INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. U. Motschmann
Dipl.-Phys. S. Simon

THERMODYNAMIK UND STATISTISCHE MECHANIK — WS 2004/2005

18. Übungsblatt — Abgabe: keine

Fragen zu den Übungsaufgaben: S. Simon, Raum A317, Tel. 391-5187, sven.simon@tu-bs.de

---

61. **Debye-Approximation I**

Einen Festkörper aus N Atomen kann man näherungsweise als ein System von $3N$ ungekoppelten, linearen harmonischen Oszillatoren betrachten. Die Frequenzen dieser Oszillatoren bezeichnen wir mit ω_j, wobei $j = 1, 2, \ldots, 3N$ ist. Grundlegende Annahme des *Einstein-Modells* war $\omega_j = \omega_E$ für alle j. Im *Debye-Modell* sind dagegen die Frequenzen der ungekoppelten Oszillatoren mit der Zustandsdichte

$$D(\omega) = \begin{cases} \frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2 & : \quad \omega \leq \omega_D \\ 0 & : \quad \omega > \omega_D \end{cases}$$

verteilt. $D(\omega)\,\mathrm{d}\omega$ ist also die Zahl der Oszillatorfrequenzen zwischen ω und $\omega + \mathrm{d}\omega$. Die *Debye-Frequenz* ω_D ist durch die Bedingung

$$\int_0^\infty D(\omega)\,\mathrm{d}\omega = 3N \qquad \text{(Gesamtzahl der Eigenschwingungen des Kristalls)}$$

festgelegt.

(a) Betrachten Sie zunächst eine *beliebige* Zustandsdichte $D(\omega)$. Berechnen Sie die Wärmekapazität C_V als Funktional von $D(\omega)$. Es bezeichne ω_{max} die größte auftretende Schwingungsfrequenz. Untersuchen Sie das Verhalten von C_V im Bereich $\beta\hbar\omega_{max} \ll 1$.

(b) Kontrollieren Sie die in Teil (a) aufgestellten allgemeinen Formeln durch Anwendung auf das Einstein-Modell.

(c) Nutzen Sie die Ergebnisse von Teil (a) nun zur Bestimmung von C_V im Rahmen der Debye-Theorie. Diskutieren Sie C_V in den Grenzfällen $T \ll \Theta_D$ und $T \gg \Theta_D$, wobei Θ_D die Debye-Temperatur ist. *Hinweis:* $\int_0^\infty \mathrm{d}x\,\frac{x^3}{\exp(x)-1} = \frac{\pi^4}{15}$.

(d) Berechnen Sie die Entropie und überprüfen Sie die Gültigkeit des dritten Hauptsatzes.

(e) Skizzieren Sie qualitativ die Phononendispersion eines Kristalls mit zweiatomiger Basis und diskutieren Sie die Gültigkeitsgrenzen des Debye-Modells. Vergleichen Sie insbesondere die Zustandsdichte eines realen Festkörpers mit der des Debye-Modells.