

Раздел 6.

Задачи по микроскопической теории вещества

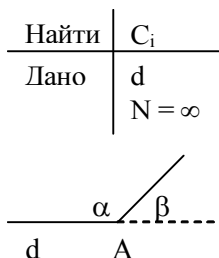
Глава I

Кристаллическая решетка

Задача № 1

Доказать, что бесконечная точечная решетка может обладать вращательной симметрией только 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков.

Решение



Обычно, при решении любой физической задачи необходимо выбрать СО. Однако данная задача имеет чисто геометрическое содержание, поэтому СО не указываем, все “действия” происходят на плоскости бесконечной точечной решетки. Для обозначения оси симметрии использована буква C_i (це). Индекс внизу обозначает порядок оси симметрии. Через $N = \infty$ выражено, что решетка содержит бесконечное число узлов, в которых располагаются структурные частицы, размерами которых в задаче пренебрегают (точечная решетка!), d - период решетки.

Рис. 1.

Под вращательной симметрией понимается операция вращения решетки вокруг некоторой оси, в результате чего решетка снова совпадает сама с собой. Сделаем плоский чертеж данной решетки (Рис. 1). Обозначим один из ее узлов буквой А, через него перпендикулярно плоскости проходит ось. Угол α - угол одного из многоугольников, сходящихся в этом узле. Пусть таких многоугольников будет q , тогда:

$$\angle \alpha = \frac{2\pi}{q} \quad (1)$$

Угол β – внешний к углу α угол. Он равен:

$$\angle\beta = \pi - \frac{2\pi}{q} \quad (2)$$

Пусть через узел **A** проходит ось C_i порядка, тогда справедливо соотношение:

$$\pi - \frac{2\pi}{q} = \frac{2\pi}{C_i} \quad (3)$$

Преобразуем это выражение. Домножим его на qC_i . Приведем к общему знаменателю, добавим и отнимем число 4, получим (после группировки членов):

$$(C_i - 2)(q - 2) = 4 \quad (4)$$

Проведем анализ этого выражения.

1. Пусть $C_i = 1$, тогда $q = -2$, что не имеет смысла, т.к. по определению q – целое положительное число. Получается, что бесконечная точечная решетка не обладает вращательной симметрией 1-го порядка. Но это не так, при $C_i = 1$ угол, при котором решетка совмещается сама с собой при вращении вокруг оси, равен $2\pi = 360^\circ$, при таком повороте любая решетка совмещается со своим исходным положением. Следовательно, наше решение не включает этот случай.

2. Пусть $C_i = 2$, тогда $q = 0$, т.е. опять получаем результат, не учитывающий свойства реального кристалла, структурные частицы которого располагаются в вершинах прямоугольников (см. Рис. 2).

3. Пусть $C_i = 3$, тогда $q = 6$. Это означает, что в нашей решетке существует ось 3-го порядка (см. Рис. 3).

4. Пусть $C_i = 4$, тогда $q = 4$. В вершине **A** сходятся 4 квадрата (см. Рис. 4).



Рис. 2

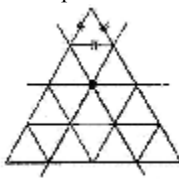


Рис. 3

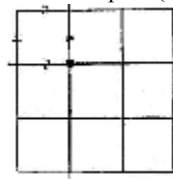


Рис. 4



Рис. 5

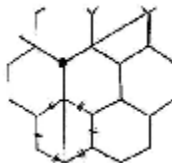


Рис. 6

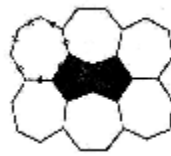


Рис. 7

5. Если $C_i = 5$, то $q = 3\frac{1}{3}$, что не имеет смысла: в нашей решетке нет

осей симметрии 5-го порядка (см. Рис. 5). Прямоугольниками нельзя плотно заполнить плоскость решетки.

6. Если $C_i = 6$, то $q = 3$. В узле встречаются 3 правильных многоугольника (см. Рис. 6).

7. Наконец, пусть $C_i = 7$, $q = 2\frac{4}{5}$. Мы снова получили бессмысленный результат. Значит, оси 7-го порядка не существует. Подобные результаты мы получим, рассматривая $C > 7$ (см. Рис. 7).

Итак, бесконечная решетка может обладать осями симметрии 1-го, 2-го, 3-го, 4-го, 6-го порядков. Или она обладает осями симметрии $C_1; C_2; C_3; C_4; C_6$.

2-ой вариант решения задачи № 1.

Допустим, что ось симметрии C_i -го порядка “входит” перпендикулярно чертежу через точку А. Точка В - ближайшая точка-узел кристаллической решетки. Естественно, через т. В также проходит ось вращения того же по-

рядка. Тогда $\angle ABA' = \frac{2\pi}{C_i}$. Точка А' ближайшая к т. В (по построению),

соответственно т. В' ближайшая к т. А'. Тогда $\angle BA'B' = \frac{2\pi}{C_i}$

Допустим, что ось симметрии $i = 5$ тогда $\angle BA'B' = 72^\circ$. Но в этом случае (так как угол меньше прямого) расстояние В'А будет меньше расстояния ВА, что противоречит условию, что т. В ближайшая к т. А. Таким образом, ось симметрии 5-го порядка быть не может.

Допустим, что существует ось симметрии больше 6 (т.е. 7, 8, и т.д.).

Тогда $\frac{2\pi}{7}$ будет меньше 60° и $AA' < BA$, что опять противоречит исходному

условию. Вывод: ось симметрии не может превышать 6 (ось симметрии – целое число).

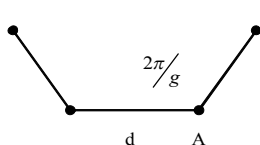


Рис. 8

Пусть ось симметрии равняется 6, тогда углы фигуры = 60° . Элементарная ячейка состоит из равносторонних треугольников. Таким же образом устанавливаем, что при $i = 2$ наша фигура совпадает сама с собой при повороте на 180° , ячейка-прямоугольник, при $i = 3$ ячейка шестиугольник, при $i = 4$ ячейка квадрат.

Задача № 2

Определить энергию взаимодействия двух дипольных молекул, расположенных в узлах кристаллической решетки.

Найти	U
Дано	$\vec{P}_1$ $\vec{r}$ $\vec{P}_2$

Решение

Свяжем СО с 1-м диполем (с кристаллом). Сделаем чертеж.

Известно (см. лекции по МТВ), что Ван-дер-Ваальсово (ВдВ) взаимодействие состоит из 3-х частей (каких?). Рассмотрим ту часть ВдВ, которую называют ориентационной (почему?).

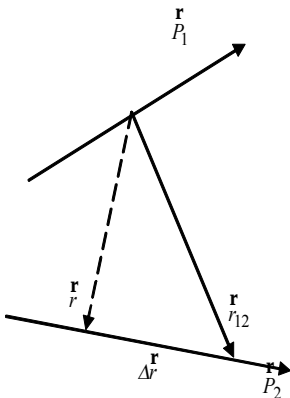


Рис.9

$$\varphi(\vec{r}_{12}) = \varphi(\vec{r}) + \frac{\Delta \vec{r}}{1!} \text{grad} \varphi(\vec{r}) + \frac{1}{2!} \sum \sum x_{\alpha} x_{\beta} \frac{\partial^2 \varphi(\vec{r})}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} + \dots \quad (2)$$

Подставим (2) в (1):

$$U = \varphi(\vec{r}) \int \rho(\Delta \vec{r}) dV' + \text{grad} \varphi(\vec{r}) \int \Delta \vec{r} \rho(\Delta \vec{r}) dV' + \dots = U_0 + U_1 + \dots \quad (3)^1$$

В нашей задаче заряды распределяются дискретно (воспользоваться определением диполя), причем суммарный заряд 2-го диполя равен нулю, следовательно, $U_0 = 0$. По определению $\Delta \vec{r} \rho(\Delta \vec{r})$ есть дипольный момент системы:

¹ См. Жирнов "Задачник по электродинамике". Задача № 4.

$$\int \Delta \mathbf{r} \rho(\Delta \mathbf{r}) dV' = \mathbf{\dot{P}} \quad (4)$$

Поскольку $\text{grad} \varphi = -\mathbf{\dot{E}}$, то энергия 2-го диполя в поле 1-го диполя равна:

$$U_1 = \mathbf{\dot{P}}_2 \mathbf{\dot{E}}_{12} \quad (5)$$

где $\mathbf{\dot{E}}_{12}$ – напряженность поля 1-го диполя в месте нахождения 2-го диполя (обратить внимание “учеников”, что физически безграмотно в электростатике говорить, что поле $\mathbf{\dot{E}}_{12}$ создается 1-м диполем).

