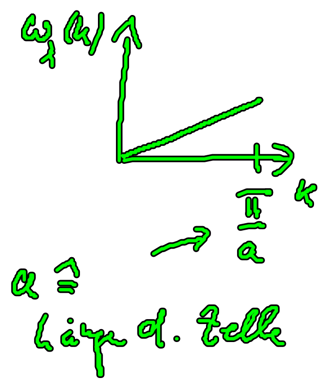
3.2.6. Phononen: Spezifische Wärme v. Festkörpern

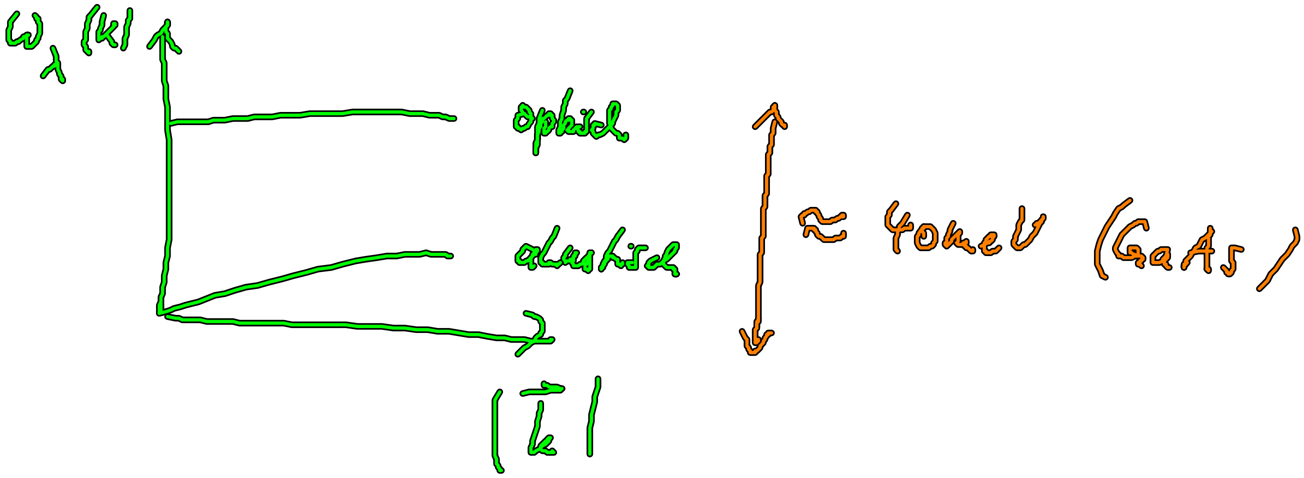
Phonon: Quasiteilchen (masselos) der Ionenschwingg. in Festkörpern, beschrieben über Normalmoden
(3pN Stück – 3 (x,y,z), p (Ion/Zelle), N (Zelle))

beschränken uns in VL auf akustische Phononen:

$$\omega_\lambda(k) = v_s |\vec{k}|$$



akustische Moden sind wichtiger für Tieftemperaturverhalten,
d.h. wo Quanteneffekte wichtig sind



typisch thermische Energie die Phononen angefügt werden kann ist kT, bei tiefen Temperaturen werden zunächst die akustischen Phononen angeregt, später ($T\uparrow$) tragen auch optische Phononen zu den makroskopischen Eigenschaften bei.

