KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE

INSTITUT FÜR THEORIE
DER KONDENSIERTEN MATERIE

Übungen zur Theoretischen Physik F SS 11

Prof. Dr. A. Shnirman
Dr. B. Narozhny

Lösungsvorschlag zu Blatt 9
24.6.2011

1. Harmonische Kette:

(a) Bewegungsgleichungen:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{u}_n}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u_n}\quad,\quad\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{s}_n}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial s_n}\quad,\quad T=\frac{1}{2}m\sum_n\left[\,(\dot{u}_n)^2+(\dot{s}_n)^2\,\right]$$

$$\Rightarrow\quad\begin{aligned}m\ddot{u}_n &= -K(u_n-s_n)-G(u_n-s_{n-1})\\ m\ddot{s}_n &= -K(s_n-u_n)-G(s_n-u_{n+1})\end{aligned}$$

Ansatz:

$$\begin{aligned}u_n(t) &= u\,e^{i(kx-\omega t)}\\ s_n(t) &= s\,e^{i(kx-\omega t)}\end{aligned}\quad,\quad x=n\,a$$

Periodische Randbedingungen:

$$u_{n+N}=u_n\quad\Rightarrow\quad e^{ikNa}=1\quad\Rightarrow\quad\boxed{k=\frac{2\pi}{a}\frac{m}{N}\quad,\quad m=0,\pm1,\pm2,\ldots}$$

Eindeutigkeit der Lösung: Der Phasenfaktor e^{ikna} ist für zwei k , die sich um $G=\frac{2\pi}{a}l$ unterscheiden, gleich:

$$e^{ikna}=e^{i(k+G)na}\quad,\quad G=\frac{2\pi}{a}l\quad,\quad l=0,\pm1,\pm2,\ldots$$

Daher muß k eingeschränkt werden auf

$$k=\frac{2\pi}{a}\frac{m}{N}\quad,\quad m=0,1,2,\ldots,(N-1)$$

oder alternativ:

$$m=(-N/2+1),(-N/2+2),\ldots,-1,0,1,\ldots,(N/2)\quad\Leftrightarrow\quad\boxed{-\frac{\pi}{a}<k\leq\frac{\pi}{a}}$$

(b) Ansatz in Bewegungsgleichungen einsetzen:

$$\begin{aligned}[\,m\omega^2-(K+G)\,]u+[\,K+G\,e^{-ika}\,]s &= 0\\ [\,K+G\,e^{ika}\,]u+[\,m\omega^2-(K+G)\,]s &= 0\end{aligned}$$

Nichttriviale Lösung für

$$[\,m\omega^2-(K+G)\,]^2-(K+Ge^{-ika})(K+Ge^{ika})=0$$

$$\Rightarrow\quad\boxed{m\omega^2=(K+G)\pm\sqrt{K^2+G^2+2KG\cos(ka)}}$$

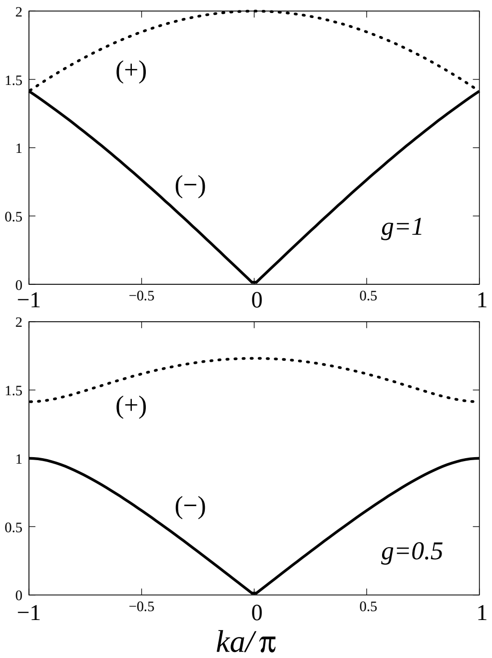

Abbildung 1: Die Dispersion von optischer (+) und akustischer (−) Mode für unterschiedliche Federn $G = 0.5\,K$ (unten) und identische Federn $G = K$ (oben). Für $K = G$ verschwindet die optische Mode bzw. geht in die zurückgefaltete akustische über.