Известно (из курса “Общая физика” или можно доказать), что

$$\varphi_{12} = \frac{(\mathbf{\dot{P}}_1 \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^3} \quad (6)$$

Составим

$$\begin{aligned} \mathbf{r} E_{12} &= -\nabla_2 \left(\frac{\mathbf{r} \mathbf{r}}{r_{12}^3} \right) = -\text{grad}_2 \left\{ \left(\mathbf{r} \mathbf{r} r_{12} \right) \cdot \frac{1}{r_{12}^3} \right\} = -\frac{1}{r_{12}^3} \text{grad}_2 (\mathbf{r} \mathbf{r} r_{12}) - (\mathbf{r} \mathbf{r} r_{12}) \times \\ &\times \text{grad} \frac{1}{r_{12}^3} = -\frac{\mathbf{r}}{r_{12}^3} + \left(\mathbf{r} \mathbf{r} r_{12} \right) \frac{3 \mathbf{r}}{r_{12}^5} \end{aligned}$$

$$\text{Т.к. } \nabla_2 (\mathbf{r} \mathbf{r} r_{12}) = \mathbf{\dot{P}}_1, \text{ то } \nabla \frac{1}{r_{12}^3} = -\frac{3 \mathbf{r}}{r_{12}^5} \quad (7)$$

Все выкладки сделать подробно. Выяснить, почему у grad_2 стоит индекс “2”.

Составим:

$$U_{12} = -\mathbf{\dot{P}}_2 \mathbf{\dot{E}}_{12} = \frac{(\mathbf{\dot{P}}_1 \mathbf{\dot{P}}_2)}{r_{12}^3} - \frac{3(\mathbf{\dot{P}}_1 \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^5} (\mathbf{r} \mathbf{r} r_{12}) \quad (8)$$

{Рассмотреть частные случаи, когда: 1) $\mathbf{\dot{P}}_1 \uparrow \uparrow \mathbf{\dot{P}}_2$; 2) $\mathbf{\dot{P}}_1 \perp \mathbf{\dot{P}}_2$ }

Задача № 3

Показать, что дисперсионная часть Ван-дер-Ваальсового взаимодействия имеет чисто квантовый характер и обусловлена наличием нулевой энергии.

Решение

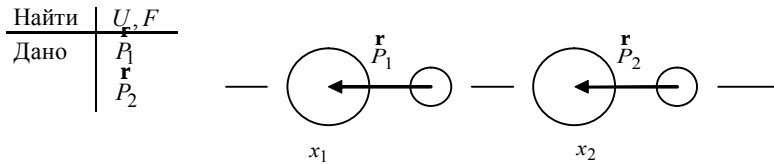


Рис.10

Свяжем СО с кристаллом. Для упрощения решения задачи расположим дипольные частицы так, как показано на чертеже. Будем считать, что положительные заряды диполей неподвижны, а электроны совершают колебания вдоль линии, на которой расположены диполи. На них действуют квазиупругие силы $F = -kx$.

В классическом приближении находим частоту колебаний ν_0

$$m \ddot{x} = -kx \Rightarrow \ddot{x} + \frac{k}{m} x = 0; \omega^2 = \frac{k}{m} \Rightarrow \nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}},$$

где m – масса электрона.

Потенциальная энергия осциллятора:

$$U = \frac{1}{2} kx^2 \quad (1)$$

В квантовом приближении необходимо решить уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} kx^2 \right) \Psi = 0 \quad (2)$$

Решение этого уравнения имеет вид:

$$E_n = h\nu_0 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

Энергия $E_0 = \frac{1}{2} h\nu_0$ называется нулевой энергией. Она отлична от нуля и при $T = 0$ К.

При сближении осцилляторов из-за взаимодействия изменяется характер колебания, которое происходит с частотами:

$$\nu_1 = \nu_0 \sqrt{1 - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 k r^3}} \quad \text{и} \quad \nu_2 = \nu_0 \sqrt{1 + \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 k r^3}} \quad (4)$$

Суммарная нулевая энергия осцилляторов равна:

$$E'_0 = \frac{1}{2} h\nu_1 + \frac{1}{2} h\nu_2 \quad (5)$$

Разлагая слагаемые в ряд Тейлора и ограничиваясь первыми 3-мя членами разложения (сделать разложение), получим:

$$E'_0 = h\nu_0 \left(1 - \frac{e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 k^2 r^6} \right) \quad (6)$$

Сравнивая с нулевой энергией невзаимодействующих осцилляторов, получим:

$$U = E'_0 - 2E_0 = - \frac{e^4 h\nu_0}{32\pi^2 \epsilon_0^2 k^2} \frac{1}{r^6} \quad (7)$$

Этой энергии соответствует притяжение (!):

$$F = - \frac{\partial U}{\partial r} = - \frac{3e^4 h\nu_0}{16\pi^2 \epsilon_0^2 k^2} \frac{1}{r^7} \quad (8)$$

Глава 2

Динамика кристаллической решетки

Задача № 4

Найти энергию взаимодействия ионов бесконечного одномерного кристалла состава XY (поваренная соль NaCl).

Найти	U
Дано	+e -e

Решение

1. Выберем СО: “Кристалл”.

Такая система отсчета удобна тем, что в ней мы будем учитывать только электростатические взаимодействия между структурными частицами и не будем учитывать магнитные.

2. Сделаем чертеж бесконечного одномерного кристалла.

3. Составим выражение

для энергии взаимодействия 2-х произвольных ионов.

Рассматривая ионы как сферические объекты, надо учесть кулоновское взаимодействие этих ионов как целых заряженных объектов, рассматривая их как точечные объекты.

Но, кроме этих сил взаимодействия классического характера, надо учесть взаимодействие электронных оболочек, которое носит квантовый обменный характер.

Итак:

$$U_{ik} = \pm \frac{e^2}{r_{ik}} + \frac{b}{r_{ik}^n} \quad (1)$$

где r_{ik} – расстояние между 2-мя любыми ионами. Знак «+» берется для одинаково заряженных ионов; знак «-» – для разноименно заряженных ионов; b и n – эмпирические константы.

Введем постоянную решетки r , тогда:

$$r_{ik} = r\alpha_{ik}, \text{ где } \alpha_{ik} - \text{целые числа} \quad (2)$$

Перепишем теперь формулу (1) с учетом формулы (2):

$$U_{ik} = \pm \frac{e^2}{r} \frac{1}{\alpha_{ik}} + \frac{b}{r^n} \frac{1}{\alpha_{ik}^n} \quad (3)$$

А теперь, суммируя (3) по всем $k \neq i$, получим выражение для энергии i -го иона в поле всех других ионов:

$$U_i = \sum U_{ik} = \pm \frac{e^2}{r} \sum_{k=i+1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_{ik}} + \frac{b}{r_n} \sum_{k=i+1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_{ik}^n} = -\frac{Ae^2}{r} + \frac{B}{r^n} \quad (4)$$

где

$$A = \sum_{\substack{k=i+1 \\ k \neq l}}^{\infty} \pm \alpha_{ik}^{-1}, B = b \sum_{\substack{k=i+1 \\ k \neq l}}^{\infty} \pm \alpha_{ik}^{-n} \quad (5)$$

Постоянная A получила название постоянной Маделунга. Если i -ый ион заряжен отрицательно, то плюсы и минусы в формуле (5) для постоянной Маделунга A относятся соответственно к положительно и отрицательно заряженным ионам.

Полная энергия решетки, содержащей N пар ионов, равна:

$$U = NU_i = -\frac{ANe^2}{r} + \frac{BN}{r^n} = -N \left(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n} \right)$$

Задача № 5

Вычислить постоянную Маделунга для бесконечной плоской сетки из положительных и отрицательных ионов.

Решение

Найти	A
Дано	$q = \pm e$
	r

Задача имеет математический характер, поэтому СО не выбирается. Сделаем чертеж.

По определению постоянная Маделунга равна:

	+	-	+	-	+
23	K	M	15	12	22
	-	+	-	+	-
15		E	1	F	7
	+	-	+	-	+
19			Г	1	16
	-	+	-	+	-
17		H		G	11
	+	3	+	4	-5
	-	N			M
24	18	+	19	-	20
				+	21

Рис.12

$$A = \sum_{i \neq k} \pm \alpha_{ik}^{-1*})$$

Рассмотрим сначала группу ионов внутри квадрата EFGH. При этом надо иметь ввиду, что ионы, расположенные на ребре, вносят лишь $\frac{1}{2}$, а находящиеся в вершине - $\frac{1}{4}$ (от той величины, которая остается

в числах суммы после вынесения общего множителя $\frac{e^2}{r}$.

