Domácí úkol č. 2

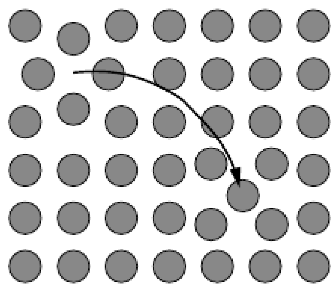
Zadáno: 15.3.2018 **Odevzdat do: 5.4.2018**

Frenkelovy defekty

V iontových krystalech (ZnS, AgCl, AgBr, NaCl,...) může dojít při konečné teplotě vlivem tepelných vibrací k přemístění menšího atomů z mřížkového bodu do intersticiální polohy. Vzniká tak tzv. Frenkelův defekt.

Uvažujme dokonalý krystal tvořený N atomy. Přemístíme-li n z nich ($1 \ll n \ll N$) do intersticiálních poloh, získáme n Frenkelových defektů. Předpokládejme, že počet dostupných intersticiálních poloh N' je řádově stejný jako počet atomů a že energie potřebná ke vzniku jednoho defektu je ε. Ukažte, že v rovnovážném stavu při teplotě T (za předpokladu $\varepsilon \gg k_B T$) platí

$$\frac{n^2}{(N-n)(N'-n)} = \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right).$$



Einsteinův model

Spočtěte tepelnou kapacitu C systému N neinteragujících kvantových harmonických oscilátorů s energií (k je celkový počet excitovaných vibračních kvant)

$$E = \hbar\omega\left(\frac{N}{2} + k\right)$$

jako funkci teploty a ukažte, že

- při vysokých teplotách platí Dulongův-Petitův zákon
- při nízkých teplotách tepelná kapacita klesá exponenciálně.

V obou úlohách pracujte s mikrokanonickým souborem.

Komentář ke cvičení – soustava nezávislých kvantových oscilátorů

Pozn: Ve skutečnosti jsme letos počítali 3D oscilátory, ale je zřejmé, že rozdíl je jen $N \to 3N\ldots$

Na cvičení jsme pro soustavu N klasických nezávislých 1D oscilátorů odvodili mikrokanonickou entropii

$$S(E) = Nk_B \log\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega}\right) + Nk_B,$$

kde ϵ je střední energie na jeden oscilátor. Pro analogický systém kvantových oscilátorů jsme ze vztahu mezi celkovou energií systému E a počtem excitovaných kvant M (n_i je počet kvant na i-tém oscilátoru)

$$M = \sum_i n_i = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2} = \frac{\tilde{E}}{\hbar\omega}$$

odvodili pro entropii vztah ($M >> 1$, $N >> 1$)

$$\begin{aligned}
&S/k_B = \log\frac{(M+N-1)!}{M!(N-1)!} \\
&= \left(\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{N}{2}\right)\log\left(\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{N}{2}\right) - \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2}\right)\log\left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2}\right) - N\log N
\end{aligned}$$

Vztah ke klasické limitě výše není na první pohled patrný, ale je možné se k němu dopracovat velice rychle. Z prvního členu vytkneme $N\log\left(\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{N}{2}\right)$, od tohoto výrazu rovnou odečteme poslední člen $N\log N$ a dostaneme

$$\begin{aligned}
S/k_b &= N\log\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right) + \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2}\right)\log\left(\frac{\left(\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{N}{2}\right)}{\left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2}\right)}\right) \\
&= N\log\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right) + N\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\log\left(\frac{\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right)}{\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)}\right)
\end{aligned}$$

Za předpokladu, že pro střední excitační energii na jeden oscilátor platí $\epsilon >> \hbar\omega$, můžeme pomocí rozvoje

$$\log\left(\frac{1+x}{1-x}\right) = 2x + O(x^3)$$

psát

$$S/k_b \approx N\log\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega}\right) + N\left(1 - \frac{\hbar\omega}{2\epsilon}\right),$$

kde již vidíme klasickou limitu a první kvantovou korekci úměrnou $\hbar\omega/\epsilon$.