28. **Mittlere Energie-Zustandssumme**
Wie hängt die mittlere Energie eines Systems von seiner Zustandssume Z ab, wenn Z definiert wird durch

$$Z = \int_x \int_p e^{-E(p,x)/k_B T} \, \mathrm{d}p \, \mathrm{d}x$$

Außerdem gilt

$$\frac{\partial}{\partial T} \ln Z = \frac{1}{k_B T^2} \langle E \rangle$$
$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \int_x \int_p E(p,x) e^{-E(p,x)/k_B T} \, \mathrm{d}p \, \mathrm{d}x$$

29. **Einstein- und Debye Modell**
Neben dem Debye-Modell liefert das Einstein-Modell eine weitere Beschreibung der Phononendispersion in Festkörpern.

(a) Machen Sie sich mit beiden Modellen vertraut und beschreiben Sie die Unterschiede.
Beides Modelle haben gemeinsam:
- Hochtemperatur-Limes $c = 3Nk_B$
- Schwingungsenergie auf $3N$ Oszillatoren aufgeteilt
- Bose-Einstein Verteilung (Phononen als Bosonen)

Unterschiede in den zugeordneten Frequenzen:

Einstein	*Debye*
gleiche charakteristische Frequenz $\omega_0 \,\forall\, 3N$ Oszillatoren	$3N$ niedrigsten Frequenzen, welche periodische Randbedingungen erfüllen, insbesondere bezeichne $\omega_{\max}$ die größte charakteristische Frequenz

(b) Begründen Sie warum beide Modelle denselben Hochtemperaturgrenzwert für die spezifische Wärmekapazität liefern (Dulong-Petitscher Grenzwert).

Im Hochtemperaturlimit spielt die genaue Verteilung der charakteristischen Frequenzen keine Rolle, solange es eine maximale Frequenz gibt. Wenn die thermische Energie $k_B T$ viel größer als die charakteristische Energie $\hbar\omega$ ist, liefert die Bose Verteilung die Energie $k_B T$ für den harmonischen Oszillator, die insbesondere unabhängig von ω ist. Wenn also $k_B T \gg \hbar\omega_0$ und $k_B T \gg \hbar\omega_{\max}$, liefert sowohl das Einstein Modell als auch die Debye Theorie die Schwingungsenergie $U_s = 3Nk_B T$ und den Dulong-Petitschen Wert fur die Wärmekapazität $c = 3Nk_B$.

(c) Ein Probenhalter bestehend aus Kupfer zur Vermessung der spezifischen Wärme verschiedener Materialien wiege 1 g. Wie groß ist der Hochtemperaturgrenzwert der spezifischen Wärme des Halters?

$$c(1\,\mathrm{g\,Cu}) = 3N(1\,\mathrm{g\,Cu})k_B$$
$$N(1\,\mathrm{g\,Cu}) = \frac{N_A}{u_{\mathrm{Cu}}} = 9{,}47 \cdot 10^{21}$$
$$\Rightarrow c(1\,\mathrm{g\,Cu}) = 0{,}392\,\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}}$$

30. **Zustandsdichte von Phononen**
Betrachten Sie eine eindimensionale lineare Kette von identischen Massepunkten der Länge L. Unter Berücksichtigung der Wechselwirkung nächster Nachbarn (Kraftoknstante C, Punktmasse M, Gitterkonstante a) erhält man die Dispersionrelation:

$$\omega^2 = (2C/M)(1 - \cos(ka))$$

oder

$$\omega = \sqrt{4C/M}|\sin(ka/2)| = \omega_{\max}|\sin(ka/2)|$$

(a) Berechnen Sie die Zustandsdichtefunktion $g(\omega)$ longitudinaler Phononen.

Hinweis: Im eindimensionalen Fall gilt $g(k) = L/\pi$.

$$\begin{aligned} k &= \frac{2}{a}\arcsin\left(\frac{\omega}{\omega_{\max}}\right) \\ \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega} &= \frac{2}{a}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} \\ g(\omega)\,\mathrm{d}\omega &= g(k)\,\mathrm{d}k \\ \Leftrightarrow g(\omega) &= g(k)\cdot\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega} = \frac{L}{\pi}\frac{2}{a}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} \end{aligned}$$

(b) Skizzieren Sie das Ergebnis und vergleichen Sie die Zustandsdichtefunktion mit der, die sich aus der Debye'schen Kontinuumsnäherung ($\omega = vk$) ergibt.

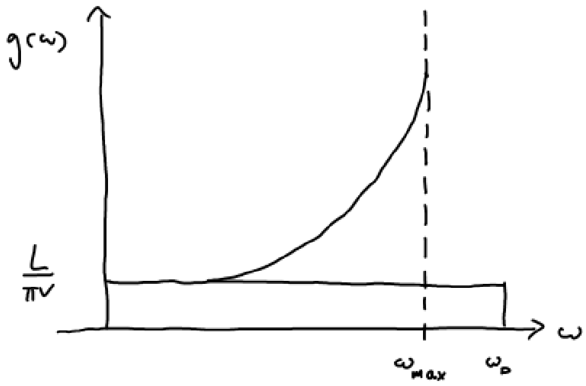

Abbildung 1: Zustandsdichten

$$g_{(\text{Debye})}(\omega) = \frac{L}{\pi v}$$

(c) Welcher Zusammenhang besteht zwischen der Maximalfrequenz $\omega_{\max}$ des Phononenspektrums der linearen Kette und der Grenzfrequenz ω_D aus der Debye'schen Kontinuumsnäherung? Berücksichtigen Sie dafür, dass die Zahl der Normalschwingeungen N in beiden Fällen übereinstimmen muss:

$$N = \int_0^{\omega_{\max}} g_{(\text{lin})}(\omega)\,\mathrm{d}\omega = \int_0^{\omega_D} g_{(\text{Debye})}(\omega)\,\mathrm{d}\omega$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{2L}{a\pi}\arcsin\left(\frac{\omega}{\omega_{\max}}\right)\right]_0^{\omega_{\max}} &= \left[\frac{L}{\pi v}\omega\right]_0^{\omega_D} \\ \frac{L}{a} &= \frac{L\omega_D}{\pi v} \end{aligned}$$

Was ist v? Grenzfall $\omega \to 0$

$$\begin{aligned} \frac{2L}{a\pi\omega_{\max}} &= \frac{L}{\pi v} \\ \Leftrightarrow v &= \frac{a}{2}\omega_{\max} \\ \Leftrightarrow \omega_D &= \frac{\pi}{2}\omega_{\max} \end{aligned}$$