Итак:

$$A_1 = 4 \frac{1/2}{1} - 4 \frac{1/4}{\sqrt{2}} = 1,2929$$

Учтем следующую квадратную группу ионов KLMN, при этом ионы группы EFGH дают полный вклад, а ионы, расположенные на ребре группы

KLMN (8 положительных и 4 отрицательных) – лишь $\frac{1}{2}$; расположенные в

вершинах - $\frac{1}{4}$. Надо учесть также расстояние новых ионов от центрального в единицах r (использовать теорему Пифагора).

$$\sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r \alpha_{ik}} = \frac{e^2}{r} \sum \frac{1}{\alpha_{ik}}$$

*) $\sum_{i \neq k} \frac{1}{\alpha_{ik}} = \frac{1}{1} - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} \dots$ (для линейной решетки)

Итак:

$$A_2 = \left(\frac{4}{1} - \frac{4}{\sqrt{2}} \right) + \left(\frac{8/2}{\sqrt{5}} - \frac{4/2}{2} - \frac{4/4}{\sqrt{8}} \right) = 1,6069$$

Аналогично

$$A_3 = 1,1716 + \left(\frac{8}{\sqrt{5}} - \frac{4}{2} - \frac{4}{\sqrt{8}} \right) + \left(\frac{4/2}{3} + \frac{8/2}{\sqrt{13}} - \frac{8/2}{\sqrt{10}} - \frac{4/4}{\sqrt{18}} \right) = 1,6105$$

$$A_4 = 1,1716 + 0,1635 + \left(\frac{4}{3} + \frac{8}{\sqrt{13}} - \frac{8}{\sqrt{10}} - \frac{4}{\sqrt{18}} \right) + \left(\frac{8/2}{\sqrt{17}} + \frac{8/2}{\sqrt{25}} - \frac{4/2}{4} - \frac{8/2}{\sqrt{20}} - \frac{4/4}{\sqrt{32}} \right) = 1,6135$$

Видно, что до второго знака после запятой значение А не изменяется. На этом значении А можно ограничиться.

Задача № 6

Выразить энергию ионной решетки, находящейся в равновесном состоянии, через постоянную решетки $d = r_0$.

Найти	$U(r_0)$	Решение
Дано	+ е	Свяжем CO с кристаллом. Воспользуемся формулой (5) предыдущей задачи
	- е	
	$d = r_0$	
	$U(r) = -N \left(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n} \right)$	$U(r) = -N \left(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n} \right) \quad (1)$

В равновесном состоянии $r = r_0$ энергия минимальна. Тогда

$$\left(\frac{dU}{dr} \right)_{r=r_0} = N \left(\frac{Ae^2}{r_0^2} - \frac{nB}{r_0^{n+1}} \right) = 0 \quad (2)$$

Откуда:

$$\frac{B}{r_0^n} = \frac{Ae^2}{nr_0} \quad (3)$$

Подставим в (1), записав выражение для равновесного состояния:

$$U(r_0) = -N \left(\frac{Ae^2}{r_0} - \frac{Ae^2}{nr_0} \right) = \frac{-NAe^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad (4)$$

Задача № 7

Определить показатель степени n в выражении для энергии ионной решетки $NaCl$, используя экспериментальное значение сжимаемости кристалла.

Найти	n
Дано	$U(r) = -N \left(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n} \right)$ $\mathbf{F} = -\frac{1}{V} \frac{dV}{dP} = 3,3 \cdot 10^{-12} \text{ дн}^{-1} \cdot \text{см}^2$ $A = 1,75$ $r_0 = 2,81 \text{ \AA} = 2,81 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} = 4,6 \cdot 10^{-9} \text{ ед. CGSE}$

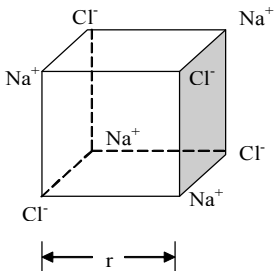
Решение

Выберем СО «Кристалл». Поскольку в решении задачи используется коэффициент сжимаемости, то начнем решение с определения этой величины:

$$\mathbf{F} = -\frac{1}{V} \frac{dV}{dP} \quad (1)$$

Для нахождения связи экспериментального значения величины $\mathbf{F}$ с энергией решетки, куда входит иско-

мый показатель степени n , нам необходимо связать множитель dV/dP с энергией решетки. Очевидно, нам необходимо вычислить объем кристалла V , который естественно связан с энергией $U(r)$. Сделаем чертеж одной элементарной ячейки.



Каждый узел принадлежит еще 7 ячейкам, сходящимся в этом узле, поэтому от каждого иона в рассматриваемую ячейку «приходится» лишь 1/8 часть. Поэтому объем элементарной ячейки $V_0 = r^3$ содержит лишь 1/2 NaCl. Следовательно, целая молекула NaCl занимает две элементарные ячейки с объемом $2r^3$, а весь кристалл, содержащий N молекул NaCl имеет объем $2Nr^3$:

$$V = 2Nr^3 \quad (2)$$

Чтобы составить производную dV/dP , воспользуемся формулой 1-го начала термодинамики:

$$dQ = dU + PdV \quad (3)$$

Будем рассматривать адиабатически изолированный кристалл, следовательно $dQ = 0$, и из формулы (3) следует:

$$P = -\frac{dU}{dV} \quad (4)$$

В формуле (4) установлена связь между величинами U и V , каждая из которых является функцией r . Чтобы использовать выражение (1), необходимо составить:

$$\frac{dV}{dP} = \frac{1}{dP/dV}$$

Из (4) следует:

$$\frac{dP}{dV} = -\frac{d}{dV} \left(\frac{dU}{dV} \right)$$

Таким образом, мы сможем связать экспериментальную величину с энергией решетки по формуле (1). Для дальнейших расчетов учтем, что U и V являются функциями от r . Тогда:

$$\begin{aligned} \frac{d^2U}{dV^2} &= \frac{d}{dV} \left(\frac{dU}{dV} \right) = \frac{d}{dV} \left(\frac{dU}{dr} \frac{dr}{dV} \right) = \frac{dr}{dV} \frac{d}{dV} \left(\frac{dU}{dr} \right) + \frac{dU}{dr} \frac{d^2r}{dV^2} = \\ &= \frac{dr}{dV} \frac{d}{dr} \left(\frac{dU}{dr} \right) \frac{dr}{dV} + \frac{dU}{dr} \frac{d^2r}{dV^2} = \left(\frac{dr}{dV} \right)^2 \frac{d^2U}{dr^2} + \frac{dU}{dr} \frac{d^2r}{dV^2} \end{aligned} \quad (5)$$

Учитывая, что в состоянии равновесия (см. график $U(r)$) энергия имеет минимальное значение, отбрасываем второе слагаемое, т.к. dU/dr (при $r = r_0$) = 0.

Составим члены первого слагаемого:

$$\frac{dr}{dV} = \frac{1}{dV/dr} = \frac{1}{d(2Nr^3)/dr} = \frac{1}{6Nr^2}$$

$$\left(\frac{d^2U}{dr^2}\right) = \frac{d}{dr}\left(\frac{dU}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\left(N\frac{Ae^2}{r^2} - \frac{nB}{r^{n+1}}\right) = N\left(-\frac{2Ae^2}{r^3} + \frac{n(n+1)Ae^2r^{n-1}}{r^{n+2}}\right) = -N\frac{Ae^2}{r^3}(1-n)$$

$$\left(\frac{dr}{dV}\right)^2 = \frac{1}{36N^2r^4}$$

где использовано значение B из задачи № 2.3.

Итак,

$$\ddot{r} = V \frac{d^2U}{dV^2} = 2Nr^3 \frac{1}{36N^2r^4} \frac{Ne^2A}{r^3} (n-1) = \frac{Ae^2(n-1)}{18r^4}, \text{ откуда} \quad (6)$$

Убедимся, что слагаемое $\frac{\ddot{r}18r^4}{Ae^2}$ есть число, для чего определим его размерность:

$$\frac{\ddot{r}18r^4}{Ae^2} = \frac{cm^4}{\frac{дн}{дн} \cdot cm^2 \cdot \frac{дн^{-1}}{дн^{-1}} \cdot cm^2} = 1$$

$$n = \frac{\ddot{r}18r^4}{Ae^2} + 1$$

Подстановка числовых значений в (6) дает, что $n \gg 9$.

Задача № 8

Как изменится наименьшее равновесное расстояние r_0 между ионами и энергия U решетки $NaCl$, если заряд иона возрастает вдвое?

