

Úloha: Einsteinov model tepelnej kapacity tuhých látok

- (1) V grafe zobrazte závislosť molárnej tepelnej kapacity tuhej látky od teploty podľa Einsteinovho modelu. Využite pri tom bezrozmerné veličiny: na os y vyneste kapacitu v násobkoch $3R$ a na x -ovú os teplotu v násobkoch $\hbar\omega_0/k_B$.
 - (2) Na základe experimentálnej hodnoty tepelnej kapacity kremíka a hliníka pri zvolenej teplote odhadnite ich frekvencie ω_0 v ich Einsteinovom modeli. Potrebné dáta pre kremík nájdete na <https://webbook.nist.gov/cgi/inchi/InChI%3D1S/Si> , pod položkou „Condensed phase thermochemistry data“. Vyhľadajte aj hodnotu pre hliník v rámci tohto istého zdroja.
 - (3) Pri akej teplote bude tepelná kapacita kremíka a hliníka polovičná voči Dulongovmu – Petitovmu vzťahu?
 - (4) Pre kremík aj hliník určte ich Debyeove frekvencie na základe koncentrácie ich atómov a rýchlosti šírenia zvuku v týchto látkach. Uveďte zdroje údajov, ktoré ste použili. Ak je rýchlosť šírenia v longitudinálnom smere v_l oveľa menšia ako v tranzverzálnom v_t , potom použite ich vhodnú strednú hodnotu $1/v = (1/v_l + 2/v_t) / 3$. Vysvetlite, prečo práve takéto spriemerovanie má zmysel pre účel vyčíslenia hustoty stavov (módov) vln.
 - (5) Porovnajte Debyeovu a Einsteinovu frekvenciu pre obe látky a zamyslite sa, či rozdiel medzi nimi dáva zmysel. Svoje porozumenie napíšte.
-

Riešenie časti (1) a (2) pomocou programu v jazyku Python:

```
1 # importing the required modules
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import numpy as np
4 from scipy.optimize import fsolve as fsolve
5
6 def Kapacita(x):
7     C = x**(-2) * np.exp( 1.0 / x ) / ( np.exp( 1.0 / x ) - 1 )
8     **2
9     return C
10
11 # pomocna funkcia na hladanie x zo zadaneho C
12 def Kapacita_minus_C(x,C_rel):
13     zero = Kapacita(x) - C_rel
14     return zero
15
16 # x axis values
17 x = np.linspace(0.01,3.0,100)
18 # corresponding y axis values
19 y = Kapacita(x)
20
21 # plotting the points
22 plt.plot(x, y)
23
24 # naming the x axis
25 plt.xlabel('x')
26 # naming the y axis
27 plt.ylabel('C (3R)')
28
29 plt.grid(linewidth=1)
30
31 # giving a title to my graph
32 plt.title('Einsteinov model kapacity' )
33
34 # function to show the plot
35 plt.show()
36
37 # tri potrebne univerzalne konstanty v S.I.
38 R = 8.314
39 hbar = 1.0546e-34
40 kB = 1.381e-23
41
42 ## Vypocet Einsteinovej frekvencie zo zadanej kapacity pri
43     danej teplote
```

```

43 # molova tepelna kapacita Si pri T=300K
44 CT = 20.05      # J/(K.mol)
45 T = 300.0       # K
46
47 # kapacita v nasobkoch Dulong-Petit
48 C_rel = CT/(3*R)
49 x = fsolve(Kapacita_minus_C,0.5,C_rel)
50 omegaE = T*kB/(x*hbar)
51 print("omegaE = %5.3E Hz" % (omegaE) )

```

Časti (2) pre Al a časť (3) vyriešite malou úpravou programu.