Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zu Moderne Theoretische Physik III SS 13

Prof. Dr. G. Schön

Dr. M. Marthaler, Dr. A. Poenicke

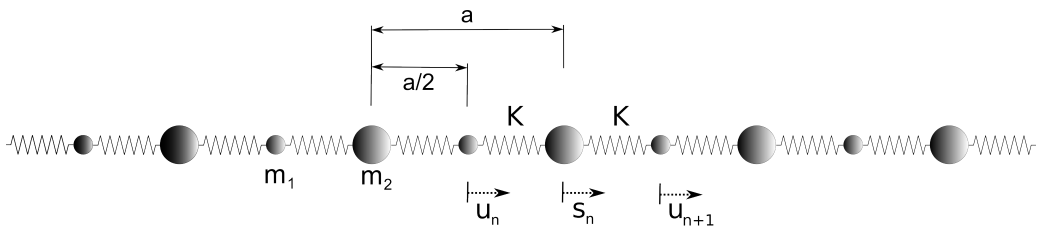
Blatt 10

Besprechung, 28.06.2013

---

1. Zweiatomige harmonische Kette (2 + 4 = 6 Punkte)

Wie in der Abbildung dargestellt, betrachten wir eine eindimensionale Kette mit Gitterkonstante a. Die Einheitszelle dieses Gitters besteht dabei aus zwei unterschiedlichen Atomen der Masse m_1 und m_2 mit einem Gleichgewichtsabstand $a/2$. Die $2N$ Atome können sich auf der x-Achse dämpfungsfrei bewegen, die Kopplung der Atome wird durch identische Federn mit der Federkonstante K beschrieben.



Es sollen die klassischen Bewegungsgleichungen

$$m_1 \ddot{u}_n = K(s_n - 2u_n + s_{n-1})$$
$$m_2 \ddot{s}_n = K(u_n - 2s_n + u_{n+1})$$

für kleine Auslenkungen u_n und s_n aus den jeweiligen Ruhelagen bei $x = na$ und $x = (na + a/2)$ gelöst werden.

(a) Zeigen Sie 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 durch die periodische Randbedingungen

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

die Wellenzahlen k nur die diskreten Werte

$$k = \frac{2\pi}{a}\frac{m}{N}, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$

annehmen können, und sie ferner für eine eindeutige Lösung auf $-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$ beschränkt sind.

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

2. Phononen $(2+1+2+3=8$ Punkte$)$

Die in Aufgabe 1 berechneten Gitterschwingungen einer linearen Kette haben die Form harmonischer Oszillatoren und können somit, wie aus der Quantenmechanik bekannt, quantisiert werden. Die Anregungszustände dieser Ozillatoren heißen akustische bzw. optische Phononen, die Besetzungszahlen unterliegen der Bose-Einstein-Statistik.

(a) Geben Sie den Hamilton-Operator für die $2N$ Oszillationsmoden $(\lambda \equiv (k, \pm))$ der harmonischen Kette an ($\pm$ steht für optisch/akustisch). Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme und die innere Energie.

(b) Betrachten Sie den Limes hoher Temperaturen und zeigen Sie, dass die klassischen Resultate für $U = 2NkT$ (Gleichverteilungssatz) und $C_V = 2Nk$ (Dulong-Petit) gelten.

(c) Im Einstein-Modell der Schwingungszustände wird eine einzige konstante Schwingungsfrequenz $\omega_\lambda(k) = \omega_0$ für alle λ angenommen. Berechnen Sie für dieses Modell wiederum U und C_V.

Zeigen Sie, dass Sie für große Temperaturen auch in diesem Modell das Dulong-Petit'sche Gesetz finden, und dass für tiefe Temperaturen U und C_V exponentiell verschwinden $(T \to 0)$.

(d) Das Einstein-Modell gibt das Verhalten der optischen Phononen gut wieder. Die akkustischen Phononenzweige hingegen werden realistischer durch das das Debeye-Modell beschrieben. In der Debeye-Näherung wird die die Dispersionsrelation der Phononen durch $\omega_\lambda(k) = c_a|k|$ angenähert.

Bestimmen Sie die innere Energie U und die spezifische Wärmekapazität C_V der harmonischen Kette in dieser Näherung. In welchen Fällen wird das Einstein-Modell der letzten Teilaufgabe relevant?

Hinweis: Ersetzen Sie die k-Summe wie üblich durch ein Integral, substituieren Sie und verschieben Sie die obere Integrationsgrenze nach ∞. Das resultierende Integral besitzt eine exakte Lösung:

$$\int_0^\infty dx \frac{x}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}$$

3. Thermodynamik des zweidimensionalen Elektronengases (2+4=6 Punkte)

(a) Drücken Sie für ein zweidimensionales Elektronengas (Fläche A) das großkanonische Potential als als Funktion des chemischen Potentials μ und der Temperatur T aus. Berechnen Sie hieraus explizit die mittlere Teilchenzahl $\langle N \rangle (\mu)$ für $T = 0$. *Hinweis:* Bilden Sie den Grenzwert $T \to 0$ vor der Integration.

(b) Die Fermienergie ε_F ist definiert als $\varepsilon_F \equiv \mu(T = 0)$. Bestimmen Sie die mittlere Teilchenzahl $\langle N \rangle$ allgemein als Funktion des chemischen Potentials und der Temperatur. *Hinweis*: Das Integral $\int_a^b \mathrm{d}x \frac{1}{(e^x+1)}$ kann mit Hilfe der Substitution $e^x = t$ berechnet werden.

Verwenden Sie nun das Ergebnis für $\langle N \rangle (\varepsilon_F)$ aus Teilaufgabe a) um das chemische Potential als Funktion der Temperatur T und der Fermienergie ε_F auszudrücken.

Betrachten Sie die Grenzfälle $k_\mathrm{B}T \ll \varepsilon_F$ und $k_\mathrm{B}T \gg \varepsilon_F$. Für welche Temperatur wird $\mu = 0$? Skizzieren Sie $\mu(T)$.