Übungen zur Theoretischen Physik Fb   SS 18

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

Blatt 2
Besprechung 04.05.2018

---

1. Thermodynamik von Phononen: (40 Punkte)

Betrachten Sie die in Abb. 1 dargestellte Kette. $2N$ identische Massen m können sich auf der x-Achse reibungsfrei bewegen und sind abwechselnd mit unterschiedlichen Federn $K > G$ verbunden:

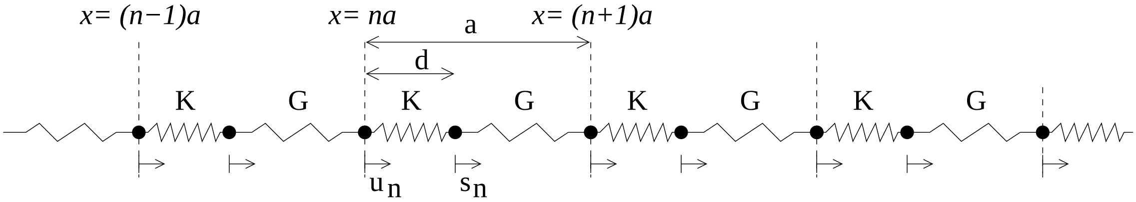

Abbildung 1: Harmonische Kette

Es sollen die klassischen Bewegungsgleichungen für kleine Auslenkungen u_n und s_n aus den jeweiligen Ruhelagen bei $x = na$ und $x = (na + d)$ gelöst werden. Die Lagrange-Funktion lautet

$$\mathcal{L}(u_n, s_n, \dot{u}_n, \dot{s}_n) = T - U, \quad \text{wobei} \quad U = \frac{K}{2}\sum_n (u_n - s_n)^2 + \frac{G}{2}\sum_n (u_{n+1} - s_n)^2,$$

(a) Bestimmen Sie die Bewegungsgleichungen. Zeigen Sie dann für den Ansatz

$$u_n(t) = u\, e^{i(kx-\omega t)}, \quad s_n(t) = s\, e^{i(kx-\omega t)}, \quad x = na,$$

dass periodische Randbedingungen

$$u_{n+N}(t) = u_n(t), \quad s_{n+N}(t) = s_n(t)$$

auf die Einschränkung

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

führen, und dass für eine eindeutige Lösung $-\pi/a < k \leqslant \pi/a$ gelten muß.

(b) Schreiben Sie die Bewegungsgleichungen als 2×2–Matrix und bestimmen Sie nun die Frequenzen $\omega_+(k)$, $\omega_-(k)$ der Eigenmoden der Kette, geben Sie jeweils auch s/u an. Wie verhalten sich $\omega_\pm(k)$ und s/u für kleine $|k| \ll \pi/a$? Was bedeutet das Ergebnis anschaulich? Skizzieren Sie $\omega_\pm(k)$ für alle erlaubten k. Wie viele akustische $(-)$ und optische $(+)$ Eigenmoden besitzt die Kette?

(c) Die bisher betrachteten Gitterschwingungen haben die Form harmonischer Oszillatoren und können somit wie aus der Quantenmechanik bekannt quantisiert werden. Die so entstandenen Schwingungszustände heißen akustische bzw. optische Phononen, die Besetzungszahl eines Schwingungszustands gehorcht der Bose-Einstein-Statistik. Da die Anzahl der Phononen keine Erhaltungsgröße ist, ist im Gleichgewicht das chemische Potential $\mu = 0$.

Finden Sie zunächst einen allgemeinen Ausdruck für das großkanonische Potential Ω der phononischen Eigenmoden $\omega_\pm(k)$ im thermodynamischen Limit $N \to \infty$ (wegen $\mu = 0$ ist hier $\Omega = F$).

