F7070 — Statistická fyzika a termodynamika

9 – Tepelná kapacita

Zadání

Ukázali jsme si, že termodynamické chování pevných látek je popsáno *phonony* — vlnami ve struktuře pevných látek. Stejne tak 2dimm vlny na rozhraní mezi povrchem tekutiny a jejími parami je popisován harmonickými mody, zvanými *ripplony*; přičemž směr jejich polarizace je kolmý na povrch. Disperzní křivka pro tyto excitace je isotropní a dána vztahem:

$$\varepsilon = \hbar\omega = b\mathbf{k}^{3/2}$$

kde $\mathbf{k} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. Pro vzorek o dimm $L \times L$ je vlnový vektor $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y)$, přičemž n_x, n_y mohou nabývat libovolných kladných i záporchých celých čísel.

Najděte matematické vyjádření příspěvku ripplonů ke konstantní oblasti tepelné kapacity, její závislost na teplotě a vyneste graficky.

Řešení

Ripplony je možné popsat B-E statistikou stejně, jako chování fotonů, kde $\mu = 0$ — stav systému můžeme popsat stavem jedné částice s polarizací 1. Volná energie F v tomto případě je rovna

$$F = T\sum_i \ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\hbar\omega_i/T}\right). \tag{1}$$

Abychom vyjádřili F pro celou plochu, tak sumu nahradíme integrálem přes hustotu stavů v podprostoru vlnových vektorů:

$$\sum_i = \int \rho(\mathbf{k})\mathrm{d}^2\mathbf{k} \tag{2}$$

Dosazením (2) do (1) dostaneme

$$F = T\int \rho(\mathbf{k})\mathrm{d}^2\mathbf{k}\ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\hbar\omega_i/T}\right) \tag{3}$$

přičemž

$$\rho(\mathbf{k})\mathrm{d}^2\mathbf{k} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \mathrm{d}^2\mathbf{k}$$

Převedeme na sférické souřadnice:

$$\rho(\mathbf{k})\mathrm{d}^2\mathbf{k} = \frac{A}{4\pi^2}k\mathrm{d}k\mathrm{d}\phi = \frac{A}{4\pi^2}k\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega}\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\omega$$

Ze zadání vyjádříme k:

$$\hbar\omega = b\mathbf{k}^{3/2}$$

$$k = \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{2/3}\omega^{2/3} \tag{4}$$

Rovnici (4) zderivujeme podle ω

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega} = \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{2/3}\frac{2}{3}\omega^{-1/3} \tag{5}$$

a (5) dosadíme do vsechno (3)

$$F = T \int_0^{\omega_D} \frac{2}{3} \frac{A}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{2}{3}} \omega^{\frac{2}{3}} \omega^{-\frac{1}{3}} \mathrm{d}\omega \ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\hbar\omega/T}\right) \int_0^{\pi/2} \mathrm{d}\phi \tag{6}$$

Spočteme co se dá:

$$F = T \int_0^{\omega_D} \frac{A}{12\pi^2} \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}} \omega^{\frac{1}{3}} \mathrm{d}\omega \ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\hbar\omega/T}\right) \tag{7}$$

$$F = T \frac{A}{12\pi} \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}} \int_0^{\omega_D} \omega^{\frac{1}{3}} \mathrm{d}\omega \ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\hbar\omega/T}\right) \tag{8}$$

Budeme řešit metodou per-partes:

$$u = \ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\hbar\omega/T}\right) \qquad v' = \omega^{-\frac{1}{3}}$$

$$u' = \frac{1}{\mathrm{e}^{-\hbar\omega/T} - 1} \frac{\hbar}{T} \qquad v = \frac{3}{4}\omega^{\frac{4}{3}}$$

Po derivaci dostaneme:

$$F = T \frac{A}{12\pi} \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left[\frac{3}{4}\omega^{\frac{3}{4}} \ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\hbar\omega/T}\right)\right]_0^{\omega_D} - \frac{3}{4}\frac{\hbar}{T} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^{\frac{4}{3}}}{\mathrm{e}^{-\hbar\omega/T} - 1} \mathrm{d}\omega \right] \tag{9}$$

Uděláme substituci pro:

$$\frac{\hbar\omega}{T} = \mathrm{a} \tag{10}$$

a $\hbar\omega_D = T_D$, tedy Debayova teplota.

Dosadíme (10) a T_D do (9):

$$F = T \frac{A}{16\pi} \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left(\frac{T_D}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \ln\left(1 - \mathrm{e}^{T_D/T}\right) - \frac{\hbar}{T} \int_0^{T_D/T} \frac{\left(\frac{T}{\hbar}\right)^{4/3} \mathrm{a}^{4/3}}{\mathrm{e}^{\mathrm{a}} - 1} \frac{T}{\hbar} \mathrm{da} \right] \tag{11}$$

$$F = T \frac{A}{16\pi} \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left(\frac{T_D}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \ln\left(1 - \mathrm{e}^{T_D/T}\right) - \left(\frac{T}{\hbar}\right)^{4/3} \int_0^{T_D/T} \frac{\mathrm{a}^{4/3}}{\mathrm{e}^{\mathrm{a}} - 1} \mathrm{da} \right] \tag{12}$$

Další řešení je možné pouze v aproximaci pro nízké či vysoké teploty.

