

(C) Debye-Modell:

Näherung: Schallgeschwindigkeit ist für jeden Polarisationsartyp konstant:

$$\omega = q \cdot v \quad (\text{is unabh. von } \omega)$$

Damit wird die Zustandsdichte:

$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3}$$


Für N primitive Elementarzellen (d.h. N Atome) in der Probe

⇒ N akustische Schwingungszustände (für jede Polarisationsrichtung)

Aus GE (*) folgt damit eine max. Schwingungsfrequenz

ω_D (Grenzfrequenz):

$$\omega_D^3 = \frac{6\pi^2 \cdot N}{V} \cdot v^3$$

{ Häufig wird hier die effektive Geschw. v_D benutzt

Analog erhält man für den Grenzwellenvektor q_D :

$$q_D = \frac{\omega_D}{v} = \left(\frac{6\pi^2 \cdot N}{V} \right)^{1/3} \quad N/V = \text{Atomdichte}$$

Im Debye-Modell ergibt sich für die innere Energie U

$$U = \int d\omega D(\omega) \langle n(\omega) \rangle \hbar \omega \quad \leftarrow \text{pro Polarisationsgrad}$$

$$= \int_0^{\omega_D} \frac{V \omega^2}{2\pi^2 v^3} \cdot \left(\frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \right)$$

Effektive Geschw. v_D mit Debye-Geschwindigkeit

$$\sum \frac{1}{v^3} = \frac{3}{v_D^3} := \left(\frac{1}{v_e^3} + \frac{2}{v_t^3} \right)$$

(Auf Berücksichtigung des Polarisationsgrade und $v_e \approx v_t \approx v_D$)

$$U(T) = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \cdot \omega^2 d\omega$$

mit Debye Temp. Θ : $\hbar \omega_D = k_B \Theta$

und $x = \hbar \omega / k_B T$, $x_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B T} = \frac{\Theta}{T}$

erhält man für die Wärmekapazität C_V :

$$c_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 9 N k_B \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

= Debye-Formel Int.

= universelle Darstellung der Temperatur abh. der Wärmekapazität mit nur ein mal abh. Konstanten

Fig. 39

	C	Si	Fe	Al	NaCl	Au
θ_{EKI}	2230	640	470	430	320	164

Grenzfälle:

(i) hohe Temp. $x \rightarrow 0$

$$\text{Int.} \approx \int_0^{x_D} \frac{x^4}{(1+x-1)^2} dx = \int_0^{x_D} x^2 dx = \frac{1}{3} \left(\frac{\theta}{T} \right)^3$$

$$c_V = 3 N k_B \stackrel{!}{=} \text{Dulong Petit'sches Gesetz}$$

(ii) tiefe Temp.: $x_D \rightarrow \infty$ ($x_D = \frac{\theta}{T}$)

$$\text{Int} \rightarrow \int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \frac{4\pi^4}{15}$$

$$c_V = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \quad \text{"T}^3\text{-Gesetz" für niedrige } T$$

(d) Einstein-Modell

N Oszillatoren mit der selben Frequenz ω_0 .

$$\rightarrow D(\omega) = N \delta(\omega - \omega_0) \quad (\text{in einer Dimension})$$

$$\rightarrow u = N \langle n \rangle \hbar \omega_0 = \frac{N \hbar \omega_0}{e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1}$$

$$\rightarrow c_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = N k_B \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_0 / k_B T}}{(e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1)^2}$$

Beschreibt den allg. Verlauf von c_V richtig.
Bei niedriger Temp. findet man alludigs exp. Abh. \rightarrow zum Exponent

(e) Zustandsdichte $D(\omega)$ im allg. Fall

Dispersion ist in realen Kristallen komplizierter als

$$\omega = v q \quad \text{bzw.} \quad \frac{d\omega}{dq} \neq \text{const}$$

$$\rightarrow D(\omega) = \frac{V q^2}{2\pi^2} \cdot \frac{1}{\left(\frac{d\omega}{dq}\right)}$$

die Dispersionsrelation besitzt Singularitäten für Frequenzen mit $d\omega/dq = 0$. Zustandsdichte realer Kristalle komplizierter als einfach $\propto \omega^2$ Abh.

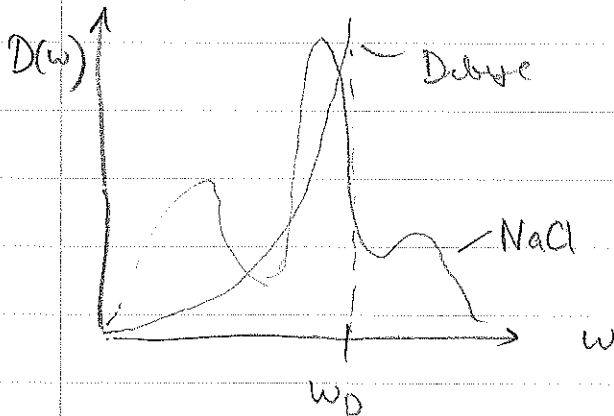


Fig 3.10

(f) Zusammenfassung Wärmekapazität: Fig 3.11)