מבוא לתורת המצב המוצק

פתרון תרגיל מס' 4

.1

א. כל תא יחידה מכיל 3 דרגות חופש ולכן יש בסך הכל 3 ענפים. הגביש חד-ממדי ולכן יהיה ענף אקוסטי אחד. מכאן שיש שני ענפים אופטיים.

ב. בגבול של טמפרטורות גבוהות: $C_V = k_\mathrm{B}\sum_b \sum_{k\in \mathrm{BZ}} 1 = 3Nk_\mathrm{B}$

בגבול של טמפרטורות נמוכות:

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T}\sum_{\substack{b \\ \text{acoustic}}}\sum_k \frac{\hbar v|k|}{e^{\beta\hbar v|k|}-1} = \frac{\partial}{\partial T}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\frac{L}{2\pi}\frac{\hbar v|k|}{e^{\beta\hbar v|k|}-1} = \frac{\partial}{\partial T}2\frac{Na}{2\pi}\frac{1}{\beta^2\hbar v}\int_0^\infty dx\,\frac{x}{e^x-1} = \frac{\pi Nak_\mathrm{B}^2}{3\hbar v}T$$

מאחר שהגביש חד-ממדי קיבלנו קיבול חום בטמפ' נמוכות שהוא פרופורציוני ל- T^1.

.2

א. מאחר שיש סימטריה קובית, $\frac{1}{\bar{v}^3} = \sum_{\substack{\mathrm{b} \\ \text{acoustic}}}\frac{1}{v_\mathrm{b}^3} = 3\left(v[100]\right)^{-3}$

ולכן $\bar{v} = \frac{1.76\times10^6}{3^{1/3}} \approx 1.22\times10^6\ \mathrm{cm/s}$

צפיפות אטומי הפחמן בגביש: $n = \frac{3.52\ \mathrm{gr/cm^3}}{12\ \mathrm{gr}}6.02\times10^{23} \approx 1.77\times10^{23}\ \mathrm{cm^{-3}}$

ומקבלים: $T_\mathrm{D} = \frac{\hbar\bar{v}}{k_\mathrm{B}}(18\pi^2 n)^{1/3} \approx 2930\mathrm{K}$

ערך זה אינו זהה לזה שהתקבל מקיבול חום (1860K), אולם שניהם מאותו סדר גודל.

ב. מאחר שטמפרטורת דביי של יהלום כה גבוהה, אנו מצפים לסטיה משמעותית מקיבול החום הקלאסי כבר בטמפרטורת החדר!

קיבלנו בכתה: $C_V = \frac{Vk_\mathrm{B}^4T^3}{2\pi^2(\hbar\bar{v})^3}\int_0^{T_\mathrm{D}/T}\frac{x^4e^x}{(e^x-1)^2}\mathrm{d}x$

הצבת $T_\mathrm{D} = \frac{\hbar\bar{v}}{k_\mathrm{B}}k_\mathrm{D} = \frac{\hbar\bar{v}}{k_\mathrm{B}}(18\pi^2 n)^{1/3}$

נותנת

$$\frac{C_V}{3Nk_\mathrm{B}} = 3\left(\frac{T}{T_\mathrm{D}}\right)^3\int_0^{T_\mathrm{D}/T}\frac{x^4e^x}{(e^x-1)^2}\mathrm{d}x = 3\left(\frac{300}{1860}\right)^3\int_0^{1860/300}\frac{x^4e^x}{(e^x-1)^2}\mathrm{d}x \approx 0.25$$

כלומר קיבול החום בטמפרטורת החדר הוא רק כרבע מהניבוי הקלאסי!