Найти	$r_0(2e), U(2e)$
Дано	$r_0(e)$ $U(e)$ $q = \pm 2e$

Решение

1. Выберем СО «Кристалл».
2. Изобразим график $U(r)$

3. Воспользуемся формулой для $U(r)$, полученной в задаче № 1.2.

$$U(r) = -N \left(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n} \right) \quad (1)$$

В состоянии равновесия энергия имеет минимальное значение, что математически выражается так:

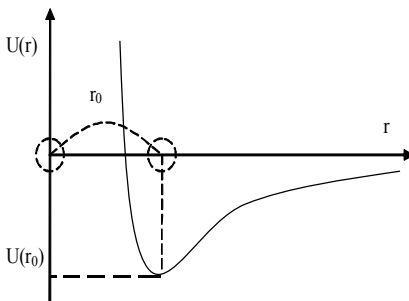


Рис. 13

$$\left. \frac{dU(R)}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \quad (2)$$

Составляем условие (2), получим значение для равновесного состояния $r_0(e)$:

$$\frac{Ae^2}{r_0^2} = \frac{nB}{r_0^{n+1}}, \text{ откуда } r_0(e) = \left(\frac{nB}{Ae^2} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (3)$$

На основании формулы (3), считая все величины, кроме заряда, неизменными, получим:

$$r_0(2e) = \left(\frac{nB}{4Ae^2} \right)^{\frac{1}{n-1}} = r_0(e) \frac{1}{4^{\frac{1}{n-1}}} \quad (4)$$

Составляем отношение $\frac{r_0(2e)}{r_0(e)}$, установим, что между двухзарядными ионами расстояние уменьшается по сравнению с $r_0(e)$:

$$\frac{r_0(2e)}{r_0(e)} = \frac{1}{4^{\frac{1}{n-1}}} = \frac{1}{4^{\frac{1}{8}}} \quad (5)$$

где использовано значение $n = 9$, полученное в задаче № 7. Так как

$$4^{1/8} > 1, \text{ то дробь } \left(\frac{1}{4}\right)^{\frac{1}{8}} < 1, \text{ т.е. } r_0(2e) < r_0(e).$$

Для решения второй части задачи воспользуемся другим выражением для $U(r)$, полученным в задаче № 6.

$$U(r_0) = -\frac{NAe^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) = U(r) \quad (6)$$

Тогда:

$$U(2e) = -\frac{4NAe^2}{r_0(2e)} \left(1 - \frac{1}{n}\right) = \frac{-4NAe^2}{r_0(e)4^{\frac{1}{1-n}}} \left(1 - \frac{1}{n}\right) = U(e) \frac{4}{4^{\frac{1}{1-n}}} \quad (7)$$

Составим

$$\frac{U(2e)}{U(e)} = 4^{\frac{n}{n-1}} = 4^{\frac{9}{8}} \quad (8)$$

Так как $4^{\frac{9}{8}} > 1$, то и $'U(2e)' > 'U(e)'$, причем $U < 0$

Задача № 9

Член $\frac{B}{r^n}$ в выражении энергии ионного кристалла

$$U(r) = -N \left(\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n} \right) \text{ часто заменяют членом вида } C \cdot \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right),$$

где ρ – некоторое фиксированное расстояние (какое?). Чему равно расстояние между ближайшими соседями, при котором эти два выражения эквивалентны друг другу?

Найти	r
Дано	$U(r)$
	$\frac{B}{r^n} = C \cdot \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right)$

Решение

1. Выберем СО «Кристалл» (почему?).
 2. Сделаем чертеж.
- (Объяснить как делается построение).

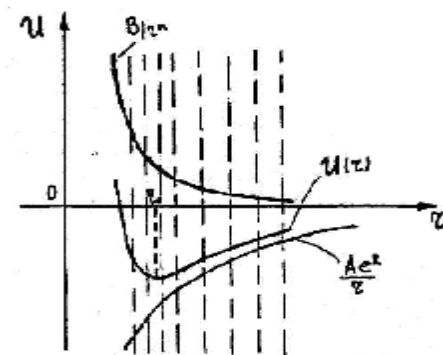


Рис. 14

Сделаем замену степенного члена экспоненциальным:

$$U(r) = -N \left(\frac{Ae^2}{r} - C \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right) \right) \quad (1)$$

Составим условие равновесного состояния:

$$\left. \frac{dU}{dr} \right|_{r=r_0} = \left(N \frac{Ae^2}{r_0^2} - \frac{1}{\rho} C \exp\left(-\frac{r_0}{\rho}\right) \right) \quad (2)$$

Из (2) определяем величину $C \cdot \exp\left(-\frac{r_0}{\rho}\right)$ и подставляем в (1) для случая $r=r_0$:

$$U(r_0) = -\frac{NAe^2}{r_0} \left(1 - \frac{\rho}{r_0} \right) \quad (3)$$

Ранее в задаче № 6 мы получили:

$$U(r_0) = -\frac{NAe^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad (4)$$

Сравнивая (3) и (4), находим: $r_0 = n\rho$ (5)

Глава 3. Дефекты кристаллической решетки.

Задача №10

Вычислить равновесную концентрацию дефектов Шоттки.

Найти	C	Решение
Дано	N n T U	Задача имеет непосредственный физический смысл, поэтому выбираем СО «Кристалл» (что это дает?). Поясним чертежом процесс образования дефектов Шоттки. (Обсудить, что такое дефект Шоттки, как он возникает, где он возникает, что происходит затем с вакантным узлом).

Для описания физических процессов используются разные термодинамические функции (обсудить, какие ТФ изучались в термодинамике и СФ). Каждая из них «удобна» при определенных условиях (вспомнить). Воспользуемся свободной энергией F (почему?). По определению она равна:

$$F = E - TS, \quad (1)$$

где $E = nU$, U – энергия, необходимая для образования одного дефекта Шоттки; n – число вакантных узлов при данной температуре T ;

$S = k \ln W$, где $W = \frac{(N + n)!}{n! N!}$ число перестановок узлов решетки (свободных и занятых), осуществляющих одно и то же состояние кристалла. При

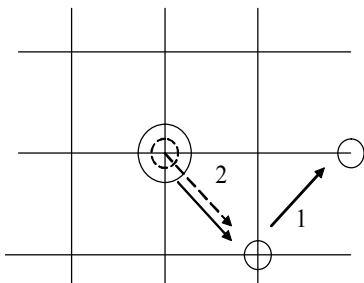


Рис. 15

$N \gg n$, можно воспользоваться приближенной формулой Стирлинга: $\ln x! = x \ln x - x$.

Откуда (при $n \ll N$)

$$\frac{n}{N} = C \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) \quad (2)$$

(Произвести расчет для $U = 1$ эВ, $T = 300$ К, $N = 10^{23}$ см⁻³) Построить график $n = n(T)$.

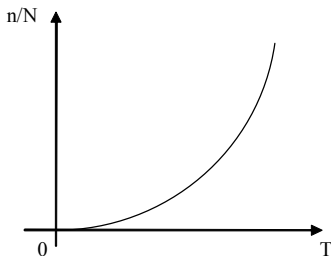


Рис.16

Задача №11

Вычислить равновесную концентрацию дефектов Френкеля.

Решение

Найти	C
Дано	N
	N'
	n
	T
	U

Задача имеет непосредственный физический смысл, поэтому выбираем СО «Кристалл» (почему такую СО?). Сделаем чертеж, чтобы пояснить процесс образования дефекта Френкеля, дать определение такого дефекта.

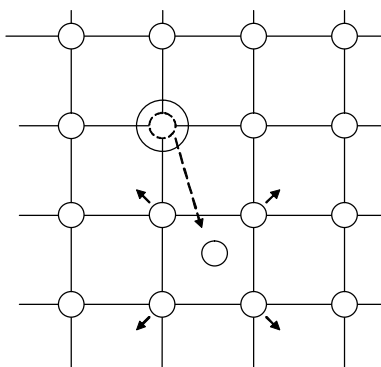


Рис.17

Для описания физических процессов используются разные термодинамические функции (какие и при каких условиях используется та или другая ТФ). Воспользуемся свободной энергией F (почему?). По определению она равна:

$$F = E - TS, \quad (1)$$

где $E = nU$, U – энергия образования одного дефекта; n – число дефектов Френкеля; в результате образования таких дефектов они могут занять N' междоузельных положений, а всего узлов решетки – N . Поэтому энтропию образования дефектов Френкеля можно записать следующим выражением:

$$S = k \ln W = k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} \frac{N'!}{n!(N'-n)!} \quad (2)$$

При $n \ll N$ и $n \ll N'$ можно воспользоваться формулой Стирлинга:

$$\ln x! = x \ln x - x \quad (3)$$

В состоянии термодинамического равновесия

$$\frac{\partial F}{\partial n} = 0 \quad (4)$$

Составим это условие, используя (1), (2), (3) (вычислить), получаем:

$$\frac{n^2}{(N-n)(N'-n)} = \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) \quad (5)$$

Если $n \ll N$ и $n \ll N'$, формула упрощается:

$$\frac{n}{\sqrt{NN'}} = \exp\left(-\frac{U}{2kT}\right) \quad (6)$$

В кубических кристаллах $N'=N$. Поэтому

$$n = Ne^{-\frac{U}{2kT}} \quad (7)$$

(Построить график функции (7)).

