}\Big)\frac{3N}{4}\sqrt{\frac{k_B^3}{\pi\hbar}}\Big(\frac{K}{M}\Big)^{\frac{1}{4}}\sqrt{T}. \tag{14}$$

Za razliko od linearne odvisnosti pri verigi, kjer so le najbližji sosedi povezani med seboj, dobimo tukaj korensko odvisnost od temperature.