МУИС, Эрдэм Шинжилгээний Бичиг, ФИЗИК №251(13), 2005, хууд. 42-44

Хатуу биеийн дулаан багтаамжийн классик ба квант онол

Г.Шилагарди, Ж.Ванчинхүү, Л.Дэмбэрэл, Р.Галбадрах, Л.Энхтөр, С.Мөнхцэцэг

МУИС, ФЭС, ОТФ Тэнхим

Аннотация: В работе было изложено основное положение классическое и квантовое теории теплоемкости твёрдых тел, а также квази квантовой теории Дебая и Эйнштейна.

УДИРТГАЛ

XX зууны эхэн хүртэл хатуу биеийн дулаан багтаамжийн онол классик физикийн шийдвэрлэж чадаагүй асуудлын нэг байлаа. 1900 онд Планк *улайссан хатуу биеийн атомуудын цацруулах гэрлийн энерги тэдгээрийн хэлбэлзлэлийн давтамж ν-д пропорциональ квантлагдсан дискрет утга авна* гэсэн таамаглал дэвшүүлжээ:

$$\varepsilon = h\nu$$

Үүнд: h-Планкийн тогтмол буюу үйлчлэлийн квант, $6.62\cdot10^{-27}$ *эрг·сек*-тэй тэнцүү.

Энэ санааг 1907 онд Эйнштейн дулаан багтаамжийн квант онолыг боловсруулахад хэрэг-лэсэн юм. Квант онолтой танилцахын өмнө хатуу биеийн дулаан багаамжийн класик онолд ямар бэрхшээл тулгарч байсныг дурдая.

КЛАССИК ОНОЛ

Классик онолоор 1 моль хатуу биеийг N_0 атом агуулсан $3N_0$ чөлөөний зэрэгтэй хэлбэлзэх систем гэж үзнэ. Чөлөөний зэргүүдээр энерги жигд хуваарилагдах хуулиар нэг хэлбэлзэх чөлөөний зэрэгт kT энерги ноогдох тул хатуу биеийн дотоод энерги $U = 3N_0kT = 3R$ байна. Атомын дулаан багтаамжийг олбол:

$$C_a = \left(\frac{dU}{dT}\right) = 3R \approx 3\cdot2\frac{кал}{град} = 6\frac{кал}{град}$$

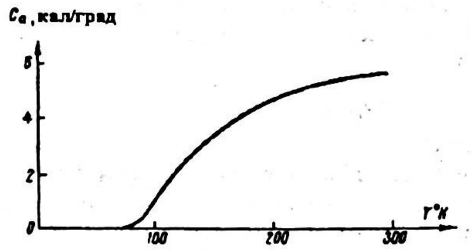
Эндээс үндэслэн Дюлонг, Пти нар дараах хуулийг томъёолжээ.

Хатуу биеийн атомын дулаан багтаах чанар температураас хамаарахгүй, бүх хатуу биед яг адилхан 6 кал/град байна.

Энэ хууль ихэнх диэлектрик ба металлийн хувьд өндөр температурын мужид туршлагатай маш сайн тохирч байлаа. Гэтэл бага, дундаж температурын мужид классик онол туршлагатай сайн тохирохгүй, хатуу биеийн атомын дулаан багтаамж температурын ãóðààäóãààð зэргээс хамаарсан $C_a = aT^3$ (*а*-тогтмол тоо) функц байв. Туршлагаас үзэхэд алмазын дулаан багтаамж 1-р зурагт үзүүлсэн байдлаар температураас хамаарч байв. 1-р хүснэгтэд температурын зарим утганд харгалзах алмазын дулаан багтаамжийн утгуудыг үзүүлэв.

1-р хүснэгт

T / Бодис	273 °K	90 °K
Алмаз C_a, *кал/град*	1.4	0.03



1-р зураг

ДУЛААН БАГТААМЖИЙН КВАНТ ОНОЛ

Туршлагатай харшилсан энэ бэрхшээлээс гарахын тулд Эйнштейн *атом бүхнийг яг ижилхэн ν_0 давтамжтай хэлбэлзэж байгаа квант осциллятор гэж үзээд хатуу биеийн атомуудын дулааны хэлбэлзлэлийн энергийг гэрлийн энергийн адил квантласан* байна:

$$\varepsilon = nh\nu,\ n = 1,2,3,...$$

Үүний ν-атомын дулааны хэлбэлзлэлийн давтамж. Квант онолыг хэрэглэн нэг чөлөөний зэрэгт оногдох дундаж энергийг олбол атомын хэлбэлзлэлийн давтамж ν ба температур T-ээс хамаарсан функц байв:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

Дулааны хэлбэлзэл хийж байгаа 1 моль хатуу биеийн дотоод энергийг олбол:

$$U = 3N_0\bar{\varepsilon} = 3N_0\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

Дээрх илэрхийллээс температур T-ээр уламжлал авбал атомын дулаан багтаамж олдоно:

$$C_a = \frac{dU}{dT} = 3N_0\bar{\varepsilon} = 3R\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 \frac{e^{\frac{h\nu}{kT}}}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}.$$

Энэ томъёонд анализ хийж үзье.