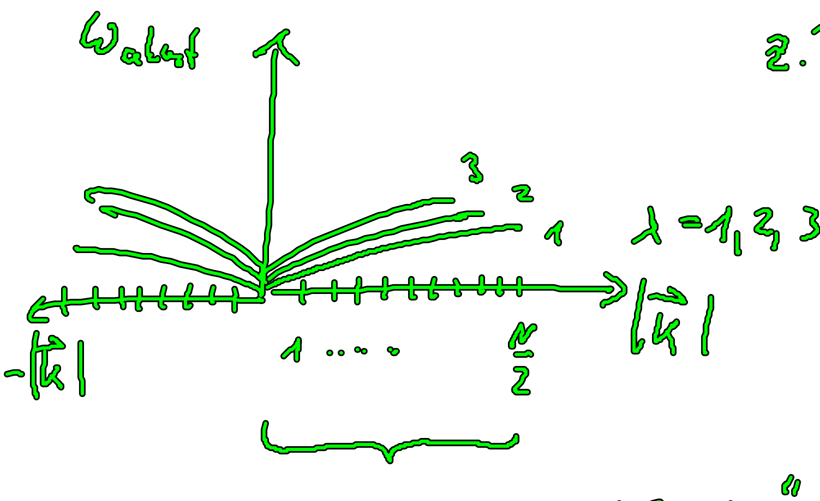
$$Z_k = \prod_k \left(\frac{e^{-\beta\hbar\frac{\omega_k}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_k}} \right)$$

ist die Zustandssumme für einen Satz ungekoppelter harmonischer Oszillatoren

k = Verbundindex $= (\lambda, \vec{k})$

Phononzweig, numeriert Zweige d. Dispersion

$\vec{k}$: Wellenzahl



insgesamt N „k Punkte"

z.B. 3 akustische Moden f. 1 Atom/Zelle

$\rightarrow$ 3N Oszillatoren

$$Z_k = \prod_{\vec{k}} \prod_{\lambda} \frac{e^{-\beta\hbar\frac{\omega_\lambda}{2}(\vec{k})}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_\lambda(\vec{k})}}$$

3.2.6.1. Auswertung der Phononenzustandssumme

Völlig analog zum Photongas kann man die Energie übernehmen:

$$E = -\partial_\beta \ln Z_k = \sum_{\lambda,\vec{k}} \left(\hbar\frac{\omega_\lambda(\vec{k})}{2} + \frac{\hbar\omega_\lambda(\vec{k})}{e^{\beta\hbar\omega_\lambda(\vec{k})}-1} \right)$$

Grundzustands-energie

$$\underbrace{\text{Energie } (\hbar\omega_\lambda(\vec{k})) \cdot \text{Besetzungszahl } \left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_\lambda(\vec{k})}-1}\right)}_{\text{thermische Anregungsbeitrag}}$$

Ziel bei den Phononen ist die Berechnung der spezifischen Wärme als Meßgröße:

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T}\bigg|_{V = \text{konstant}}$$

(Erklärg., wohl erfolgt in Thermodynamik)

$$E = \underbrace{E_0(V)}_{\text{Grundzustandsenergie}} + \sum_{\lambda=1}^{3p} \underbrace{\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k}_{\sum_{\vec{k}}}\, \hbar\omega_\lambda(\vec{k})\, f^B(\omega_\lambda(\vec{k}))$$

Versuch von der $\vec{k}$-Integration zur ω_λ Integration überzugehen

$$= E_0(V) + \sum_{\lambda=1}^{3p} \int d\omega_\lambda\, D(\omega_\lambda)\, \hbar\omega_\lambda\, f^B(\omega_\lambda)$$

Korrektur f. die Variable substitution
~ Zustandsdichte
$(\vec{k} \to E)$

hängt vom Modell ab

2 Modelle wichtig: Debye-Modell: akustische Phonon
$(\omega \sim |\vec{k}|)$

Einstein-Modell: optischen Phononen
$(\omega \sim \text{konstant})$

Man spricht bei tiefen Temperaturen von eingefrorenen optischen Phononen

3.2.6.2. Debye Modell der spezifischen Wärme

Debye-Modell: akustische

1 Ion / Zelle

3d-Modell

$\omega_\lambda(\vec{k}) \approx v_\lambda |\vec{k}|$

Schallgeschwindigkeit für alle Moden gleich $v_\lambda \equiv c_0$

E wird berechnet, $D(\omega) = ?$

$$\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3}\int dk\, k^2 \underbrace{\int d\vartheta \sin\vartheta \int d\varphi}_{4\pi}$$

