

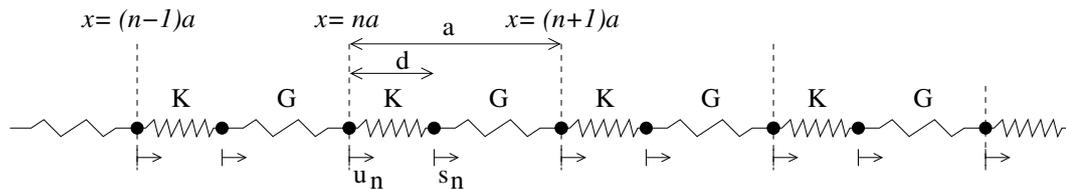
Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gornyi
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. König

Blatt 7: Lösungen
Besprechung 11.12.2014

1. Harmonische Kette (7+5+3+3+2=20 Punkte)

$2N$ identische Massen m können sich auf der x -Achse reibungsfrei bewegen und sind abwechselnd mit unterschiedlichen Federn mit Federkonstanten $K > G$ verbunden:



Mit den Auslenkungen u_n und s_n aus den jeweiligen Ruhelagen bei $x = na$ und $x = (na + d)$ (s. Abbildung) lautet die elastische Energie:

$$U = \frac{K}{2} \sum_n (u_n - s_n)^2 + \frac{G}{2} \sum_n (u_{n+1} - s_n)^2.$$

- (a) Schreiben Sie die klassischen Bewegungsgleichungen für u_n und s_n mit periodischen Randbedingungen $u_{n+N}(t) = u_n(t)$, $s_{n+N}(t) = s_n(t)$. Bestimmen Sie die Frequenzen $\omega_{\pm}(k)$ der akustischen (-) und optischen (+) Eigenmoden der Kette. Wie verhalten sich $\omega_{\pm}(k)$ für kleine $|k| \ll \pi/a$? Skizzieren Sie $\omega_{\pm}(k)$ für alle erlaubten k .

Lösung: Die Lagrange-Funktion der Kette ist

$$\mathcal{L} = T - U. \tag{1}$$

Hierbei ist die kinetische Energie

$$T = \frac{1}{2}m \sum_n [(\dot{u}_n)^2 + (\dot{s}_n)^2]. \tag{2}$$

Die Bewegungsgleichungen ergeben sich dann aus den Euler-Lagrange-Gleichungen,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_n} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_n}, \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{s}_n} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s_n},$$

zu

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

Wir machen den Ansatz

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

Aus den periodischen Randbedingungen ergibt sich

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

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

$$e^{ikna} = e^{i(k+G)na} \quad , \quad G = \frac{2\pi}{a}l \quad , \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Daher muß k eingeschränkt werden auf

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

Alternativ können wir auch schreiben:

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

Einsetzen des Ansatz in die Bewegungsgleichungen ergibt

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

Dies können wir auch als Matrix Gleichung schreiben

$$\begin{pmatrix} m\omega^2 - (K + G) & K + G e^{-ika} \\ K + G e^{ika} & m\omega^2 - (K + G) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ s \end{pmatrix} = 0 . \quad (3)$$

Nichttriviale Lösung erhalten wir nur, wenn die Determinante der Matrix verschwinden, d.h.

$$\begin{aligned} [m\omega^2 - (K + G)]^2 - (K + G e^{-ika})(K + G e^{ika}) &= 0 \\ \Rightarrow \quad \boxed{m\omega^2 = (K + G) \pm \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)}} . \end{aligned}$$

Die Dispersion ist in Abb. 1 dargestellt. Für kleine Impulse gilt:

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

Damit folgt für die Dispersionsrelationen:

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

- (b) Die in Aufgabe 1(a) berechneten Gitterschwingungen können quantisiert werden. Geben Sie den Hamilton-Operator für jede Mode $\lambda \equiv (k, \pm)$ an. Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme.

