

О. В. Алифанов (Москва, НИТУ МиСИС). Двухуровневая система с учетом колебаний: модель тепловых свойств.

Исследованы тепловые свойства модельной двухуровневой системы, колеблющейся около положения равновесия при температуре T . Средняя энергия системы представлена в виде суммы энергии гармонического осциллятора $U^{(B)}$ с частотой ω и энергии двухуровневой системы $U^{(F)}$. Предполагается, что энергетические состояния последней описываются распределением Ферми–Дирака:

$$U = U^{(B)} + U^{(F)} = \left\{ \frac{\hbar\omega}{[\exp(\frac{\hbar\omega}{kT}) - 1]} + \frac{\Delta}{[\exp(\frac{\Delta - \mu}{kT}) + 1]} \right\}. \quad (1)$$

Здесь Δ — энергия частицы (элементарного возбуждения), $\hbar$ — постоянная Планка. Будем считать химический потенциал $\mu \approx 0$, имея в виду возможные приложения модели к металлам. Таким образом энергия кванта колебаний $\hbar\omega$ и энергия возбуждения Δ имеют общее начало отсчета — энергию нулевых колебаний. Введем обозначения:

$$a = \Delta/\hbar\omega, \quad x = \hbar\omega/kT, \quad (2)$$

где k — постоянная Больцмана, тогда (1) примет вид:

$$U(x) = kT \left(\frac{x}{e^x - 1} + \frac{ax}{e^{ax} + 1} \right), \quad (3)$$

При $x = 0$ (высокие температуры) из (3) получим:

$$U(0) = kT,$$

так что выражение в скобках в (3) имеет смысл относительной средней энергии модельной системы. Дифференцируя по T энергию (1) с учетом (2), найдем теплоемкость при постоянном объеме:

$$C = \frac{x^2}{4} \{ [\sinh(x/2)]^{-2} + a^2 [\cosh(ax/2)]^{-2} \}. \quad (4)$$

В частном случае $a = 1$ ($\hbar\omega = \Delta$) из (4) следует:

$$C = k \left[\frac{x}{\sinh(x)} \right]^2 \cosh(x). \quad (5)$$

Численные расчеты по формуле (4) представлены на рис. 1. Как видно из графика при больших значениях параметра a , т.е. при энергиях кванта колебаний $\hbar\omega$, малых по сравнению с энергией возбуждения Δ двухуровневой системы, кривая теплоемкости имеет вид характерный для гармонического осциллятора. При увеличении энергии колебаний $\hbar\omega$ ($a \sim 1$) теплоемкость принимает вид кривой с максимумом, при этом $C > k$, что наблюдается, в частности, для сверхпроводящих металлов [1]. На рис. 2 показано как изменяется вид кривой теплоемкости при малых значениях энергий возбуждения $\Delta < \hbar\omega$.

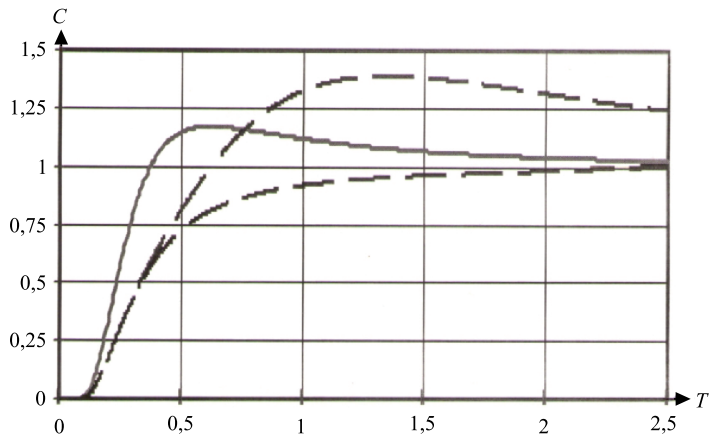


Рис. 1. Теплоемкость C (в единицах k) как функция температуры T (в единицах $\hbar\omega/k$) при различных значениях параметра a : $a = 1$ (сплошная кривая), $a = 3$ (верхняя пунктирная), $a = 20$ (нижняя пунктирная).

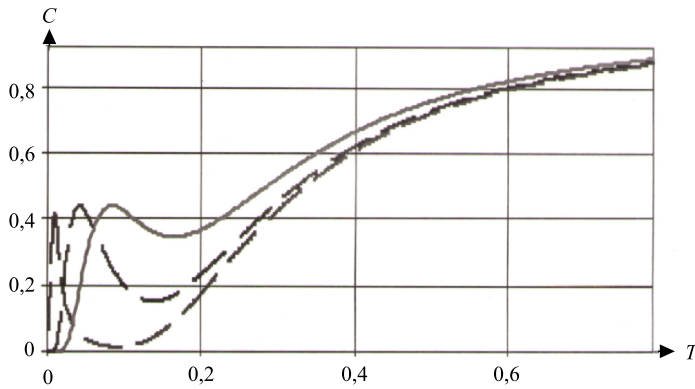


Рис. 2. Зависимость теплоемкости C (в единицах k) от температуры T (в единицах $\hbar\omega/k$) для различных значений a : $a = 0,02$ (нижняя пунктирная кривая), $a = 0,1$ (средняя пунктирная), $a = 0,2$ (сплошная кривая).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mukhin S. I. ArXiv:0807.4222v.1[cond-mat.str-el] 26 Jul 2008.