

Teoría de Debye

Julio E. Rodríguez L.
Universidad Nacional de Colombia

1. Capacidad calorífica

Un material sólido cuando se calienta, experimenta un incremento en su temperatura, lo que significa que ha absorbido una determinada cantidad de calor. La capacidad calórica es una propiedad que indica la habilidad de un material para absorber calor.

Hay realmente dos formas en las cuales se puede medir esta propiedad, de acuerdo a las condiciones ambientales que acompañan la transferencia de calor. Una es la capacidad calórica mientras se mantiene el volumen constante, C_v , y el otro es manteniendo la presión exterior constante, C_p .

En la mayoría de los sólidos el principal modo de asimilación de energía térmica es por el incremento de energía vibracional de los átomos. Los átomos en los materiales sólidos están vibrando continuamente a *muy alta frecuencia y con relativamente pequeñas amplitudes*. Las vibraciones de átomos adyacentes son acopladas en virtud de los enlaces atómicos. Esas vibraciones son coordinadas de tal forma que se producen ondas que viajan en la red. Estas ondas pueden compararse con ondas elásticas ó con ondas sonoras, con pequeñas longitudes de onda y alta frecuencia, la cual se propaga a través de un cristal a la velocidad del sonido. La energía térmica vibracional para un material consiste en una serie de esas ondas elásticas las cuales tienen un rango de distribuciones y frecuencias. Solo ciertos valores de energía son permitidos (la energía está cuantizada) y un quantum simple de energía vibracional es llamado un *FONON*.

2. Dependencia de la capacidad calórica con la temperatura

La variación con la temperatura de la contribución vibracional de la capacidad calórica a volumen constante para muchos sólidos cristalinos simples se muestra en la figura.

La capacidad calorífica es cero a 0^0K pero crece rápidamente con la temperatura. Esto corresponde a una habilidad incrementada de las ondas de la red para incrementar su energía promedio con el ascenso de la temperatura. A bajas Temperaturas la relación entre C_v y la temperatura absoluta T es: $C_v = AT^3$, donde A es una constante que no depende de la temperatura.

Por encima de la llamada temperatura de Debye Θ_D , C_v se nivela y se vuelve esencialmente independiente de la temperatura hasta aproximadamente un valor de $3R$, siendo R la constante de gases, por lo tanto aun cuando la energía total de un material se incrementa con la temperatura, la cantidad de energía necesaria para producir un cambio de un grado de temperatura es constante. El valor de Θ_D para muchos sólidos es menor que la temperatura ambiente para C_v .

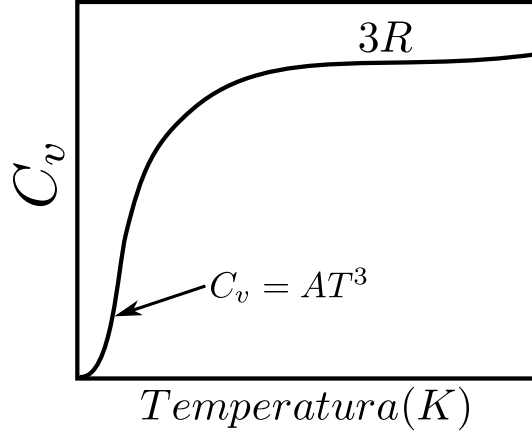


Figura 1: La dependencia de la capacidad calórica a volumen constante con la temperatura

Si consideramos un sólido de N átomos, el sistema tendrá $3N$ grados de libertad, los cuales corresponden a las $3N$ coordenadas requeridas para especificar la posición de los átomos. Pero los átomos no vibran independientemente unos de otros al rededor de sus posiciones de equilibrio, por el contrario ellos ejecutan complicadas vibraciones acopladas.

Desde el punto de vista de la mecánica clásica se sabe que las oscilaciones de un sistema de esta clase se puede describir en terminos de los $3N$ modos normales de vibración de todo el cristal, cada uno con sus propias frecuencias características.

Si se considera que el potencial que modela las oscilaciones de la red atómica es armónico, se tiene que para un sistema de $3N$ grados de libertad la energía será dada por la expresión:

$$E_i = \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad i = 1, 2, \dots, 3N \quad (1)$$

donde el subíndice i corresponde al i -ésimo modo de oscilación.

Si se piensa en un sólido como un medio continuo y elástico de volumen V , se tiene una distribución

$$g(\omega)d\omega = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 c_s^3} d\omega \quad (2)$$

En esta expresión c_s es la velocidad del sonido en el sólido, considerando este como un medio homogéneo.

Como se sabe el número total de modos es $3N$, por lo tanto se puede calcular la frecuencia máxima de vibración como:

$$3N = \int_0^{\omega_D} g(\omega)d\omega \quad (3)$$

Lo cual da como resultado

$$\omega_D^3 = c_s \left(\frac{6N\pi^2}{V} \right) \quad (4)$$

En la ecuación anterior ω_D es la denominada frecuencia de Debye.

