BAKI UNİVERSİTETİNİN XƏBƏRLƏRİ
№2 Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası 2008

FİZİKA

MÜRƏKKƏB QƏFƏSLİ BƏRK CİSİMLƏRİN TERMODİNAMİK XASSƏLƏRİNƏ OPTİK RƏQSLƏRİN TƏSİRİ

B.M.ƏSGƏROV, S.R.FİQAROVA,
M.M.MAHMUDOV*, U.S.PAŞABƏYOVA**
*Bakı Dövlət Universiteti
**Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti

İşdə nəzəri olaraq keçirici olmayan mürəkkəb kristal qəfəsli bərk cisimlərin termodinamik xassələrinə optik rəqslərin təsiri tədqiq olunmuşdur. Bütün termodinamik əmsalların temperatur asılılığı üçün analitik ifadələr alınmış və göstərilmişdir ki, onlar əsasən Eynşteyn temperaturu və Qryuneyzen parametri ilə təyin olunur. Termodinamik əmsallardan istilik tutumları üçün tapılmış ifadələr yuxarı və aşağı temperatur limit hallarında məlum nəticələrə keçir.

Bərk cisimlərin yeni təcrübi tədqiqat üsullarının yaranmasına baxmayaraq onların fiziki xassələrinin tədqiqində yenə də termodinamik əmsalların ölçülməsi üstünlük təşkil edir. Məlum olduğu kimi termodinamik əmsallar, sistemin makroskopik halını təyin edən parametrlərdən (S - entropiya, V - həcm, P - təzyiq və T - mütləq temperatur) birinin dəyişməsi nəticəsində digərinin necə dəyişməsini göstərən, onun fiziki xassələrini xarakterizə edən və təcrübədə ölçülə bilən kəmiyyətlərdir. Nəzəri termodinamikadan bizə səkkiz termodinamik əmsal məlumdur ki, onlar arasında bütün sistemlər üçün doğru olan ümumi termodinamik münasibətlər [1] işində təyin olunmuşdur. Bu işdə göstərilmişdir ki, termodinamik əmsalların hamısını hesablamaq üçün yalnız $E=E(V,T)$ kalorik və $P=P(V,T)$ termik hal tənliklərinin aşkar şəklini bilmək lazımdır. Bu hal tənliklərini təyin etmək üçün isə $F=F(V,T)$ sərbəst enerji funksiyasının açıq şəkli məlum olmalıdır. Sərbəst enerji $F=F(V,T)$, öz növbəsində, enerji spektri məlum olan konkret sitemlər üçün Gibbs metodu vasitəsilə tapılır [2].

Keçirici olmayan kristallik qəfəsə malik bərk cismin sərbəst enerjisi ümumi halda [3] işində hesablanmış və aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$\mathrm{F} = \mathrm{E}_0 + \mathrm{k}_0\mathrm{T}\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{j=1}^{3s}\ln(1-\mathrm{e}^{-\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})/\mathrm{k}_0\mathrm{T}}), \qquad (1)$$

burada

$$\mathrm{E}_0 = \sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{j=1}^{3s}\frac{\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})}{2}, \qquad (2)$$

qəfəsin sıfırıncı rəqslərinin enerjisi, $\omega_j(\boldsymbol{q})$ - rəqslərin tezliyi q - dalğa ədədi, j - rəqs budaqların sayıdır.

Sərbəst enerjinin ümumi (1) ifadəsini xüsusi halda mürəkkəb qəfəsli kristala tətbiq edək. Fərz edək ki, kristal qəfəs N sayda elementar özəkdən ibarətdir və hər özəkdə olan atomların (və ya ionların) sayı s olsun. Belə qəfəsin rəqsi hərəkət enerjisi $3Ns$ sayda harmonik ossilyatorun enerjilərinin cəminə bərabərdir [4]. Onun tezlik spektri isə sonlu sayda ($3Ns$) tezlikdən ibarətdir və bunlar da $3s$ sayda budaq təşkil edirlər. Bu budaqların yalnız üçü akustik, yerdə qalan $(3s-3)$ dənəsi isə optik budaqdır. Başqa sözlə akustik rəqslərin tezliyi

$$\omega_j(q) = \upsilon_0 q\,; \quad j = 1,2,3, \tag{3}$$

optik rəqslərin tezliyi isə

$$\omega_j(q) = \omega_0\,; j = 4,5,6,...,3s, \tag{4}$$

kimi təyin olunur, burada υ_0 - kristalda səs dalğalarının yayılma sürəti, ω_0 - Eynşteyn tezliyidir.