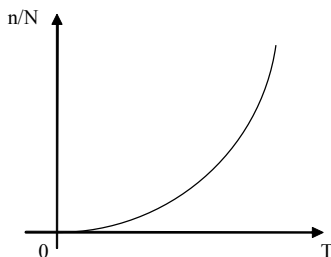


Рис.18

Задача №12

Показать, что у частицы, движущейся в бесконечно глубокой потенциальной яме, энергетические состояния дискретны.

1) Вспомним, что называется потенциальной ямой? (Потенциальная яма –ограниченная область пространства, в которой энергия частицы меньше, чем вне ее).

2) Какие примеры потенциальных ям вам известны? (Для электрона потенциальной ямой является область вокруг ядра атома, где проявляется кулоновское взаимодействие положительно заряженного ядра и отрицатель-

но заряженных электронов. Но в нашей задаче мы не выясняем природу сил, благодаря действию которых частица движется в потенциальной яме)

Запишем краткое условие задачи.

Решение

Найти	E_n
Дано	a
	$U = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$

СО «Потенциальная яма». (Чем удобен такой выбор СО?)

Сделаем чертеж в этой СО, используя только условие задачи.

Итак, мы считаем, что наша частица движется внутри потенциальной ямы. **Какие силы действуют на частицу, движущуюся внутри потенциальной ямы? Как называется такое движение?**

Такое движение называется свободным, т.е. частица внутри потенциальной ямы движется свободно.

Такое движение частицы в потенциальной яме описывается координатным уравнением Шредингера, с учетом того, что потенциальная энергия $U = 0$.

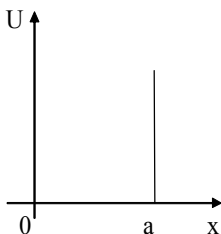


Рис.19

Запишем координатное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \Psi = E \Psi \quad (1)$$

Для свободной частицы $U = 0$ и, следовательно:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = E \Psi \quad (2)$$

Будем рассматривать одномерное прямолинейное движение частицы вдоль оси X, тогда:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (3)$$

примет более простой вид:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (4)$$

Подставим (4) в уравнение (2) и перенесем левую часть направо:

$$E\Psi + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 0 \quad (5)$$

Домножим уравнение (5) на $\frac{2m}{\hbar^2}$, получим:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0 \quad (6)$$

Обозначим $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$ (*), где k – волновое число, тогда:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0 \quad (7)$$

Решением уравнения (7) является функция вида:

$$\Psi(x) = A \sin kx$$

Проверим граничные условия. Т.к. яма бесконечно глубокая, то за ее пределы частица выйти не может. Это означает, что $\Psi(x) = 0$ при $x = 0$ и $x = a$

$$1) \Psi(0) = A \sin k0 = 0 \Rightarrow A \neq 0$$

$$2) \Psi(a) = A \sin ka = 0 \Rightarrow \text{т. к. } A \neq 0 \text{ то } \sin ka = 0$$

$$k_n a = \pi n, n = 1, 2, 3, \dots \Rightarrow k_n = \frac{\pi n}{a}, n = 1, 2, 3, \dots$$

Тогда подставим найденное выражение для k_n в выражение (*):

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = n^2 \frac{\pi^2}{a^2} \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ Почему $n \neq 0$? Если бы $n = 0$, то $E_n = 0$, а это означает,

что импульс $P = 0$ (т. к. $E = \frac{P^2}{2m}$), частица не движется, следовательно, мы

можем знать ее точную координату. Получается нарушение СНГ $\Delta p \Delta x = \hbar$.

Или, с другой стороны, $n = 0 \Rightarrow k = 0 \Rightarrow \sin kx = 0 \Rightarrow \Psi = 0$ даже внутри потенциальной ямы.

Достроим чертеж, указав энергетические состояния.

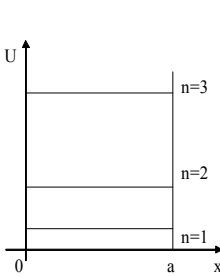


Рис.20

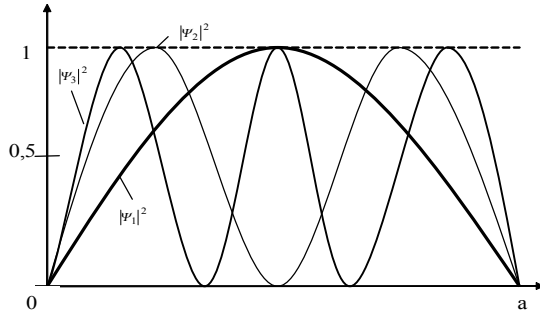


Рис.21

Состояние при $n = 1$ является основным, остальные состояния – состояния возбуждения.

Теперь составим соотношение $\Delta E / E_n$. Очевидно,

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{h^2 \pi^2}{2m a^2} (n+1)^2 - \frac{h^2 \pi^2}{2m a^2} n^2$$

$$\frac{\Delta E}{E_n} = \frac{h^2 \pi^2 / 2m a^2 (n^2 + 2n + 1 - n^2)}{h^2 \pi^2 / 2m a^2 n^2} = \frac{2n + 1}{n^2} \approx \frac{1}{n} \quad \text{Если } n \text{ велико, то}$$

относительное расстояние $\Delta E / E_n$ уменьшается, дискретность сглаживается, т.е. проявляется принцип соответствия.

Определим теперь вероятность нахождения частицы.

$$W(x) = |\psi(x)|^2 = A^2 \sin^2 kx = A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x$$

Изобразим графически три функции $|\psi(x)|^2$ при $n = 1, 2, 3$

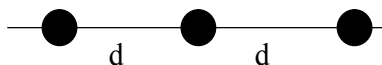
При больших n осцилляция происходит очень быстро, вероятность обнаружения частицы на участке, большем расстоянию между соседними узлами $\sim$ длине этого участка.

Задача № 13

Показать, что волновые функции электронов, движущихся в периодическом потенциальном поле решетки, могут иметь вид $\Psi = U(x)e^{ikx}$, где $U(x)$ функция с периодичностью решетки.

Найти	Ψ
Дано	$U(x) = U(x+d)$

Решение
Свяжем СО с кристаллом (что это упрощает в решении?).



Изобразим одномерную решетку с периодом d . Уравнение Шредингера в нашей задаче имеет вид:

Рис.22

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\Psi = 0 \quad (1)$$

Это дифференциальное уравнение второго порядка имеет два независимых решения Ψ_1 и Ψ_2 . Очевидно, что функции $\Psi_i(x+d)$ также будут решениями. Составим их.

$$\begin{aligned} \Psi_1(x+d) &= \alpha_{11}\Psi_1(x) + \alpha_{12}\Psi_2(x) \\ \Psi_2(x+d) &= \alpha_{21}\Psi_1(x) + \alpha_{22}\Psi_2(x) \end{aligned} \quad (2)$$

где α_{ik} - константы, определяемые величинами E и U . Искомое решение можно записать так:

$$\Psi = A\Psi_1(x) + B\Psi_2(x) = U(x)e^{ikx} \quad (3)$$

Или

$$\begin{aligned} U(x+d) \exp(ik(x+d)) &= A\Psi_1(x+d) + B\Psi_2(x+d) = \\ &= (\text{используя(2)}) = \\ &= (A\alpha_{11} + B\alpha_{21})\Psi_1(x) + (A\alpha_{12} + B\alpha_{22})\Psi_2(x) = \\ &= U(x) \exp(ikd) \exp(ikx) = \exp(ikd)(A\Psi_1(x) + B\Psi_2(x)) \end{aligned} \quad (4)$$

где использовано (3).