Die zugehörigen Moden werden bestimmt durch die Lösung des Gleichungssystems:

$$\Rightarrow \quad \frac{s}{u} = \frac{-[\,K + Ge^{ika}\,]}{m\omega^2 - (K+G)} = \mp \frac{[\,K + Ge^{ika}\,]}{\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG\cos(ka)}}$$

Interessant ist jetzt der Grenzfall $k \to 0$:

$$k \ll \pi/a : \quad \cos(ka) \simeq 1 - \frac{1}{2}(ka)^2$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad m\omega^2 &= (K+G) \pm \sqrt{(K+G)^2 - KG\,(ka)^2} \\ &= (K+G)\left[1 \pm \left(1 - \frac{KG}{2(K+G)^2}(ka)^2\right)\right] \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \omega_+ = \sqrt{\frac{2}{m}(K+G)} \;, \quad \omega_- = \sqrt{\frac{KG}{2(K+G)}}ka \equiv c\,k$$

und

$$\frac{s}{u} \simeq \mp \frac{(K+G)}{(K+G)(1 - \frac{KG}{2(K+G)^2}(ka)^2)} \simeq \mp 1$$

Für kleine k unterscheiden sich also deutlich die Moden:

$$ka \ll \pi \; : \quad \boxed{\begin{array}{llll} (+): & \omega_+ = const. & \frac{s}{u} = -1 & \text{gegenphasig (optisch)} \\ (-): & \omega_- = c\,k & \frac{s}{u} = +1 & \text{gleichphasig (akustisch)} \end{array}}$$

Die Dispersion ist in Abb. 1 gezeigt, und zwar in der Form

$$\omega_\pm = \frac{K}{m}\left[(1+g) \pm \sqrt{1+g^2+2g\cos(ka)}\right]^{1/2} \quad , \quad g = \frac{G}{K} \quad , \quad \frac{K}{m} \equiv 1$$

Anzahl der Moden: Die Anzahl der erlaubten k-Werte ist gerade N, also gibt es N optische und N akustische Moden. Die Gesamtzahl $2N$ der Moden entspricht der Anzahl der Massen in der Kette, denn jede Masse kann in einer Richtung (x-Richtung) um die Gleichgewichtslage schwingen, trägt also einen Freiheitsgrad bei.

2. Phononen:

Die Moden der Kette seien mit λ bezeichnet, also $\lambda \equiv (k, \pm)$, $(\pm)$ steht für optisch/akustisch, mit den entsprechenden Eigenfrequenzen ω_λ. Jeder Mode λ wird nun ein harmonischer Oszillator zugeordnet,

$$\lambda : \quad H_\lambda = \hbar\omega_\lambda(a^\dagger_\lambda a_\lambda + 1/2) \quad , \quad H_\lambda|n_\lambda\rangle = \hbar\omega_\lambda(n_\lambda + 1/2)|n_\lambda\rangle \quad , \quad n_\lambda = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Dann lautet die kanonische Zustandssumme der *unterscheidbaren* Oszillatoren:

$$Z = \sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha} = \prod_\lambda \left(\sum_{n_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega_\lambda(n_\lambda+1/2)}\right) = \prod_\lambda \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega_\lambda \frac{1}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_\lambda}}\right)$$

Innere Energie:

$$\begin{aligned} U &= -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_\lambda \left[-\frac{\beta\hbar\omega_\lambda}{2} - \ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega_\lambda}\right)\right] \\ &= \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda \left[\frac{1}{2} + g(\hbar\omega_\lambda)\right] \end{aligned}$$

(a) Hochtemperaturlimes $k_B T \gg \hbar\omega_\lambda \quad \Rightarrow \quad e^{\beta\hbar\omega_\lambda} \approx 1 + \beta\hbar\omega_\lambda$:

$$U = \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda\left(\frac{1}{2} + \frac{k_B T}{\hbar\omega_\lambda}\right) = \sum_\lambda k_B T\left(1 + \frac{1}{2}\frac{\hbar\omega_\lambda}{k_B T}\right) = 2Nk_B T\left(1 + \mathcal{O}\Big(\underbrace{\frac{\hbar\omega_\lambda}{k_B T}}_{\ll 1}\Big)\right)$$

In führender Ordnung ist dies genau der Gleichverteilungssatz, der besagt, dass jeder Freiheitsgrad, der quadratisch in der Lagrange-Funktion auftritt mit $1/2Nk_BT$ zur inneren Energie beiträgt (2N Atome oder Moden, die jeweils in der kinetischen und potentiellen Energie quadratisch auftreten).

