

## 14.4. Phononen: Modell von Debye

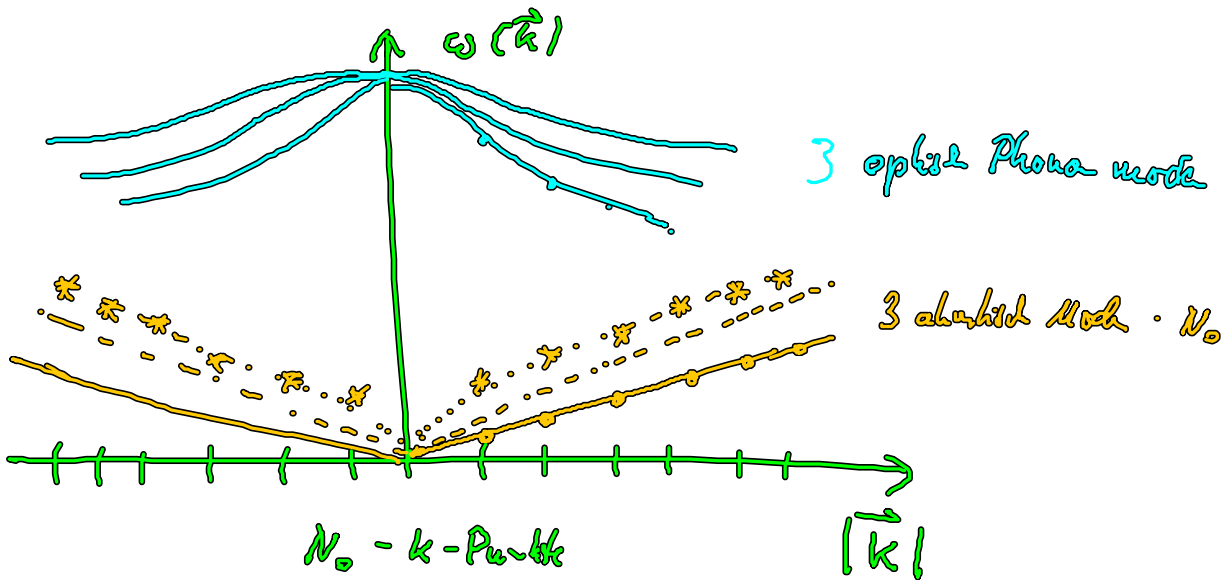
- Festkörper mit  $N_0$  Elementarzellen und  $p$ -Ionen / Atome pro Zelle

- Aussage der Theoretischen Festkörperphysik:

(i) es gibt  $3pN_0$  kollektive Schwingungsmoden  
(in harmonischer Näherung)

(ii) davon sind  $(3p-3)N_0$  optisch Moden (koppeln an Licht)  
und  $3N_0$  akustisch Moden ( $\omega(\vec{k}) \rightarrow 0$  für  $|\vec{k}| \rightarrow 0$ )

Beispiel: 2 Atome pro Elementarzelle,  
Dispersionsrelation  $\omega = \omega(\vec{k})$ :



- akustische Moden haben klein  $\vec{k}$  im  $\vec{k}$ -Raum

- und werden bei st.  $kT$  schnell besetzt  
 - approx. Mod. typischerweise eLgeform bei  $kT \ll kT$

Festkörper und kanonische Zustandsgleichung

$$E(T, N, V) = \sum_{\lambda} \sum_{\{\vec{k}\}}^N h \omega_{\lambda}(\vec{k}) \int_{\kappa}^{\infty} = \sum \text{alle Mode } \lambda, \vec{k} \cdot \text{Modenergie} \cdot \text{Feldzahl}$$

ben. gesucht wird um  $C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$  zu berechnen (Messgröße).

Idee v. Debye (Debye Modell); Annahmen:

(i)  $p=1 \rightarrow 1 \text{ Atom/Zelle} \Rightarrow 3 \text{ akustisch Mode}$

(ii)  $\omega_{\lambda}(\vec{k}) = c_{\lambda} |\vec{k}|$  f. alle  $\vec{k}$ -Werte, f. alle  $\lambda$   
 $\uparrow$   
 Schallgeschwindigkeit

$\hat{=}$  3 ident. isel. akust. Moden

(iii) Ein folg. ein. Zustand dichte für  $\omega$

wie ist  $\sum_{\vec{k}}$  berechnen:

$$\sum_{\vec{k}} \xrightarrow{\text{großer Kasten}} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \xrightarrow{\text{Isotropie}} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} dk k^2 4\pi \quad (\text{Kugelkoordinat})$$