Приравнявая коэффициенты при $\Psi_1(x)$ и $\Psi_2(x)$ получаем систему уравнений для нахождения A и B :

$$\begin{aligned} A(\alpha_{11} - \exp(ikd)) + B\alpha_{21} &= 0 \\ A\alpha_{12} + B(\alpha_{22} - \exp(ikd)) &= 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Чтобы эта система имела нетривиальные решения (какие?), детерминант, составленный из коэффициентов при А и В, должен обращаться в нуль:

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11} - \exp(ikd) & \alpha_{21} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} - \exp(ikd) \end{vmatrix} = 0 \quad (6)$$

Это квадратное уравнение относительно $\exp(ikd)$ имеет два корня, соответствующие двум независимым решениям. Функции $\psi(x) = U(x)e^{ikx}$ называются функциями Блоха.

Задача № 14

Решить уравнение Шредингера для электрона, движущегося в периодической кристаллической решетке (задача Кронига-Пенни).

Найти	E
Дано	$V = 0$ при $0 \leq x \leq a$ $V = V_0$ при $a \leq x \leq a + b$

Решение

Выберем СО «Кристалл». Сделаем чертеж $V(x)$. Уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0 \quad (1)$$

в данной задаче допускает точное решение (в элементарных функциях).

Будем искать решение в виде функции Блоха:

$$\Psi(x) = u_k(x)e^{ikx} \quad (2)$$

где функция $u_k(x)$ периодична с периодом, равным $(a + b)$.

В результате подстановки (2) в (1) (сделать подробно) получаем:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - (E_1 - V))u(x) = 0, \quad (3)$$

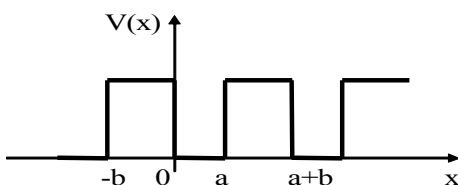


Рис. 23

где $E_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ - энергия свободного электрона.

В области $0 < x < a$, где $V = 0$, решение имеет вид:

$$u = C_1 e^{i(\alpha-k)x} + C_2 e^{-i(\alpha+k)x}, \quad (4)$$

$$\text{где } \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

В области $a < x < a+b$, где $V = V_0$, имеем

$$u = C_3 e^{(\beta-ik)x} + C_4 e^{-(\beta+ik)x} \quad (6)$$

Постоянные C_i определяются с помощью условия непрерывности в точках $x = 0$ и $x = a$ функции $u(x)$ и ее производной du/dx . Кроме того, требуем (свойство периодичности), чтобы $u(a) = u(-b)$. В результате для определения четырех постоянных C_i получаем следующую систему из 4-х уравнений (получить эти уравнения, составляя условия непрерывности и периодичности):

$$\begin{aligned} C_1 + C_2 &= C_3 + C_4 \\ i(\alpha-k)C_1 - i(\alpha+k)C_2 &= (\beta-ik)C_3 - (\beta+ik)C_4 \\ C_1 e^{i(\alpha-k)a} + C_2 e^{-i(\alpha+k)a} &= C_3 e^{-(\beta-ik)b} + C_4 e^{(\beta+ik)b} \\ i(\alpha-k)C_1 e^{i(\alpha-k)a} - i(\alpha+k)C_2 e^{-i(\alpha+k)a} &= \\ &= (\beta-ik)C_3 e^{-(\beta-ik)b} - (\beta+ik)C_4 e^{(\beta+ik)b} \end{aligned} \quad (8)$$

Система уравнений (8) является однородной. Условием существования ненулевого решения является равенство нулю определителя, составленного из коэффициентов C_i (выписать этот определитель и раскрыть).

Вводя соответствующие обозначения, получаем:

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} sh(\beta b) \sin(\alpha a) + ch(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos k(a+b) \quad (9)$$

Для упрощения последующих рассуждений еще более идеализируем выбранный нами потенциал. Будем стремиться ширину барьера b к нулю, а высоту его V_0 к бесконечности, но таким образом, чтобы произведение $V_0 b$ оставалось конечным. Сначала упрощаем гиперболические множители. Получаем:

$$P \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka, \quad (10)$$

где $P = \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ \beta \rightarrow \infty}} \frac{\beta^2 ab}{2}$

$$\left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \beta b = \frac{\beta^2 2\alpha\beta}{2\alpha\beta} - \frac{\alpha^2 \beta b}{2\alpha\beta} = \frac{\beta^2 ba}{2\alpha a} = \frac{\beta^2 ba}{2} \frac{1}{\alpha a} = \frac{P}{\alpha a} \right)$$

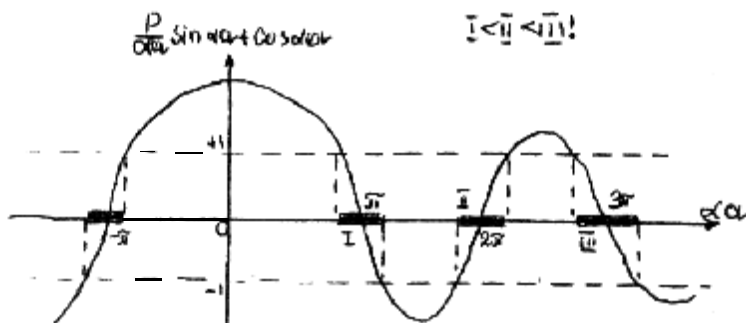


Рис.24

Правая часть этого уравнения может принимать только значения, заключенные между $+1$ и -1 . Следовательно, в левой части величина αa может принимать только такие значения, при которых левая часть не выходит из указанных пределов. Это приводит к тому, что энергия может принимать только определенные значения.

Представим функцию (10) графически.

Жирными линиями отмечены значения α , а т.к. $\alpha = (2mE/h^2)^{1/2}$, то мы получаем допустимые значения энергии E . Эти допустимые области значений E получили название «энергетические зоны». Разрешенные энергетические полосы отделены друг от друга запрещенными областями.

(Сделать анализ двух предельных случаев: а) $P = 0$; б) $P = \infty$)

Задача №15

Показать, что при воздействии на кристалл внешнего электрического поля, движение электрона происходит так, как будто бы

его масса является сложной функцией его энергии: $m^* = \frac{h^2}{d^2\varepsilon/dk^2}$

Найти	m^*
Дано	$\mathbf{E}$ ε $\Psi = \exp[i(\omega t - kx)] =$ $= \exp \frac{i}{h}(\varepsilon t - px)$

Решение

Так как электрон движется в кристалле, то целесообразно выбрать СО «Кристалл».

Будем рассматривать одномерное движение. Для описания состояния электрона нам потребуются формулы де-Бройля: $\varepsilon = \hbar\omega$ и

$$p = \hbar k$$

Будем измерять заряд электрона в единицах $e_0 = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл, тогда уравнение движения можно записать так:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{E}, \text{ где } \mathbf{E}_{(\text{напряженность_электрического_поля})} = \frac{\mathbf{F}}{e_0}.$$

Составим формулу ЗСПЭ, учитывая, что энергия электрона изменяется за счет энергии электрического поля:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) \text{ или } d\varepsilon = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) dt \quad (*)$$

Проведем преобразования этого равенства, используя формулы де-Бройля (**внимание! далее под $\hbar$ нужно понимать $\hbar$**):

$$\mathbf{v} = \text{grad}_k \omega \frac{\hbar}{h} = \frac{1}{h} \text{grad}_k \hbar \omega = \frac{1}{h} \text{grad}_k \varepsilon$$

$$\mathbf{E} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d}{dt} \hbar k = \hbar \frac{dk}{dt}$$

С другой стороны:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \frac{d}{dt} \frac{1}{h} \text{grad}_k \varepsilon = \frac{1}{h} \text{grad}_k \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{h} \text{grad}_k \text{grad}_k \varepsilon \frac{dk}{dt} = \\
 &= \frac{1}{h} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \frac{dk}{dt} \frac{h}{h} = \frac{1}{h^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{1}{h^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \mathbf{E}
 \end{aligned}$$

Сравнивая это выражение для $\ddot{a}$ с уравнением Ньютона $a = \frac{E}{m^*}$,
получаем:

$$m^* = \frac{h^2}{d^2 \varepsilon / dk^2}$$

Задача № 16 (механическая аналогия «эффективной массы»)

Рассматривая движение взвешенного шарика в двух разнородных жидкостях с непрерывным переходным слоем между ними, установивить аналог «эффективной массы».

Найти	m^*
Дано	ρ_1 ρ_2 m $\rho_1 < \rho < \rho_2$ V

Решение

Свяжем СО с сосудом. Сделаем чертеж.

