Неделя №2
Теплоёмкость твёрдого тела. Модель Дебая

Драчов Ярослав
Факультет общей и прикладной физики МФТИ

25 марта 2021 г.

2.27.

Решение.

Первая зона Бриллюэна для квадратной решётки также имеет форму квадрата со стороной $2\pi/a$. Максимальная частота

$$\omega_{\max} = \omega\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right) = 2\sqrt{2}\sqrt{\frac{\gamma}{M}}.$$

Длинноволновой предел

$$\omega^2 = 2\frac{\gamma}{M}\left(2 - \left(1 - (K_x a)^2/2\right) - \left(1 - (K_y a)^2/2\right)\right) = \frac{(Ka)^2\gamma}{M}$$

изотропен (от направления не зависит), скорость звука $s = a\sqrt{\dfrac{\gamma}{M}}$.

В модели Дебая заменяем спектр линейным изотропным $\omega = sK$ и ограничиваем его сверху так, чтобы полное число колебаний сохранилось:

$$N = \frac{S\pi k_D^2}{(2\pi)^2}$$

где N — число атомов, а S — площадь решётки.

$$k_D^2 = \frac{4\pi}{a^2}.$$

$$k_D = \frac{2\sqrt{\pi}}{a} \approx \frac{3{,}545}{a} > \frac{\pi}{a} = k_{Br}$$

и для частоты

$$\omega_D = \frac{2\sqrt{\pi}s}{a} = 2\sqrt{\pi}\sqrt{\frac{\gamma}{M}} > \omega_{\max}.$$

Т2-1.

Решение. Нужно, во-первых, перейти к теплоёмкости на примитивную ячейку. У NaCl гранецентрированная решётка с четырьмя формульными единицами на элементарный куб. То есть, примитивная ячейка имеет объём $1/4$ элементарного куба:

$$C_{\text{прим}} = \frac{d^3}{4}C.$$

Считаем, что температура достаточно низка для применения низкотемпературного приближения:

$$C_{\text{прим}} = \frac{C_{\text{Дебай}}}{N} \approx \frac{12}{5}\pi^4 k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3.$$

$$\Theta = T\left(\frac{48\pi^4}{5}\frac{k_B}{Cd^3}\right)^{1/3} \approx 315 \text{ K}.$$

Далее ищем скорость звука

$$\Theta = \frac{\hbar s}{k_B}\left(6\pi^2 n\right)^{1/3} = \frac{\hbar s}{k_B}\left(6\pi^2\frac{4}{d^3}\right)^{1/3} = \frac{2\sqrt[3]{3\pi^2}\hbar s}{dk_B},$$

при вычислении дебаевской температуры не забываем, что кубическая ячейка не примитивная.

Откуда окончательно для усреднённой скорости звука

$$s = \frac{k_B\Theta d}{2\sqrt[3]{3\pi^2}\hbar} = 3{,}76\cdot 10^5\,\frac{\text{см}}{\text{с}}.$$

2.47.

Решение. При нулевых граничных условиях (закреплённая граница, т. е. амплитуда колебаний на границе равна нулю) смещение U может быть записано в виде

$$U = Ae^{i\omega_n t}\sin\frac{\pi x}{L}n_x\cdot\sin\frac{\pi y}{L}n_y\cdot\sin\frac{\pi z}{L}n_z,$$

а частота n-го колебания ω_n равна

$$\omega_n^2 = \left(\frac{\pi s}{L}\right)^2\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right).$$

Числа n_x, n_y, n_z принимают все целочисленные значения $\geqslant 1$. Энергия колебаний

$$\mathcal{E} = 3\sum_{n_x,n_y,n_z}\frac{\hbar\omega_n}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_n}{k_{\text{Б}}T}-1\right)},$$