(alles hängt v.  $|\vec{k}|$  ab)

$$= \left( \begin{array}{l} \text{Dispersionsrelation} \\ \omega_{\vec{k}} = c_0 |\vec{k}| = c_0 k \end{array} \right) = \frac{V}{2\pi^2 c_0^3} \int d\omega \omega^2$$

$$\equiv \int d\omega D(\omega)$$

$D(\omega)$  Zustände drehk im Frequenzintervall  $d\omega$

$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 c_0^3} \omega^2$$

ist Zustände drehk, ges.  $\sum_{\vec{k}}$  (zählt alle Zustände) =  $\int d\omega D(\omega)$

$$\left( \begin{array}{l} \text{analyt. ED: } Q = \int d^3\vec{r} \rho(\vec{r}) \\ \text{Lsg} \quad \text{Korpdichte} \end{array} \right)$$

$$\text{Grenzfrequenz: } \int d\omega \rightarrow \int_0^{\omega_D} d\omega$$

↑  
untere Grenze an Dispersion

$\omega_D$  - Debye frequenz ab oberer Frequenz d. Dispersion

Zahl der Zustände bestimmt Debye Frequenz:

$$N_D = \sum_{\vec{k}} 1 \stackrel{!}{=} \int_0^{\omega_D} d\omega D(\omega) \rightarrow \text{Bestimmungsgleichung f. } \omega_D :$$

$$N_0 = \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{V}{2\pi^2 c_0^3} \omega^2 = \frac{V}{6\pi^2 c_0^3} \omega_D^3$$

$$\omega_D = \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N_0}{V}} c_0$$

Interpretation: •  $\omega_D = \omega_D \left( \frac{N_0}{V} \hat{=} \text{Teilchendichte} / \text{konst} \right)$

•  $\omega$  ist maximal griffunge  $\omega = \omega_D$

wobei  $\omega = \omega(\vec{k})$  und

$\omega$  und  $|\vec{k}| \sim \frac{1}{\lambda}$  in griffunge  $\vec{k}$  gilt,

wobei  $\lambda$  in Klammerung. Wellenlänge (Abstand) gilt

Zurück zu kanonisch Zustandsgleichung:

$$F = \sum_{\lambda=1}^3 \int_0^{\omega_D} d\omega D(\omega) \frac{\omega \hbar}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} \quad \omega_\lambda = \omega \text{ im Debye Modell}$$

$$= \frac{3V}{2\pi^2 c_0^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \omega^2 \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1}$$

weil Koordinate  $x = \hbar\omega\beta = \frac{\hbar\omega}{kT}$

und Debyetemperatur  $T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k}$

$$= \frac{3V \hbar}{2\pi^2 c_0^3} \left( \frac{kT}{\hbar} \right)^4 \int_0^{T_0/\hbar} dx x^3 \frac{1}{e^x - 1}$$

$$= \frac{3V \hbar}{c_0^3 2\pi^2} \omega_D^4 \left( \frac{T}{T_D} \right)^4 \int_0^{T_0/\hbar} dx \frac{x^3}{e^x - 1}$$

Vorfaktor  $\cdot I\left(\frac{T}{T_D}\right) \rightarrow$  dimension

Diskussion:  $T_D \gg T \rightarrow$  quant. med. ;  $T_D \ll T \rightarrow$  klassisch

a) klassisch Grenzfall  $T \rightarrow \infty \hat{=} \frac{T_D}{T} \rightarrow 0$

$$I\left(\frac{T}{T_D}\right) = \left(\frac{T}{T_D}\right)^4 \int_0^{T_0/\hbar} dx \frac{x^3}{1 + e^x - 1} = \left(\frac{T}{T_D}\right)^4 \frac{1}{3} x^3 \Big|_0^{T_0/\hbar} = \frac{T}{3T_D}$$

oben für  $z$  geht gegen Null,

wenn wir sehr klein  $x$  mit,

im Nenner Taylor f. klein  $x$

$$\bar{E} = \frac{3V \hbar}{3 c_0^3 2\pi^2} \cdot \omega_D^4 \frac{T}{T_D} = \frac{V \hbar}{c_0^3 2\pi^2} \underbrace{\frac{\omega_D}{\hbar}}_{T_D} \underbrace{\frac{\omega_D^3}{c_0^3}}_{\frac{6\pi^2 N_0}{V}} \frac{T}{T_D} = \underline{\underline{3kT N_0}}$$

$\hat{=}$  Wert nach Plancksches  $3N_0$  Mod, sich hat 2 quadratische FG

$$\rightarrow \bar{E} = 3N_0 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} kT = 3N_0 kT$$

