Vorlesung 2

Thursday, 17. October 2019 17:59

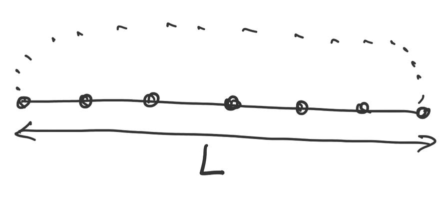
2.2. Debye - Modell (1912)

- Einstein Modell beschreibt das experimentelle Verhalten der Wärmekapazität $\sim T^3$ für tiefe T nicht. Metalle haben zusätzlich einen Term $\sim T$. Magnetische Materialien haben zusätzliche Terme
- Oszillation von Atomen sind nicht unabhängig
  $\Rightarrow$ Schallwellen
- Quantisierung ähnlich wie für Licht
  - Licht hat zwei Polarizationsrichtungen
  - Schall hat drei: zwei transversale Mode, ein longitudinale Mode

    häufig $v_{long} > v_{trans}$
  - hier Vereinfachung: alle drei Mode haben die selbe Schallgeschwindigkeit

2.2.1 Periodische Randbedingung (Born-Von-Karman)

$\boxed{1D}$



Rand verbunden
$\Rightarrow$ periodische RB

- Welle bei e^{ikr} ist identisch zu $e^{ik(r+L)}$
  $\leadsto$ k-Werte nur $k = \frac{2\pi n}{L}$, $n = 0, 1, 2 \dots$
- Nährung für L groß
  $$\sum_k \longrightarrow \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk$$
  $\frac{2\pi}{L}$ ist der Abstand zwischen erlaubte k-Werten

$\boxed{3D}$ Welle $e^{i\vec{k}\vec{r}}$, Systemgröße L^3

erlaubte k-Werte $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3)$

$$\sum_{\vec{k}} \longrightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}$$

2.2.2 Debye's Rechnung (analog zu Planck für Licht)

- lineare Dispersionsrelation
  $$\omega(\vec{k}) = v|\vec{k}|$$
  ω: Kreisfrequenz
  v: Schallgeschwindigkeit
  $\vec{k}$: Wellenvektor $k = \frac{2\pi}{\lambda}$
  - Geschwindigkeit ist unabhängig von der Frequenz
  - wie Licht im Vakuum
- für jeden $\vec{k}$-Wert gibt es drei Oszillationsmoden
- analog zu Einstein:
  $$\langle E \rangle = 3 \sum_{\vec{k}} \hbar\omega(\vec{k}) \left(n_B(\beta\hbar\omega(\vec{k})) + \frac{1}{2} \right)$$
  $$= 3 \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}\, \hbar\omega(\vec{k}) \left(n_B(\beta\hbar\omega(\vec{k})) + \frac{1}{2} \right)$$
  Besetzungszahl $n_B(x) = \frac{1}{e^x - 1}$
- jede Mode ist ein Boson mit Frequenz $\omega(\vec{k})$, die im Mittel mit $n_B(\beta\hbar\omega(\vec{k}))$ besetzt ist
- spherische Koordinaten
  $$\int \vec{k} \rightarrow 4\pi \int_0^{\infty} k^2\, dk$$
  $4\pi k^2$ ist die Oberfläche der k-Kugel
- mit $k = \frac{\omega}{v}$
  $$\langle E \rangle = 3 \frac{4\pi L^3}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega \frac{1}{v^3} \hbar\omega \left(n_B + \frac{1}{2} \right) \quad (2.3)$$
- Atomdichte $n = \frac{N}{L^3}$ N: Anzahl der Atome
  $$\langle E \rangle = \int_0^{\infty} d\omega\, g(\omega) \hbar\omega \left(n_B + \frac{1}{2} \right) \quad (2.4)$$
- Zustandsdichte
  $$g(\omega) = N \frac{12\pi\, \omega^2}{(2\pi)^3 n v^3} = N \frac{9\omega^2}{\omega_D^3} \quad (2.5)$$
- Debye-Frequenz
  $$\omega_D^3 = 6\pi^2 n v^3 \quad (2.6)$$

$g(\omega)d\omega$ ist die Anzahl von Oszillationsmoden mit der Frequenz zwischen ω und $\omega + d\omega$

- analog zu Planck für Licht, aber:
  $$\frac{2}{c^3} \longrightarrow \frac{3}{v^3} + \text{Nullpunktenergie } \frac{1}{2}$$

$$\langle E \rangle = \frac{9N\hbar}{\omega_D^3} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + T\text{-unabhängige Terme}$$

(können wir weglassen, da wir die Ableitung suchen $C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$)

mit $x = \beta\hbar\omega$

$$\langle E \rangle = \frac{9N\hbar}{\omega_D^3 (\beta\hbar)^4} \underbrace{\int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{\frac{\pi^4}{15}} + T\text{-unab. Terme}$$

$$\langle E \rangle = \frac{9N(k_B T)^4}{(\hbar\omega_D)^3} \frac{\pi^4}{15} + T\text{-unab. Terme}$$

ist analog zu Planck's T^4 Abhängigkeit für Photone

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = N k_B \frac{(k_B T)^3}{(\hbar\omega_D)^3} \frac{12\pi^4}{5} \sim T^3$$

- Debye-Temperatur $k_B T_D = \hbar\omega_D$
  $$\boxed{C = N k_B \frac{T^3}{T_D^3} \frac{12\pi^4}{5}}$$

2.2.3 Debye's Nährung

Problem: Divergenz von C für $T \to \infty$
aber wir wissen $C \to 3k_B N$ für $T \to \infty$

- Kommt von ∞-großer Zahl von Schallwellenmoden
- Moden sollten aber mit der Anzahl der Freiheitsgrade begrenzt werden!