где коэффициент «3» — это три независимые поляризации. При больших L сумма может быть заменена интегралом

$$\mathcal{E}(T) = \int\limits_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} d\omega\mathcal{D}(\omega)n(\omega,T)\hbar\omega, \quad \text{где } \mathcal{D}(\omega) = \frac{3}{2}\frac{V\omega^2}{\pi^2 s^3},$$

откуда энергия единицы объёма кластера

$$u_{\text{класт}}(T) = \frac{\mathcal{E}}{V} = \frac{3}{2}\frac{\hbar}{\pi^2 s^3}\int\limits_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}}\frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_{\text{Б}}T}-1} = \frac{3}{2}\frac{(k_{\text{Б}}T)^4}{\pi^2\hbar^3 s^3}\int\limits_{x_{\min}}^{x_{\max}}\frac{x^3dx}{e^x-1}.$$

Здесь $\omega_{\max} = \frac{\pi s}{L}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)_{\max} \simeq \frac{\pi s}{L}N$, $L = Na$. Точное значение коэффициента при низких температурах несущественно. С другой стороны,

$$\omega_{\min} = \frac{\pi s}{L}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)_{\min} = \begin{cases} 0 & \text{при } L\to 0,\\ \frac{\pi s}{L}\sqrt{3} & \text{при } L<\infty.\end{cases}$$

Кроме того, в интеграле была сделана стандартная замена переменныых

$$x_{\max} = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_{\text{Б}}T} = \frac{\pi s\hbar}{ak_{\text{Б}}T} = \frac{\theta}{T}; \quad x_{\min} = \frac{\hbar\omega_{\min}}{k_{\text{Б}}T} = \frac{\pi s\sqrt{3}}{10ak_{\text{Б}}T} = \frac{\theta}{T}\frac{\sqrt{3}}{10}.$$

Таким образом, энергия единицы объёма кластера

$$u_{\text{класт}} = \frac{3}{2}\frac{(k_{\text{Б}}T)^4}{\pi^2\hbar^3 s^3}\int\limits_{\frac{\theta}{T}\frac{\sqrt{3}}{10}}^{\theta/T}\frac{x^3dx}{e^x-1}.$$

Количество теплоты, необходимое для нагрева единицы объёма кластера

$$Q_{\text{класт}} = \Delta u_{\text{класт}} = u_{\text{класт}}\left(\frac{\theta}{30}\right) - u_{\text{класт}}(0) = \frac{3}{2}\frac{\left(k_{\text{Б}}\frac{\theta}{30}\right)^4}{\pi^2\hbar^3 s^3}\int\limits_{3\sqrt{3}}^{30}\frac{x^3dx}{e^x-1}.$$

Для единицы объёма большого тела

$$\Delta u_{\text{тела}} = \frac{3}{2\pi^2\hbar^3 s^3}\left(\frac{k_{\text{Б}}\theta}{30}\right)^4\int\limits_0^{30}\frac{x^3dx}{e^x-1} \text{ и тогда } \frac{Q_{\text{класт}}}{Q_{\text{тела}}} = \frac{\Delta u_{\text{класт}}}{\Delta u_{\text{тела}}} = \frac{\int_{3\sqrt{3}}^{30}\frac{x^3dx}{e^x-1}}{\int_0^{30}\frac{x^3dx}{e^x-1}}.$$

В этих интегралах верхний предел можно заменить на бесконечность, а поскольку $e^{3\sqrt{3}} \simeq 180 \gg 1$,, то

$$\int\limits_{3\sqrt{3}}^{30}\frac{x^3dx}{e^x-1} \approx \int\limits_{3\sqrt{3}}^{\infty} e^{-x}x^3dx = 1{,}43; \quad \int\limits_0^{\infty}\frac{x^3dx}{e^x-1} = \frac{\pi^4}{15} \approx 6{,}5.$$

Отсюда

$$\frac{Q_{\text{класт}}}{Q_{\text{тела}}} = \frac{1{,}43}{6{,}5} = 0{,}22.$$

Если же непосредственно подсчитать сумму всех возможных колебаний, то ограничиваясь числами (n_x, n_y, n_z): $(1,1,1)$; $(1,1,2)$; $(1,2,1)$; $(2,1,1)$; $(2,2,1)$; $(2,1,2)$; $(1,2,2)$; $(1,1,3)$; $(1,3,1)$; $(3,1,1)$ и $(2,2,2)$, получаем

$$\frac{Q_{\text{класт}}}{Q_{\text{тела}}} = 0{,}13.$$

2.58.