Lösung: 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,

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

Dann lautet die kanonische Zustandssumme der *unterscheidbaren* Oszillatoren:

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

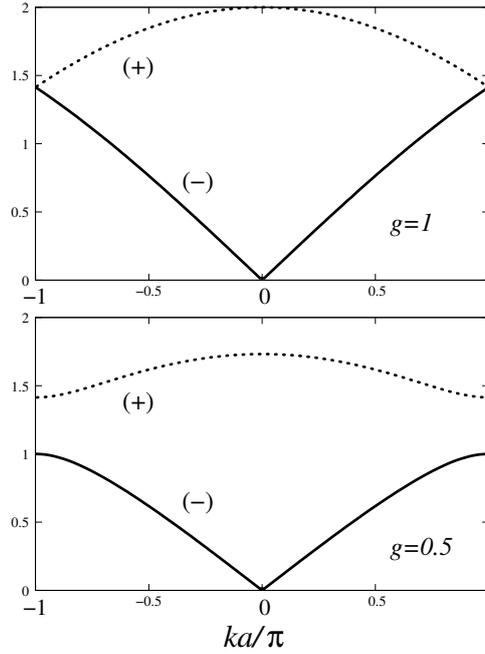


Abbildung 1: Die Dispersion von optischer (+) und akustischer (-) Mode für unterschiedliche Federn $G = 0.5K$ (unten) und identische Federn $G = K$ (oben). Für $K = G$ verschwindet die optische Mode bzw. geht in die zurückgefaltete akustische über.

- (c) Betrachten Sie den Limes hoher Temperaturen und zeigen Sie, dass Sie die klassischen Resultate für die innere Energie (Gleichverteilungssatz) und die spezifische Wärme c_V (Dulong-Petit) finden.

Lösung: Die innere Energie folgt aus der Zustandssumme gemäß

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

Hierbei ist

$$g(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1}, \quad (4)$$

die Bose-Verteilung. Im Hochtemperaturlimes $k_B T \gg \hbar \omega_{\lambda}$, entwickeln wir die Exponentialfunktion

$$e^{\beta \hbar \omega_{\lambda}} \approx 1 + \beta \hbar \omega_{\lambda},$$

und erhalten

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

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

- (d) Nehmen Sie an, dass für tiefe Temperaturen nur noch akustische Phononen zum physikalischen Verhalten beitragen und nähern Sie $\omega_-(k) = c_a k$. Bestimmen Sie die innere Energie und c_V in diesem Limes.

Lösung: Wir machen die Annahme, $\omega_\lambda = \omega_{\text{akustisch}} = c_a k$.

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

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

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.

- (e) Verwenden Sie nun die noch stärkere Näherung $\omega_\lambda = \omega_0 = \text{const}$ für alle λ (Einstein-Modell). Berechnen Sie wiederum c_V .

Lösung: 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

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

mit der charakteristischen Einstein-Temperatur

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

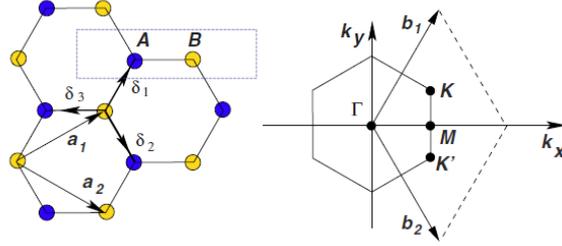


Abbildung 2: Das Kristallgitter von Graphen.

2. Phononen in Graphen

(10 Punkte)

Betrachten Sie das Gitter von Graphen. Nehmen Sie an, dass die Kohlenstoff-Atome sich nur innerhalb der zwei-dimensionalen Ebene bewegen können. Benutzen Sie die harmonische Näherung (mit Kraftkonstanten zwischen nächsten Nachbarn) und berechnen Sie das Spektrum der Phononen.

Lösung: Im Folgenden sei die Gitterkonstante $a = 1$. Die Position jedes Ions läßt sich durch die mittlere Ionenposition $\mathbf{R}^{(0)}$ und eine Abweichung \mathbf{u} (Verschiebungsfeld) ausdrücken. Es gibt zwei Ionen (A und B) pro Elementarzelle. Wir wählen als unsere Elementarzelle das horizontale Verbindungselement “ A – B ” (s. Abb. 2). Dann bezeichnen wir die Ruhepositionen als

$$\mathbf{R}_A^{(0)} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2,$$

und

$$\mathbf{R}_B^{(0)} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 - \boldsymbol{\delta}_3,$$

wobei die Gittervektoren gegeben sind durch

$$\mathbf{a}_1 = \boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2} (\sqrt{3}, 1), \quad \mathbf{a}_2 = \boldsymbol{\delta}_2 - \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2} (\sqrt{3}, -1).$$