Die spezifische Wärme erhält man durch Ableiten nach T und wir finden $C_V = 2Nk_B$. Im allgemeinen lautet das Dulong-Petit'sche Gesetz

$$C_V = dNrk_B$$

mit der Raumdimension d, der Anzahl der Einheitszellen N und der Anzahl der Atome pro Einheitszelle r.

(b) Annahme: $\omega_\lambda = \omega_{\text{akustisch}} = ck$.

Die Grundzustandsenergie ist $U_0 = \sum_\lambda \frac{\hbar\omega_\lambda}{2}$. Es gilt dann also

$$\begin{aligned}
U - U_0 &= \sum_k \frac{\hbar ck}{e^{\beta\hbar ck} - 1} \\
&= \frac{V}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \frac{\hbar ck}{e^{\beta\hbar ck} - 1} \\
&= \frac{2Na}{2\pi} \frac{(k_B T)^2}{\hbar c} \int_0^{\frac{\pi\hbar c}{a k_B T}} dx \frac{x}{e^x - 1} \\
&\overset{k_B T \ll \hbar c \frac{\pi}{a}}{\longrightarrow} \frac{2Na}{2\pi} \frac{(k_B T)^2}{\hbar c} \int_0^{\infty} dx \frac{x}{e^x - 1} \\
&= \frac{Na\pi}{6} \frac{(k_B T)^2}{\hbar c}
\end{aligned}$$

Die spezifische Wärme ergibt sich dann zu

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{Na\pi k_B^2}{3\hbar c} T \ .$$

Man kann leicht zeigen (in einer analogen Rechnung), dass im Allgemeinen gilt

$$C_V \propto T^d \ ,$$

was dann für $d = 3$ das bekannte T^3–Gesetz ergibt.

(c) Man erhält mit den Annahmen vom Übungsblatt die innere Energie

$$U = U_0 + 2N \frac{\hbar\omega_0}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1}$$

und daraus sofort die spezifische Wärme

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = 2Nk_B \frac{(\hbar\omega_0)^2}{(k_B T)^2} \frac{e^{\beta\hbar\omega_0}}{\left[e^{\beta\hbar\omega_0} - 1\right]^2} = 2Nk_B \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\Theta_E/T}}{\left[e^{\Theta_E/T} - 1\right]^2}$$

mit der charakteristischen Einstein-Temperatur

$$k_B \Theta_E = \hbar\omega_0 \ .$$

<u>Hochtemperaturlimes $T \gg \Theta_e$</u> ($\exp(\Theta_E/T) \approx 1 + \Theta_E/T$):

$$\Rightarrow \quad U - U_0 = 2Nk_B T \quad \text{und} \quad C_V = 2Nk_B \ .$$

<u>Tieftemperaturlimes $T \ll \Theta_e$</u> ($\exp(\Theta_E/T) \gg 1$):

$$U - U_0 \approx 2N \frac{\hbar\omega_0}{e^{\beta\hbar\omega_0}} = 2N\hbar\omega_0 e^{-\Theta_E/T}$$

$$C_V \approx 2Nk_B \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\Theta_E/T}}{\left[e^{\Theta_E/T}\right]^2} = 2Nk_B \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 e^{-\Theta_E/T}$$

Sowohl U als auch C_V verschwinden sind also exponentiell unterdrückt im Limes $T \to 0$. Dies ist charkateristisch für ein System mit Energielücke im Anregungsspektrum, wie Sie in Aufgabe 1 für optische Phononen bereits herausgefunden hatten. Mit anderen Worten: Da Sie mit der Annahme $\omega(k) = \text{const.}$ (motiviert durch ihr Ergebnis für kleine k aus Aufgabe 1) begonnen haben, konnten Sie nichts anderes als einen exponentiellen Abfall in der T–Abhängigkeit finden.