$\downarrow$   $c_v = \text{konst}$  in klass. Fall f. Festkörper

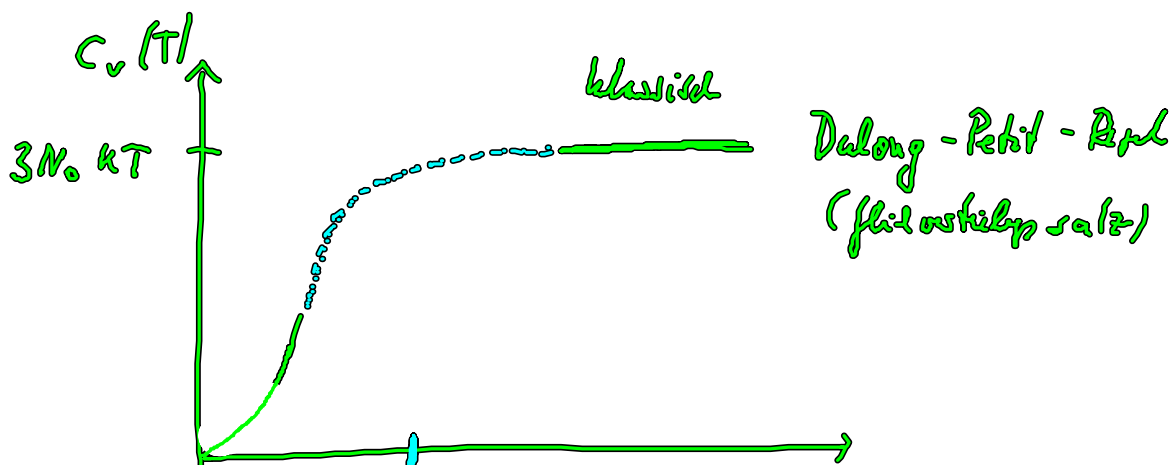
b) Quantengrenzfall  $T \rightarrow 0 \hat{=} \frac{\bar{T}_D}{T} \rightarrow \infty$

$$\bar{E}\left(\frac{\bar{T}}{\bar{T}_D}\right) = \left(\frac{\bar{T}}{\bar{T}_D}\right)^4 \underbrace{\int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{\text{Zahl, konstant}}$$

$$\downarrow E = \frac{3V k}{c_0^3 2\pi^2} \left(\frac{\bar{T}}{\bar{T}_D}\right)^4 \cdot \text{konstant} \sim T^4 \text{ f. klein } T \ll \bar{T}_D$$

$$\downarrow c_v = \text{konst} \cdot T^3$$

Skizze



extrem  
Ante-  
lines  $T_D$   $T$

Die Debye Temperatur ist ein Maß f. das Verhalten d. Systems bei  $T$

$T \gg T_D \rightarrow$  klassisch

$T \ll T_D \rightarrow$  quantisch

$T_D$  (Kupfer)  $\sim 360$  K

$T_D$  (Blei)  $\sim 600$  K

Bemerkung:

a) optisch Phonon bis  $\omega_D$  gelockt,

haben endliche Energie und tragen entscheidend Temp. bei

(falls  $\sim 36$  meV,  $kT \sim \frac{1}{40}$  eV),  $T^3$  ist gutes Maß

b) Festkörper haben nicht nur Ionen, sondern auch Elektronen (Fermigas)

$$\bar{E}_{\text{Fermi}} = \bar{E}_{T=0} + \alpha T^2$$

$$\rightarrow C_v / \text{Elektron} \sim T$$

dominant bei  $T \rightarrow 0$  (sehr, sehr klein!)

## 14.5. Zweiatomige fa

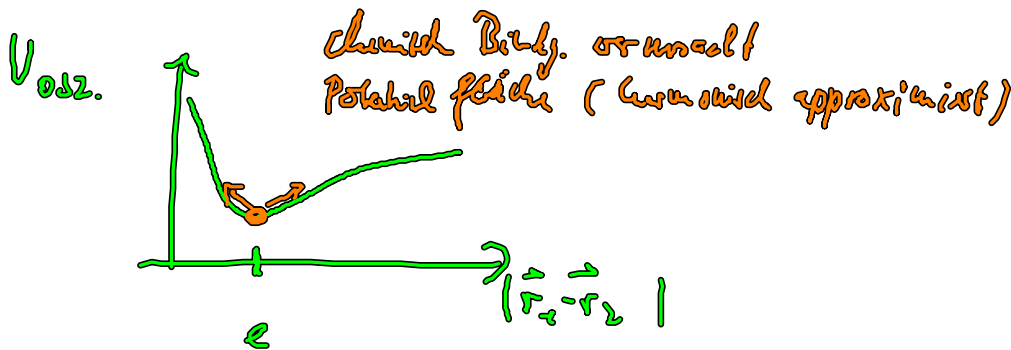
Bsp. f. System mit inneren Freiheitsgraden



