Übungen zur Festkörperphysik I

Lösungen zu Serie 4

---

1 Lineare Kette

Wir gehen das Problem allgemein an und betrachten Kopplungen zwischen einer willkürlichen Anzahl von Nachbarn. Wir bezeichnen mit f_i die Federkonstante zwischen dem n-ten und dem $n \pm i$-ten Gitterplatz. Damit lautet die Bewegungsgleichung für das Teilchen der Masse m mit Koordinate :

$$\begin{aligned} m\ddot{\zeta} &= f_1(\zeta_{n+1} + \zeta_{n-1} - 2\zeta_n) \\ &\quad + f_2(\zeta_{n+2} + \zeta_{n-2} - 2\zeta_n) \\ &\quad \vdots \\ &\quad + f_p(\zeta_{n+p} + \zeta_{n-p} - 2\zeta_n) \\ &\quad \vdots \\ &= \textstyle\sum_{r>0} f_r(\zeta_{n+r} + \zeta_{n-r} - 2\zeta_n) \end{aligned} \tag{1}$$

Die Lösung der Bewegungsgleichung wird mit Hilfe des Ansatzes

$$\zeta_n(t) = \zeta(0) e^{i(kna - \omega t)} \tag{2}$$

und den periodischen Randbedingungen

$$\zeta_{Na} = \zeta_0 \Rightarrow e^{ikNa} = 1 \tag{3}$$

erhalten. Die Reduktion in die erste Brillouin Zone (1. BZ) ergibt

$$-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a} \Leftrightarrow k = n\frac{2\pi}{Na} \tag{4}$$

$$\omega^2(k) = \sum_{r>0} \frac{2f_r}{m}(1 - \cos(kra)) \tag{5}$$

$$= \sum_{r>0} (w_r^0)^2 \sin^2\left(\frac{kra}{2}\right) \tag{6}$$

mit $\omega_r^0 = \sqrt{\frac{4f_r}{m}}$. Dies ist eine Überlagerung von Lösungen, die einer Kopplung mit nur einem (dem r-ten) Nachbarn entsprechen.

a) Mit $f_i = 0$ für $i > 2$ erhält man die folgende Dispersionsrelation:

$$\omega^2(k) = (\omega_1^0)^2 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + (\omega_2^0)^2 \sin^2(ka) \tag{7}$$

b) Wir können anstelle der Maxima (1.BZ) von $\omega(k)$ diejenigen von $\omega^2(k)$ suchen:

$$\frac{\partial(\omega^2)}{\partial k} = 0 \tag{8}$$

$$(\omega_1^0)^2 a\sin(ka) + 4(\omega_2^0)^2 a\sin(ka)\cos(ka) = 0 \tag{9}$$

$$k(\omega) = \frac{1}{a}\arccos\left[-\frac{1}{4}\frac{(\omega_1^0)^2}{(\omega_2^0)^2}\right] \tag{10}$$

2 Debye-Modell in $D = 1, 2, 3$ Dimensionen

a) Wir berechnen zunächst die Anzahl der erlaubten Schwingungszustände mit Frequenzen kleiner als ω:

$$Z_{l,t}(\omega) = \frac{V_{l,t}(\omega)}{(2\pi/L)^D}$$

wobei $V_{l,t}(\omega)$ die Kugel im D-dimensionalen Raum ist, mit Radius $\omega/c_{l,t}$. Eine mittlere Geschwindigkeit lässt sich wie folgt definieren:

$$\frac{D}{c^D} = \frac{1}{c_l^D} + \frac{D-1}{c_t^D}$$

Für die gesamte Anzahl der erlaubten Wellen (longitudinal und transversal) ergibt sich:

$$Z_W(\omega) = Z_l(\omega) + (D-1)Z_t(\omega)$$

und schliesslich für die Zustandsdichte

$$\rho(\omega) = \frac{\mathrm{d}Z_W(\omega)}{\mathrm{d}\omega}$$

b) $\omega_{\max}$ wird bestimmt durch die Bedingung

$$Z_W(\omega_{\max}) = ND$$

wobei N die Anzahl der Atome und D die Dimensionalität und damit auch die Anzahl der Polarisationen ist. Weiter muss deshalb für $\omega_{\max}$ gelten:

$$DN = \int_0^{\omega_{\max}} \rho(\omega)\mathrm{d}\omega$$

c) Drückt man die Frequenzdichte als Funktion von $\omega_{\max}$ aus, erhält man für die Oszillationsenergie:

$$U(T) = \int_0^{\omega_{\max}} \rho(\omega) < E(\omega) > \mathrm{d}\omega \tag{11}$$

$$= \int_0^{\omega_{\max}} \frac{D^2}{\omega_{\max}^D}\frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_BT)-1}\omega^{D-1}\mathrm{d}\omega \tag{12}$$

Durch differenzieren nach T erhält man die spezifische Wärme:

$$c_V(T) = \frac{\partial U}{\partial T} \tag{13}$$

$$= \frac{D^2}{\omega_{\max}^D} N\frac{1}{k_BT^2}\int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar^2\omega^{D+1}\exp(\hbar\omega/k_BT)}{(\exp(\hbar\omega/k_BT)-1)^2}\mathrm{d}\omega \tag{14}$$

Mit den reduzierten Einheiten $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$ und $x_{\max} = \frac{\Theta_D}{T}$ erhält man:

$$c_V = D^2 N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^D \int_0^{x_{\max}} \frac{x^{D+1} e^x}{(e^x - 1)^2} \mathrm{d}x \tag{15}$$

d) Für niedrige Temperaturen ($T \to 0$) ergibt das Integral eine temperaturunabhängige Konstante, so dass die spezifische Wärme folgende T-Abhängigkeit hat:

$$c_V(T) \sim T^D$$

e) Für hohe Temperaturen ($T \to \infty$) ist mit $x << 1$ eine Reihenentwicklung des Integranden nach x gerechtfertigt:

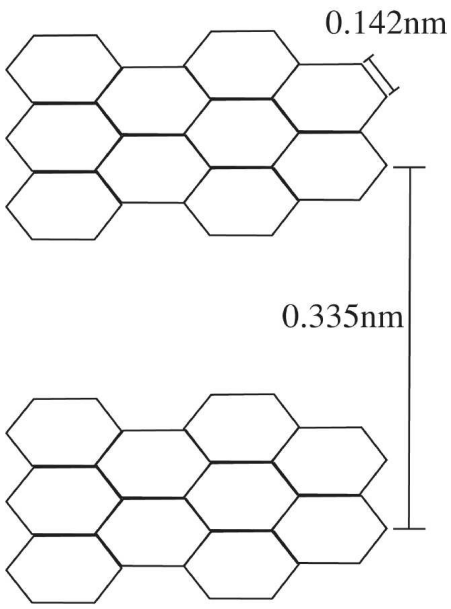
$$c_V(T) \approx D^2 N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^D \int_0^{x_{\max}} x^{D-1} \mathrm{d}x = D N k_B \tag{16}$$

Dieser Wert entspricht dem vom Äquipartitionsprinzip erwarteten Wert von k_B pro Freiheitsgrad pro Atom.

Die Resultate für $D = 1, 2, 3$ von Aufgabe 2 sind in der Tabelle auf der letzten Seite zusammengefasst.

3 Spezifische Wärme von Graphit

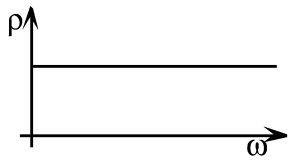
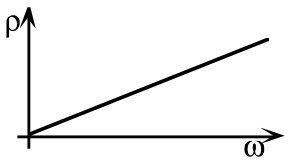
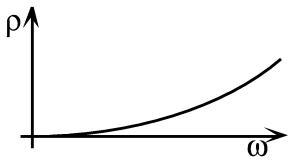
Bei der Debyeschen Näherung betrachtet man den Festkörper als ein isotropes Kontinuum. Das bedeutet, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wellen in allen Polarisationsrichtungen konstant und keine Richtungsabhängigkeit derselben festzustellen ist, d.h. $\omega = ck$.



Graphit muss aufgrund seiner Struktur aber als ein anisotroper Kristall angesehen werden. Wie die Abbildung zeigt, sind die Bindungsabstände zwischen den Schichten erheblich grösser als in den Schichten. Ausserdem treten bei Graphit die verschiedenen Bindungsarten deutlich in Erscheinung: In den Ebenen liegt eine kovalente Bindung vor, während zwischen den Ebenen Van-der-Waals-Bindungen vorhanden sind. Somit unterscheiden sich auch die Kopplungskonstanten in bzw. zwischen den Ebenen sehr deutlich. Aufgrund dieser unterschiedlich starken Wechselwirkungen hat die Graphit-Struktur eher zweidimensionalen Charakter. Die Herleitung der spezifischen Wärmefür ein zweidimensionales Gitter für kleine Temperaturen wurde in Aufgabe 2 ausführlich besprochen. Mit den dort angestellten überlegungen ergibt sich für die spezifische Wärme von Graphit die Proportionalität:

$$c_V(T) \sim T^2$$

Zusammenfassende Tabelle der Grössen im D = 1, 2, 3 dimensionalen Debye-Modell

	D = 1	D = 2	D = 3
$V_{l,t}(\omega)$	$2\left(\frac{\omega}{c_l}\right)$	$\pi\left(\frac{\omega}{c_{l,t}}\right)^2$	$\frac{4}{3}\pi\left(\frac{\omega}{c_{l,t}}\right)^3$
$Z_{l,t}(\omega)$	$\frac{L}{\pi c_l}\omega$	$\frac{L^2}{4\pi c^2_{l,t}}\omega^2$	$\frac{L^3}{6\pi^2 c^3_{l,t}}\omega^3$
$\frac{d}{c^d}$	$\frac{1}{c_l}$	$\frac{1}{c_l^2}+\frac{1}{c_t^2}$	$\frac{1}{c_l^3}+\frac{2}{c_t^3}$
$Z_W(\omega)$	$\frac{L}{\pi c}\omega$	$\frac{L^2}{2\pi c^2}\omega^2$	$\frac{L^3}{2\pi^2 c^3}\omega^3$
$\rho(\omega)$	$\frac{L}{\pi c}$ 	$\frac{L^2}{\pi c^2}\omega$ 	$\frac{3L^3}{2\pi^2 c^3}\omega^2$ 
Debyefrequenz ω_{max}	$\frac{\pi c N}{L}$	$\sqrt{\frac{4\pi c^2 N}{L^2}}$	$\sqrt[3]{\frac{6\pi^2 c^3 N}{L^3}}$
$Z_W(\omega_{max})$	N	2N	3N
Frequenzdichte $\rho(\omega)$	$\frac{N}{\omega_{max}}$	$\frac{4N}{\omega^2_{max}}\omega$	$\frac{9N}{\omega^3_{max}}\omega^2$
Tieftemperatur-limes für c_v $c_v(T\to 0)$	$\sim T$	$\sim T^2$	$\sim T^3$
Hochtemperatur-limes für c_v $c_v\ (T\to\infty)$	Nk_B	$2Nk_B$	$3Nk_B$