

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gorny
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. KönigBlatt 8: Lösungen
Besprechung 18.12.2014

1. Elastizität eines quadratischen Gitters

(5+4+6=15 Punkte)

Mechanische Spannung beschreibt die Kraft pro Fläche, die auf eine Schnittfläche eines Kristalls wirkt. Man zerlegt die Spannung in eine Komponente senkrecht auf der gewählten Ebene, die Normalspannung, und eine Komponente in der Ebene, die Schubspannung. Diese verschiedenen Spannungen werden im Spannungstensor $\sigma_{\alpha\beta}$ zusammengefasst. Entsprechend enthält der Verzerrungstensor $\varepsilon_{\alpha\beta}$ die Deformationen. Im Fall dass kleine Auslenkungen lineare Rückstellkräfte bewirken, ergibt sich der Zusammenhang

$$\sigma_{\alpha\beta} = C_{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta}, \quad \alpha, \beta, \gamma, \delta = 1 \dots d$$

zwischen Spannungstensor und Verzerrungstensor mit dem Elastizitätstensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$.

Betrachten Sie nun ein quadratisches Gitter in zwei Dimensionen mit der Gitterkonstanten a . Das Gitter besteht nur aus einem Atom (Masse M) pro Einheitszelle. Nehmen Sie an, dass die Atome sich nur innerhalb der zwei-dimensionalen Ebene bewegen können.

- (a) Benutzen Sie die harmonische Näherung (mit Kraftkonstanten K zwischen nächsten Nachbarn) und berechnen Sie die harmonische Elastizitätsmatrix:

$$\Phi_{\alpha\alpha'} \left(\mathbf{R}_n^{(0)} - \mathbf{R}_{n'}^{(0)} \right) = \Phi_{n\alpha, n'\alpha'} = \frac{\partial^2 U}{\partial u_{n\alpha} \partial u_{n'\alpha'}}, \quad \alpha, \alpha' = 1, 2, \quad (1)$$

wobei $\mathbf{R}_n^{(0)}$ die Vektoren des Bravais-Gitters und \mathbf{u}_n die Auslenkungen der Atome aus den Gleichgewichtslagen sind. Zudem bezeichnet U die potentielle Energie des Kristallgitters.

Lösung: Wir definieren die Basisvektoren $\mathbf{a}_1 = a \mathbf{e}_1$ und $\mathbf{a}_2 = a \mathbf{e}_2$ und die Notation $\mathbf{e}_1 = (1, 0)^T$, $\mathbf{e}_2 = (0, 1)^T$ und $\mathbf{n} = (n_1, n_2)^T$. Die Gittervektoren sind $\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + \mathbf{u}_n$ und die Vektoren der nächsten Nachbaratome sind $\boldsymbol{\delta} \in \{\pm \mathbf{a}_1, \pm \mathbf{a}_2\}$. Jedes Ion hat vier nächste Nachbarn und die potentielle Energie des Atoms an der Stelle \mathbf{R}_n ist somit

$$U_n = \frac{K}{2} \sum_{\boldsymbol{\delta}} (|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n+\boldsymbol{\delta}}| - |\boldsymbol{\delta}|)^2. \quad (2)$$

In der Harmonischen Näherung entwickeln wir diesen Ausdruck zu zweiter Ordnung in kleinen Abweichungen aus der Ruhelage \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} U_n &\simeq \frac{K}{2} \sum_{\boldsymbol{\delta}} \left[\frac{\boldsymbol{\delta}}{|\boldsymbol{\delta}|} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n+\boldsymbol{\delta}}) \right]^2 \\ &= \frac{K}{2} \left[(u_n^x - u_{n+\mathbf{a}_1}^x)^2 + (u_n^x - u_{n-\mathbf{a}_1}^x)^2 + (u_n^y - u_{n+\mathbf{a}_2}^y)^2 + (u_n^y - u_{n-\mathbf{a}_2}^y)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3)$$

