Praca Domowa Termodynamika i Fizyka Statystyczna R 2021/2022

Kacper Cybiński

9 czerwca 2022

1 Zadanie 2

Entropia Debye'a. Na ćwiczeniach obliczyliśmy podatność cieplną trójwymiarowego ciała stałego w którym mogą rozchodzić się fale akustyczne o prędkości v_0 (model Debye'a) i pokazaliśmy że dla niskich temperatur:

$$C_V = Nk\frac{12\pi^4}{5}\left(\frac{T}{T_D}\right)^3, \text{ gdzie } T_D = \frac{\hbar v_0}{k}\sqrt[3]{6\pi^2\frac{N}{V}}$$

Dla tego samego modelu oblicz zależność entropii od temperatury i jej zachowanie asymptotyczne dla niskich temperatur.

2 Rozwiązanie

Gęstość stanów w modelu Debye'a jest dana jako:

$$g(w) = \begin{cases} \frac{3V}{2\pi^2 v_0^3}\omega^2 & \omega < \omega_D \\ 0 \quad \omega > \omega_D \end{cases}$$

Entropię wyznaczyć można różniczkując po temperaturze energię swobodną układu. Wiemy, że ma ona wzór: $F = \int_0^\infty g(\omega)\left(\frac{\hbar\omega}{2} + kT\log(1-\exp(-\beta\hbar\omega))\right)d\omega$ Natomiast entropię policzymy ze wzoru $S = -\frac{\partial S}{\partial T}$. Czyli po podstawieniu mamy:

$$S = -\int_0^\infty g(\omega)\left(k\log(1-\exp(-\beta\hbar\omega)) - \frac{\hbar}{T}\frac{\omega\exp(-\beta\hbar\omega)}{1-\exp(-\beta\hbar\omega)}d\omega\right)$$

$$S = -\int_0^{\omega_D}\frac{3V}{2\pi^2 v_0^3}\omega^2 k\log(1-\exp(-\beta\hbar\omega))d\omega + \int_0^{\omega_D}\frac{3V\hbar}{2T\pi^2 v_0^3}\frac{\omega^3\exp(-\beta\hbar\omega)}{1-\exp(-\beta\hbar\omega)}d\omega$$

Jako, że $\omega_D = v_0\left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \implies v_0^3 = \omega_D^3\frac{V}{6\pi^2 N}$. Jak użyjemy to w naszym równaniu to dostajemy:

$$S = -9Nk\int_0^{\omega_D}\frac{\omega^2}{\omega_D^3}\log(1-\exp(-\beta\hbar\omega))d\omega + 9Nk\frac{1}{T\omega_D^3}\int_0^{\omega_D}\frac{\omega^3}{\exp(\beta\hbar\omega)-1}d\omega$$

Dla ułatwienia podstawmy sobie teraz $x = \beta\hbar\omega$, co zmieni nam równanie na Entropię do postaci:

$$S = -9Nk\left(\frac{T}{T_D}\right)^3\int_0^{\frac{T_D}{T}}x^2\log\left(1-e^{-x}\right)dx + 9Nk\left(\frac{T}{T_D}\right)^3\int_0^{\frac{T_D}{T}}\frac{x^3}{e^x-1}dx$$

$$S = 9Nk\left(\frac{T}{T_D}\right)^3\left(-\frac{1}{3}x^3\log\left(1-e^{-x}\right)\Big|_0^{\frac{T_D}{T}} + \frac{4}{3}\int_0^{\frac{T_D}{T}}\frac{x^3}{e^x-1}dx\right)$$

$$S = -3Nk\log\left(1-e^{-\frac{T_D}{T}}\right) + 12Nk\left(\frac{T}{T_D}\right)^3\int_0^{\frac{T_D}{T}}\frac{x^3}{e^x-1}dx$$

W końcu, przejdźmy teraz do granicy niskich temperatur (to znaczy $T \ll T_D$). Wówczas wyrażenie $\frac{T_D}{T} \to \infty$, więc wyraz pod logarytmem dąży do 1 , a sam logarytm do 0 . Za to $\int \to \frac{\pi^4}{15}$. Stąd też entropia w granicy niskotemperaturowej jest opisana wzorem:

$$S = 12Nk\left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \frac{\pi^4}{15} = \frac{4\pi^4}{5} Nk\left(\frac{T}{T_D}\right)^3$$