Das Spektrum der Phononen hat mehrere Eigenfrequenzen:

$$\omega_-(k = \pi/a) < \omega_+(k = \pi/a) < \omega_+(k = 0).$$

Nehmen Sie an, dass die Lücke im Spektrum der Phononen großist, $\omega_+(k = \pi/a) \gg \omega_-(k = \pi/a)$. Berechnen Sie das großkanonische Potential und die Wärmekapazität der Phononen in den Temperaturbereichen

(1) $T \gg \omega_+(k = 0)$;
(2) $\omega_-(k = \pi/a) \ll T \ll \omega_+(k = \pi/a)$;
(3) $T \ll \omega_-(k = \pi/a)$.

Wie sind die Ergebnisse von (1) und (2) mit dem Gleichverteilungssatz der klassischen Statistik vereinbar? Diskutieren sie das Verhalten der Wärmekapazität bei Änderung der Temperatur.

(d) Entfernen Sie sich nun von der Vorstellung des 1D-Modells und betrachten Sie einen Kristall in D räumlichen Dimensionen. Dieser besitzt D akustische Moden mit den linearen Dispersionsrelationen $\omega_{i;k} = c_i(\boldsymbol{k}/k)k$ bei kleinem Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ $(i = 1, \ldots D)$. Zeigen Sie, dass sich die Wärmekapazität des Kristalls bei tiefen Termperaturen wie $c_V \propto T^\alpha$ verhält und finden sie den Exponenten α.

2. Korrelatoren im 1D-Ising-Modell: (25 Punkte)

Gegeben sei ein Ising-Modell aus N Spins-1/2 in einer Dimension mit periodischer Randbedingung: $S^z_{N+1} = S^z_1$ (Ising-Modell auf einem Ring). Der Hamiltonoperator ist

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} S^z_i S^z_{i+1} - \gamma H \sum_{i=1}^{N} S^z_i,$$

mit der Austauschwechselwirkung J und einem Magnetfeld $H > 0$. Die Eigenwerte der Spinoperatoren S^z_i seien durch $\sigma_i/2$ bezeichnet sind und können die diskreten Werte $\sigma_i = \pm 1$ annehmen. Betrachten Sie den thermodynamischen Limes $N \to \infty$.

(a) Berechnen Sie im endlichen Magnetfeld $H > 0$ den Korrelator

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_l\}} \sigma_i \sigma_j e^{-\mathcal{H}/T}, \qquad i > j.$$

Wie verhält sich der Korrelator $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ im Limes $(i - j) \to \infty$? Interpretieren Sie das Ergebnis.

(b) Berechnen Sie für $H = 0$ die Korrelatoren

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle \qquad \text{und} \qquad \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle, i > j > k > l.$$

Drücken Sie den 4er-Korrelator $\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle$ durch den 2er-Korrelator $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ aus.
Hinweis: Verwenden Sie die in der Vorlesung diskutierte Transfermatrixmethode. Im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ können Sie Beiträge der Form $(\lambda_2/\lambda_1)^N$ vernachlässigen, wobei $\lambda_{1,2}$ die Eigenwerte der Transfermatrix sind und $\lambda_1 > \lambda_2$.

3. Suszeptibilität und Korrelatoren in Ising-Modellen (35 Punkte)

Im Allgemeinen hat der Hamiltonoperator eines Ising-Modells die Form

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle}^{N} S_i^z S_j^z - \gamma H \sum_{i=1}^{N} S_i^z,$$

wobei $\langle ij \rangle$ die nächste Nachbarn bezeichnet. Benutzen Sie den allgemeinen Ausdruck $Z = \operatorname{Tr} \exp(-\mathcal{H}/T)$ für die Zustandssumme, um zu beweisen, dass die Suszeptibilität $\chi = \partial M / \partial H$ die folgende Relation erfüllt:

$$\chi = \frac{\gamma^2}{T} \left[\sum_{i,j} \langle S_i^z S_j^z \rangle - \sum_i \langle S_i^z \rangle^2 \right].$$