Die gesamte potentielle Energie ist gegeben durch [der Faktor 1/2 korrigiert die Doppelzählung von Paaren]

$$\begin{aligned}
 U &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} U_{\mathbf{n}} \\
 &= \frac{K}{4} \sum_{\mathbf{n}} \left[2(u_{\mathbf{n}}^x)^2 + 2(u_{\mathbf{n}}^y)^2 + (u_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_1}^x)^2 + (u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}_1}^x)^2 + (u_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_2}^y)^2 + (u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}_2}^y)^2 \right. \\
 &\quad \left. + 2(u_{\mathbf{n}}^x u_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_1}^x + u_{\mathbf{n}}^x u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}_1}^x + u_{\mathbf{n}}^y u_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_2}^y + u_{\mathbf{n}}^y u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}_2}^y) \right]. \quad (4)
 \end{aligned}$$

Wir erhalten die Elemente der harmonischen Elastizitätsmatrix wie in Gleichung (1) beschrieben:

$$\Phi_{xx}(\mathbf{0}) = \Phi_{yy}(\mathbf{0}) = 2K, \quad \Phi_{xx}(\mathbf{a}_1) = \Phi_{xx}(-\mathbf{a}_1) = \Phi_{yy}(\mathbf{a}_2) = \Phi_{yy}(-\mathbf{a}_2) = -K. \quad (5)$$

Alle weiteren Einträge der Matrix verschwinden.

(b) Bestimmen Sie den Elastizitätstensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$:

$$\begin{aligned}
 C_{\alpha\beta\gamma\delta} &= -\frac{1}{8v_{EZ}} \sum_{\mathbf{n}} \left[\mathbf{R}_{n,\alpha}^{(0)} \Phi_{\beta\gamma}(\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{(0)}) \mathbf{R}_{n\gamma}^{(0)} + \mathbf{R}_{n\beta}^{(0)} \Phi_{\alpha\delta}(\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{(0)}) \mathbf{R}_{n\gamma}^{(0)} \right. \\
 &\quad \left. + \mathbf{R}_{n\alpha}^{(0)} \Phi_{\beta\gamma}(\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{(0)}) \mathbf{R}_{n\delta}^{(0)} + \mathbf{R}_{n\beta}^{(0)} \Phi_{\alpha\gamma}(\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{(0)}) \mathbf{R}_{n\delta}^{(0)} \right],
 \end{aligned}$$

wobei v_{EZ} das Volumen der Einheitszelle ist. Finden Sie die Verschiebungen $\epsilon_{\alpha\beta}$ für eine Schubspannung $\sigma_{12} \neq 0$.

Lösung: Zunächst stellen wir fest, dass nur Elemente $\Phi_{ij}(\mathbf{R}_{\mathbf{n}})$ mit $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{(0)} \neq 0$ zum Elastizitätstensor beitragen. Die einzigen nichtverschwindenden Einträge sind somit C_{xxxx} und C_{yyyy} ,

$$\begin{aligned}
 C_{xxxx} &= -\frac{1}{8v_{EZ}} \sum_{\mathbf{n}} 4(\mathbf{R}_{\mathbf{n},x}^{(0)})^2 \Phi_{xx}(\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{(0)}) \\
 &= -\frac{1}{2v_{EZ}} \mathbf{a}_1^2 [\Phi_{xx}(\mathbf{a}_1) + \Phi_{xx}(-\mathbf{a}_1)] = K \quad (6)
 \end{aligned}$$

und analog finden wir $C_{yyyy} = K$. Hierbei haben wir $v_{EZ} = a^2$ verwendet. Der Elastizitätstensor charakterisiert die entstehende Verzerrung $\epsilon_{\alpha\beta}$ in einem Kristall als Antwort auf eine Spannung $\sigma_{\alpha\beta}$. Betrachten wir die Situation $\sigma_{xy} \neq 0$ so gilt [Einsteinsche Summenkonvention ist impliziert]:

$$\sigma_{xy} = C_{xy\gamma\delta} \epsilon_{\gamma\delta}. \quad (7)$$

Da alle Nebendiagonalelemente des Elastizitätstensor verschwinden muss gelten, dass $\epsilon_{\gamma\delta} \rightarrow \infty$ entlang einer oder mehrerer Richtungen. Der Kristall ist somit instabil gegenüber Schubspannungen tangential zu einer Schnittebene. Dieses unphysikalische Ergebnis ist eine Folge unseres vereinfachten Modells, das keine rückstellenden Kräfte entlang der Diagonalen der Einheitszelle enthält.

