

Übung 2

Ausgabe: 14.10.2024 Abgabe: 21.10.2024 Besprechung: 28.10.2024

Verständnisfragen und Vorlesungswiederholung:

(keine schriftliche Beantwortung; mündliche Diskussion in der Übung)

1. Was versteht man unter dem sogenannten Dulong-Petit-Grenzwert?
2. Fassen Sie die wesentlichen Eigenschaften des Einstein-Modells der spezifischen Wärmekapazität von Festkörpern zusammen!
3. Fassen Sie die wesentlichen Eigenschaften des Debye-Modells der spezifischen Wärmekapazität von Festkörpern zusammen!
4. Wo bestehen Parallelen zwischen dem Debye-Modell und der Beschreibung der Hohlraumstrahlung nach Planck? Wo gibt es Unterschiede?
5. Erläutern Sie die Zustandsdichte im Debye-Modell!

1. Aufgabe: Wärmekapazität im Einstein-Modell (6 P)

- a) Berechnen Sie die Wärmekapazität eines dreidimensionalen Festkörpers gemäß $C = \frac{\partial U}{\partial T}$ für die innere Energie $U = 3\hbar\omega_E \left(\frac{1}{e^x - 1} + \frac{1}{2} \right)$ mit $x = \frac{\hbar\omega_E}{k_B T}$. (1 P)
- b) Plotten Sie den sich daraus ergebenden Verlauf der spezifischen Wärmekapazität als Funktion der skalierten Temperatur T/T_E . (1 P)
- c) Zeigen Sie, dass die Hochtemperatur-Wärmekapazität eines dreidimensionalen Festkörpers aus N Atomen in führender Ordnung folgendermaßen geschrieben werden kann:

$$C = 3Nk_B \left(1 - \frac{\kappa}{T^2} + \dots \right),$$

und drücken Sie die Konstante κ durch die Einstein-Temperatur T_E aus! (4 P)

2. Aufgabe: Debye-Modell im Experiment (4 P)

Folgende Werte werden für die spezifische Wärmekapazität einer Substanz gefunden:

T / K	C / (J K ⁻¹ mol ⁻¹)
0,1	$8,5 \cdot 10^{-7}$
1,0	$8,6 \cdot 10^{-4}$
5	0,12
8	0,59
10	1,1
15	2,8
20	6,3

- Bestimmen Sie mit Hilfe dieser Daten die Debye-Temperatur der Substanz. (2 P)
- Ziehen Sie wissenschaftliche Literatur zu Rate, um einen begründeten Vorschlag zu machen, welche Substanz hier vorliegen könnte. (2 P)

3. Aufgabe: Debye-Modell für beliebige Temperaturen (5 P)

In der Vorlesung wurde die allgemeine Debye-Formel zur Beschreibung der Wärmekapazität eines Festkörpers aus N Teilchen hergeleitet:

$$C = 9Nk_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 I_D \left(\frac{T_D}{T} \right),$$

wobei I_D das sogenannte Debye-Integral darstellt, welches analytisch nicht lösbar ist:

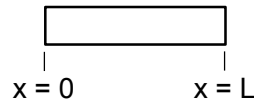
$$I_D(x_D) := \int_0^{x_D} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}$$

mit $x_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B T} =: \frac{T_D}{T}$.

- Zeigen Sie, dass sich im Grenzfall tiefer Temperaturen ein T^3 -Gesetz ergibt, und bestimmen Sie den Vorfaktor. (2 P)
- Zeigen Sie, dass sich im Grenzfall hoher Temperaturen der Dulong-Petit-Grenzwert ergibt. (3 P)

4. Aufgabe: Periodische Randbedingungen (4 P)

Periodische Randbedingungen werden immer dann verwendet, wenn die Eigenschaften eines idealisierten, unendlich ausgedehnten Systems mittels eines Systems aus nur endlich vielen Bestandteilen berechnet werden sollen. Die Idee ist dabei, unphysikalische Divergenzen zu vermeiden, die von einer unendlich großen Anzahl an Bestandteilen hervorgerufen werden. Betrachten Sie einen Festkörper der endlichen, makroskopischen Länge L :



Periodische Randbedingungen bedeuten in einer Dimension, dass für eine Funktion $u(x)$ gilt $u(0) \equiv u(L)$.

- a) Zeigen Sie, dass die Anwendung periodischer Randbedingungen auf eine ebene Welle mit der Wellenfunktion $\psi(x) = A \cdot e^{ikx}$ zu einer Diskretisierung der erlaubten k -Werte führt, und geben Sie die erlaubten k -Werte für den eindimensionalen Fall an. (1 P)
- b) Zeigen Sie, dass für beliebige stetige Funktionen $f(k)$ eine Summation über alle erlaubten k -Werte in sehr guter Näherung durch folgendes Integral approximiert werden kann: (1 P)

$$\sum_k f(k) \approx \frac{L}{2\pi} \int dk f(k) .$$

- c) Was ergibt sich jeweils in drei Dimensionen? (2 P)