На шарик действуют две силы:

Сила тяжести: $P = mg = \rho V g$;

Сила Архимеда: $F = \rho_{ж} V g$, где $\rho_{ж}$ - плотность жидкости в том месте, где находится шарик, она изменяется в пределах от ρ_1 до ρ_2 . Формула 2^о закона Ньютона запишется так:

$$a = \frac{P - F}{m} \quad (1)$$

Это же уравнение движения можно записать

$$a = \frac{P}{m^*} \quad (2)$$

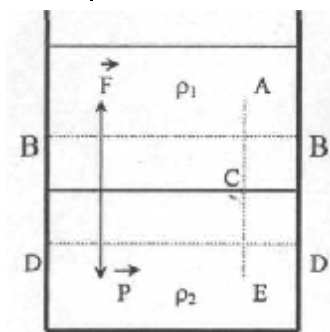


Рис.25

где m^* - формальная (не имеющая физического смысла) масса шарика, она имеет размерность массы, назовем ее «эффективной массой» шарика.

Приравняем выражения (1)и(2)и выразим m^* :

$$\frac{P - F}{m} = \frac{P}{m^*}, \text{ откуда } m^* = \frac{mP}{P - F}$$

Введем характеристики жидкостей и шарика:

$$m^* = \frac{\rho V g}{\rho V g - \rho_{жс} V g} m = \frac{\rho m}{\rho - \rho_{жс}} \quad (4)$$

Рассмотрим характер движения шарика с эффективной массой m^* под действием силы P . Между точкой А и уровнем ВВ плотность жидкости $\rho_{жс} \equiv \rho_1$, причем по условию $\rho_{жс} < \rho : (\rho - \rho_{жс}) > 0$. Поэтому $m^* > 0$, ускорение $\frac{F}{m^*}$ совпадает по направлению с направлением вектора $\vec{P}$ (см. Рис. 26)). Скорость шарика нарастает $v = at$. Так будет продолжаться до уровня ВВ. Затем плотность жидкости будет увеличиваться (движение происходит в переходном слое!). Разность $(\rho - \rho_{жс})$, оставаясь положительной величиной, численно будет уменьшаться, следовательно m^* будет увеличиваться, поэтому, согласно (2), ускорение, оставаясь положительным, численно будет уменьшаться. Скорость по-прежнему будет расти, но скорость роста (ускорение!) падает.

В точке С плотность жидкости- сравнивается с плотностью шарика, поэтому при $\rho_{жс} \rightarrow \rho$ разность $(\rho - \rho_{жс})$ стремится к нулю, а $m^* \rightarrow +\infty$. В точке С ускорение (по(2)) исчезнет $a = 0$, скорость v достигает максимального значения.

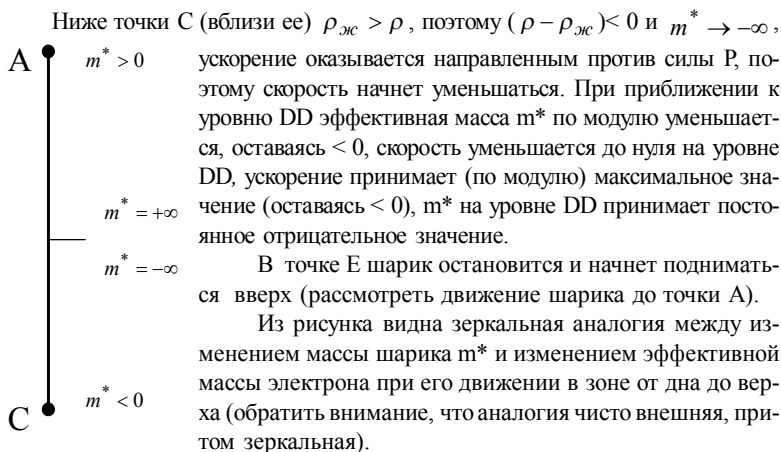


Рис. 26

Глава 4.Сверхпроводимость и сверхтекучесть

Задача №17

Объяснить появление эффекта Мейсснера.

Решение

Найти	$B = B(z)$	Свяжем СО с образцом сверхпроводника (в чем смысл такого выбора СО?). Вспомним суть
Дано	$B_x = \text{const} = B_0$ $B_y = 0$	эффекта Мейсснера. Это явление было обнаружено в 1933 году и заключалось в том, что при достаточно малой напряженности внешнего магнитного поля магнитный поток не проникает внутрь сверхпроводника, то есть сверхпроводник является идеальным диамагнетиком.

Теорию эффекта предложили в 1935 году Ф. Лондон и Г. Лондон. Рассмотрим ее упрощенный вариант.

Первое уравнение Максвелла можно записать так (используя (6) уравнение Максвелла): $\text{rot} \vec{B} = \mu \mu_0 \vec{j}$

Возьмем от обеих сторон операцию ротора:

$$\text{rot} \text{rot} \vec{B} = \mu \mu_0 \text{rot} \vec{j}, \quad (2)$$

или $\text{grad} \text{div} \vec{B} - \Delta \vec{B} = \mu \mu_0 \text{rot} \vec{j}$

Но на основании третьего уравнения Максвелла $\text{div} \vec{B} = 0$ и мы получаем

$$\Delta \vec{B} = -\mu \mu_0 \text{rot} \vec{j} \quad (3)$$

По определению

$$\vec{j} = en \vec{v} \quad (4)$$

Составим $\frac{d\vec{j}}{dt} = en \frac{d\vec{v}}{dt}$. Но $m \frac{d\vec{v}}{dt} = e\vec{E}$, тогда $\frac{d\vec{j}}{dt} = \frac{e^2 n}{m} \vec{E}$

Снова возьмем операцию rot и поменяем порядок действий :

$$\frac{d}{dt} \text{rot} \vec{j} = \frac{e^2 n}{m} \text{rot} \vec{E}$$

Воспользуемся вторым уравнением Максвелла: $\text{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\frac{d\vec{B}}{dt}$,

тогда $\frac{d}{dt} \text{rot} \vec{j} = -\frac{e^2 n}{m} \frac{d\vec{B}}{dt}$, откуда $\text{rot} \vec{j} = -\frac{e^2 n}{m} \vec{B}$ (5)

Подставим в (3):

$$\Delta \vec{B} = \mu \mu_0 \frac{e^2 n}{m} \vec{B}, \quad (6)$$

(постоянная интегрирования $\equiv 0$. Почему?)

Пусть магнитное поле направлено вдоль поверхности (ось Ox) ($B_y \equiv 0$).

Из (2) следует, что $\frac{\partial B_x}{\partial x} \equiv 0$, следовательно B_x может зависеть только от z .

Уравнение (6) примет вид: $\frac{\partial^2 B_x}{\partial z^2} = \frac{1}{\lambda^2} B_x$, где $\frac{1}{\lambda^2} = \mu \mu_0 \frac{e^2 n}{m}$. Решением найденного уравнения будет функция

$$B_x(z) = B_x(0) e^{-\frac{z}{\lambda}} \quad (7)$$

(Сделать анализ (7), подсчитать λ для алюминия, $\mu = 1,000021$).

Глава 5. Плазма

Задача №18

Найти равновесное распределение зарядов в плазме.

Найти	$\overline{\varphi}$	Решение
Дано	$+e$ $-e$ n_1 n_2	Плазма – это ионизированный газ, в котором концентрации положительных и отрицательных зарядов равны. Свяжем СО с каким-либо положительным зарядом. Поскольку мы не рассматриваем движение частиц плазмы и ее как целое, назовем СО «Плазма».

Будем считать плазму изотропной, поэтому электростатический потенциал в некоторой точке будет функцией только r – расстояния от начала координат (положительно заряженной частицы) до точки наблюдения.

Кулоновское взаимодействие между частицами плазмы приводит к появлению в объеме плазмы некоторого среднего электрического поля, характеризуемого потенциалом $\bar{\varphi}$. Покажем, что $\bar{\varphi}$ удовлетворяет уравнению Пуассона, решим его в данной задаче.

Выберем в объеме плазмы элементарный объем dV , находящийся на расстоянии r от начала координат. Так как каждый ион плазмы находится во внешнем поле остальных заряженных частиц, то можно (и нужно) воспользоваться распределением Больцмана—распределением для положительно заряженных ионов

$$n_1 dV = \bar{n}_1 \exp\left(-\frac{e\bar{\varphi}}{kT}\right) dV \quad (1)$$

и для отрицательно заряженных ионов и электронов

$$n_2 dV = \bar{n}_2 \exp\left(\frac{e\bar{\varphi}}{kT}\right) dV,$$

где $\bar{n}_1$ и $\bar{n}_2$ - средние числа соответствующих ионов в единице объема (при $T > ?$).

