

ZAD.1. Wykazać że dla długich fal równanie ruchu sieci jednoatomowej:

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_p C_p (u_{s+p} - u_s)$$

przechodzi w równanie fali sprężystej rozchodzącej się w ośrodku ciągłym: $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, gdzie v - jest prędkością dźwięku.

ZAD.2. A) Metodę okresowych warunków brzegowych zastosuj do drgań zbioru N atomów w sześcianie o boku L . Pokaż, że gęstość stanów w przestrzeni pędów $w(\vec{k}) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$.

Oblicz gęstość stanów w przestrzeni częstości $D(\omega)$ stosując następujące rozumowanie:

- i) liczbę drgań normalnych w przedziale $(\omega, \omega + d\omega)$ można wyrazić na dwa równoważne sposoby:

$$D(\omega)d\omega = \int_{\text{warstwa } (\omega, \omega+d\omega)} w(\vec{k}) d^3k$$

- ii) w przestrzeni pędów warstwa $(\omega, \omega + d\omega)$ odnosi się do naskórka o grubości dk_{\perp} utworzonego dla powierzchni o stałej częstości S_{ω} a więc:

$$\int_{\text{warstwa } (\omega, \omega+d\omega)} d^3k = \int_{\omega=\text{const}} dS_{\omega} dk_{\perp}$$

- iii) grubość naskórka można wyrazić przez prędkość grupową v_g : $dk_{\perp} = \frac{d\omega}{\nabla_{\vec{k}} \omega} = \frac{d\omega}{v_g}$

Powinieneś uzyskać wynik: $D(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{\omega=\text{const}} \frac{dS_{\omega}}{v_g}$.

B) W **przybliżeniu Debye'a** relacja dyspersji wynosi: $\omega(k) = vk$ a więc powierzchnia stałej częstości S_{ω} jest kulą! Zakładając, że dla 3-dim kryształu mamy możliwe 3 polaryzacje drgań normalnych pokaż, że całkowita gęstość stanów wynosi: $D(\omega) = 3 \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v^3}$.

ZAD.3. a) Znajdź dozwolone wartości wektora falowego q dla drgań 1-wymiarowej sieci jednoatomowej o stałej sieci A i długości L , zakładając liniową relację dyspersji $\omega = |q| v_f$ oraz warunki brzegowe na wychylenie $u(n)$ n -tego atomu z położenia równowagi:

i) $u(n) = u(n+L/A)$ ALBO **ii)** $u(0) = u(L/A) = 0$

b) Oblicz funkcję gęstości stanów $D(\omega)$

c) Uogólnij wyniki z punktu a) na przypadek 2- i 3-wymiarowy. Pokaż, że oba warunki brzegowe i) oraz ii) prowadzą do tego samego wyniku: $D(\omega) = \text{const } L^d \omega^{(d-1)}/v_f^d$ (dając także te same stałe const)

ZAD.4. A) Model Einsteina Oblicz $c_V(T)$ przyjmując $D(\omega) = 3N\delta(\omega - \omega_E)$, gdzie N - liczba atomów w kryształ. Dla $T \rightarrow \infty$ pokaż, że $c_V(T)$ spełnia prawo Dulonga-Petita.

B) Model Debye'a Pokaż, że dla N atomów w sześcianie o boku L , gęstość stanów w przestrzeni pędów $w(k) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$. Używając zależności dyspersyjnej $\omega = vk$ pokaż, że

$$D(\omega) = \frac{3\omega^2 L^3}{2\pi^2 v^3} \quad \text{dla} \quad \omega < \omega_D = (6\pi^2 N)^{\frac{1}{3}} \frac{v}{L}. \quad \text{Oblicz } c_V(T) \text{ i pokaż, że dla } T \rightarrow 0 \quad c_V(T) \propto T^3.$$

ZAD.5. Rozszerzalność cieplna kryształu jako efekt anharmoniczny. Załóż, że w 1-dim kryształie energia potencjalna atomu wychylonego z pozycji równowagi o u jest opisana wzorem $E(u) = E_0 + \frac{B}{2}u^2 + \frac{C}{6}u^3$. Przyjmij, że rozkład kanoniczny (rozkład Boltzmann) opisuje gęstość prawdopodobieństwa dla atomu o wychyleniu u . Oblicz średnie wychylenie atomu $\langle u \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u e^{-\beta E(u)} du / \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta E(u)} du$ korzystając z $e^{-\beta[E_0 + \frac{B}{2}u^2 + \frac{C}{6}u^3]} \approx \text{const.} e^{-\beta \frac{B}{2}u^2} (1 + \frac{C}{6}u^3)$

oraz ze wzorów $\int_{-\infty}^{\infty} dz \exp(-\alpha z^2) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ oraz $\int_{-\infty}^{\infty} z^4 dz \exp(-\alpha z^2) = \frac{3}{4\alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$. Powinieneś

otrzymać wynik: $\langle u \rangle = \frac{C}{2B^2} k_B T$. Oblicz współczynnik rozszerzalności linowej

$\lambda := \frac{1}{L_0} \left(\frac{\partial L}{\partial T}\right)_p$ dla 1-dim kryształu o długości L i stałej sieci a , zbudowanego z N atomów.

Załącz, że $L_0 = Na$ oraz $L = N(a + \langle u \rangle)$.