Gostota stanj in toplotna kapaciteta 1-D kristala

Matjaž Žganec

21. marec 2008

Naloga

Zanimata nas gostota stanj in specifična toplotna kapaciteta verige $N+1$ mas m, ki so povezane z vzmetmi s koeficientom raztezka k. Mase so razmaknjene za a, dolžina celotne verige je L.

Rešitev

Gostota stanj v eni dimenziji

Predpostavimo, da sta prva in zadnja masa v verigi fiksirani (ne nihata). Potem vibracijski načini nihanja verige predstavljajo stoječe valovanje z odmikom mase na mestu s

$$u_s = u(0)\exp(-\mathrm{i}\omega_K t)\sin(sKa), \qquad s = 0, 1, \ldots, N. \tag{1}$$

Robna pogoja določata možne valovne vektorje

$$K = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \ldots, \frac{(N-1)\pi}{L}. \tag{2}$$

Rešitev z največjim valovnim vektorjem $K_{max} = N\pi/L$ ne da nihanja, saj vozli stoječega valovanja sovpadajo z legami mas. Dobili smo $N-1$ neodvisnih valovnih vektorjev. To je toliko, kolikor je mas, ki lahko nihajo. Vsak valovni vektor K določa drugo stoječe valovanje.

Namesto fiksnih mas na zacčetku in konču verige lahko uporabimo periodične robne pogoje. Z nastavkom za ravni val

$$u_s = u(0)\exp(\mathrm{i}(sKa - \omega_K t)), \tag{3}$$

kjer je

$$K = 0, \pm\frac{2\pi}{L}, \pm\frac{4\pi}{L}, \ldots, \pm\frac{N\pi}{L}, \tag{4}$$

spet dobimo toliko nihajnih načinov, kolikor je nefiksiranih mas - v tem primeru $N+1$. V obeh primerih lahko zaključimo, da z valovnim vektorjem manjšim od $|K|$ dobimo

$$N = \frac{L}{\pi}|K| \tag{5}$$

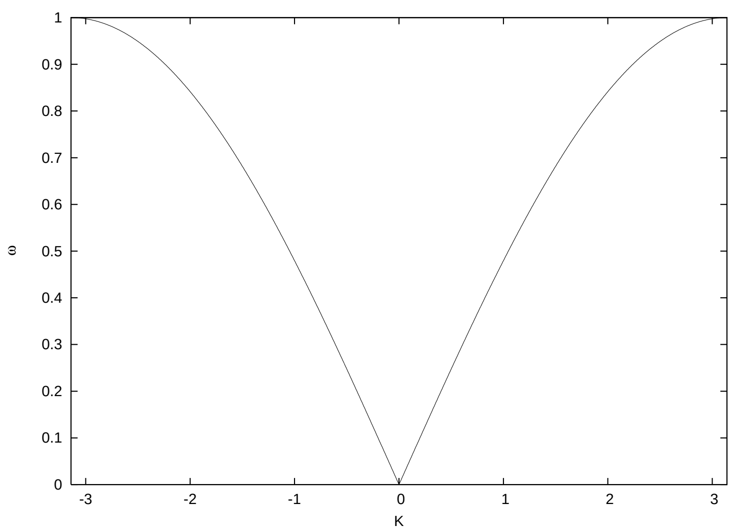
nihajnih načinov.

Debyev model gostote stanj

Na predavanjih smo za verigo mas izpeljali disperzijsko zvezo

$$\omega(K) = \sqrt{\frac{4k}{m}} \sin\left(\frac{|K|a}{2}\right) \approx \frac{\omega_0 a}{2}|K| = v|K|, \tag{6}$$

kjer je v grupna hitrost. Pri tem smo v aproksimaciji upoštevali $|K|a \ll 1$ in $\omega_0 = \sqrt{4k/m}$. Funkcijo $\omega(K)$ prikazuje Slika 1.



Slika 1: Disperzijska zveza za verigo mas. Vzeli smo $\omega_0 = a = 1$. Pri majhnih K velja linearna zveza.

Gostoto stanj zapišemo kot

$$D(\omega) = \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\omega}. \tag{7}$$

