Übungen zur Festkörperphysik I

Lösungen zu Serie 5

---

1 Spezifische Wärme des amorphen Festkörpers

Betrachtet man den amorphen Festkörper als Ensemble von N Zwei-Niveau-Systemen, deren Energiedifferenz ΔE gleichmässig zwischen 0 und $\Delta E_{\max}$ verteilt ist, also mit der Zustandsdichte

$$\rho(\Delta E) = \frac{N}{\Delta E_{\max}}$$

gilt für die Anzahl der Zustände:

$$N = \int_0^{\Delta E_{\max}} \rho(\Delta E)\mathrm{d}(\Delta E)$$

Unter Vernachlässigung der Nullpunktsenergie und ohne Entartung folgt für die innere Energie

$$U(T) = \int_0^{\Delta E_{\max}} \Delta E \frac{1}{1 + e^{\frac{\Delta E}{k_B T}}} \rho(\Delta E)\mathrm{d}(\Delta E)$$

und nach Substitution $x = \frac{\Delta E}{k_B T}$ und durch einsetzen von $\rho(\Delta E)$:

$$U(T) = \frac{N}{\Delta E_{\max}} (k_B T)^2 \int_0^{x_{\max}} \frac{x}{1 + e^x} \mathrm{d}x$$

Für $\Delta E_{\max} \approx 1$ eV, welches der Temperatur von 11'000 K entspricht, darf im Tieftemperaturbereich (~ 1 K) genähert werden:

$$x_{\max} = \frac{\Delta E_{\max}}{k_B T} \sim \frac{k_B \cdot 10^5 \mathrm{K}}{k_B \cdot 1\mathrm{K}} \to \infty$$

so dass:

$$\int_0^{\infty} \frac{x}{1 + e^x} \mathrm{d}x \approx 0.8$$

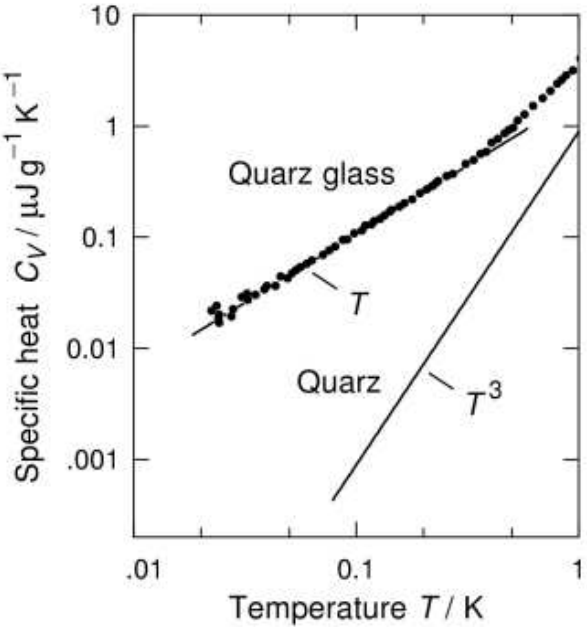
und

$$U(T) = 0.8 \frac{N}{\Delta E_{\max}} (k_B T)^2$$

Daraus erhält man die spezifische Wärme

$$c_V = \frac{\partial U}{\partial T} = 1.6 \frac{N}{\Delta E_{\max}} k_B^2 T \sim T$$

Die Figur auf der Rückseite zeigt den Unterschied der spezifischen Wärme von kristallinem Quarz und Quarzglas bei tiefen Temperaturen in einer doppelten logarithmischen Skala.


10
1
0.1
0.01
.001
Specific heat C_V / μJ g^{-1} K^{-1}
Quarz glass
T
Quarz
T^3
.01
0.1
1
Temperature T / K

2 Inelastische Neutron-Phonon-Streuung

Im Debye-Modell gilt für die Phononen: $\omega_p = c_p q = \frac{2\pi c_p}{\lambda_p}$. Für die Neutronen wird die De-Broglie-Wellenlänge herangezogen: $E_n = \frac{h^2}{2m\lambda_n^2}$
Energieerhaltung:

$$E_n' = E_n + E_p = \frac{h^2}{2m\lambda_n^2} + c_p \frac{h}{\lambda_p}$$

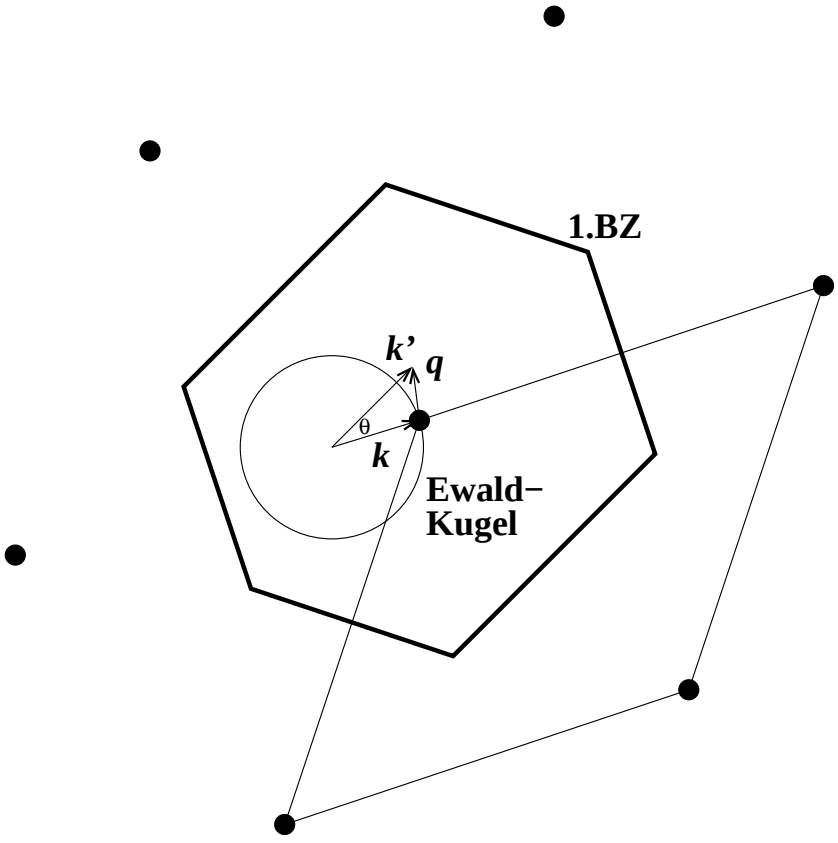
Mit eingesetzten Zahlen ergibt dies: $E_n' = 1.48 \cdot 10^{-21}$ J $= 9.25$ meV und $\lambda_n' = 2.99$ Å. Es gilt neben der Energieerhaltung auch die Impulserhaltung:

$$\hbar\vec{k}' - \hbar\vec{k} = \hbar\vec{Q} = \hbar\vec{q} + \hbar\vec{G}$$

Mit $\vec{G}$ einem beliebigen reziproken Gittervektor und $\vec{Q}$ dem Streuvektor. Aufgrund der langen Wellenlänge (10 Å) und damit kurzem q-Vektor des Phonons, können wir davon ausgehen, dass keine Umklapp-Prozesse stattfinden (also ist $\vec{G} = 0$). Somit ist das Streuproblem wie in der Abbildung gegeben (Im reziproken Gitter ist die 1. Brillouin-Zone eingezeichnet. $\vec{k}'$ liegt ausserhalb der Ewaldkugel mit Radius k, d.h. ein Phonon mit Wellenvektor $\vec{q}$ wurde absorbiert) und der Streuwinkel lässt sich aus einfachen geometrischen Überlegungen ableiten. Der Winkel Θ zwischen $\vec{k}$ und $\vec{k}'$ ist gegeben durch:

$$q^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos\theta$$

$$\theta = \arccos \frac{\frac{1}{4^2} + \frac{1}{2.99^2} - \frac{1}{10^2}}{2\frac{1}{4}\frac{1}{2.99}} = 10.63°$$



3 Schallgeschwindigkeit in Diamant

Für Schallwellen im Polykristall gilt innerhalb des Debye-Modells: $\omega = \overline{c}k$, wobei $\frac{3}{\overline{c}^3} = \frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3}$. Damit wird

$$\overline{c} = \frac{k_B \Theta_D}{\hbar k_{\max}}$$

Die Zahl $n(L^3) = 3N$ der Zustände im periodisch wiederholten Grundgebiet (Würfel) der Kantenlänge L mit N Atomen ist gleich der Zahl der Zustände, welche sich in einer Kugel mit dem Radius $k_{\max}$ im reziproken Raum befinden. Die Dichte der Punkte im reziproken Raum ist $\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$, also:

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4}{3}\pi k_{\max}^3 = n(L^3)$$

und somit:

$$k_{\max}^3 = \frac{6\pi^2 n(L^3)}{L^3}$$

Damit ist die Schallgeschwindigkeit gegeben durch

$$\overline{c} = \frac{k_B \Theta_D}{\hbar k_{\max}} = \frac{k_B \Theta_D}{\hbar (6\pi^2)^{1/3}} \left(\frac{L^3}{n(L^3)}\right)^{1/3}$$

Man beachte, dass der letzte Term in Klammern das Volumen pro Atom ist, welches aus der Struktur und dem angegebenen interatomaren Abstand gewonnen werden kann: die kubische Einheitszelle enthält 8 Atome mit der Gitterkonstanten $4d_{\mathrm{C-C}}/\sqrt{3}$.
Wir erhalten: $\overline{c} = 1.3 \cdot 10^4$ m s^{-1}.
Gemäss des in der Vorlesung besprochenen Modells für die Wärmeleitfähigkeit des Gitters

$$\lambda_G = \frac{1}{3} c_V v_s \Lambda_p$$

(mit der spezifischen Wärmekapazität c_V, der Schallgeschwindigkeit v_s und der mittleren freien Weglänge der Phononen Λ_p), geht die Schallgeschwindigkeit linear in die Wärmeleitung ein.