
Übungen zu Theoretische Physik IV

Priv.-Doz. Dr. Stefan Förste

<http://www.th.physik.uni-bonn.de/people/forste/exercises/ws1213/tp4>

–ANWESENHEITSÜBUNGEN–

A 12.1 Phononen in Festkörpern

Als Modell für einen (eindimensionalen) Festkörper betrachten wir zunächst eine Kette aus N Teilchen der Masse m , die durch Federn mit der Federkonstante f mit den nächsten Nachbarn gekoppelt sind. Die Positionen der Teilchen werden mit X_n bezeichnet, ihre Gleichgewichtslagen mit x_n^0 . Die Gitterkonstante ist $a = x_{n+1}^0 - x_n^0$. Die Hamiltonfunktion dieses Systems ist dann gegeben durch

$$H = W_0 + \sum_{n=1}^N \left(\frac{m}{2} \dot{u}_n^2 + \frac{f}{2} (u_n - u_{n-1})^2 \right),$$

wobei $u_n = x_n - x_n^0$ und W_0 die potentielle Energie der Kette in der Gleichgewichtslage ist. Wir fordern nun periodische Randbedingungen

$$u_n = u_{n+N}, \quad \dot{u}_n = \dot{u}_{n+N}$$

und führen eine kanonische Transformation auf Normalkoordinaten Q, P gemäß

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{Nm}} \sum_k e^{ikan} Q_k, \quad m\dot{u}_n = \sqrt{\frac{m}{N}} \sum_k e^{-ikan} P_k$$

durch. Die Hamiltonfunktion lässt sich dann als Summe über die N verschiedenen Moden k der Normalkoordinaten schreiben

$$H = W_0 + \frac{1}{2} \sum_k \left(P_k P_{-k} + \omega_k^2 Q_k Q_{-k} \right),$$

wobei die Kreisfrequenz durch

$$\omega_k = \left| 2\sqrt{\frac{f}{m}} \sin \frac{ka}{2} \right|$$

gegeben ist. Beachte, dass die maximale Kreisfrequenz $\omega_{k,\max} = 2\sqrt{\frac{f}{m}}$ ist.

Fasst man nun die Variablen Q_k und P_k als zueinander konjugierte quantenmechanische Operatoren auf, die die kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[Q_k, P_{k'}] = i\hbar\delta_{kk'}, \quad [Q_k, Q_{k'}] = [P_k, P_{k'}] = 0$$

erfüllen, so kann man die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren a_k^\dagger und a_k einführen, die durch

$$Q_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} (a_k + a_{-k}^\dagger), \quad P_k = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}} (a_{-k} - a_k^\dagger)$$

definiert sind und die Vertauschungsrelationen

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}, \quad [a_k, a_{k'}] = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0$$

erfüllen. Damit wird der Hamiltonoperator zu

$$H = W_0 + \sum_k \hbar\omega_k \left(\hat{n}_k + \frac{1}{2} \right),$$

mit dem Besetzungszahloperator $\hat{n}_k = a_k^\dagger a_k$.

In dieser Form kann man den Hamiltonoperator sofort auf 3 Dimensionen verallgemeinern. In einem dreidimensionalen Kristall mit einem Atom pro Einheitszelle (Bravais-Kristall) gibt es zu jeder Wellenzahl 3 Gitterschwingungen: eine longitudinale (l) und zwei transversale (t_1, t_2), insgesamt hat das Gitter also $3N$ Schwingungsfreiheitsgrade. Wir kennzeichnen die Schwingungszustände durch die Wellenzahl und die Polarisierung λ . Der Hamiltonoperator ist dann

$$H = W_0 + \sum_{k,\lambda} \hbar\omega_{k,\lambda} \left(\hat{n}_{k,\lambda} + \frac{1}{2} \right). \quad (1)$$

- (a) Berechne die kanonische Zustandssumme $Z = \text{Spe}^{-\beta H}$ (mit dem Hamiltonoperator (1)) und daraus die freie Energie F und die innere Energie E .
- (b) Betrachte die Zustandssumme

$$g(\omega) = \frac{1}{3N} \sum_{k,\lambda} \delta(\omega - \omega_{k,\lambda}),$$

mit der Normierung $\int_0^\infty d\omega g(\omega) = 1$. Schreibe die Summe über k als Integration und werte den so erhaltenen Ausdruck unter der Annahme aus, dass man für die Frequenzen der longitudinalen beziehungsweise transversalen Schwingungen

$$\omega_{k,l} = c_l k, \quad \omega_{k,t} = c_t k,$$

ansetzen kann, wobei $c_{l,t}$ die longitudinalen bzw. transversalen Schallgeschwindigkeiten sind. Diese Voraussetzung gilt bei kleinen Temperaturen, wenn nur Moden mit kleinen Phononenfrequenzen angeregt sind.

- (c) Drücke den in (a) gefundenen Ausdruck für die innere Energie E durch eine Frequenzintegration über die Zustandssumme $g(\omega)$ aus. Wie kann man E für tiefe Temperaturen und für $T \gg \hbar\omega/k$ nähern? Was ergibt sich daraus jeweils für C_V ?
- (d) Werte die innere Energie mit der Debyeschen Näherung

$$g_D(\omega) = \frac{3\omega^2}{\omega_D^3} \theta(\omega_D - \omega)$$

aus. Dabei ist

$$\frac{1}{\omega_D^3} = \frac{V}{18\pi^2 N} \left(\frac{1}{c_1^3} + \frac{2}{c_t^3} \right).$$

Leite auch den daraus folgenden Ausdruck für C_V ab und untersuche dessen Grenzfall für sehr große bzw. sehr kleine Temperaturen.

–HAUSÜBUNGEN–

H 12.1 Schwankungsquadrate und Quantenstatistik

5 Punkte

Wir betrachten ein ideales Quantengas bei der Temperatur T . Die Teilchenzahl im Quantenzustand p werde mit n_p bezeichnet, die Energie in diesem Zustand mit ϵ_p . Berechne das Schwankungsquadrat $(\Delta n_p)^2$ für die Bose-Einstein- und die Fermi-Dirac-Statistik.

H 12.2 Entropie und Energie eines idealen Quantengases

(5+5=10) Punkte

(a) Zeige, dass die Entropie eines idealen Bose- (Fermi-) Gases als

$$S = k \sum_p (-\langle n_p \rangle \log \langle n_p \rangle \pm (1 \pm \langle n_p \rangle) \log (1 \pm \langle n_p \rangle))$$

dargestellt werden kann, wobei das obere (untere) Vorzeichen für den bosonischen (fermionischen) Fall gilt.

(b) Benutze die Definition der inneren Energie im Großkanonischen Ensemble um zu zeigen, dass für die innere Energie eines idealen Bose- (Fermi-) Gases

$$E = \sum_p n(\epsilon_p) \epsilon_p$$

gilt. Betrachte den Kontinuumsfall und zeige

$$E = \frac{gV m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^\infty \frac{d\epsilon \epsilon^{3/2}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} \mp 1}.$$

Der Vergleich mit der in der Vorlesung berechneten Form von Φ ergibt dann die Zustandsgleichung eines idealen Quantengases

$$PV = \frac{2}{3} E.$$

H 12.3 Thermodynamische Größen im klassischen Grenzfall

5 Punkte

Berechne C_V , C_p , κ_T und α für ideale Bose- und Fermigase im Grenzfall starker Verdünnung bis zur Ordnung \hbar^3 .