а) Өндөр температурын мужид $kT >> h\nu$ буюу $\frac{h\nu}{kT} << 1$ тул $e^{\frac{h\nu}{kT}}$-ийг цуваагаар задалж эхний хоёр гишүүнийг авбал $e^{\frac{h\nu}{kT}} = 1 + \frac{h\nu}{kT}$ учраас

$$C_a = 3R\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 \frac{1+\frac{h\nu}{kT}}{\left(1+\frac{h\nu_0}{kT}-1\right)^2} = 3R\left(1+\frac{h\nu}{kT}\right) = 3R = 6\frac{кал}{град}$$

болж классик онолтой тохирч байна.

б) Бага температурын мужид $kT << h\nu$ буюу $\frac{h\nu}{kT} >> 1$ тул $e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1$-ийг $e^{\frac{h\nu}{kT}}$-ээр сольж болно. Энэ үед

$$C_a = 3R\left(\frac{h\nu_0}{kT}\right)^2 e^{\frac{h\nu}{kT}}$$

болж температур багасахад экспоненциаль функц хурдан буурах тул $C_a \approx 0$ болно.

Дээр дурдсан тооцооноос харвал Эйнштейны квант онол өндөр ба бүр бага температурт туршлагатай тохирох үр дүн өгөх боловч дулаан багтаамж температурын гуравдугаар зэргээс хамаарах илэрхийллийг гаргаж чадахгүй байна.

ДЕБАЙН КВАЗИКВАНТ ОНОЛ

Дебайн онолоор N атомтай хатуу биеийг $3N$ чөлөөний зэрэгтэй хэлбэлзэгч систем гэж үзэх бөгөөд дулааны хэлбэлзлэлийг хатуу биеийн доторх харимхай зогсонги долгионтой адилтгаж үзнэ.

Боломжит хэлбэлзэх төлөвийн тоо нь чөлөөний зэргийн тоо $3N$ тэй тэнцүү ба гэхдээ хамгийн удаан хэлбэлзлэлүүдийг буюу үндсэн хэлбэлзлэлийг авна. "Нормаль хэлбэлзлэл" хэмээн нэрлэгдэх эдгээр хэл-бэлзлэлийн давтамж хэдэн зуун герцээс эхлээд инфра улаан муж буюу 10^{13} Гц хүрнэ. Янз бүрийн далайц ба давтамжтай (фазтай) эдгээр хэлбэлзлэлүүд нэмэгдэж хатуу биеийн дулааны хэлбэлзлэлийг бүрдүүлнэ. Энэ хөдөлгөөний энерги:

$$E = \sum_{i=1}^{3N_0} \frac{h\nu_i}{e^{\frac{h\nu_i}{kT}}-1}.$$

Энэ томъёонд буй нормаль давтамж ν_i-г бодож олох нь нэлээд төвөгтэй.

Дебайн энэ онолыг хэрэглэн хатуу биеийн атомын дулаан багтаамжийг бодож олбол үнэхээр температурын гуравдугаар зэргэтэд пропорциональ хэмжигдэхүүн гарна:

$$C_a = aT^3.$$

Дебайн онолд $\Theta' = \frac{h\nu'}{k}$-тэй тэнцүү характеристик температур хэмээх хэмжигдэхүүн чухал үүрэг гүйцэтгэнэ. Үүний ν' нь $3N$ хэлбэлзлэлээс хамгийн хурдан хэлбэлзлэлийн давтамж юм. 2-р хүснэгтэд зарим бодисын характеристик температур ба хамгийн их давтамжийг сийрүүлэн бичлээ.

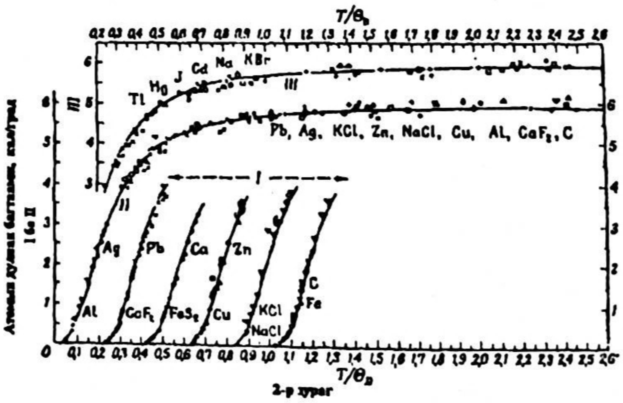
2-р хүснэгт

Хэмжиг. / Бодис	Характеристик температур Θ', *0 K*	Хамгийн их давтамж ν', *Гц*
Алмаз	1860	3.9·1013
Хөнгөн цагаан	400	1.2·1013
Мөнгө	210	7.9·1012
Хар тугалга	90	1.9·1012

Дебайн онолын гайхамшиг нь хэрэв бодис бүхний атомын дулаан багтаамжийг абсолют температур T ба характеристик температур Θ-ын харьцаагаар илэрхийлбэл бүх бодист тохирох универсаль функц $C_a=f(T/Q)$ гарна.

2-р зурагт бүх бодисын туршлагаар олсон дулаан багтаамжийн утгууд тод муруйгаар илэрхийлсэн шугам дагуу хэрхэн яаж байрласныг харуулав.

Атомын дулаан багтаамж ба харьцангуй температурын хамаарал



2-р зураг

АШИГЛАСАН НОМ

[1] А.Н.Матвеев, Молекулярная физика, Москва, 1981.
[2] Р.В.Телеснин, Молекулярная физика, Москва, 1983.
[3] Макс Борн, Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решёток Москва, 1958.