Die Vektoren $\boldsymbol{\delta}_j$ zeigen auf den nächsten Nachbarn (s. Abb. 2) und sind gegeben durch,

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{1}{2} (1, \sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{1}{2} (1, -\sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = (-1, 0).$$

Jetzt können wir die Positionen des Ions A und B aufschreiben:

$$\mathbf{R}_{m,n}^{(A)} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + \mathbf{u}_{m,n}^{(A)}, \quad \mathbf{R}_{m,n}^{(B)} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 - \boldsymbol{\delta}_3 + \mathbf{u}_{m,n}^{(B)}.$$

Wir betrachten nur die Kopplung zwischen nächsten Nachbarn mit Kraftkonstante K . Jedes Ion A hat drei B Nachbarn und die elastische Energie ist demnach

$$U_{m,n}^{(A)} = \frac{K}{2} \left[\left(\left| \mathbf{R}_{m,n}^{(A)} - \mathbf{R}_{m,n}^{(B)} \right| - 1 \right)^2 + \left(\left| \mathbf{R}_{m,n}^{(A)} - \mathbf{R}_{m,n-1}^{(B)} \right| - 1 \right)^2 + \left(\left| \mathbf{R}_{m,n}^{(A)} - \mathbf{R}_{m-1,n}^{(B)} \right| - 1 \right)^2 \right].$$

Die gesamte elastische Energie ist

$$U = \sum_{m,n} U_{m,n}^{(A)}.$$

Hierbei sind bereits alle Verbindungselemente berücksichtigt.

Wir benutzen nun die Harmonische Näherung, d.h. die Entwicklung von U in 2. Ordnung in \mathbf{u} :

$$U_{m,n}^{(A)} = \frac{K}{2} \left\{ \left[\left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_x - \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(B)} \right)_x \right]^2 + \frac{1}{4} \left[\left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_x - \left(\mathbf{u}_{m,n-1}^{(B)} \right)_x - \sqrt{3} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_y + \sqrt{3} \left(\mathbf{u}_{m,n-1}^{(B)} \right)_y \right]^2 + \frac{1}{4} \left[\left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_x - \left(\mathbf{u}_{m-1,n}^{(B)} \right)_x + \sqrt{3} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_y - \sqrt{3} \left(\mathbf{u}_{m-1,n}^{(B)} \right)_y \right]^2 \right\}.$$

Die Bewegungsgleichungen ergeben sich, wie in Aufgabe 1, aus den Euler-Lagrange-Gleichungen, welche die folgende Form annehmen:

$$M \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A,B)} \right)_{x,y} = - \frac{\partial U}{\partial \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A,B)} \right)_{x,y}}.$$

Explizit ergeben sich daraus die Gleichungen

$$-\frac{M}{K} \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_x = \frac{3}{2} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_x - \left[\left(\mathbf{u}_{m,n}^{(B)} \right)_x + \frac{1}{4} \left(\mathbf{u}_{m,n-1}^{(B)} \right)_x + \frac{1}{4} \left(\mathbf{u}_{m-1,n}^{(B)} \right)_x \right] + \frac{\sqrt{3}}{4} \left[\left(\mathbf{u}_{m,n-1}^{(B)} \right)_y - \left(\mathbf{u}_{m-1,n}^{(B)} \right)_y \right],$$

$$-\frac{M}{K} \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_y = \frac{3}{2} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_y - \frac{3}{4} \left[\left(\mathbf{u}_{m,n-1}^{(B)} \right)_y + \left(\mathbf{u}_{m-1,n}^{(B)} \right)_y \right] + \frac{\sqrt{3}}{4} \left[\left(\mathbf{u}_{m,n-1}^{(B)} \right)_x - \left(\mathbf{u}_{m-1,n}^{(B)} \right)_x \right],$$

$$-\frac{M}{K} \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(B)} \right)_x = \frac{3}{2} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(B)} \right)_x - \left[\left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A)} \right)_x + \frac{1}{4} \left(\mathbf{u}_{m,n+1}^{(A)} \right)_x + \frac{1}{4} \left(\mathbf{u}_{m+1,n}^{(A)} \right)_x \right] + \frac{\sqrt{3}}{4} \left[\left(\mathbf{u}_{m,n+1}^{(A)} \right)_y - \left(\mathbf{u}_{m+1,n}^{(A)} \right)_y \right],$$