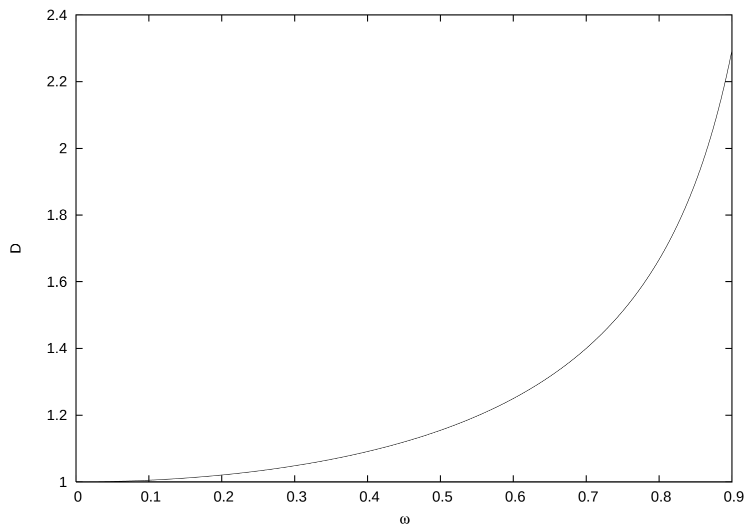
Če $\mathrm{d}N$ izrazimo iz (5) in $\mathrm{d}\omega$ iz disperzijske zveze (6), dobimo

$$D(\omega) = \frac{2L}{\pi a \omega_0 \cos\left(\frac{|K|a}{2}\right)} = \frac{2L}{\pi a \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}} \approx \frac{2L}{\pi a \omega_0} = \frac{L}{\pi v}. \tag{8}$$

Na prehodu drugega enačaja smo uporabili

$$\frac{\omega}{\omega_0} = \sin\left(\frac{|K|a}{2}\right) \quad \rightarrow \quad \cos\left(\frac{|K|a}{2}\right) = \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2}.$$

Na koncu smo gostoto stanj zapisali v limiti $\omega/\omega_0 \to 0$. Odvisnost prikazuje Slika 2.



Slika 2: Gostota stanj za verigo mas. Vzeli smo $2L/\pi a = \omega_0 = 1$. Pri majhnih ω velja $D = L/\pi v$.

Z znano gostoto stanj $D(\omega)$ lahko zapišemo notranjo energijo sistema kot

$$U = \int_0^{\omega_0} D(\omega) \left(\frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \mathrm{d}\omega. \tag{9}$$

Zasedenost stanj harmonskih oscilatorjev smo opisali z Bose - Einsteinovo statistiko. Pri tem se splača energijsko skalo premakniti tako, da 1/2 v oklepaju odpade, zato je v nadaljevanju več ne bomo pisali. Toplotno kapaciteto izračunamo kot

$$C_V = \left(\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}T} \right)_V. \tag{10}$$

Ko vstavimo gostoto stanj v limiti $\omega/\omega_0 \to 0$, sledi

$$U = \frac{L(k_B T)^2}{\pi\hbar v} \int_0^{x_0} \frac{x}{\exp x - 1} \mathrm{d}x, \tag{11}$$

$$C_V = \frac{L k_B^2 T}{\pi\hbar v} \int_0^{x_0} \frac{x^2 \exp x}{(\exp x - 1)^2} \mathrm{d}x. \tag{12}$$

Pri tem smo vpeljali $x = \hbar\omega/k_B T$ in $x_0 = \hbar\omega_0/k_B T$. Pri nizkih temperaturah $x_0 \gg 1$ lahko zgornjo integralsko mejo potegnemo v neskončnost in dobimo

$$U = \frac{L(k_B T)^2}{\pi\hbar v} \frac{\pi^2}{6} \propto T^2, \tag{13}$$

$$C_V = \frac{L k_B^2 T}{\pi\hbar v} \frac{\pi^2}{3} \propto T. \tag{14}$$

Pri visokih temperaturah $x \ll 1$ z razvojem eksponentnih členov v obeh integrandih sledi *Dulong - Petitova limita*

$$U = \frac{L(k_BT)^2}{\pi\hbar v}x_0 = Nk_BT, \tag{15}$$

$$C_V = \frac{Lk_B^2T}{\pi\hbar v}x_0 = Nk_B. \tag{16}$$

Na zadnjem enačaju smo vstavili x_0, izrazili ω_0 s K iz disperzijske zveze (6), K pa zapisali s številom stanj (5).

Einsteinov model gostote stanj

V tem modelu predpostavimo, da N oscilatorjev niha s frekvenco ω_0. Potem je gostota stanj enaka

$$D(\omega) = N\delta(\omega - \omega_0). \tag{17}$$

Notranja energija takega sistema se zapiše kot

$$U = N\langle n\rangle\hbar\omega_0 = \frac{N\hbar\omega_0}{\exp(\hbar\omega_0/k_BT) - 1}. \tag{18}$$

Z odvajanjem po temperaturi dobimo toplotno kapaciteto

$$C_V = Nk_Bx_0^2\frac{\exp x_0}{(\exp x_0 - 1)^2}. \tag{19}$$

Pri visokih temperaturah $x_0 \to 0$ gre toplotna kapaciteta proti Nk_B. Pri nizkih temperaturah $x_0 \to \infty$ je toplotna kapaciteta sorazmerna z $\exp(-x_0)$, kar je v nasprotju z eksperimentalnimi rezultati. Nizkotemperaturno limito pravilno opiše Debyev model.