WALTHER–MEISSNER–INSTITUT
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218

16. Dezember 2010

Blatt 9

Übungsaufgaben zur

Festkörperphysik I, WS 2010/2011

6 Thermische Eigenschaften des Kristallgitters

6.1 Mittlere thermische Ausdehnung einer Kristallzelle

1. Schätzen Sie für eine primitive Elementarzelle eines Natriumkristalls bei 300 K die mittlere thermische Volumenausdehnung $\Delta V/V$ ab. Nehmen Sie dazu den Kompressionsmodul B zu 7×10^9 J/m^3 an. Beachten Sie, dass die Debye-Temperatur mit 158 K geringer als 300 K ist, so dass Sie eine klassische Betrachtung machen können.
2. Benutzen Sie dieses Ergebnis, um die mittlere thermische Schwankung $\Delta a/a$ der Gitterkonstanten abzuschätzen.

6.2 Nullpunkts–Gitterauslenkung und Dehnung

1. Zeigen Sie, dass in der Debye-Näherung am absoluten Nullpunkt das mittlere Auslenkungsquadrat eines Atoms aus seiner Ruhelage durch
$$\langle r^2 \rangle = \frac{3\hbar\omega_{\mathrm{D}}^2}{8\pi^2 \rho v_{\mathrm{s}}^3}$$
gegeben ist, wobei v_{s} die Schallgeschwindigkeit ist. Zeigen Sie zunächst, dass die mittlere quadratische Schwingungsamplitude $\langle r_{\max}^2 \rangle = (\hbar/\rho V)\langle \omega^{-1} \rangle_{\mathrm{D}}$ ist, wobei V das Probenvolumen, $\rho = mN/V$ die Masssendichte und $\langle g(\omega) \rangle_{\mathrm{D}} = \sum_{\mathbf{q},r} g(\omega_{\mathbf{q}r})$ ist. Leiten Sie daraus die mittlere quadratische Auslenkung $\langle r^2 \rangle = \langle r_{\max}^2 \rangle / 2$ ab.
2. Zeigen Sie, dass $\langle \omega^{-1} \rangle_{\mathrm{D}}$ und damit $\langle u^2 \rangle$ für ein eindimensionales Gitter (einatomige Basis, Auslenkung u) divergieren, dass jedoch das mittlere Dehnungsquadrat $\langle (\partial u/\partial x)^2 \rangle$ endlich ist. Gehen Sie dazu von der Form $\langle (\partial u/\partial x)^2 \rangle = \frac{1}{2}\sum_q q^2 u_{\max}^2$ für das mittlere Dehnungsquadrat aus und zeigen Sie, dass im Fall einer Kette aus N Atomen, von denen jedes die Masse m hat, gilt
$$\left\langle \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right\rangle = \frac{\hbar \omega_{\mathrm{D}}^2 L}{4\pi m N v_{\mathrm{s}}^3}$$
wenn nur longitudinale Zustände berücksichtigt werden. Die Divergenz von $\langle r^2 \rangle$ ist aber für keine einzige physikalische Messung signifikant.

6.3 Spezifische Wärme eines eindimensionalen Gitters und eines Stapels aus zweidimensionalen Schichten

1. Zeigen Sie, dass in Debye-Näherung die spezifische Wärme eines eindimensionalen Gitters aus identischen Atomen für tiefe Temperaturen ($T \ll \theta_{\mathrm{D}}$) proportional zu T/θ_{D} ist. Hierbei ist $\theta_{\mathrm{D}} = \hbar\omega_{\mathrm{D}}/k_{\mathrm{B}} = \hbar\pi v_{\mathrm{s}}/k_{\mathrm{B}}a$ die für eine Dimension gültige Debye-Temperatur; k_{B} ist die Boltzmann-Konstante und a der Abstand der Gitteratome.
2. Betrachten Sie einen dielektrischen Kristall, der aus einem Stapel von zweidimensionalen Atomschichten aufgebaut ist, wobei aneinandergrenzende Schichten nur schwach aneinander gebunden sein sollen. Wie sieht Ihrer Meinung nach im Grenzfall sehr tiefer Temperaturen der Ausdruck für die spezifische Wärme aus?

