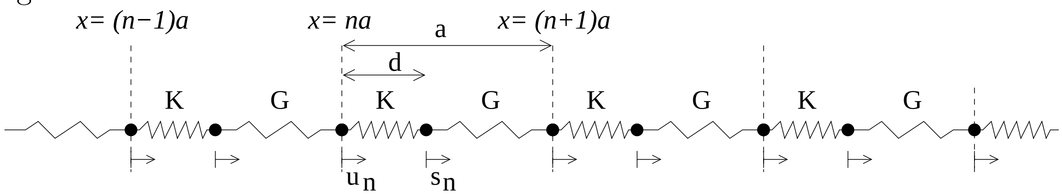
Universität Karlsruhe SS 2007
Institut für Theorie der Kondensierten Materie
Prof. Dr. Peter Wölfle, Dr. Jan Brinckmann **30.05.07**
http://www.tkm.uni-karlsruhe.de/lehre theorie-f@tkm.uni-karlsruhe.de

Übungsblatt Nr. 6 zur Theorie F (Statistische Physik)

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



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

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

a) Bestimmen Sie die Bewegungsgleichungen. Zeigen Sie dann für den Ansatz $u_n(t) = u\, e^{i(kx-\omega t)}$, $s_n(t) = s\, e^{i(kx-\omega t)}$, $x = n\, a$, daß periodische Randbedingungen $u_{n+N}(t) = u_n(t)$, $s_{n+N}(t) = s_n(t)$ auf die Einschränkung $k = \frac{2\pi}{a}\frac{m}{N}$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ führen, und daß für eine eindeutige Lösung $-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$ gelten muß.

b) 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?

2 Dichte der Eigenmoden (Zustandsdichte):

a) Eine brauchbare Näherung ist offenbar $\omega_-(k) = c\,|k|$, $\omega_+(k) = \omega_0 = const.$ Berechnen Sie damit die Zustandsdichten $D_\pm(\omega) = \overline{\sum}_k \delta(\omega - \omega_\pm(k))$ als Funktion von c, ω_0. Die $\overline{\sum}_k$ umfaßt nur die erlaubten k-Werte aus Aufg. 1.

b) Für ein dreidimensionales Kristallgitter mit insgesamt N Elementarzellen, die jeweils 2 Massen enthalten, gilt $\omega_-^s(\mathbf{k}) = c\,|\mathbf{k}|$, $\omega_+^s(\mathbf{k}) = \omega_0$, $s = 1, 2, 3$ mit $-\frac{\pi}{a} < k_i \leq \frac{\pi}{a}$, $i = x, y, z$, $k_i = \frac{2\pi}{L} m_i$, $m_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, $L^3 = N\, a^3$. Berechnen Sie dafür die Zustandsdichten $D_\pm(\omega) = \overline{\sum}_{\mathbf{k}} \sum_s \delta(\omega - \omega_\pm(\mathbf{k}))$ für kleine Frequenzen $\omega \ll c/a\, , \omega_0$.

3 Phononen: Die klassischen Eigenmoden der Kette bzw. des Kristalls werden nun als unabhängige, unterscheidbare, quantenmechanische harmonische Oszillatoren aufgefaßt.

a) Geben Sie die kanonische Zustandssumme Z an, und bestimmen Sie die innere Energie U als Funktion der Zustandsdichten $D_\pm(\omega)$. Worin besteht der Unterschied zum idealen Bose-Gas?

b) Ausgehend von den Ergebnissen aus Aufg. 2 berechne man die spezifische Wärme $c_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$ für kleine Temperaturen $kT \ll \hbar c/a$, $\hbar\omega_0$ für Kette und Kristall.

— Besprechung in den Übungsgruppen am Dienstag, 05.06.07 —