$$-\frac{M}{K} \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(B)} \right)_y = \frac{3}{2} \left(\mathbf{u}_{m,n}^{(B)} \right)_y - \frac{3}{4} \left[\left(\mathbf{u}_{m,n+1}^{(A)} \right)_y + \left(\mathbf{u}_{m+1,n}^{(A)} \right)_y \right] + \frac{\sqrt{3}}{4} \left[\left(\mathbf{u}_{m,n+1}^{(A)} \right)_x - \left(\mathbf{u}_{m+1,n}^{(A)} \right)_x \right].$$

Weiter verwenden wir jetzt die Fourier-Transformation

$$\left(\mathbf{u}_{m,n}^{(A,B)} \right)_{x,y} = A_{x,y}^{(A,B)} e^{i\omega t} e^{-i\mathbf{R}_A^{(0)} \mathbf{q}},$$

wobei $\mathbf{R}_A^{(0)}$ die Koordinate der Elementarzelle ist. Dann schreiben wir die Bewegungsgleichungen in Matrix-Form auf,

$$\frac{M}{K} \omega^2 \mathbf{A} = \frac{1}{4} \hat{\mathcal{D}} \mathbf{A},$$

wobei

$$\mathbf{A}^T = (A_x^{(A)}, A_y^{(A)}, A_x^{(B)}, A_y^{(B)}),$$

und

$$\hat{\mathcal{D}} = \begin{pmatrix} 6 & 0 & -[4 + e^{i\mathbf{a}_2\mathbf{q}} + e^{i\mathbf{a}_2\mathbf{q}}] & \sqrt{3}[e^{i\mathbf{a}_2\mathbf{q}} - e^{i\mathbf{a}_2\mathbf{q}}] \\ 0 & 6 & \sqrt{3}[e^{i\mathbf{a}_2\mathbf{q}} - e^{i\mathbf{a}_2\mathbf{q}}] & -3[e^{i\mathbf{a}_2\mathbf{q}} + e^{i\mathbf{a}_2\mathbf{q}}] \\ -[4 + e^{-i\mathbf{a}_2\mathbf{q}} + e^{-i\mathbf{a}_2\mathbf{q}}] & \sqrt{3}[e^{-i\mathbf{a}_2\mathbf{q}} - e^{-i\mathbf{a}_2\mathbf{q}}] & 6 & 0 \\ \sqrt{3}[e^{-i\mathbf{a}_2\mathbf{q}} - e^{-i\mathbf{a}_2\mathbf{q}}] & -3[e^{-i\mathbf{a}_2\mathbf{q}} + e^{-i\mathbf{a}_2\mathbf{q}}] & 0 & 6 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte von $\hat{\mathcal{D}}$

$$E_{01} = 12, \quad E_{02} = 0, \quad E_{\pm} = 6 \pm 2\sqrt{3 + 4 \cos \frac{3q_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}q_y}{2} + 2 \cos \sqrt{3}q_y},$$

liefern uns die Dispersionsrelation gemäß

$$\frac{4M}{K} \omega_{\pm}^2 = E_{\pm}. \quad (5)$$

Die Entwicklung für kleine q (hier $q = |\mathbf{q}|$) ergibt

$$E_- \approx \frac{3}{2} q^2, \quad E_+ \approx 12 - \frac{3}{2} q^2.$$

Deswegen finden wir zwei akustische Phononen

$$\omega_{02} = 0, \quad \omega_- \approx \sqrt{\frac{3K}{8M}} q,$$

und zwei optische Phononen

$$\omega_{01} \approx \sqrt{\frac{3K}{M}}, \quad \omega_+ \approx \sqrt{\frac{3K}{M}} \left(1 - \frac{q^2}{16}\right).$$

Die zwei Phononen ω_{01} und ω_{02} haben keine Dispersion. Das ist ein Artefakt unserer Näherung. Um die Phononen in Graphen besser zu beschreiben, muss man weitere (d.h. etwa übernächste Nachbar) Wechselwirkung betrachten.