WALTHER–MEISSNER–INSTITUT 16. Dezember 2010
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 9**

Lösungen der Übungsaufgaben zur

Festkörperphysik I, WS 2010/2011

6 Thermische Eigenschaften des Kristallgitters

6.1 Mittlere thermische Ausdehnung einer Kristallzelle

1. Das Kompressionsmodul B ist, wie in der Vorlesung gezeigt wurde, definiert als zweite Ableitung der potentiellen Energie U nach der Volumenänderung ΔV:

$$B = V\frac{d^2U(\Delta V)}{d(\Delta V)^2}$$

Durch zweimaliges Integrieren erhält man daraus die potentielle Energie, die mit der thermischen Ausdehnung verbunden ist (harmonische Näherung, vgl. Vorlesung):

$$U(\Delta V) = \frac{1}{2}BV\left(\frac{\Delta V}{V}\right)^2 \simeq \frac{1}{2}k_\mathrm{B}T$$

Dies entspricht der potentiellen Energie $\frac{1}{2}Cx^2$ einer gespannten Feder mit der Federkonstante C. Wir setzen die potentielle Energie hier gleich $k_\mathrm{B}T/2$ und nicht gleich $3k_\mathrm{B}T/2$, da wir bei der reinen Volumenausdehnung nicht alle Freiheitsgrade angeregt haben. Die Freiheitsgrade, die zu Verscherungen (Schermodul) und Verdrehungen (Torsionsmodul) gehören, sind eingefroren. Diese Gleichung lässt sich nun nach der relativen und der absoluten Volumenänderung auflösen:

$$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)^2 = \frac{k_\mathrm{B}T}{BV} \quad\leftrightarrow\quad \frac{\Delta V}{V} = \sqrt{\frac{k_\mathrm{B}T}{BV}} \quad\leftrightarrow\quad \Delta V = \sqrt{\frac{k_\mathrm{B}TV}{B}}$$

Wir benutzen $k_\mathrm{B}T = 4.14\cdot 10^{-21}\,\mathrm{J} = 25.8\,\mathrm{meV}$ bei $300\,\mathrm{K}$ und $a = 4.225\,\text{Å} = 4.225\times 10^{-10}\,\mathrm{m}$ für einen Natriumkristall. Benutzen wir $V = a^3$, so erhalten wir $(\Delta V)^2 = 4.46\times 10^{-59}\,\mathrm{m}^6$ und daraus $(\Delta V)_\mathrm{rms} = 6.67\times 10^{-30}\,\mathrm{m}^3$. Für die relative Änderung des Einheitszellenvolumens erhalten wir $\Delta V/V \simeq 0.088$.

2. Für isotrope und kubische Systeme gilt

$$\begin{aligned}\Delta V &= (a+\Delta a)^3 - a^3 = a^3 + 3a^2\Delta a + \cdots - a^3 = 3a^2\Delta a\\ \frac{\Delta V}{V} &= \frac{3a^2\Delta a}{a^3} \overset{\Delta a \ll a}{=} 3\frac{\Delta a}{a}\end{aligned}$$

Somit erhalten wir für die relative Längenänderung $\Delta a/a \approx 0.029$.

6.2 Nullpunkts–Gitterauslenkung und –Dehnung

Um diese Aufgabe zu lösen, argumentieren wir wie in Blatt 5, Aufgabe 3.1 und beginnen mit der Gesamtenergie E_{tot} eines klassischen dreidimensionalen harmonischen Oszillators

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{kin}}(\dot{r}) + E_{\text{pot}}(r) \quad ; \quad E_{\text{kin}}(\dot{r}) = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 \quad ; \quad E_{\text{pot}}(r) = \frac{1}{2}Cr^2$$