2 Atome  $\hat{=}$  Molekül  
gebunden

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2}_{\text{2 Atome}} + \frac{k}{2} (|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| - e)^2$$

↑  
Minimum d.  
Schwgg.



auch H-Atom

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R}_{\text{Schwerptts-}} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r}_{\text{beweg.}} + \frac{k}{2} (r - e)^2$$

Schwerptts-    Relativ-  
beweg.  $\vec{R}$     beweg.    }  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{r}$

in Kugelkoordinaten:



$$= -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{1}{2\mu r^2} \vec{L}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu r} \partial_r^2 r + \frac{k}{2} (r-e)^2$$



hängt nicht von

$r$  ab  $\hat{=}$  Näherung!

$$= H_{\text{transl.}}(R) + H_{\text{rot}}(\vartheta, \varphi) + H_{\text{osc}}(r)$$

diese Aufteilung erlaubt Aufspaltung in 3 unabhängige Zustandsummen

$$Z = Z_T \cdot Z_{\text{rot}} \cdot Z_{\text{osc}}$$

( z. B. kanonisch  $e^{-H\beta} = e^{-\beta H_T} e^{-\beta H_{\text{rot}}} e^{-\beta H_{\text{osc}}}$  )

$Z_T$  : bekannt  $\rightarrow$  Fermion / Boson / klass. für Teilchen

$$Z_{\text{rot}} = \sum_j (2j+1) e^{-\beta \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1)} \quad \text{Rotator (qm)}$$

$Z_{\text{osc}}$  : bekannt

ohne Reddy, klassisch:

a) Schwerpunkt:  $\bar{E} = \frac{3}{2} kT$  pro Molekül

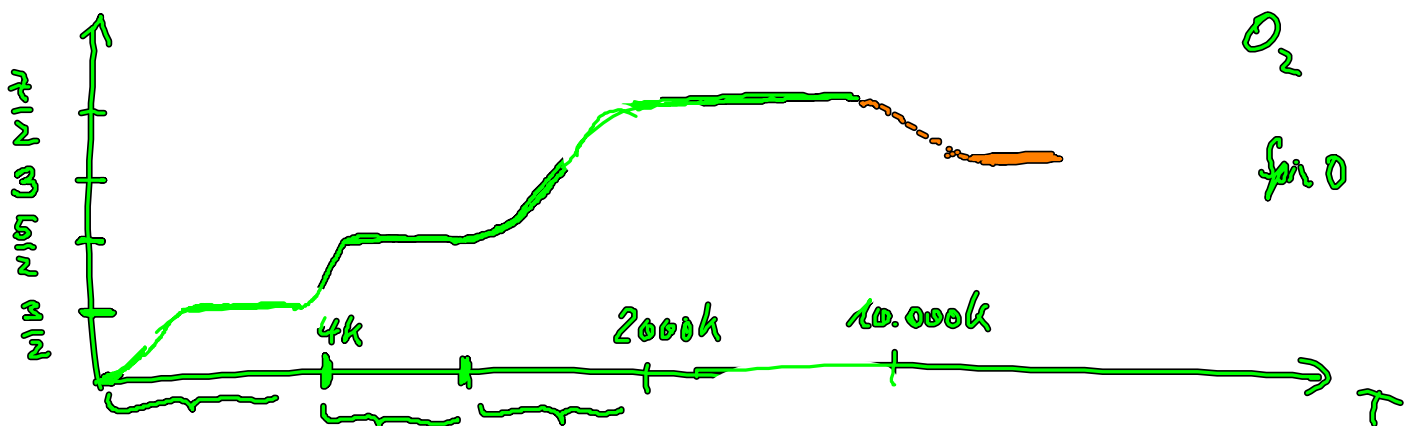
b) Rattle: (i) Rotation: 2 Freiheitsgrade in  $r$  ( $r, \varphi$ )

$$\bar{E} = 2 \cdot \frac{1}{2} kT = kT$$

(ii) Rotation auf d. Kugeloberfläche bei  $l = \text{fest}$   
 kinet. Energie v. 2 Freiheitsgraden.

$$P_r / P_\varphi \rightarrow \bar{E} = 2 \cdot \frac{1}{2} kT = kT$$

$E$  in  $kT$  pro Molekül



<p><u>Schwerpunkt- bewegung</u></p> <p><math>c_v = T^{3/2} f.</math></p> <p>Borgers</p> <p>0,1 k</p>	<p><u>Rotation</u></p> <p><u>Oxidation</u></p> <p><u>elastisch:</u></p> <p>alle FG sind flüssig ausgefüllt</p>	<p><u>Dissoziation</u></p> <p>doppelt soviel Moleküle (3 kT)</p> <p>ohne WW</p>
--	--	---