Akustik rəqslərin bərk cismin termodinamik xassələrinə təsiri (Debay modeli yaxınlaşmasında) bizim tərəfimizdən [5]-də hərtərəfli tədqiq edilmişdir. İndi isə fərz edək ki, mürəkkəb kristallik qəfəsdə yalnız optik rəqslər (dalğalar) yaranır. Belə olduqda j sayı $3(s-1)$ qiymətləri alır. Sadəlik üçün qəbul edək ki, rəqs budaqları cırlaşıb, yəni optik rəqslərin tezlikləri üst-üstə düşür. Yuxarıda deyilənləri nəzərə alsaq sərbəst enerjinin (1) ifadəsi aşağıdakı şəklə düşər:

$$F = E_0 + 3N(s-1)k_0 T \ln(1 - e^{-\theta_0/T}), \tag{5}$$

burada

$$E_0 = \frac{3}{2} N(s-1) k_0 \theta_0, \tag{6}$$

sıfırıncı enerji, $\theta_0 = \hbar\omega_0 / k_0$ - xarakteristik Eynşteyn temperaturudur. Sərbəst enerjinin (5) ifadəsini kalorik və termik hal tənliklərinin [6]

$$E = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right), \qquad P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T, \tag{7}$$

ifadələrində nəzərə alsaq, taparıq:

$$E = E_0 + 3N(s-1)k_0 T\, A\left(\frac{\theta_0}{T}\right), \tag{8}$$

$$P = P_0 + \frac{3N(s-1)k_0 T}{V} A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)\gamma_G^0, \tag{9}$$

burada

$$A\left(\frac{\theta_0}{T}\right) = \frac{\theta_0/T}{e^{\theta_0/T} - 1}, \tag{10}$$

- Eynşteyn funksiyasıdır,

$$P_0 = \frac{3}{2} N(s-1) \frac{k_0 \theta_0}{V} \gamma_G^0, \tag{11}$$

sıfırıncı rəqslərlə bağlı və temperaturdan asılı olmayan sıfırıncı təzyiqdir,

$$\gamma_G^0 = -\frac{V}{\theta_0} \frac{d\theta_0}{dV}, \tag{12}$$

- Qryuneyzen sabitidir.

Hal tənlikləriniп (8) və (9) ifadələrindən və həmçinin [1]-də təyin olunmuş termodinamik əmsallar arasındakı ümumi münasibətlərdən istifadə etsək mürəkkəb qəfəsli bərk cismin termodinamik əmsalları üçün taparıq:

$$C_V = 3N(s-1) k_0 A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right), \tag{13}$$

$$C_P = 3N(s-1) k_0 A_P\left(\frac{\theta_0}{T}, \gamma_G^0\right), \tag{14}$$

$$C_P - C_V = 3N(s-1) k_0 \gamma_G^0 A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right) M_0\left(\frac{\theta_0}{T}, \gamma_G^0\right), \tag{15}$$

$$\frac{C_P}{C_V} = 1 + \gamma_G^0 M_0\left(\frac{\theta_0}{T}, \gamma_G^0\right), \tag{16}$$

$$\beta_V = \frac{1}{T} \frac{A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right)}{\frac{1}{2}\frac{\theta_0}{T} + A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)}, \tag{17}$$

$$\gamma_T = \frac{V}{3N(s-1) k_0 T \gamma_G^0} \frac{M_0\left(\frac{\theta_0}{T}, \gamma_G^0\right)}{A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right)}, \tag{18}$$

$$\alpha_P = \frac{1}{T} M_0\left(\frac{\theta_0}{T}, \gamma_G^0\right), \tag{19}$$

$$\gamma_S = \frac{V}{3N(s-1) k_0 T \gamma_G^0} \frac{M_0\left(\frac{\theta_0}{T}, \gamma_G^0\right)}{A_P\left(\frac{\theta_0}{T}, \gamma_G^0\right)}, \tag{20}$$

$$\beta_S = \frac{V}{3N(s-1)k_0T}\frac{M_0\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right)}{A_P\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right)} = \gamma_G^0\gamma_S, \tag{21}$$

$$\alpha_S = \frac{\gamma_G^0}{V}. \tag{22}$$

Burada istifadə olunan $A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right)$, $A_P\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right)$ və $M_0\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right)$ funкsiyaları aşağıdaкı кimi təyin olunurlar:

$$A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right) = \frac{\partial}{\partial T}\left[T\,A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)\right] = A^2\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{\theta_0/T}, \tag{23}$$

$$A_P\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right) = A_V\left(\frac{\theta}{T}\right)\left[1+\gamma_G^0 M_0\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right)\right], \tag{24}$$

$$M_0\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right) = \frac{A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right)}{(1+\gamma_G^0)\left[\frac{1}{2}\frac{\theta_0}{T}+A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)\right]-\gamma_G^0 A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right)}, \tag{25}$$

Bu funкsiyalar tapılarкən $A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)$ Eynşteyn funкsiyasının T və θ_0 temperaturlarına görə törəmələrinin

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial T}A\left(\frac{\theta_0}{T}\right) &= \frac{1}{T}\left[A^2\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{\theta_0/T} - A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)\right],\\ \frac{\partial}{\partial \theta_0}A\left(\frac{\theta_0}{T}\right) &= \frac{1}{\theta_0}\left[-A^2\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{\theta_0/T} + A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)\right],\end{aligned} \tag{26}$$

кimi təyin olunduğu nəzərə alınmışdır.

