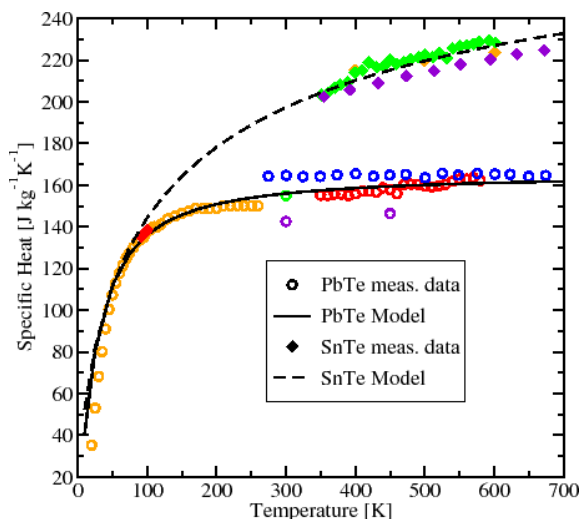


Θέμα 1: Για το Ti δίνεται ότι $c_l = 6070\text{m/s}$, $c_t = 3130\text{m/s}$, $\rho_M = 4.5\text{ g/cm}^3$, $A = 47.9\text{ g/mol}$. Υπολογίστε την συχνότητα Debye, ω_D .

Θέμα 2: Η διπλανή εικόνα δείχνει την θερμοχωρητικότητα ανά μονάδα μάζας ($c = C_V/M$) στο PbTe, μετρημένη με διάφορες πειραματικές τεχνικές, σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας. Εκτιμήστε την θερμοκρασία Debye στο PbTe από αυτά τα δεδομένα.

Αγνοήστε την άνω διακεκομμένη γραμμή και τα σημεία που αφορούν το SnTe.



Πηγή εικόνας: Martin Wagner, διδακτορική διατριβή, Technische Universität Wien, 2007.

Θέμα 3: Σε κάποιο υλικό η πυκνότητα καταστάσεων φωνονίων είναι $\phi(\epsilon) \sim \epsilon^a$ όταν $0 \leq \epsilon \leq \epsilon_D$ και $\phi(\epsilon) = 0$ για άλλες τιμές του ϵ . Αποδείξτε ότι σε χαμηλές θερμοκρασίες, η θερμοχωρητικότητα λόγω φωνονίων είναι ανάλογη του T^{a+1} όπου T η θερμοκρασία.

Ατομικές μονάδες:

$$\alpha_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{ma_B^2} = 27.211 \text{ eV}, \quad u_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}} = 2187.77 \text{ km/s},$$

$$\omega_0 = \frac{2\pi u_0}{\alpha_B} = 2.60 \times 10^{17} \text{ Hz}, \quad P_0 = \frac{E_0}{\alpha_B^3} = 29421 \text{ GPa}, \quad T_0 = \frac{E_0}{k_B} = 315773 \text{ K},$$

Σταθερές:

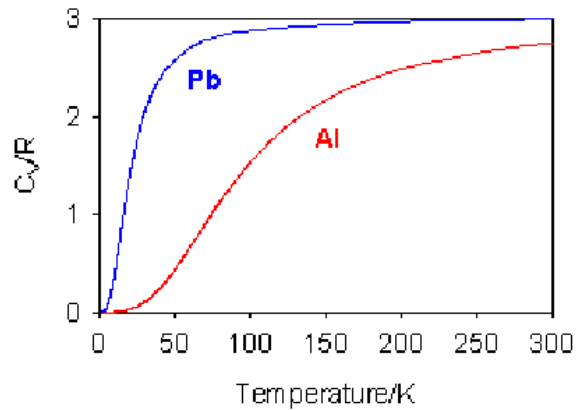
$$R = 8.3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}, \quad m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C},$$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}, \quad c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s}, \quad N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1},$$

$$1 \text{ cal} = 4.18 \text{ J}, \quad \epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m}, \quad k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1},$$

$$m_p = 1836.2m_e, \quad hc = 12398 \text{ eV \AA}, \quad k_B^{-1} = 11605 \text{ K/eV}.$$

Θέμα 1: Η διπλανή εικόνα δείχνει την θερμοχωρητικότητα ανά mol στο Pb και στο Al. Με βάση την εικόνα, ποιο μέταλλο έχει μεγαλύτερη θερμοκρασία Debye;



Θέμα 2: Το Al_2O_3 έχει πυκνότητα $\rho_M = 4.0 \text{ g/cm}^3$, και το μέσο ατομικό βάρος των ατόμων του είναι $A = 20.4 \text{ g/mol}$. Η θερμοκρασία Debye είναι $\Theta_D = 1050 \text{ K}$. Πόση είναι η ταχύτητα του ήχου, c ;

Θέμα 3: Ο Ag έχει ατομικό βάρος 108 g/mol , σθένος $\zeta=1$, και θερμοκρασίες Debye και Fermi $\theta_D = 225\text{K}$ και $T_F = 63000\text{K}$. Βρείτε την θερμοκρασία στην οποία η θερμοχωρητικότητα λόγω ηλεκτρονίων ισούται με την θερμοχωρητικότητα λόγω φωνονίων. Δίνεται η θερμοχωρητικότητα λόγω ηλεκτρονίων, $C_{Ve} = \frac{\pi^2 N k_B T}{2T_F}$ και το ολοκλήρωμα $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$.