$\Rightarrow$ Einführung einer maximalen Frequenz ω_{cutoff}

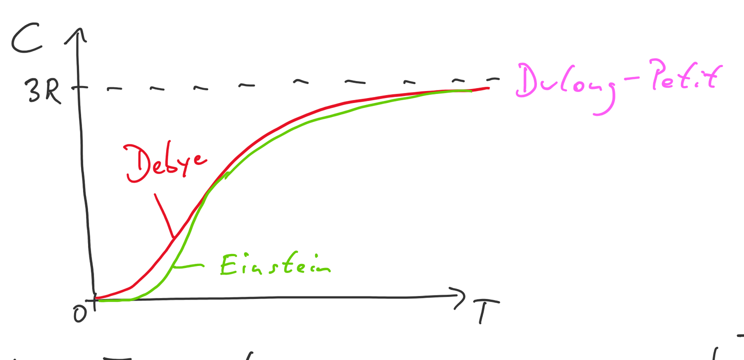
$$3N = \int_0^{\omega_{cutoff}} d\omega\, g(\omega)$$

- von Eq. 2.4
  $$\langle E \rangle = \int_0^{\omega_{cutoff}} d\omega\, g(\omega) \hbar\omega\, n_B(\beta\hbar\omega)$$
- für hohe T
  $$n_B(\beta\hbar\omega) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \longrightarrow \frac{k_B T}{\hbar\omega}$$

$$\leadsto \langle E \rangle = k_B T \int_0^{\omega_{cutoff}} d\omega\, g(\omega) \overset{!}{=} 3k_B T N \quad \text{(Dulong-Petit)}$$

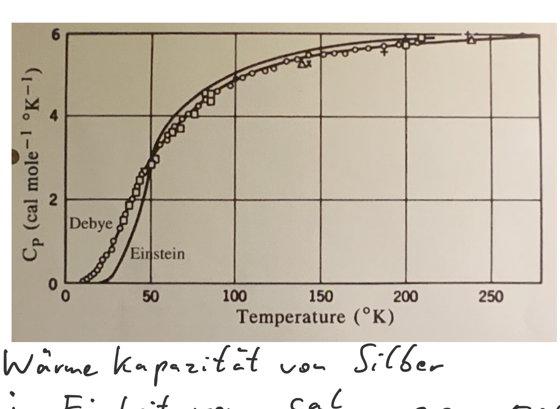
$$\leadsto 3N = \int_0^{\omega_{cutoff}} d\omega\, g(\omega) \underset{\text{Eq. 2.5}}{=} 9N \int_0^{\omega_{cutoff}} d\omega \frac{\omega^2}{\omega_D^3} = 3N \frac{\omega_{cutoff}^3}{\omega_D^3}$$

$$\leadsto \boxed{\omega_D = \omega_{cutoff}}$$

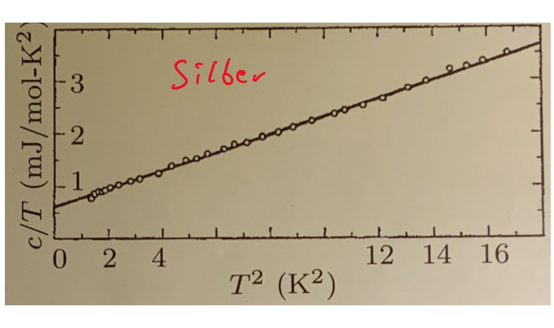


Debye-Temperaturen verschiedener Materialien:

	T_D (K)
Diamant	1850
Cr	610
α-Eisen	464
Al	428
Cu	345
Ag	215
Au	165
Pb	95



Wärmekapazität von Silber in Einheit von $\frac{cal}{K\, mol}$: $3R \approx 5.96$



$$C = \gamma T + \alpha T^3$$
$$\frac{C}{T} = \gamma + \alpha T^2$$

2.2.4 Schwachstellen des Debye-Modells

- cutoff sieht wie Betrug aus
- Annahme von $\omega = vk$ (lineares Dispersionsgesetz)
  wir erwarten aber Abweichungen wenn wir in die Nähe von Atomabständen kommen
- Debye-Modell nicht so gut für mittelgroße T
- Lineare Anteil für Metalle fehlt bei tiefen T

2.3. Zusammenfassung der Wärmekapazität im FK

- ein großer Teil der Wärmekapazität kommt von atomaren Schwingungen
- Boltzman und Einstein benutzen N harmonische Oszillatoren
- Boltzman bekommt das Dulong-Petit Gesetz
  $$C = 3Nk_B = 3R$$
- Einsteins Quanten-Analyse zeigt exponentiellen Abfall für $k_B T < \hbar\omega$
- Debye-Modell
  - lineare Dispersion $\omega = vk$
    analog zu Licht aber 3 Polarisationsrichtungen
  - Quantisierung analog zu Planck
  - maximale Frequenz: $\hbar\omega_D = k_B T_D$
    um $3N$ Freiheitsgrade zu bekommen
  - $C = 3k_B N$ für T groß (Dulong-Petit)
  - $C \sim T^3$ für T klein
- Metalle haben zusätzlich einen linearen T-Anteil
- Zustandsdichte
  $$g(\omega) = 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3}$$