

Условие

3. Рассмотрите свойства идеального кристалла с кубической решеткой, образованного одинаковыми атомами массой m . Потенциальная энергия взаимодействия двух атомов зависит от расстояния между их центрами r по закону

$$U(r) = \frac{a}{r^{12}} - \frac{b}{r^6},$$

где a, b - некоторые положительные константы. Выразите через параметры a, b, m следующие характеристики кристалла: а) плотность ρ ; б) удельную теплоту сублимации (перехода из кристаллического в газообразное состояние) λ ; в) модуль Юнга кристалла E ; г) предел прочности на разрыв (максимальное механическое напряжение, который может выдержать кристалл без разрушения) - $\sigma_{н.р.}$; д) максимальное относительное удлинение кристалла до его разрушения $\varepsilon_{н.р.}$; е) линейный коэффициент термического расширения кристалла α . (Сила взаимодействия двух тел связана с потенциальной энергией соотношением $F = -U'_r$, где U'_r - производная энергии по r . При расчете всех характеристик можно учитывать взаимодействие атома **только** с его ближайшими соседями. Рекомендуем использовать приближенную формулу, справедливую при малых величинах x :

$$(1+x)^\alpha \approx 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2}x^2,$$

в которой вы можете использовать столько членов, сколько требуется в конкретной ситуации. Увеличение размеров тела при нагревании описывается формулой $l = l_0(1 + \alpha \Delta T)$, где α - линейный коэффициент термического расширения).

Решение

3. Вычислим силу взаимодействия между двумя атомами как функцию расстояния между ними

$$f = -U' = \frac{12a}{r^{13}} - \frac{6b}{r^7}. \quad (1)$$

Положению равновесия соответствует нулевая сила взаимодействия (или, что равносильно, минимум потенциальной энергии). Поэтому равновесное расстояние между атомами (период решетки) найдем из условия $f = 0$, из которого следует

$$r_0 = \left(\frac{2a}{b}\right)^{\frac{1}{6}}. \quad (2)$$

На один атом в кубической кристаллической решетке приходится объем r_0^3 , следовательно плотность кристалла рассчитывается по формуле

$$\rho = \frac{m}{r_0^3} = m\sqrt{\frac{b}{2a}}. \quad (3)$$

Вычислим энергию связи, приходящуюся на один атом. Так как атом взаимодействует с $n = 6$ ближайшими соседями, то его потенциальная энергия

$$u = \frac{n}{2}U(r_0) = -\frac{3b^2}{4a}, \quad (4)$$

где учтено, что функция $U(r)$ описывает энергию взаимодействия двух атомов. Для перехода из кристаллического в газообразное состояние нужно сообщить кристаллу энергию, необходимую для разрыва всех связей, иными словами, удельная теплота сублимации рассчитывается по формуле

$$\lambda = -\frac{u}{m} = \frac{3b^2}{4am}. \quad (5)$$

При отклонении атомов от положения равновесия возникает сила, стремящаяся вернуть атомы в исходное положение. При малых деформациях эта сила пропорциональна деформации. Для ее вычисления преобразуем формулу (1) при условии $r = r_0 + x$, где x - малое отклонение от положения равновесия. В ходе преобразований необходимо использовать приближенную формулу, приведенную в условии задачи с учетом членов первого порядка малости

$$f = \frac{12a}{(r_0 + x)^{13}} - \frac{6b}{(r_0 + x)^7} = \frac{12a}{r_0^{13}} \left(1 + \frac{x}{r_0}\right)^{-13} - \frac{6b}{r_0^7} \left(1 + \frac{x}{r_0}\right)^{-7} \approx -\frac{36b}{r_0^7} \cdot \frac{x}{r_0}. \quad (6)$$

В поперечном сечении кристалла на один атом приходится площадь r_0^2 , следовательно, механическое напряжение в кристалле определяется формулой

$$\sigma = \frac{f}{r_0^2} = \frac{36b}{r_0^9} \cdot \frac{x}{r_0} = \frac{18}{\sqrt{2}} b \left(\frac{b}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{x}{r_0}. \quad (7)$$