(c) Fügen Sie nun Kräfte mit Federkonstante K' hinzu, die übernächsten Nachbarn auf dem Gitter verbinden. Bestimmen Sie $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ und finden Sie die Verschiebungen $\epsilon_{\alpha\beta}$ für eine Schubspannung $\sigma_{12} \neq 0$.

Lösung: Wir definieren die Verbindungsvektoren zu den übernächsten Nachbarn

$\boldsymbol{\delta}' \in \{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, -\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, -\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2\}$ mit $|\boldsymbol{\delta}'| = a\sqrt{2}$. Diese Kopplung liefert einen Beitrag $U_{\mathbf{n}}(K')$ zur potentiellen Energie. In der Harmonischen Näherung ist diese gegeben durch

$$\begin{aligned}
U_{\mathbf{n}}(K') &= \frac{K'}{2} \sum_{\boldsymbol{\delta}'} (|\mathbf{R}_{\mathbf{n}} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}'}| - |\boldsymbol{\delta}'|)^2 \\
&\simeq \frac{K'}{2} \sum_{\boldsymbol{\delta}'} \left[\frac{\boldsymbol{\delta}'}{|\boldsymbol{\delta}'|} (\mathbf{u}_{\mathbf{n}} - \mathbf{u}_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}'}) \right]^2 \\
&= \frac{K'}{4} \left[(u_{\mathbf{n}}^x - u_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2}^x + u_{\mathbf{n}}^y - u_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2}^y)^2 \right. \\
&\quad + (u_{\mathbf{n}}^x - u_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2}^x - u_{\mathbf{n}}^y + u_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2}^y)^2 \\
&\quad + (-u_{\mathbf{n}}^x + u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2}^x + u_{\mathbf{n}}^y - u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2}^y)^2 \\
&\quad \left. + (-u_{\mathbf{n}}^x + u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2}^x - u_{\mathbf{n}}^y + u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2}^y)^2 \right].
\end{aligned} \tag{8}$$

Die gesamte potentielle Energie lautet nun

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} [U_{\mathbf{n}}(K) + U_{\mathbf{n}}(K')]. \tag{9}$$

Nun bestimmen wir die Einträge der Elastizitätsmatrix. Dabei ist zu beachten, dass nur Einträge $\Phi(\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{(0)} - \mathbf{R}_{\mathbf{m}}^{(0)} \neq \mathbf{0})$ zu $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ beitragen. Wir erhalten z.B.

$$\Phi_{xx}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2}^x \partial u_{\mathbf{n}}^x} + \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\mathbf{n}}^x \partial u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2}^x} = -\frac{K'}{2}. \tag{10}$$

Die nichtverschwindenden Einträge sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
\Phi_{xx}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) &= \Phi_{yy}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = \Phi_{xy}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = \Phi_{yx}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = -\frac{K'}{2}, \\
\Phi_{xx}(-\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) &= \Phi_{yy}(-\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) = \Phi_{xy}(-\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) = \Phi_{yx}(-\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) = -\frac{K'}{2}, \\
\Phi_{xx}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) &= \Phi_{yy}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) = -\frac{K'}{2}, \quad \Phi_{xy}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) = \Phi_{yx}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) = \frac{K'}{2}, \\
\Phi_{xx}(-\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) &= \Phi_{yy}(-\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = -\frac{K'}{2}, \quad \Phi_{xy}(-\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = \Phi_{yx}(-\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = \frac{K'}{2}.
\end{aligned} \tag{11}$$

Die Elemente des Elastizitätstensors berechnen sich analog zum Aufgabenteil (2b). Sie lauten

$$\begin{aligned}
C_{xxxx} &= C_{yyyy} = K + K', \\
C_{xxyy} &= C_{xyxy} = C_{yxyx} = C_{xyyx} = C_{yxxxy} = C_{yyxx} = K'.
\end{aligned} \tag{12}$$

Wir betrachten wiederum die Reaktion des Systems auf eine Spannung $\sigma_{xy} \neq 0$. Es gilt

$$\sigma_{xy} = C_{xy\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\beta} = C_{xyyx} \epsilon_{yx} + C_{xyxy} \epsilon_{xy} = K'(\epsilon_{yx} + \epsilon_{xy}). \tag{13}$$

Da die Spannungsmatrix und die Verzerrungsmatrix symmetrisch sind erhalten wir

$$\epsilon_{xy} = \frac{1}{2K'} \sigma_{xy}. \tag{14}$$

Die resultierende mechanische Verzerrung ist somit endlich.