Ατομικές μονάδες:

$$\alpha_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{ma_B^2} = 27.211 \text{ eV}, \quad u_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}} = 2187.77 \text{ km/s},$$

$$\omega_0 = \frac{2\pi u_0}{\alpha_B} = 2.60 \times 10^{17} \text{ Hz}, \quad P_0 = \frac{E_0}{a_B^3} = 29421 \text{ GPa}, \quad T_0 = \frac{E_0}{k_B} = 315773 \text{ K},$$

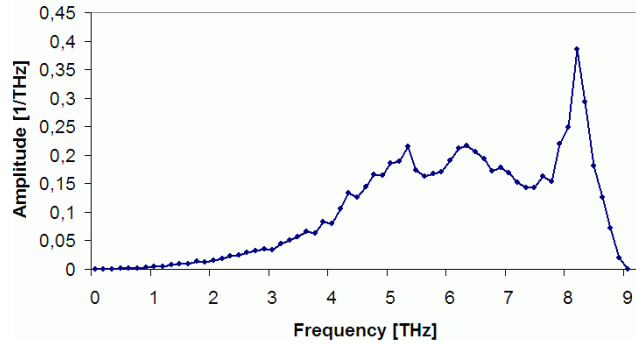
Σταθερές:

$$\begin{aligned} R &= 8.3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}, & m_e &= 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}, & e &= 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}, \\ \hbar &= 1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}, & c &= 3.00 \times 10^8 \text{ m/s}, & N_A &= 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}, \\ 1 \text{ cal} &= 4.18 \text{ J}, & \epsilon_0 &= 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m}, & k_B &= 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}, \\ m_p &= 1836.2m_e, & hc &= 12398 \text{ eV \AA}, & k_B^{-1} &= 11605 \text{ K/eV}. \end{aligned}$$

Θέμα 1: Η καμπύλη στην διπλανή εικόνα παριστάνει την ποσότητα

$f(\omega) = \frac{\hbar\phi(\epsilon)}{3N_i}$, όπου $\phi(\epsilon)$ είναι η πυκνότητα καταστάσεων φωνονίων στον Fe και $\epsilon = \hbar\omega$.

Βρείτε το εμβαδόν που περικλείεται μεταξύ της καμπύλης και του οριζοντιου άξονα και δικαιολογήσετε την απάντησή σας.



Πηγή εικόνας: <http://www.phonon.fc.pl>

Θέμα 2: Για το SiO₂ δίνεται ότι $c_l = 5970\text{m/s}$, $c_t = 3760\text{m/s}$, $\rho_M = 2.2\text{g/cm}^3$ και $B = 40\text{GPa}$. Υπολογίστε την σταθερά f στην σχέση $c = fc_0$.

Θέμα 3: Ο Au έχει ατομικό βάρος 197g/mol , σθένος $\zeta=1$, και θερμοκρασίες Debye και Fermi $\theta_D = 165\text{K}$ και $T_F = 64000\text{K}$. Υπολογίστε την θερμοχωρητικότητα ανά γραμμάριο (δηλαδή το C_V/M σε $\text{J g}^{-1}\text{K}^{-1}$) (α) στους 300K (β) στους 3K . Δίνεται η θερμοχωρητικότητα λόγω ηλεκτρονίων, $C_{Ve} = \frac{\pi^2 N k_B T}{2T_F}$ και το ολοκλήρωμα $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$.

Ατομικές μονάδες:

$$\alpha_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{ma_B^2} = 27.211 \text{ eV}, \quad u_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}} = 2187.77 \text{ km/s},$$

$$\omega_0 = \frac{2\pi u_0}{\alpha_B} = 2.60 \times 10^{17} \text{ Hz}, \quad P_0 = \frac{E_0}{\alpha_B^3} = 29421 \text{ GPa}, \quad T_0 = \frac{E_0}{k_B} = 315773 \text{ K},$$

Σταθερές:

$$R = 8.3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}, \quad m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C},$$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}, \quad c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s}, \quad N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1},$$

$$1 \text{ cal} = 4.18 \text{ J}, \quad \epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m}, \quad k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1},$$

$$m_p = 1836.2m_e, \quad hc = 12398 \text{ eV \AA}, \quad k_B^{-1} = 11605 \text{ K/eV}.$$

Απαντήσεις

$$A1 \omega_D = \left(\frac{3}{\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3}} \right)^{1/3} (6\pi^2 \rho_M N_A / A)^{1/3} = 53 \text{ THz.}$$

A2 $\Theta_D \approx 200 \text{ K}$ (οποιαδήποτε τεσμηριωμένη απάντηση από 100 έως 300 K θα θεωρηθεί σωστή).

$$A3 U_\phi = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon \phi(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon \sim \int_0^{\epsilon_D} \frac{\epsilon \epsilon^a}{e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon = \frac{1}{\beta^{a+2}} \int_0^{\beta\epsilon_D} \frac{x^{a+1}}{e^x - 1} dx \sim T^{a+2} \text{ for } \beta\epsilon_D \gg 1 \Rightarrow dU_\phi/dT \sim T^{a+1}.$$

B1 Το A1.

$$B2 c = \frac{k_B \Theta_D}{\hbar (6\pi^2 \rho_M N_A / A)^{1/3}} = 7260 \text{ m/s.}$$

$$B3 T = \sqrt{\frac{5\Theta_D^3}{24\pi^2 T_F}} = 2.0 \text{ K.}$$

Γ1 1.

$$\Gamma2 f = \frac{\sqrt{\frac{B}{\rho_M}}}{\left(\frac{3}{\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3}} \right)^{1/3}} = 0.97.$$

$$\Gamma3 \text{ για } T = 300 \text{ K: } c = \frac{\pi^2 \zeta R T}{2AT_F} + 3R/A = 0.128 \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}.$$

$$\text{για } T = 3 \text{ K: } c = \frac{\pi^2 \zeta R T}{2AT_F} + \frac{12\pi^4 T^3}{5\Theta_D^3} R/A = 6.9 \times 10^{-5} \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}.$$