

6. Übungsblatt

Verteilung 30. Oktober 2007
Besprechung 7./8. November 2007**Aufgabe 1:** *Einstein-Modell für die spezifische Wärmekapazität*

1. Die thermische Energie von N Moden ist in der harmonischen Näherung gegeben durch:

$$U(T) = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(\mathbf{k}) \left[n(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] = \int d\omega Z(\omega) \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \right).$$

Dabei ist $n(\mathbf{k})$ die mittlere Anzahl Phononen mit Wellenvektor \mathbf{k} (Bose-Einstein-Verteilungsfunktion) und $Z(\omega) = N\delta(\omega - \omega_E)$ die Zustandsdichte für N Moden der Frequenz ω_E . Die Integration ergibt:

$$U(T) = N\hbar\omega_E \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_E}{kT}\right) - 1} \right)$$

2. Der Beitrag zur spezifischen Wärmekapazität ist daher

$$c(T) = \frac{1}{V} \frac{dU}{dT} = \frac{Nk}{V} \left(\frac{\hbar\omega_E}{kT} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega_E}{kT}\right)}{[\exp\left(\frac{\hbar\omega_E}{kT}\right) - 1]^2}$$

3. Für hohe Temperaturen $T \gg \Theta_E$ erhält man

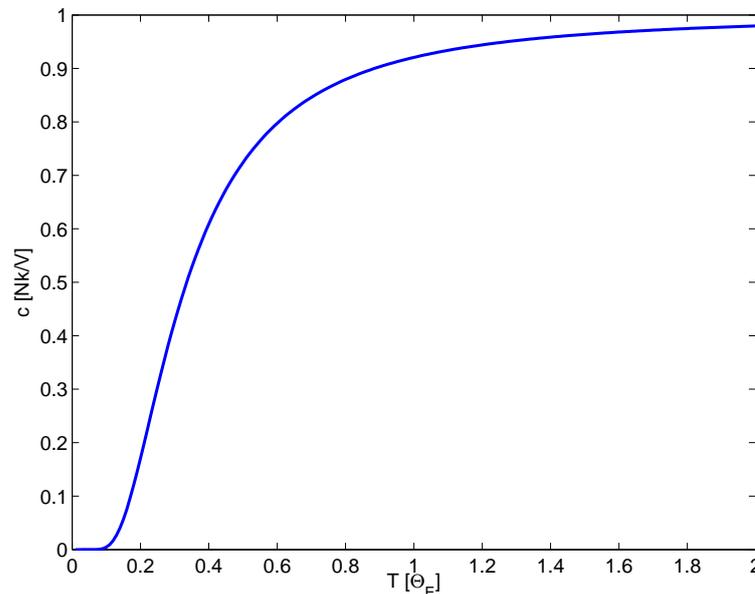
$$c(T) = \frac{Nk}{V},$$

was dem klassischen Dulong-Petit Gesetz entspricht. Für tiefe Temperaturen $T \rightarrow 0$ ergibt sich

$$c(T) = \frac{Nk}{V} \left(\frac{\hbar\omega_E}{kT} \right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\omega_E}{kT}\right),$$

d.h. der Beitrag eines solchen Astes zur spezifischen Wärmekapazität nimmt für $T \rightarrow 0$ exponentiell ab. Typische Werte für die Einstein Temperatur liegen bei mehreren 100 K. In GaAs beispielsweise beträgt die Energie optischer Phonon ca. 35meV, was $\Theta_E \approx 420$ K entspricht. Die durch das Einstein-Modell beschriebenen optischen Phononen liefern also selbst bei Raumtemperatur nur einen kleinen Beitrag zur Wärmekapazität.

4. Vollständige Temperaturabhängigkeit $c(T)$ im Einstein-Modell:



Das Debye-Modell (siehe Vorlesung) liefert für hohe Temperaturen ebenfalls eine konstante Wärmekapazität $c(T) = Nk/V$. Für $T \rightarrow 0$ ergibt sich der realistischere Verlauf $c(T) \propto T^3$.

Aufgabe 2: Debye-Waller-Faktor

1.

$$\overline{S_{hkl}} = \sum_j \gamma_j \overline{e^{i\vec{G} \cdot (\vec{r}_j + \vec{u})}} = \left(\sum_j \gamma_j e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} \right) \overline{e^{i\vec{G} \cdot \vec{u}}}$$

Zunächst wird die Funktion $\overline{e^{i\vec{G} \cdot \vec{u}}}$ in eine Taylorreihe entwickelt (das Zeitmittel einer Summe ist die Summe der Mittelwerte):

$$\overline{e^{i\vec{G} \cdot \vec{u}}} = 1 + i\overline{\vec{G} \cdot \vec{u}} - \frac{1}{2} \overline{(\vec{G} \cdot \vec{u})^2}.$$

Setzen wir voraus, dass die Gitteratome völlig unabhängig voneinander um die Ruhelage schwingen, so gilt

$$\begin{aligned} \overline{\vec{G} \cdot \vec{u}} &= 0, \\ \overline{(\vec{G} \cdot \vec{u})^2} &= |\vec{G}|^2 u^2 \overline{\cos^2 \Theta}, \end{aligned}$$

wobei Θ der Winkel zwischen \vec{G} und \vec{u} ist. Der Ausdruck $\overline{\cos^2 \Theta}$ muss über eine Kugel gemittelt werden, da alle Richtungen gleichwertig vertreten sind und die Amplitude u der Schwingung davon unabhängig ist:

$$\overline{\cos^2 \Theta} = \frac{1}{4\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi} \int_{\Phi=0}^{2\pi} \cos^2 \Theta \sin \Theta d\Theta d\Phi = \frac{1}{3}.$$

Damit erhält man:

$$\overline{e^{i\vec{G} \cdot \vec{u}}} = 1 - \frac{1}{6} |\vec{G}|^2 u^2.$$

Dies sind aber gerade die ersten zwei Glieder der Taylorreihe von $e^{-1/6 |\vec{G}|^2 u^2}$. In guter Näherung gilt also

$$\overline{e^{i\vec{G} \cdot \vec{u}}} = e^{-1/6 |\vec{G}|^2 u^2}.$$

Dies ist rein reell und sicher kleiner als 1. Setzt man diese Gleichung in die Formel für den Strukturfaktor ein, so ergibt sich

$$\overline{S_{hkl}} = \left(\sum_j \gamma_j e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} \right) e^{-1/6 |\vec{G}|^2 u^2}.$$

Die Intensität des gebeugten Strahles beträgt somit

$$I = I_0 \cdot e^{-1/3 |\vec{G}|^2 u^2}.$$

2. In der kubisch raumzentrierten Struktur mit Kantenlänge a beträgt der Abstand zwischen den nächsten Nachbarn $a\sqrt{3}/2$. Nach dem Lindemannschen Schmelzkriterium erhält man daraus für das mittlere Amplitudenquadrat der thermischen Bewegung:

$$\sqrt{u^2} = a\sqrt{3}/10.$$

Der Debye-Waller-Faktor ist gegeben durch

$$D = \exp[-1/3 |\vec{G}|^2 u^2].$$

Dies bedeutet, dass die stärksten Reflexe von den kürzesten \vec{G} -Vektoren stammen. In der bcc Struktur sind dies die 12 Vektoren $\frac{\pi}{a}(\pm 1, \pm 1, 0)$ plus Permutationen. Damit erhält man $D(T = T_S) = \exp[-\frac{\pi^2}{50}] = \exp[-0.197] = 0.82$. Beachte, dass die obige Rechnung unabhängig vom Zahlenwert der Gitterkonstante für alle bcc Kristalle gültig ist.