

Übungen zu Moderne Theoretische Physik III SS 13

Prof. Dr. G. Schön

Lösungsvorschlag zu Blatt 10

Dr. M. Marthaler, Dr. A. Poenicke

28.06.2013

1. **Harmonische Kette:** Gegeben ist eine zwei atomige Kette, wobei die zwei verschiedenen Atome sich durch ihre Masse unterscheiden (siehe Bild 1).

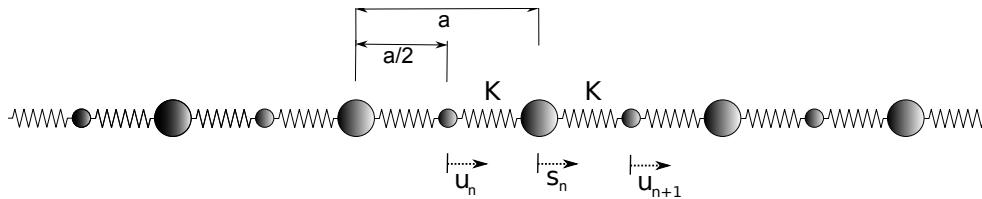


Abbildung 1: Zwei-atomige Kette mit den Atompositionen  $S_n$  und  $U_n$

Atome um die Position  $U_n$  haben die Masse  $m_u$  und entsprechend Atome bei  $S_n$  die Masse  $m_s$ . Zwischen allen Atomen gilt die selbe Federkonstante  $K$ . Aufgrund der angegebenen Struktur besitzt das System die Periodizität  $a$ . Via Lagrange Funktion, Hamilton Funktion oder durch direktes ablesen lassen sich die Bewegungsgleichungen bestimmen.

Es ergeben sich folgende newtonsche Bewegungsgleichungen (in Matrixform):

$$\begin{pmatrix} m_u & 0 \\ 0 & m_s \end{pmatrix} \ddot{z}_n = K \left[ \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} z_n + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} z_{n-1} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} z_{n+1} \right] \quad \text{mit } z_n = \begin{pmatrix} u_n \\ s_n \end{pmatrix}$$

die mit Hilfe eines Ansatzes mit ebenen Wellen:

$$u_n(t) = u e^{i[kna - \omega t]} \quad s_n(t) = s e^{i[k(na + \frac{a}{2}) - \omega t]} \quad \text{also}$$

$$z_n(t) = e^{i[kna - \omega t]} \begin{pmatrix} u \\ s e^{ik\frac{a}{2}} \end{pmatrix}$$

gelöst werden soll (entgegen dem Übungsblatt verwenden wir ein Reelles  $s$ ). Die Matrixform der Bewegungsgleichung legt einen solchen Ansatz nahe, da die Struktur einer einatomigen Kette (mit geeigneten Koeffizienten) wiederhergestellt wurde:  $z_{n-1} - 2z_n + z_{n+1}$ .

(a) Zuerst soll bestimmt werden wie die periodischen Randbedingungen sich auf die möglichen Lösungen des Systems auswirken.

Mit der Bedingung der Periodizität bezüglich  $a$  folgt:

$$z_{n+N}(t) = z_n(t) \quad \Rightarrow \quad e^{ikNa} = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{k = \frac{2\pi}{a} \frac{m}{N}, m = 0, 1, 2, \dots, N - 1}$$

Die Einschränkung  $|m| < N$  folgt aufgrund der Vermeidung doppelt gezählter Zustände. Die Periodizität bezüglich  $a$  impliziert das  $2N$  Atome als Freiheitsgrade zur Verfügung stehen. Die Zahl der möglichen Zuständen muss demnach ebenfalls  $2N$  sein ( $z_n$  enthält immer 2 Freiheitsgrade).

Eine Symmetrisierung des Intervalls führt zur Einschränkung: 
$$\boxed{-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}}$$
.

- (b) Unter Verwendung des Ansatzes ergibt sich für die Bewegungsgleichung (re-absorbieren des  $e^{ika}$ -Faktors):

$$\left\{ K \left[ \begin{pmatrix} -2 & e^{ik\frac{a}{2}} \\ e^{-ik\frac{a}{2}} & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik\frac{a}{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ e^{ik\frac{a}{2}} & 0 \end{pmatrix} \right] + \omega^2 \begin{pmatrix} m_u & 0 \\ 0 & m_s \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} u \\ s \end{pmatrix} = 0$$

und damit die quadratische Gleichung:

$$\left| \begin{pmatrix} \omega^2 m_u - 2K & 2K \cos(k\frac{a}{2}) \\ 2K \cos(k\frac{a}{2}) & \omega^2 m_s - 2K \end{pmatrix} \right| = 0 \quad (1)$$

die gelöst wird durch (Siehe Abbildung 2 für die Auftragung von  $\omega_{\pm}(k)$ ):

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2 &= K \frac{m_u + m_s}{m_u m_s} \pm K \sqrt{\left( \frac{m_u + m_s}{m_u m_s} \right)^2 - \frac{4}{m_u m_s} \sin^2(k\frac{a}{2})} \\ &= K \frac{m_u + m_s}{m_u m_s} \pm K \sqrt{\left( \frac{m_u - m_s}{m_u m_s} \right)^2 + \frac{4}{m_u m_s} \cos^2(k\frac{a}{2})}. \end{aligned} \quad (2)$$

Desweiteren sind die dazu gehörenden Eigenmoden von Interesse (die Art der Schwingung). Aus der Determinanten (1) folgt dass:

$$\frac{u}{s} = -\frac{2K \cos(k\frac{a}{2})}{\omega^2 m_u - 2K} \quad (3)$$

gerade die Form der Schwingung angibt.