(nichts hängt v. Richtg. ab)

$$= \frac{V}{2\pi^2 c_0^3}\int d\omega_\lambda\, \omega_\lambda^2 = \int d\omega_\lambda\, D(\omega_\lambda)$$

$$D(\omega_\lambda) = \frac{V}{2\pi^2 c_0^3}\,\omega_\lambda^2 \quad , \quad \sum_{\lambda=1}^{3p} \equiv 3 \quad p=1$$

$$E_{akust} = \underbrace{E_0(V)}_{\substack{\text{hängt nicht von} \\ \text{der Temperatur ab} \\ \text{wird weggelassen,} \\ \text{weil wir spezifische Wärme} \\ \text{berechnen}}} + \frac{V}{2\pi^2} \frac{3}{c_0^3} \int_0^{?} d\omega\, \omega^2 \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta}-1}$$

? $\hat{=}$ es muß die obere Grenze in ω festgelegt werden, weil die Dispersion nicht bis $\omega = \infty$ ausgedehnt ist (anders als bei Photonen)

$\omega_D \equiv$? wird Debyefrequenz genannt

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ionenzahl ist fest}}}{N} = \sum_{\vec{k}} = \int_0^{\omega_D} d\omega\, D(\omega)$$

ist eine Bestimmungsgleichung für ω_D

$$N = \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{V}{2\pi^2 c_0^3} \omega^2 = \frac{V}{6\pi^2 c_0^3} \omega_D^3$$

$$\omega_D = \left(6\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} c_0$$

Dichte der Elementarzellen

Damit ist ω_D bestimmt und E kann berechnet werden.

$$E = \frac{3}{c_0^3} \frac{V\hbar}{2\pi^2} \underbrace{\int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega\beta}-1}}_{I} \qquad \beta = \frac{1}{kT}$$

Ziel: $\frac{\partial E}{\partial T}$ berechnen, um c_V zu bestimmen

Bemerkungen:

a) ω_D als Debyefrequenz bestimmt den Übergang zwischen dem klass. Regime und dem quanten Regime:

$$I = \left| kT_D = \hbar\omega_D \right| =$$

Debye-Temperatur

dimensionslos, gut zu diskutieren

$$= \int_0^{\omega_D} d\omega \, \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/kT}-1} = \int_0^{\hbar\omega_D/kT} dx \, \frac{x^3}{e^x-1} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4$$

$$x = \frac{\hbar\omega}{kT}$$

$$I = \int_0^{T_D/T} dx \, \frac{x^3}{e^x-1} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4$$

b) klassischer Grenzfall: $\frac{T_D}{T} \to 0$

$(T \to \infty)$

(Debye Temperatur trennt klass. + qm. Bereich)

weil kleine Grenze von I, kann $x \to 0$ genommen werden

$$I = \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \int_0^{T_D/T} dx \, \frac{x^3}{1+x-1}$$

$$= \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \int_0^{T_D/T} dx\, x^2 = \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \left(\frac{T_D}{T}\right)^3 \frac{1}{3}$$

$$I \sim T$$

Damit ist gezeigt : $E_{\text{akust}} \underset{\text{klassisch}}{=} 3NkT$

Interpretation später mit Gleichverteilungssatz

Spezifische Wärme : $c_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3Nk =$ konstant

die spezifische Wärme eines Festkörpers ist im klassischen Grenzfall nicht von der Temperatur abhängig.

c) Diskussion des quantenmechanischen Grenzfalls

$T \to 0$, $T_D/T \to \infty$

$$I = \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \underbrace{\int_0^{\infty} dx\, \frac{x^3}{e^x - 1}} \sim T^4$$