Сравнивая с законом Гука $\sigma = E\varepsilon$ (где $\varepsilon = x/r_0$ - относительная деформация), получим выражение для модуля Юнга

$$E = \frac{18}{\sqrt{2}} b \left(\frac{b}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \approx 12,8b \left(\frac{b}{a}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (8)$$

Сила взаимодействия между атомами принимает максимальное значение при некотором расстоянии r_1 . Если расстояние между атомами превысит r_1 , то сила взаимодействия (притяжения) начнет уменьшаться и, следовательно, при постоянной внешней силе кристалл разрушится. Найдём значение r_1 из условия $f' = 0$:

$$f' = -\frac{12 \cdot 13a}{r^{14}} + \frac{6 \cdot 7b}{r^8} = 0. \quad (9)$$

Из уравнения (9) находим расстояние r_1 , при котором сила притяжения максимальна

$$r_1 = \left(\frac{26a}{7b}\right)^{\frac{1}{6}}. \quad (10)$$

Таким образом, максимальное относительное удлинение кристалла до разрушения определяется соотношением

$$\varepsilon_{max} = \frac{r_1 - r_0}{r_0} = \left(\frac{13}{7}\right)^{\frac{1}{6}} - 1 \approx 0,11. \quad (11)$$

При таком удлинении сила взаимодействия и соответствующее механическое напряжение (которое и является предельной прочностью) определяются формулой

$$\sigma_{max} = \frac{U'(r_1)}{r_0^2} = \frac{18}{\sqrt{2}} \left(\frac{13}{7}\right)^{\frac{7}{6}} b \left(\frac{b}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \approx 26,2b \left(\frac{b}{a}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (12)$$

Термическое расширение твердых тел связано с увеличением кинетической энергии колеблющихся атомов. С ростом температуры увеличивается диапазон изменения расстояний между атомами. Существенным фактором является несимметричность потенциальной кривой - максимальное отклонение от положения равновесия в большую сторону превышает отклонение в меньшую сторону. Обозначим максимальное и минимальное расстояния между атомами в ходе колебаний r_1 и r_2 , соответственно. Тогда среднее расстояние между атомами может быть оценено как среднее арифметическое между этими величинами. Расстояния r_1 и r_2 являются корнями уравнения

$$U(r) = U(r_0) + kT, \quad (13)$$

где kT - средняя энергия одномерного колебательного движения атомов в кристаллической решетке (k - постоянная Больцмана, T - абсолютная температура). Если обозначить $x = r^{-6}$ и принять во внимание формулу (20), то уравнение (13) примет вид

$$ax^2 - bx + \frac{b^2}{4a} - kT = 0, \quad (14)$$

корни которого находятся по формуле

$$x_{1,2} = \frac{b}{2a} \left(1 \pm \sqrt{\frac{4akT}{b^2}} \right). \quad (15)$$

Теперь можно найти значения r_1 и r_2 :

$$r_{1,2} = r_0(1 \pm \delta)^{-\frac{1}{6}} \approx r_0(1 \mp \frac{\delta}{6} + \frac{7}{72}\delta^2), \quad (16)$$

где обозначено $\delta = \sqrt{\frac{4akT}{b^2}}$ и использовано разложение степенной функции с учетом членом второго порядка малости. Среднее расстояние между атомами найдем, усредняя r_1 и r_2 :

$$\bar{r} = \frac{r_1 + r_2}{2} = r_0 \left(1 + \frac{7}{72}\delta^2 \right) = r_0 \left(1 + \frac{7akT}{18b^2} \right). \quad (17)$$

Сравнивая выражение (17) с формулой термического расширения $l = l_0(1 + \alpha\Delta T)$, находим линейный коэффициент термического расширения

$$\boxed{\alpha = \frac{7ak}{18b^2}}. \quad (18)$$