Im Fall

$|k| \ll \pi/a$  folgt für die Dispersion:

$$\omega_{\pm}^2 \approx K \frac{m_u + m_s}{m_u m_s} \left[ 1 \pm \left( 1 - \frac{2m_u m_s}{(m_u + m_s)^2} \frac{k^2 a^2}{4} \right) \right]$$

also  $\omega_+(k) \approx \sqrt{2K \frac{m_u + m_s}{m_u m_s}} - O(k^2)$  und  $\omega_-(k) \approx \sqrt{\frac{K}{2(m_u + m_s)}} ka$ . Die Form der Schwingung ist dann für stationäre Oszillationen ( $k \rightarrow 0$ ):

$$\frac{u}{s} = \begin{cases} -\frac{m_s}{m_u} & \text{für } + \\ 1 & \text{für } - \end{cases}$$

und damit gegenphasig im optischen + Fall, und gleichphasig im akkustischen - Fall.

$|k| \simeq \pi/a$  folgt für die Dispersion:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{K}{m_u m_s} [m_u + m_s \pm |m_u - m_s|]$$

Der Sprung zwischen akkustischer und optischer Mode ist damit  $\sim 2K \frac{|m_u - m_s|}{m_u m_s}$ . Im Fall gleicher Massen liegt bei  $\pi/a$  eine Entartung vor die daher rührt, dass die Brillouin Zone künstlich vergrößert wurde ( $a$  statt  $a/2$ ).

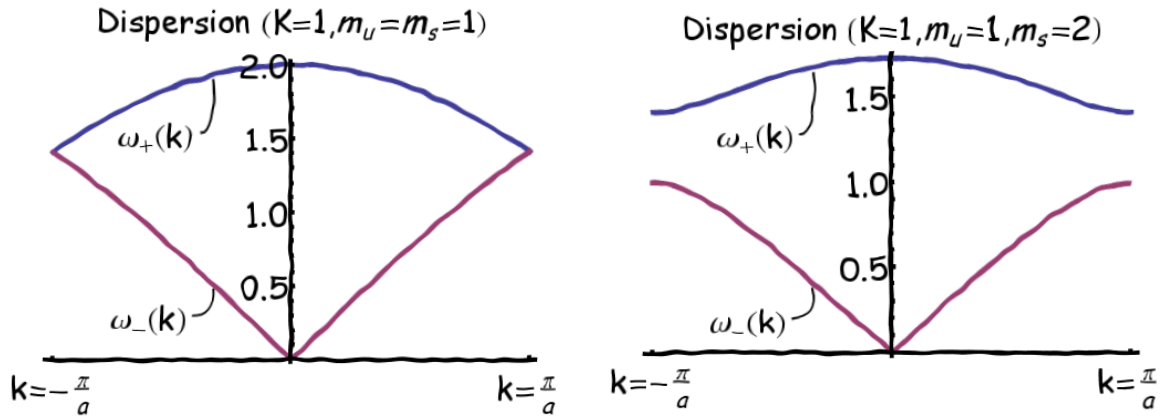


Abbildung 2: **Links** Entarteter Fall: optische und akkustische Moden über  $k$  aufgetragen. **Rechts** Entartung aufgelöst: Optische und akkustische Moden als separierte Energiebänder über  $k$  aufgetragen.

## 2. Phononen:

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

(a) Für jede Mode:

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

Dann lautet die kanonische Zustandssumme der *unterscheidbaren* Oszillatoren:

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

Innere Energie:

$$\begin{aligned} U &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_\lambda \left[ -\frac{\beta\hbar\omega_\lambda}{2} - \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega_\lambda}) \right] \\ &= \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda \left[ \frac{1}{2} + g(\hbar\omega_\lambda) \right] = U_0 + \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda g(\hbar\omega_\lambda) \end{aligned}$$

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

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

In führender Ordnung ist dies genau der Gleichverteilungssatz, der besagt, dass jeder Freiheitsgrad, der quadratisch in der Lagrange-Funktion auftritt mit  $1/2Nk_B T$  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

$$C_V = dNr k_B$$

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

- (c) Das Einstein-Modell liefert für optische Phononen brauchbare Resultate. 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

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

mit der charakteristischen Einstein-Temperatur

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

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

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

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

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

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

Sowohl  $U$  als auch  $C_V$  verschwinden, sind also im Limes  $T \rightarrow 0$  exponentiell unterdrückt. Dieses exponentielle Verhalten ist typisch für Systeme mit einer Energielücke.