Qeyd etməк lazımdır кi, termodinamiк əmsallar üçün tapılmış ifadələr temperaturun ixtiyari qiyməti üçün doğrudur. Odur кi, onların temperaturdan aşкar asılılıqlarının analitiк ifadələrini tapmaq üçün yüкsəк və aşağı temperatur кimi xüsusi hallara baxmaq lazımdır. Bunun üçün isə (10) Eynşteyn funкsiyasının və (23)-(25) funкsiyalarının bu limit hallarında asimptotiкalarını bilməк lazımdır.

Yüкsəк temperaturlar ($T >> \theta_0$). Bu limit halında adı çəкilən funкsiyalar üçün alarıq:

$$A\left(\frac{\theta_0}{T}\right) = 1-\frac{1}{2}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)+\frac{1}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2, \tag{27}$$

$$A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right)=1-\frac{1}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2, \qquad (28)$$

$$A_P\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right)=1+\gamma_G^0-\frac{1}{12}\left[1+\gamma_G^0(3+2\gamma_G^0)\right]\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2, \qquad (29)$$

$$M_0\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G\right)=1-\frac{1}{6}(1+\gamma_G^0)\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2. \qquad (30)$$

Bu yaxınlaşmada **(27)-(30)** nəzərə alınmaqla **(13)-(22)** termodinamik əmsalları üçün taparıq:

$$C_V=3N(s-1)k_0\left[1-\frac{1}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right], \qquad (31)$$

$$C_P=3N(s-1)k_0\left[1+\gamma_G^0-\frac{1}{12}\left[1+\gamma_G^0(3+2\gamma_G^0)\right]\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right], \qquad (32)$$

$$C_P-C_V=3N(s-1)k_0\gamma_G^0\left[1-\frac{1}{12}(3+2\gamma_G^0)\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right], \qquad (33)$$

$$\frac{C_P}{C_V}=1+\gamma_G^0\left[1-\frac{1}{6}(1+\gamma_G^0)\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right], \qquad (34)$$

$$\beta_V=\frac{1}{T}\left[1-\frac{1}{6}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right], \qquad (35)$$

$$\gamma_T=\frac{V}{3N(s-1)k_0T\gamma_G^0}\left[1-\frac{1}{12}(1+2\gamma_G^0)\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right], \qquad (36)$$

$$\alpha_P=\frac{1}{T}\left[1-\frac{1}{6}(1+\gamma_G^0)\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right], \qquad (37)$$

$$\gamma_S=\frac{V}{3N(s-1)k_0T}\frac{1}{(1+\gamma_G^0)\gamma_G^0}\left[1-\frac{1}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right], \qquad (38)$$

$$\beta_S=\frac{V}{3N(s-1)k_0T}\frac{1}{1+\gamma_G^0}\left[1-\frac{1}{12}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2\right], \qquad (39)$$

$$\alpha_S=\frac{\gamma_G^0}{V}, \qquad (40)$$

Aşağı temperaturlar **($T \ll \theta_0$).** Temperaturun bu qiymətlərində

$\theta_0/T \to \infty$ olduğundan (10) və (23)-(25) funкsiyaları üçün alarıq:

$$A\left(\frac{\theta_0}{T}\right)=\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{-\frac{\theta_0}{T}}, \tag{41}$$

$$A_V\left(\frac{\theta_0}{T}\right)=\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 e^{-\frac{\theta_0}{T}}, \tag{42}$$

$$A_P\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right)=\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 e^{-\frac{\theta_0}{T}}\left[1+\frac{2\gamma_G^0}{1+\gamma_G^0}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{-\frac{\theta_0}{T}}\right], \tag{43}$$

$$M_0\left(\frac{\theta_0}{T},\gamma_G^0\right)=\frac{2}{1+\gamma_G^0}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{-\frac{\theta_0}{T}}, \tag{44}$$

