# V47 Temperaturabhängigkeit der Molwärme von Festkörpern

Dominik Birkwald, Domink.Birkwald@tu-dortmund.de
David Pachurka, David.Pachurka@tu-dortmund.de

Durchführung 11.12.2017, Abgabe

## 1 Ziel

Im folgenden werden drei Modelle vorgestellt, welche Näherungen zur Temperaturabhängigkeit der Molwärme von Festkörpern geben. Daraufhin wird die Molwärme gemessen und so das Debye-Modell untersucht werden.

## 2 Theorie

### 2.1 Klassisches Modell

Das klassische Modell geht davon aus, dass Molwärme sich gleichmäßig auf alle Freiheitsgrade der Atome verteilt. Jedes Atom hat so eine Energie von $\frac{1}{2}k_BT$ pro Freiheitsgrad. Im Kristallgitter hat jedes Atom drei Freiheitsgrade und somit eine Energie von

$$\langle u \rangle = \frac{6}{2}k_BT. \tag{1}$$

Für einen Mol gilt somit

$$U = 3k_BN_LT = RT, \tag{2}$$

mit der Loschmidtschen Zahl $N_L$ und der allgemeinen Gaskonstanten $R$. Durch Ableiten lässt sich die spezifische Molwärme berechnen.

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right) = 3R \tag{3}$$

Offensichtlich widerspricht dies den Erwartungen, da die spezifische Molwärme temperatur- und materialunanbhängig ist. Allerdings gehen im Allgemeinen die Grenzwerte der spezifischen Molwärme gegen $3R$.

## 2.2 Modell nach Einstein

Das Einsteinsche Modell beachtet, dass die Schwinungsenergie gequantelt ist, indem sie die Annahme trifft, dass alle Atome mit der Kreisfrequenz $\omega$ schwingen. Außerdem werden nur ganzzahlige vielfache der Energie $\hbar\omega$ angenommen. Mit der Wahrscheinlichkeit, dass ein Oszillator die Energie $n\hbar\omega$ hat

$$W(n) = \exp -\frac{n\hbar\omega}{k_B T} \tag{4}$$

kann die mittlere Energie berechnet werden.

$$\langle u \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\inf} n\hbar\omega \exp -\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}{\sum_{n=0}^{\inf} \exp -\frac{n\hbar\omega}{k_B T}} \tag{5}$$

$$\langle u \rangle = \frac{\hbar\omega}{\exp \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1} < k_B T \tag{6}$$

Durch für die spezifische Wärme ergibt sich durch Ableiten

$$C_{vE} = 3R \left( \frac{1}{T} \frac{\hbar\omega}{k_B} \right)^2 \frac{\exp \frac{\hbar\omega}{k_B T}}{\left( \exp \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1 \right)^2} \tag{7}$$

Wie im klassischen Modell geht der Limes für $T$ gegen inf gegen $3R$. Besonders im Bereich tiefer Temperaturen ist diese Näherung nicht sehr genau, da die Atome tatsächlich mit verschiedenen Frequenzen schwingen.

## 2.3 Debye-Modell

Das Debye-Modell ersetzt man die Frequenz mit einer Frequenzverteilung $Z(\omega)$. Diese ist

$$Z(\omega)\mathrm{d}\omega = \frac{3L^3}{2\pi^2 v^3} \omega^2 \mathrm{d}\omega \text{ oder } \qquad Z(\omega)\mathrm{d}\omega = \frac{3L^3}{2\pi^2} \omega^2 \left( \frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_t^3} \right) \mathrm{d}\omega \tag{8}$$

wenn man die longitudinal und transversal Geschwindigkeiten unterscheidet. Da ein Kristall endlich viel Atome hat folgt, dass er auch endlich viele Eigenschwingungen hat. Deshalb gibt es die Grenzfrequenz $\omega_D$, die Debye-Frequenz. Sie ist gegeben durch

$$\int_0^{\omega_D} Z(\omega)\mathrm{d} = 3N_L \tag{9}$$

Daraus folgt

$$\omega_D^3 = \frac{6\pi^2 v^3 N_L}{L^3} \qquad \text{oder } \omega_D^3 = \frac{18\pi^2 N_L}{L^3} \frac{1}{\frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_t^3}} \tag{10}$$

So ergibt sich für die Verteilung der Frequenzen

$$Z(\omega)\mathrm{d}\omega = \frac{9N_L}{\omega_D^3}\omega^2\mathrm{d}\omega \tag{11}$$

und für die spezifische Molwärme, mit $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$ und $\frac{\theta_D}{T} = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T}$,

$$C_{vD} = 9R\left(\frac{\theta_D}{T}\right)^3 \int_0^{\omega_D/T} \frac{x^4 \exp x}{(\exp x - 1)}\mathrm{d}x. \tag{12}$$

$\theta_D$ ist die sogenannte Debye-Temperatur. Sie ist eine materialspezifische Größe.

Wie im klassischem und im einsteinschem Modell geht die spezifische Molwärme auch im Debye-Modell gegen $3R$ für T gegen inf.