Integraltafel: $\frac{\pi^4}{15}$

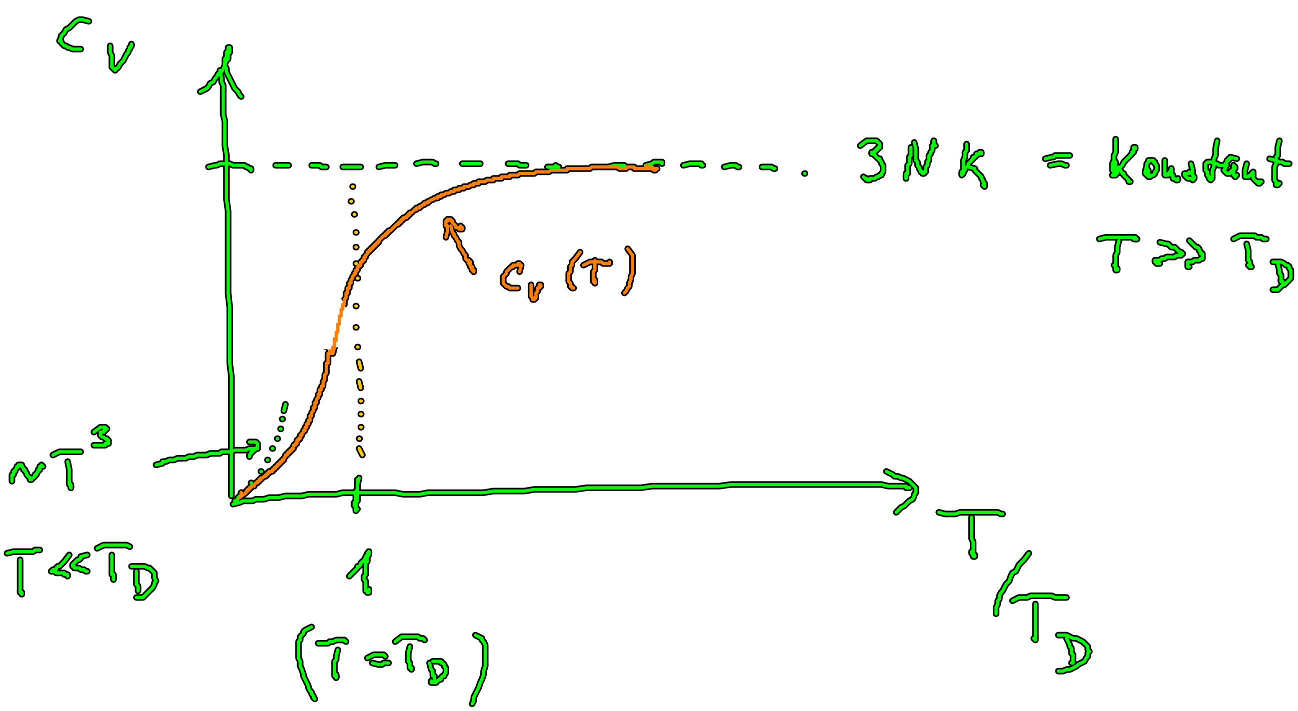
Damit ist gezeigt: $E_{\text{akust}} \underset{\text{Quantlimit}}{=} \frac{3\pi^4 k N}{5} \frac{T^4}{T_D^3}$

$E \sim T^4$ hat kein klassisches Analogon

die spezifische Wärme $c_V = \frac{12\pi^4 k N}{5}\left(\frac{T}{T_D}\right)^3$

$c_V \sim T^3$ für tiefe Temperaturen

d) Berechneten Gesamtverlauf von $c_V(T)$



T_D trennt qm. + klass. Bereich

Tieftemperaturverhalten durch QM (Boseverteilung) festgelegt.

e) T_D ist stark materialabhängig, typischer Wert $T = 100K$

f) bei hohen Temperaturen sollte man auch optischen Phononen mitrechnen

g) bei tiefen Temperaturen führt auch das Elektronengas zu einem Beitrag zu C_V.