Hierbei ist C die Kraftkonstante, die über $C = m\omega^2$ mit der Atommasse m und der Schwingungsfrequenz ω zusammenhängt. Für die maximale Auslenkung ist $E_{\text{kin}} = 0$ und $E_{\text{pot}}(r_{\max}) = Cr_{\max}^2/2$. Setzen wir $Cr_{\max}^2/2$ gleich der Grundzustandsenergie $\hbar\omega/2$ des harmonischen Oszillators, so erhalten wir (vgl. Übungsblatt 5, Aufgabe 3.1):

$$r_{\max}^2 = \frac{\hbar}{m}\frac{1}{\omega}$$

Das über alle $3N$ Schwingungsmoden gemittelte maximale Amplitudenquadrat erhält man dann in der Form

$$\langle r_{\max}^2 \rangle = \frac{\hbar}{M}\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle_{\text{D}} = \frac{\hbar}{\rho V}\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle_{\text{D}} \quad ; \quad \left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle_{\text{D}} = \sum_{\mathbf{q}i} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}i}}$$

wobei wir die totale Masse $M = Nm$ sowie die Massendichte $\rho = M/V$ eingeführt haben. Der Index D deutet an, dass wir die Summen über Wellenvektoren $\mathbf{q}$ im Rahmen des Debye–Modells (vgl. Vorlesung) auswerten wollen:

$$\begin{aligned}
\langle f \rangle_{\text{D}} &= \sum_{\mathbf{q},i} f(\omega_{\mathbf{q}i}) = \int_0^{\omega_{\text{D}}} d\omega D(\omega) f(\omega) \\
D(\omega) &= \frac{3V}{2\pi^2}\int \frac{d^2\Omega_{\mathbf{q}}}{4\pi}\frac{\omega^2}{v_{\text{s}}^3} \\
\omega_{\text{D}} &= v_{\text{s}} q_{\text{D}} \quad ; \quad q_{\text{D}} = \left(6\pi^2\frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \\
v_{\text{s}} &= \left(\frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{v_i^3}\right)^{-\frac{1}{3}}
\end{aligned}$$

1. Auf unser Problem angewendet, haben wir nun auszuwerten

$$\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle_{\text{D}} = \frac{3V}{2\pi^2 v_{\text{s}}^3}\int_0^{\omega_{\text{D}}} d\omega\omega = \frac{3V}{4\pi^2 v_{\text{s}}^3}\omega_{\text{D}}^2$$

   Daraus erhält man sofort

$$\begin{aligned}
\left\langle r_{\max}^2 \right\rangle &= \frac{3\hbar}{4\pi^2}\frac{\omega_{\text{D}}^2}{\rho v_{\text{s}}^3} \\
\left\langle r^2 \right\rangle &= \frac{1}{2}\left\langle r_{\max}^2 \right\rangle = \frac{3\hbar}{8\pi^2}\frac{\omega_{\text{D}}^2}{\rho v_{\text{s}}^3} \qquad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$

2. In einem eindimensionalen Gitter kann man für das mittlere Auslenkungsquadrat schreiben

$$\left\langle u^2 \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle u_{\max}^2 \right\rangle = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{mN}\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle_{\text{D}}$$

Hier bezeichnet u die Auslenkung in einer Dimension. Für $D = 1$ gilt allgemein (vgl. Übungsblatt 8, Aufgabe 5.6):

$$
\begin{aligned}
\langle f \rangle_{\mathrm{D}} &= \sum_q f(\omega_q) = \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} d\omega D_1(\omega) f(\omega) \\
D_1(\omega) &= \frac{L}{\pi} \frac{dq}{d\omega_q} = \frac{L}{\pi v_{\mathrm{s}}}
\end{aligned}
$$

und man erkennt sofort, dass

$$
\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle_{\mathrm{D}} = \frac{L}{\pi v_{\mathrm{s}}} \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} \frac{d\omega}{\omega}
$$

und damit auch $\langle u^2 \rangle$ an der unteren Grenze divergiert.
Anstelle des mitteren *Auslenkungsquadrats* $\langle u^2 \rangle$ kann man auch das mittlere *Dehnungsquadrat*

$$
\left\langle \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_q q^2 u_{\mathrm{max}}^2
$$

studieren. Wir starten wieder von dem einfachen Ansatz

$$
u_{\mathrm{max}}^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad \rightarrow \quad q^2 u_{\mathrm{max}}^2 = \frac{\hbar q^2}{m\omega}
$$