2. Debye-Waller-Faktor

(6+2+4+3=15 Punkte)

Aus der Vorlesung ist bekannt dass der dynamische Strukturfaktor $S(\mathbf{q}, \omega)$ für die Neutronenstreuung an Kristallen durch die Debye-Waller-Faktor e^{-2W} unterdrückt wird, wobei $2W = \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_0)^2 \rangle = \langle [\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_n(t)]^2 \rangle$.

Betrachten Sie Phononen mit dem Spektrum $\omega_j(q)$ im d -dimensionalen Kristall. Das Gitter besteht nur aus einem Atom (Masse M) pro Einheitszelle.

- (a) Leiten Sie den allgemeinen Ausdruck für den Debye-Waller-Faktor für beliebige Temperatur T her.

Lösung: Wir nutzen die Entwicklung der Auslenkung \mathbf{u} in Eigenmoden bekannt aus der Vorlesung,

$$u(\mathbf{R}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}, \alpha}}} (a_{\mathbf{k}, \alpha} + a_{-\mathbf{k}, \alpha}^\dagger) \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}. \quad (15)$$

Hierbei beschreibt α die Polarisation und $\omega_{\mathbf{k}, \alpha}$ die Dispersion der Moden, $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \alpha}$ ist der Polarisationsvektor und $a_{\mathbf{k}, \alpha}$ sind bosonische Vernichtungsoperatoren. Für eine monoatomare Basis sind die Dispersion und die Polarisationsvektoren reell und symmetrisch, $\omega_{\mathbf{k}, \alpha} = \omega_{-\mathbf{k}, \alpha}$ und $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \alpha} = \boldsymbol{\epsilon}_{-\mathbf{k}, \alpha}$. Die Operatoren a erfüllen

$$[a_{\mathbf{k}, \alpha}, a_{\mathbf{p}, \beta}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \delta_{\alpha, \beta}, \quad \langle a_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}, \beta} \rangle = n_{\mathbf{k}, \alpha} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \delta_{\alpha, \beta}. \quad (16)$$

wobei $n_{\mathbf{k}, \alpha} = (e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}, \alpha}/k_B T} - 1)^{-1}$ die Bose-Funktion ist. Der Debye-Waller-Faktor lautet somit

$$\begin{aligned} 2W &= \langle [\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{R} = \mathbf{0})]^2 \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \sum_{\mathbf{p}, \beta} \frac{(\mathbf{q}\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \alpha})(\mathbf{q}\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{p}, \beta})}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}, \alpha}\omega_{\mathbf{p}, \beta}}} \langle (a_{\mathbf{k}, \alpha} + a_{-\mathbf{k}, \alpha}^\dagger)(a_{\mathbf{p}, \beta} + a_{-\mathbf{p}, \beta}^\dagger) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \sum_{\mathbf{p}, \beta} \frac{(\mathbf{q}\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \alpha})(\mathbf{q}\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{p}, \beta})}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}, \alpha}\omega_{\mathbf{p}, \beta}}} \left(\langle a_{\mathbf{k}, \alpha} a_{-\mathbf{p}, \beta}^\dagger \rangle + \langle a_{-\mathbf{k}, \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}, \beta} \rangle \right) \\ &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \frac{(\mathbf{q}\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \alpha})^2}{\omega_{\mathbf{k}, \alpha}} (1 + 2n_{\mathbf{k}, \alpha}) \\ &= V_{EZ} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \sum_{\alpha} \frac{\hbar}{2M\omega_{\mathbf{k}, \alpha}} (\mathbf{q}\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}, \alpha})^2 \coth \left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}, \alpha}}{2k_B T} \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Im letzten Schritt haben wir den Kontinuumsliches gezogen, $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow V \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}$, wobei $V = NV_{EZ}$ und verwendet, dass $1 + 2n_{\mathbf{k}, \alpha} = \coth(\hbar\omega_{\mathbf{k}, \alpha}/2k_B T)$.