La expresión para la energía se puede calcular a partir de la siguiente integral:

$$\frac{U}{N} = \frac{3V}{2\pi^2 c_s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \omega^2 d\omega \quad (5)$$

La cual se puede escribir como:

$$U = 3RT \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{(e^x - 1)^2} \quad (6)$$

donde N es el número de átomos presentes en la muestra y $x_D = \Theta_D/T$, $x = \hbar\omega/\kappa_B T$. Si U es el calor suministrado por la muestra entonces el calculo numérico de la integral permitirá encontrar la temperatura de Debye a la temperatura de ebullición de N_2 .

NOTA: Un desarrollo completo de la teoría de Debye puede ser consultado en el texto: *Kittel, Introduction to solid state physics*.

3. La práctica

NOTA:

El nitrógeno es líquido a muy baja temperatura (77K es decir $-196^\circ C$). Esto hace que deba manejarse con mucho cuidado pues cualquier contacto con la piel puede producir severas quemaduras. Por otra parte tampoco se le debe depositar en recipientes cerrados pues se puede presurizar y generar una explosión.

La idea de esta práctica es determinar la cantidad de nitrógeno líquido Δm que se evapora cuando el nitrógeno absorbe calor de una pieza metálica. El experimento está diseñado para medir de manera precisa Δm .

En un recipiente de icopor se vierte nitrógeno líquido (LN_2) hasta aproximadamente 1/3 de su altura, el recipiente se coloca sobre el platillo de una balanza, sobre el mismo platillo se coloca la muestra metálica, la cual será luego introducida en el líquido. La temperatura del medio ambiente, hace que el LN_2 se evapore a cierta rata, la cual se determina midiendo el peso del recipiente mas el líquido en función del tiempo. Una vez se tengan suficientes datos, tales que le permitan determinar la rata de evaporación de LN_2 , se introduce la pieza metálica dentro del líquido. El calor de la pieza será absorbido por el LN_2 lo cual hará que una cantidad de líquido se evapore de una manera rápida y desordenada. Una vez el sistema llega nuevamente al equilibrio, la rata de evaporación será la misma que antes de introducir la masa. Aproximando los datos experimentales antes y después de introducir la pieza metálica a una recta podemos encontrar la masa perdida Δm debido únicamente al calor proveniente de la pieza metálica (ver figura 2).

Si m es la masa de la pieza metálica y c su calor específico, la cantidad de calor entregado al nitrógeno por esta es:

$$\Delta Q = mc(77K - T_0) \quad (7)$$

Este calor es usado para convertir el nitrógeno líquido en vapor de nitrógeno. Si el calor latente de vaporización del LN_2 es $L = 47,23 \text{ cal/g}$, la masa de nitrógeno vaporizada será:

$$\Delta m = \frac{\Delta Q}{L} \quad (8)$$

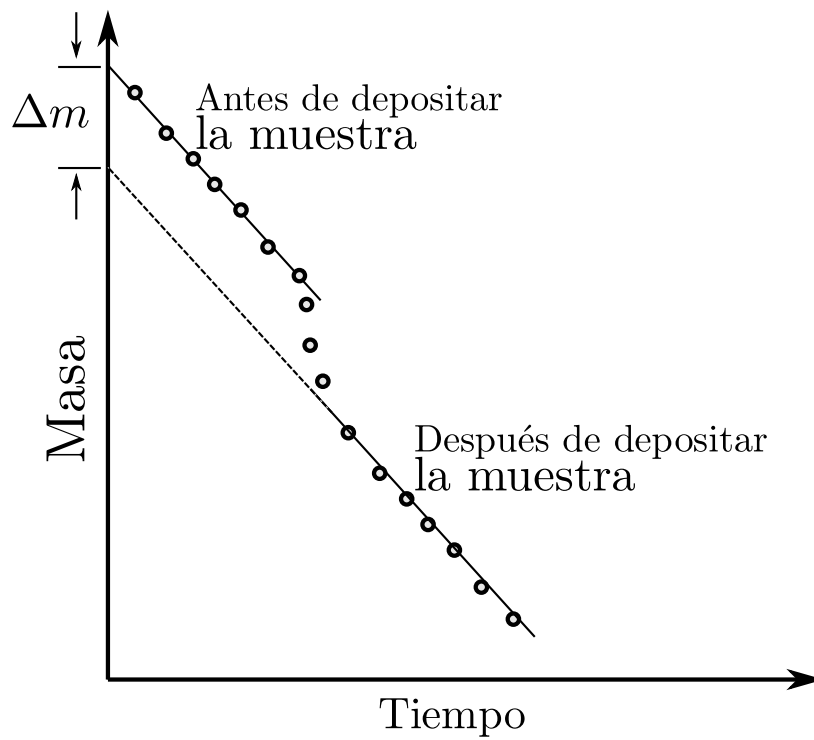


Figura 2: Relación entre la masa del nitrógeno líquido y el tiempo

De donde es posible calcular ΔQ y mediante la expresión 7 se puede encontrar el calor específico de la muestra en estudio. En esta experiencia se trata de repetir el experimento con tres diferentes piezas metálicas, encontrar su calor específico a esta temperatura, compararlo con el obtenido a temperatura ambiente y utilizar una integración numérica a fin de hallar su temperatura de Debye.