Pro vysoké teploty

- $T \to \infty$
- $\dfrac{T_D}{T} \to 0$
- $\mathrm{e}^{\mathrm{a}} - 1 \to \mathrm{a}$
- $\ln\left(1 - \mathrm{e}^{-T_D/T}\right) \to \ln\left(\frac{T_D}{T}\right)$
- $\frac{\hbar\omega}{T} \to 0$

$$F = T \frac{A}{16\pi} \left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left(\frac{T_D}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \ln\left(\frac{T_D}{T}\right) - \left(\frac{T}{\hbar}\right)^{4/3} \int_0^{T_D/T} \mathrm{a}^{1/3} \mathrm{da} \right] \tag{13}$$

Spočteme integrál:

$$\int_0^{T_D/T} \mathrm{a}^{1/3}\mathrm{da} = \frac{3}{4}\left(\frac{T_D}{T}\right)^{4/3}$$

A dosadíme

$$F = T\frac{A}{16\pi}\left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}}\left[\left(\frac{T_D}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}}\ln\left(\frac{T_D}{T}\right) - \left(\frac{T}{\hbar}\right)^{4/3}\frac{3}{4}\left(\frac{T_D}{T}\right)^{4/3}\right]$$

Vytkneme $\left(\frac{T_D}{\hbar}\right)^{4/3}$

$$F = T\frac{A}{16\pi}\left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}}\left(\frac{T_D}{\hbar}\right)^{4/3}\left[\ln\left(\frac{T_D}{T}\right) - \frac{3}{4}\left(\frac{T}{T}\right)^{4/3}\right]$$

Vykrátíme $\hbar$

$$F = T\frac{A}{16\pi}\left(\frac{T_D}{b}\right)^{\frac{4}{3}}\left[\ln\left(\frac{T_D}{T}\right) - \frac{3}{4}\right] \tag{14}$$

Vzhledem k počtu dimenzí (2), bude počet stavů $2N$. Integrál přes hustotu stavů tak bude

$$\int_0^{\omega_D} \rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega = 2N$$

$$\int_0^{\omega_D} \rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega = \frac{A}{12\pi}\left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}}\int_0^{\omega_D} \omega^{1/3}\mathrm{d}\omega$$

$$\int_0^{\omega_D} \rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega = \frac{A}{16\pi}\left(\frac{\hbar}{b}\right)^{\frac{4}{3}}\left(\frac{T_D}{\hbar}\right)^{\frac{4}{3}}$$

Tedy:

$$2N = \frac{A}{16\pi}\left(\frac{T_D}{b}\right)^{\frac{4}{3}}$$

Zpět k rovnici (14)

$$F = 2NT\left[\ln\left(\frac{T_D}{T}\right) - \frac{3}{4}\right] \tag{15}$$

Tepelná kapacita je

$$C_V = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \tag{16}$$

Po dvou derivacích F získáme

$$C_V = 2NT\frac{T}{T_D}\frac{T_D}{T^2}$$

Konečně tedy pro vysoké teploty je tepelná kapacita C_V rovna

$$C_V = 2N \tag{17}$$

Pro nízké teploty

- $T \to 0$
- $\frac{T_D}{T} \to \infty$
- $\ln\left(1 - \mathrm{e}^{-T_D/T}\right) \to 0$

Rovnice (12) přejde do tvaru:

$$F = -T \frac{A}{16\pi} \left(\frac{T}{b}\right)^{4/3} \int\limits_0^{T_D/T} \frac{\mathrm{a}^{4/3}}{\mathrm{e}^{\mathrm{a}} - 1} \mathrm{da} \tag{18}$$

$$F = -\frac{A}{16\pi b^{4/3}} T^{7/3} B_{4/3}\left(0\right) \tag{19}$$

kde

$$B_{4/3}(0) = \int\limits_0^{T_D/T} \frac{\mathrm{a}^{4/3}}{\mathrm{e}^{\mathrm{a}} - 1} \mathrm{da}$$

Tepelná kapacita je

$$C_V = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \tag{20}$$

Dvakrát zderivujeme (18) a vynásobíme $-T$

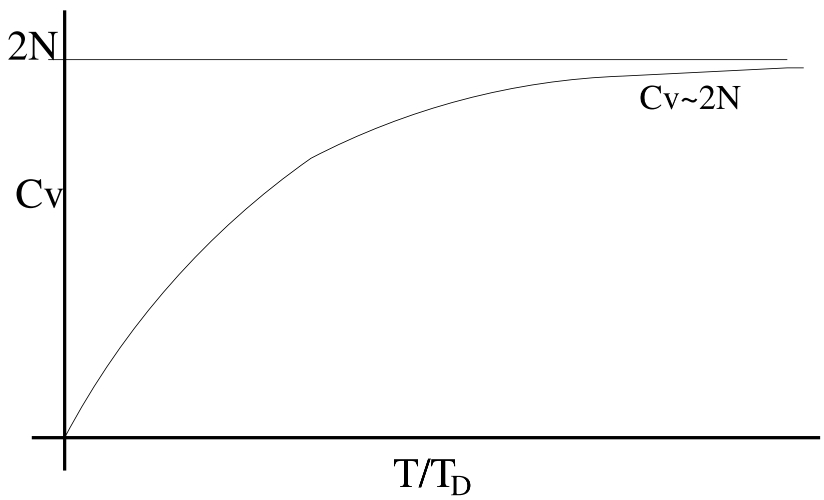
$$C_V = \frac{7}{36\pi b^{4/3}} T^{4/3} B_{4/3}\left(0\right)$$

$$2N = \frac{A}{16\pi} \left(\frac{T_D}{b}\right)^{\frac{4}{3}}$$

$$C_V = 2N \cdot \frac{28}{9} B_{4/3}\left(0\right)$$

Pro nízké teploty je vztah složitější než pro vysoké.

Obrázek



Obrázek 1: Přibližný graf závislosti Tepelné kapacity C_V na poměru T/T_D