- (b) Schätzen Sie den Wert von W in drei-dimensionalen Kristallen bei $T = 300K$ für q in der Größenordnung des Debye-Wellenvektor ab.

Lösung: Nach der Definition in Gleichung (17) ist $W \sim q^2 u^2$. Um Kristallstrukturen auflösen zu können muss die Differenz der Neutronwellenvektoren q von der Größenordnung der inversen Gitterkonstanten sein, $q \sim 1/a \sim 10^{10} \text{m}^{-1}$. Wir definieren den Impuls der Gitterschwingung mit de-Broglie Wellenlänge u als $p = \hbar/u$. Wir nehmen an dass bei Raumtemperatur alle Phononenzustände besetzt sind und

somit die Temperatur des Phononensystems durch die Debye Temperatur bestimmt ist. Aus der Energiebilanz erhalten wir somit

$$\frac{p^2}{2M} = k_B \theta_D \quad \Leftrightarrow \quad u = \frac{h}{\sqrt{2Mk_B\theta_D}} \sim 10^{-10} - 10^{-11} \text{ m}. \quad (18)$$

Hierbei habe wir typische Debye Temperaturen von $\theta_D \sim 10^2 - 10^3 \text{ K}$ und Atommassen, $M \sim 10^{-27} \text{ kg}$, von Größenordnung der Neutronmasse angenommen. Der Debye-Waller-Faktor ist somit von der Größenordnung

$$W \sim 10^{-1} - 10^0.$$

- (c) Analysieren Sie den Debye-Waller-Faktor in $d = 2$ und $d = 1$ für $T = 0$.

Lösung: Wir nehmen an, dass bei $T = 0$ nur akustische Moden mit Spektrum $\omega_{\mathbf{k},\alpha} = c_\alpha(n_{\mathbf{k}})|\mathbf{k}|$ angeregt sind [$n_{\mathbf{k}}$ bezeichnet den Einheitsvektor in \mathbf{k} Richtung]. Nun analysieren wir den Debye-Waller-Faktor (17) für kleine Impulse, $k \ll 1/a$, d.h. wir entwickeln $\epsilon_{\mathbf{k},\alpha} = \epsilon_{\mathbf{0},\alpha} + \nabla_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k},\alpha}|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \mathbf{k} + \dots$. Für $T = 0$ nutzen wir die Eigenschaft $\coth(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 1$. Somit lautet der Debye-Waller-Faktor

$$2W \simeq \frac{V_{EZ}\hbar}{2M} \sum_{\alpha} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^d} \frac{(\mathbf{q}\epsilon_{\mathbf{0},\alpha})^2}{c_{\alpha}(\mathbf{n}_{\mathbf{k}})} I_d. \quad (19)$$

Hierbei ist $\Omega_{\mathbf{k}}$ das Oberflächenelement in d -Dimensionen und I_d ist

$$I_1 = \int_{1/L}^{1/a} dk \frac{1}{k} \propto \ln\left(\frac{L}{a}\right), \quad (20)$$

$$I_{d>1} = \int_0^{1/a} dk k^{d-2} \propto a^{1-d}.$$

Das Integral I_1 ist infrarot ($k \rightarrow 0$) divergent. Diese Divergenz wird durch eine endliche Systemgröße L aufgehoben. Diese Divergenz taucht in Dimensionen $d \geq 2$ nicht auf.

- (d) Analysieren Sie den Debye-Waller-Faktor in $d = 2$ und $d = 1$ für $T > 0$.

Lösung: Für Energien $\hbar\omega_{\mathbf{k},\alpha} \ll k_B T$ entwickeln wir $\coth(x) = 1/x + \mathcal{O}(x)$. Außerdem betrachten wir kleine Impulse $k \ll a^{-1}$. Der Debye-Waller-Faktor (17) lautet nun

$$2W \simeq \frac{V_{EZ}T}{2M} \sum_{\alpha} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^d} \frac{(\mathbf{q}\epsilon_{\mathbf{0},\alpha})^2}{c_{\alpha}^2(\mathbf{n}_{\mathbf{k}})} \mathcal{I}_d. \quad (21)$$

Das Integral \mathcal{I}_d ist infrarot ($k \rightarrow 0$) divergent für $d \leq 2$. Diese Divergenz wird durch eine endliche Systemgröße L aufgehoben. In $d = 1, 2$ erhalten wir

$$\mathcal{I}_1 = \int_{1/L}^{1/a} dk \frac{1}{k^2} \propto \frac{L}{a}, \quad (22)$$

$$\mathcal{I}_2 = \int_{1/L}^{1/a} dk \frac{1}{k} \propto \ln\left(\frac{L}{a}\right). \quad (23)$$

Somit zerstören thermische Fluktuationen die kristalline Ordnung in einer und zwei Dimensionen.