- (d) Annahme:  $\omega_\lambda = \omega_{\text{akkustisch}} = ck$ .

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

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

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.

Die vorgenommene Näherung entspricht im Wesentlichen dem Debye-Modell. Im Allgemeinen wird allerdings die Integralgrenze nicht nach  $\infty$  geschoben, so dass Korrekturen zur Temperaturabhängigkeit auftreten und die Resultate auch für "mittlere" Temperaturbereiche gültig werden.

Das Einstein Modell wird relevant sobald die Temperatur  $T \sim \Theta_E$  erreicht (damit wird dann auch Dulong Petit reproduziert.).

### 3. Chemisches Potential für zweidimensionales Elektronengas:

(a) Das Großkanonische Potential des Fermi-Gases ist gegeben über die Zustandsumme

$$\Omega(T, V, \mu) = -kT \ln Z_G = -kT \sum_{\lambda} \ln [1 + e^{-(\varepsilon_{\lambda} - \mu)/kT}] ,$$

und die Teilchenzahl die partielle Ableitung nach dem chemischen Potential

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = kT \sum_{\lambda} \frac{1}{kT} \frac{e^{-(\varepsilon_{\lambda} - \mu)/kT}}{1 + e^{-(\varepsilon_{\lambda} - \mu)/kT}} \\ &= \sum_{\lambda} \frac{1}{e^{(\varepsilon_{\lambda} - \mu)/kT} + 1} = \sum_{\lambda} f(\varepsilon_{\lambda}) . \end{aligned}$$

Die Teilchenzahl ist also gegeben durch die besetzten Zustände, beschrieben durch die Fermi-Verteilung  $f(\varepsilon)$ . Mit Hilfe der Zustandsdichte lässt sich die Summe als Energie-Integral ausdrücken

$$N = \langle \hat{N} \rangle = \int d\varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) = D_{2d} \int d\varepsilon f(\varepsilon) . \quad (4)$$

da die zwei-dimensionalen Zustandsdichte konstant ist, gegeben durch

$$D_{2d} = (2s + 1) \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{2\pi m}{\hbar^2} ,$$

somit ergibt sich im Grenzfall tiefer Temperaturen

$$N = D_{2d} \int_0^{\infty} d\varepsilon \theta(\mu - \varepsilon) = D_{2d} \mu \quad \text{wobei} \quad f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \theta(\mu - \varepsilon) \quad (5)$$

verwendet wurde.

(b) Aus der vorhergehenden Rechnung (Gl.(4)) folgt für endliche Temperaturen:

$$N = D_{2d} kT \int_{-\frac{\mu}{k_B T}}^{\infty} \frac{dz}{e^z + 1}.$$

Mit Hilfe des Hinweises ergibt sich:

$$\int_a^b \frac{dz}{e^z + 1} \stackrel{(e^z=t)}{=} \int_{t_a}^{t_b} \frac{dt}{t(t+1)} = \int_{t_a}^{t_b} dt \left( \frac{1}{t} - \frac{1}{t+1} \right) = \ln \frac{t}{t+1} \Big|_{t_a}^{t_b} = \ln \left( \frac{1}{e^{-z} + 1} \right) \Big|_a^b$$

und damit

$$N = D_{2d} kT \ln \left( 1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right).$$

Unter Verwendung des Ergebnisses aus Aufgabe a) und der Annahme konstanter Teilchenzahl folgt ( $\mu(T=0) = \varepsilon_F$ ):

$$\varepsilon_F = kT \ln \left( 1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \rightarrow \mu(T) = kT \ln \left( e^{\frac{\varepsilon_F}{k_B T}} - 1 \right)$$

und somit  $T_{\mu=0} = \frac{\varepsilon_F}{k \ln 2}$ .

Betrachtet man die Temperaturgrenzfälle so findet man

$$\underline{kT \ll \varepsilon_F} : \quad \ln \left( e^{\frac{\varepsilon_F}{kT}} - 1 \right) = \frac{\varepsilon_F}{kT} + \ln \left( 1 - e^{-\frac{\varepsilon_F}{kT}} \right) \approx \frac{\varepsilon_F}{kT} - e^{-\frac{\varepsilon_F}{kT}}$$

$$\mu(T) \approx \varepsilon_F - kT e^{-\frac{\varepsilon_F}{kT}} = \varepsilon_F - \mathcal{O} \left( e^{-\frac{\varepsilon_F}{kT}} \right)$$

$$\underline{kT \gg \varepsilon_F} : \quad \ln \left( e^{\frac{\varepsilon_F}{kT}} - 1 \right) \approx \ln \left[ \frac{\varepsilon_F}{kT} + \frac{1}{2!} \left( \frac{\varepsilon_F}{kT} \right)^2 + \dots \right]$$

$$\mu(T) \approx -kT \ln \frac{kT}{\varepsilon_F}$$