Mittelt man diesen Ausdruck über alle N Schwingungsmoden

$$
q^2 u_{\mathrm{max}}^2 \rightarrow \frac{1}{N} \sum_q q^2 u_{\mathrm{max}}^2 = \frac{1}{N} \frac{\hbar}{m} \sum_q \frac{q^2}{\omega_q} = \frac{\hbar}{m N v_{\mathrm{s}}} \langle q \rangle_{\mathrm{D}}
$$

Damit können wir schreiben

$$
\begin{aligned}
\left\langle \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right\rangle &= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m N v_{\mathrm{s}}} \langle q \rangle_{\mathrm{D}} = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m N v_{\mathrm{s}}} \frac{L}{\pi v_{\mathrm{s}}} \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} d\omega \frac{\omega}{v_{\mathrm{s}}} \\
&= \frac{\hbar \omega_{\mathrm{D}}^2}{4\pi (mN/L) v_{\mathrm{s}}^3} \qquad \text{q.e.d.}
\end{aligned}
$$

6.3 Spezifische Wärme eines eindimensionalen Gitters und eines Stapels aus zweidimensionalen Schichten

1. Wir starten von dem Ausdruck für die innere Energie U für ein eindimensionales System

$$
U = U_0 + \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} d\omega D_1(\omega) \frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\hbar\omega/k_{\mathrm{B}}T} - 1} \quad ; \quad \omega_{\mathrm{D}} = v_{\mathrm{s}} \frac{\pi}{a}
$$

In $D = 1$ hat man

$$
D_1(\omega) = \frac{L}{\pi v_{\mathrm{s}}}
$$

und man kann schreiben

$$
\begin{aligned}
U &= U_0 + \frac{L}{\pi\hbar v_\mathrm{s}} \int_0^{\omega_\mathrm{D}} d(\hbar\omega) \frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\hbar\omega/k_\mathrm{B}T} - 1} \\
&\overset{x=\hbar\omega/k_\mathrm{B}T}{=} U_0 + L \frac{(k_\mathrm{B}T)^2}{\pi\hbar v_\mathrm{s}} \underbrace{\int_0^{\hbar\omega_\mathrm{D}/k_\mathrm{B}T} \frac{dx x}{\mathrm{e}^x - 1}}_{\overset{T\to 0}{=} \frac{\pi^2}{6}} \\
&\overset{T\to 0}{=} U_0 + L \frac{\pi(k_\mathrm{B}T)^2}{6\hbar v_\mathrm{s}} = U_0 + \frac{\pi^2}{6} \frac{L}{a} \frac{(k_\mathrm{B}T)^2}{\hbar\omega_\mathrm{D}} \\
&= U_0 + \frac{\pi^2}{6} \frac{L}{a} \frac{(k_\mathrm{B}T)^2}{k_\mathrm{B}\theta_\mathrm{D}} = U_0 + \frac{\pi^2}{6} N \frac{(k_\mathrm{B}T)^2}{k_\mathrm{B}\theta_\mathrm{D}}
\end{aligned}
$$

Die spezifische Wärme ergibt sich daraus als

$$
C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_T \overset{T\to 0}{=} \frac{\pi^2}{3} \frac{L}{a} k_\mathrm{B} \left(\frac{T}{\theta_\mathrm{D}}\right) = \frac{\pi^2}{3} N k_\mathrm{B} \left(\frac{T}{\theta_\mathrm{D}}\right)
$$

2. Ein solcher Kristall ist im Wesentlichen ein lineares Gitter aus entkoppelten zweidimensionalen Lagen. Wir können deshalb das Ergebnis aus dem 1. Aufgabenteil auch hier verwenden. Wir erhalten also in gleicher Weise $C_V(T) \propto T$ bei tiefen Temperaturen.