(d) Wir setzen voraus, dass der Körper isotrop ist. Bekanntlich ist in einem isotropen Festkörper die Ausbreitung longitudinaler Schallwellen (mit der Geschwindigkeit u_l) und transversaler Wellen mit zwei unabhängigen Polarizationen (und gleicher Ausbreitungsgeschwindigkeit u_t) möglich.

Die Zahl der Eigenschwingungen im Spektrum der Schallwellen mit dem Betrag des Wellenvektors im Interval dk und mit gegebener Polarization ist

$$V\frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi\hbar)^3},$$

wobei V das Volumen des Körpers ist. Im Interval $d\omega$ gibt es insgesamt die folgende Zahl von Schwingungen:

$$V\frac{\omega^2 d\omega}{2\pi^2\hbar^3}\left(\frac{1}{u_l^3} + \frac{2}{u_t^3}\right) \to V\frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2\hbar^3\bar{u}^3},$$

dabei muss man unter $\bar{u} = \bar{u}(V/N)$ die auf eine bestimmte Weise gemittelte Ausbreitungsgeschwindigkeit des Schalls im Kristall verstehen.

Jetzt die Gesamtzahl der Schwingungen:

$$\frac{3V}{2\pi^2\hbar^3\bar{u}^3}\int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega = 3N\nu.$$

Dann findet man für die Debye-Frequenz:

$$\omega_D = \bar{u}\left(\frac{6\pi^2\hbar^3 N\nu}{V}\right)^{1/3}.$$

Die Verteilung der Frequenzen wird im Debye-Modell durch die Formel

$$9N\nu\frac{\omega^2 d\omega}{\omega_D^3}, \quad \omega \leqslant \omega_D.$$

Die freie Energie:

$$F = F_0 + k_B T\sum_\lambda \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_\lambda}\right) = F_0 + k_B T\frac{9N\nu}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right).$$

Integriert man partiell und führt die Debye-Funktion ein:

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int\limits_0^x \frac{z^3 dz}{e^z - 1},$$

so kann man die freie Energie in der folgenden Form schreiben:

$$F = F_0 + N\nu k_B T \left[3 \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_D}\right) - D\left(\beta\hbar\omega_D\right)\right].$$

Für die Energie erhalten wir;

$$U = F - T\frac{\partial F}{\partial T} = U_0 + 3N\nu k_B T D\left(\beta\hbar\omega_D\right),$$

und für die Wärmekapazität

$$C_V = 3N\nu k_B \left[D\left(\beta\hbar\omega_D\right) - \beta\hbar\omega_D D'\left(\beta\hbar\omega_D\right)\right].$$

Bei hohen Temperaturen

$$D(\beta\hbar\omega_D \ll 1) \approx 1 \quad \Rightarrow \quad C_V = 3N\nu k_B.$$

(e) Alles läuft genauso wie in Aufgabenteil (b). Allerdings erhalten wir eine Integration über alle drei k-Richtungen anstelle von einer:

$$\begin{aligned}
U - U_0 &= \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_s \int_{\boldsymbol{k}\in 1.BZ} d^3k \frac{\hbar c|k|}{e^{\beta\hbar ck} - 1} = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_s \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3} \int_0^\infty d^3x \frac{x}{e^x - 1} \\
&= \frac{V}{(2\pi)^3} 3 \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3} 4\pi \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} \\
&= \frac{V}{(2\pi)^3} 3 \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3} 4\pi \frac{\pi^4}{15} = \frac{\pi^2}{10} \frac{V}{(\hbar c)^3} (k_B T)^4
\end{aligned}$$

Da wir jetzt in $d = 3$ sind, ist $\lambda = (k, s, \pm)$, das heisst wir haben in drei Dimensionen drei akustische Phononenzweige etc. Diese Summe über s ergibt dann aber einfach nur einen Faktor 3, da wir Isotropie des k-Raums annehmen dürfen. Damit finden wir schließlich für die spezifische Wärme

$$C_V = \frac{2}{5} V \pi^2 k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3 \; \propto \; T^3 .$$

Oder findet man von (d):

$$D(\beta\hbar\omega_D \gg 1) \approx \frac{\pi^4}{5(\beta\hbar\omega_D)^3} \quad \Rightarrow \quad C_V = \frac{12}{5} N\nu\pi^4 k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_D}\right)^3.$$