Решение. В условии даётся температура Дебая 19 K, смысл которой для жидкости странен. Тут важно, что температура много меньше ротонного минимума (который около 8 K), поэтому есть только фононы, а их спектр до энергий, соответствующий температуре 0,5 K нашей задачи, можно считать линейным. В жидкости есть единственная поляризация звуковых волн (продольная).

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3}\int\frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)-1}d^3k = \frac{V}{2\pi^2}\frac{(k_BT)^4}{(\hbar s)^3}\int\limits_0^{\infty}\frac{x^3}{e^x-1}dx = V\frac{\pi^2}{30}\frac{(k_BT)^4}{(\hbar s)^3}.$$

$$\frac{C}{V} = \frac{2}{15}\pi^2 k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar s}\right)^3$$

и далее по формулам термодинамики

$$\frac{S(T_1)}{V} = \int\limits_0^{T_1} \frac{C}{T} dT = \frac{2}{45}\pi^2 k_B \left(\frac{k_B T_1}{\hbar s}\right)^3$$

для искомой удельной энтропии

$$S_{\text{уд}} = \frac{2}{45}\frac{\pi^2 k_B}{\rho}\left(\frac{k_B T}{\hbar s}\right)^3 \approx 8{,}5 \cdot 10^3 \, \frac{\text{эрг}}{\text{К} \cdot \text{г}}.$$

2.75.

Решение. Аналогично задаче 2.74 наложим закреплённые граничные условия. От граничных условий несколько меняется ответ в этой задаче, но по постановке «мысленного опыта» по определению конечной длины цепочки, для которой роль квантовых колебаний ещё неразрушительна, закреплённые граничные условия кажутся даже более логичными.

Тогда собственные моды колебаний в одномерном случае имеют вид $u_k = A_{0k}\sin(kx)\sin(\omega t)$, $k > 0$, на одно состояние приходится объём π/L в одномерном k- пространстве. Для среднего квадрата смещения $\left\langle\left\langle u^2\right\rangle\right\rangle = \frac{1}{4}\sum A_{0k}^2$, а из сравнения каждой моды с гармоническим осциллятором

$$\frac{\hbar\omega}{2} = E_k = \langle E_k\rangle = 2\langle K_k\rangle = M\sum_n \left\langle V_n^2\right\rangle = \frac{MN\omega_k^2 A_{0k}^2}{4} \text{ и } A_{0k}^2 = \frac{2\hbar}{MN\omega_k}.$$

В одномерном случае для единственной поляризации, в дебаевской модели, ограничивая нижний предел из-за конечности цепочки:

$$\frac{\left\langle\left\langle u^2\right\rangle\right\rangle}{a^2} = \frac{L}{\pi}\frac{2\hbar}{NMa^2}\int\limits_{k_{\min}}^{k_D}\frac{dk}{sk} = \frac{2\hbar}{\pi s M a}\ln\frac{k_D}{k_{\min}}.$$

Для однородной цепочки $k_D = \pi/a$, а для закреплённых граничных условий $k_{\min} = \pi/L$.

Окончательно

$$\alpha = \frac{2\hbar}{\pi s M a}\ln\frac{L}{a}.$$

$$\ln\frac{L}{a} = \alpha\frac{\pi s M a}{2\hbar} \approx 11{,}2.$$

$$L \approx 22 \text{ мкм}.$$