3. Bonusaufgabe: Thermische Ausdehnung

(4+6=10 Punkte)

Thermische Ausdehnung von Kristallen kann mit dem Modell eines zweiatomigen Moleküls untersucht werden. Betrachten Sie zwei Atomen, die miteinander durch ein anharmonisches 1D-Potential $U(x) = Kx^2 + Bx^3 + Cx^4$ gekoppelt sind, wobei x die relative Verschiebung der Atome von der Gleichgewichtslage bei $T = 0$ ist.

- (a) Finden Sie den Mittelwert $\langle x \rangle$ für ein Molekül bei $T \neq 0$ durch Mittelung der klassischen Bewegungsgleichungen der Atomen.

Lösung: Der statistische Mittelwert einer Observablen \mathcal{O} in einer Dimension ist gegeben durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int dx dp \mathcal{O} e^{-H(x,p)/k_B T}}{\int dx dp e^{-H(x,p)/k_B T}}. \quad (24)$$

wobei $H(x, p)$ die Hamilton-Funktion ist. Wir bestimmen den Mittelwert $\langle x \rangle$ für kleine anharmonische Korrekturen zu einem parabolischen Potential, $K \gg B \gg C$.

$$\langle x \rangle = \frac{\int dx dp x e^{-U(x)/k_B T}}{\int dx dp e^{-U(x)/k_B T}} \simeq \frac{\int dx dp x e^{-\frac{Kx^2}{k_B T}} \left(1 - \frac{Bx^3}{k_B T} - \frac{Cx^4}{k_B T} \right)}{\int dx dp e^{-\frac{Kx^2}{k_B T}} \left(1 - \frac{Bx^3}{k_B T} - \frac{Cx^4}{k_B T} \right)} = -\frac{3}{4} \frac{B}{K^2} k_B T. \quad (25)$$

Hier haben wir die Integrale $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2) = \sqrt{\pi}$ und $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^4 \exp(-x^2) = 3\sqrt{\pi}/4$ benutzt und Terme in höherer Ordnung von B und C vernachlässigt. Beachten Sie, dass der Term proportional zu C sowie die Korrektur zur ersten Ordnung in B durch den Nenner aufgrund der Symmetrie des Integranden verschwindet.

- (b) Betrachten Sie eine 1D-Kette der Länge L mit dem Potential $U(x)$ zwischen benachbarten Atomen. Bestimmen Sie den Koeffizienten der linearen thermischen Ausdehnung $\alpha = L^{-1}(dL/dT)$ der Kette im Temperaturintervall $\hbar(K/M)^{1/2} \ll k_B T \ll Ka^2$, wobei M die Masse eines Atoms und a der Gleichgewichtsabstand zwischen den Atomen ist.

Lösung: Wir betrachten klassische Oszillationen der Atome um den mittleren Abstand a , d.h. die Energie der Phononen mit Frequenz $\omega = \sqrt{K/M}$ ist klein gegenüber der thermischen Energie $k_B T$. Die thermische Energie ist allerdings klein gegenüber der Bindungsenergie der Moleküle, $U(a) \approx Ka^2$, so dass der Kristall thermisch stabil ist. Der mittlere Abstand zwischen Atomen bei $T \neq 0$ ist nun $\ell = a + \langle x \rangle$ und die Länge der Kette ist somit $L = N_{EZ} \ell$. Mit dem Ergebnis aus Aufgabenteil (a) finden wir die thermische Ausdehnung:

$$\alpha = \frac{1}{\ell} \frac{d\ell}{dT} \simeq -\frac{3}{4} \frac{B}{K^2 a}. \quad (26)$$

Beachten Sie, dass die thermische Ausdehnung nur aufgrund der anharmonischen Korrekturen ($B \neq 0$) endlich ist.