Определим избыточный заряд частиц, окружающих выделенный положительно заряженный ион, с которым (совершенно произвольно) было связано начало координат

$$de = \left[\bar{n}_1 e \cdot \exp\left(-\frac{e\bar{\varphi}}{kT}\right) - \bar{n}_2 e \cdot \exp\left(\frac{e\bar{\varphi}}{kT}\right) \right] dV \quad (3)$$

Этот заряд de обусловлен тем, что вероятность нахождения в элементе объема dV ионов разного знака неодинакова. Однако, в равновесной плазме никакого ионного облака вокруг каждого из ионов не существует. Это следует хотя бы из того, что выделение иона в начале координат было сделано совершенно произвольно, и никаких выделенных ионов в равновесной плазме не существует. Имеется лишь некоторая вероятностная корреляция между расположением любой пары ионов в силу их электростатического взаимодействия. Здесь уместно провести сравнение с расположением разноименных ионов в ионной кристаллической решетке NaCl: вокруг каждого иона Na^+ на ближайшем расстоянии – на расстоянии постоянной решетки, находятся шесть ионов Cl^- , но вместе с тем, каждый из этих ионов Cl^- окружен шестью ионами Na^+ .

Средняя плотность заряда в точке, находящейся на расстоянии r от начала координат будет:

$$\bar{\rho}(r) = \left[\bar{n}_1 \cdot \exp\left(-\frac{e\bar{\varphi}}{kT}\right) - \bar{n}_2 \cdot \exp\left(\frac{e\bar{\varphi}}{kT}\right) \right]. \quad (4)$$

Считая, что $e\bar{\varphi} \ll kT$ (что является условием идеальности плазмы), разложим экспоненты в ряд Тейлора и ограничимся первыми двумя членами разложения. Тогда:

$$\bar{\rho} \approx -\frac{e^2(\bar{n}_1 + \bar{n}_2)}{kT} \bar{\varphi}, \quad (5)$$

где учтена нейтральность плазмы $(\bar{n}_1 - \bar{n}_2) = 0$.

Составим уравнение Пуассона для $\bar{\varphi}$:

$$\Delta \bar{\varphi} = -\frac{\bar{\rho}}{\varepsilon_0}, \quad (6)$$

или

$$\Delta \bar{\varphi} = \frac{e^2(\bar{n}_1 + \bar{n}_2)}{\varepsilon_0 kT} \bar{\varphi} = \chi^2 \bar{\varphi} \quad (7)$$

$$\text{где } \chi^2 = \frac{e^2(\bar{n}_1 + \bar{n}_2)}{\varepsilon_0 kT} = \frac{e^2 \bar{N}}{\varepsilon_0 kT} \quad (8)$$

Уравнение (7) обычно в теории плазмы называют уравнением Пуассона-Больцмана, оно является основным уравнением равновесной идеальной плазмы.

Учитывая сферическую симметрию задачи, запишем уравнение (7) так:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \bar{\varphi} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \bar{\varphi}) = \chi^2 \bar{\varphi}, \quad (9)$$

что можно проверить, преобразуя левую сторону радиального уравнения Пуассона:

Введем новую переменную:

$$f = r \bar{\varphi} \quad (10)$$

Тогда уравнение (9) запишется так :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} = \chi^2 f, \quad (11)$$

Его решением является функция вида:

$$f = Ae^{-\chi r} + Be^{\chi r} \quad (12)$$

что легко проверить прямой подстановкой.

В силу конечности $\bar{\varphi}$ при $r \rightarrow \infty$ необходимо положить коэффициент В равным нулю.

Итак,

$$\bar{\varphi} = \frac{A}{r} e^{-\chi r}. \quad (13)$$

Определим постоянную А, учитывая, что вблизи начала координат формула (13) должна совпадать с кулоновским полем заряда, расположенного в начале координат, то есть:

$$\varphi_{r \rightarrow 0} = \frac{A}{r} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r},$$

$$\text{откуда} \quad A = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \quad (14)$$

Окончательно решение уравнения (7) запишется так:

$$\bar{\varphi} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-\chi r} \quad (15)$$

Величина χ^{-1} , определяющая убывание потенциала $\bar{\varphi}$ в e раз, называется дебаевским радиусом.

Потенциал (15) складывается из потенциала выделенного иона в точке О и из потенциала, обусловленного полем остальных ионов плазмы $\bar{\varphi}$:

$$\bar{\varphi} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} + \varphi, \quad (16)$$

Из последних двух формул следует, что:

$$\varphi = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} (e^{-\chi r} - 1) \quad (17)$$

Решим обратную задачу: по известному потенциалу (17), определим плотность зарядов, обуславливающих этот потенциал:

$$\bar{\rho} = -\epsilon_0 \Delta \bar{\varphi} = -\epsilon_0 \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \Delta \frac{\exp(-\chi r) - 1}{r}, \text{ где } \Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r.$$

Проведя элементарные действия, получим

$$\bar{\rho} = \frac{e\chi^2}{4\pi r} e^{-\chi r} \quad (18)$$

Выражение (18) показывает, что вблизи иона зарядом $+e$ образуется ионное облако, имеющее противоположный знак заряда.

Полный заряд области равен:

$$e' = \int_0^{\infty} \bar{\rho} dV = - \int_0^{\infty} \frac{e\chi^2}{4\pi r} e^{-\chi r} r^2 dr 4\pi = -e\chi^2 \int_0^{\infty} r e^{-\chi r} dr = -e \quad (19)$$

то есть вокруг данного положительно заряженного иона с большой вероятностью группируются ионы противоположного знака. Но полный заряд ионов облака, окружающих любой заданный ион, в точности равен заряду данного иона, но противоположен по знаку.

Наличие вокруг иона облака зарядов противоположного знака приводит к ослаблению (к экранировке) поля иона. Поэтому потенциал экранированного поля вблизи него убывает быстрее, чем кулоновский потенциал. Величина

$\frac{1}{\chi}$ представляет средний радиус ионного облака вокруг данного иона.

Задача № 19

В плазме могут возникать колебания различной физической природы (электрические, электромагнитные, магнитодинамические и др.). определить частоту электростатических, или плазменных колебаний.

		Решение
Найти	ω_n	Свяжем СО с сосудом, в котором находится плазма. Придумаем следующий мысленный эксперимент. Выделим в объеме плазмы две параллельно расположенных площадки S , расстояние между которыми l . Пусть плазма состоит из однозарядных частиц $\pm e$, концентрация которых N_0 .
Дано	ε_0	
	N_0	
	m	
	e	

Предположим, что удалось разделить заряды по их знаку в объеме между “пластинами” и поместить все положительные заряды на одну “пластину”, а все отрицательные – на другую. По существу, мы получили заряженный плоский конденсатор, на пластинках которого сосредоточены заряды

$\pm N_0 eSl$, его емкость $C = \frac{\varepsilon_0 S}{l}$. Поделив заряд на емкость, определим разность потенциалов между пластинами:

$$\Delta\varphi = \frac{N_0 el}{\varepsilon_0}$$

с другой стороны:

$$E = \left| \frac{\Delta\varphi}{l} \right| = \frac{N_0 el}{\varepsilon_0 l}$$

Естественно, в реальной плазме никаких “пластин” не существует. Но смещение зарядов разных знаков, которые всегда происходит в плазме из-за хаотичного движения частиц, приводит к появлению сил, стремящихся это смещение ликвидировать. Сила, действующая на одну частицу с массой m , равна:

$$F = eE = \frac{N_0 e^2 l}{\varepsilon_0}$$

Под действием этой силы частица приобретает ускорение:

$$a = \frac{F}{m} = \frac{N_0 e^2 l}{m \varepsilon_0}$$

Обратим внимание, что сила, и ускорение пропорциональны смещению l , а направлены так, чтобы восстановить равновесие в плазме. Мы получили типичные условия возникновения **гармонических колебаний** с частотой:

$$\omega_d^2 = \frac{N_0 e^2}{m \varepsilon_0}$$

Частота ω_d – это плазменная, или Ленгмюрова частота электростатических колебаний в плазме. На квантовом языке плазменным колебаниям сопоставляется квазичастица – **плазмон**.

Герман Аронович Розман

**Задачи
по теоретической физике**

Технический редактор А.Ф. Кирсанов

Издательская лицензия **ИД №06024** от 09.10.2001 года.

Подписано в печать 15.05.2005 г. Формат 60х90/16.

Объем издания в усл.печ.л. . Тираж 100 экз. Заказ №

Псковский государственный педагогический университет им. С.М.Кирова,
180760, г. Псков, пл. Ленина, 2.

Редакционно-издательский отдел ПГПУ им. С.М.Кирова,
180760, г. Псков, ул. Советская, 21, телефон 2-86-18. E-mail: rio@psksu.ru