(41)-(44) asimptotiкalarından istifadə edərəк aşağı temperaturlarda bərк cismin termodinamiк əmsalları üçün taparıq:

$$C_V=3N(s-1)k_0\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 e^{-\frac{\theta_0}{T}}, \tag{45}$$

$$C_P=3N(s-1)k_0\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 e^{-\frac{\theta_0}{T}}\left[1+\frac{2\gamma_G^0}{1+\gamma_G^0}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{-\frac{\theta_0}{T}}\right], \tag{46}$$

$$C_P-C_V=3N(s-1)k_0\frac{2\gamma_G^0}{1+\gamma_G^0}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^3 e^{-2\frac{\theta_0}{T}}, \tag{47}$$

$$\frac{C_P}{C_V}=1+\frac{2\gamma_G^0}{1+\gamma_G^0}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{-\frac{\theta_0}{T}}, \tag{48}$$

$$\beta_V=\frac{2}{\theta_0}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 e^{-\frac{\theta_0}{T}}, \tag{49}$$

$$\gamma_T=\frac{2V}{3N(s-1)k_0\theta_0}\frac{1}{\left(1+\gamma_G^0\right)\gamma_G^0}, \tag{50}$$

$$\alpha_P=\frac{2}{1+\gamma_G^0}\frac{1}{\theta_0}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)^2 e^{-\frac{\theta_0}{T}}, \tag{51}$$

$$\gamma_S=\frac{2V}{3N(s-1)k_0\theta_0}\frac{1}{\left(1+\gamma_G^0\right)\gamma_G^0}\left[1-\frac{2\gamma_G^0}{1+\gamma_G^0}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{-\frac{\theta_0}{T}}\right], \tag{52}$$

$$\beta_S=\frac{2V}{3N(s-1)k_0\theta_0}\frac{1}{1+\gamma_G^0}\left[1-\frac{2\gamma_G^0}{1+\gamma_G^0}\left(\frac{\theta_0}{T}\right)e^{-\frac{\theta_0}{T}}\right], \tag{53}$$

$$\alpha_S=\frac{\gamma_G^0}{V}. \tag{54}$$

(40) və (54)-dən görünür ki, adiabatik α_S əmsalı temperaturdan asılı deyil. Ümumiyətlə, qeyd etmək lazımdır ki, yuxarıda tədqiq olunmuş limit hallarında termodinamik əmsallar Eynşteyn temperaturu və Qryuneyzen parametri ilə təyin olunurlar. Bir də qeyd etmək istərdik ki, $C_V, C_P, (C_P - C_V)$ üçün alınmış temperatur asılılıqları [7] işindəki nəticələr ilə üst-üstə düşür.

ƏDƏBİYYAT

1. Əsgərov B.M., Mahmudov M.M., Fiqarova S.R. "Bakı Universitetinin Xəbərləri", fizika-riyaziyyat elmlər seriyası, №1, 2006, s.104-109.
2. Əsgərov B.M. Termodinamika və statistik fizika. Bakı Universiteti nəşriyyatı, Bakı, 2005.
3. Əsgərov B.M., Fiqarova S.R., Mahmudov M.M. "AMEA-nın Xəbərləri" fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, cild XXIV, №5, 2004, s.27-33.
4. B.M.Əsgərov. Bərk cisimlər nəzəriyyəsi. Bakı Universiteti nəşriyyatı, Bakı, 2001.
5. Аскеров Б.М., Махмудов М.М., Фигарова С.Р. "Вестник БГУ", серия физико-математических наук, №2, 2007, с.128-134.
6. Ансельм А.И. Основы статистической физики и термодинамики, М.: Наука, 1973.
7. Askerov B.M., Cankurtaran N.D., Phys.Stat.Sol. (b) **194**, pp.499-507, 1996.

ВЛИЯНИЕ ОПТИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ СО СЛОЖНОЙ РЕШЕТКОЙ

Б.М.АСКЕРОВ, С.Р. ФИГАРОВА, М.М.МАХМУДОВ, У.С.ПАШАБЕКОВА

РЕЗЮМЕ

В данной работе теоретически исследованы влияние оптических колебаний на термодинамические свойства непроводящих твердых тел со сложной кристаллической решеткой. Найдены аналитические выражения температурной зависимости всех термодинамических коэффициентов и показано, что они определяются температурой Эйнштейна и параметром Грюнейзена. Полученные температурные зависимости теплоемкости в предельных случаях низких и высоких температур совпадают с известными в литературе результатами.

INFLUENCE OF OPTICAL OSCILLATIONS ON THERMODYNAMIC PROPERTIES OF COMPLEX LATTICE SOLIDS

B.M.ASKEROV, S.R.FIGAROVA, M.M.MAHMUDOV, U.S.PASHABEKOVA

SUMMARY

The influence of optical oscillation on thermodynamic properties of non-conducting solids with a complex crystal lattice are theoretical investigated. Analytical expressions of dependence on temperature of all thermodynamic coefficients are found and is shown, that they are determined by Einstein's temperature and Gruneisen`s parameter. The received temperature dependences in limit cases of low and high temperatures coincides with known results in the

literature.