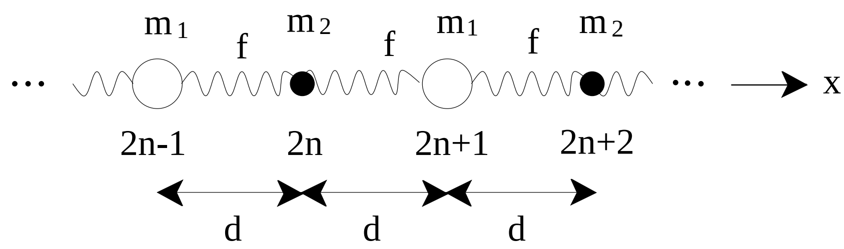
Universität Bielefeld
Theoretische Festkörperphysik
Sommersemester 2011

Dozent: Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster
Tutor: Dr. Mykhaylo Evstigneev
Blatt 5

Aufgabe 9: Lineare zweiatomige Kette (13 Punkte)

Als einatomiges Modell für einen Ionenkristall mit zweiatomiger Basis wie z.B. NaCl sei die folgende Anordnung gewählt:



Die Massen m_1 und m_2, die sich in x-Richtung abwechseln und mit ungeraden bzw. geraden Nummern gekennzeichnet sind, liegen auf einem Gitter der Gitterkonstante d und sind durch Federn der Federkonstante f gekoppelt. Es werden nun Schwingungen der Massen m_n in x-Richtung betrachtet, die durch die Auslenkungen u_n beschrieben werden.

a) Welche Kräfte wirken auf die Massen m_{2n} bzw. m_{2n+1}? Geben Sie die zugehörigen Bewegungsgleichungen an. Um die in **b)** zu bestimmende allgemeine Lösung überprüfen zu können, ist es nützlich, den Grenzfall von sehr verschiedenen Massen $m_1 \gg m_2$ zu betrachten. Dann ist die Bewegung der ungeraden Massenpunkte im Vergleich zu derjenigen der geraden Massenpunkte quasistatisch. Um die langsame Bewegung der ungeraden Massenpunkte zu beschreiben, kann man formal den Limes $m_2 \to 0$ betrachten. Welche Werte nehmen die gerade Koordinaten u_{2n} in diesem Limes an? Wie lauten die Bewegungsgleichungen der ungeraden Massenpunkte? Geben Sie die entsprechende Dispersionsrelation $\omega_1(k)$ mit Hilfe von Aufgabe **1** an. Wie lautet die Frequenz ω_2 für die schnellen Schwingungen der geraden Massenpunkte?

(3 Punkte)

b) Die Bewegungsgleichungen lassen sich durch den Ansatz

$$u_{2n} = A \exp[i(kx - \omega t)], \qquad x = 2nd \tag{1}$$

$$u_{2n+1} = B \exp[i(kx - \omega t)], \qquad x = (2n+1)d \tag{2}$$

lösen, wobei x die Ruhelage des betreffenden Atoms ist. Zeigen Sie, dass die Dispersionsrelation die folgende Gestalt hat:

$$\omega_{1,2}(k) = \alpha[1 \pm (1 - \beta \sin^2 kd)^{1/2}]^{1/2} \tag{3}$$

Geben Sie die Ausdrücke für α und β an. Skizzieren Sie die beide Äste $\omega_{1,2}(k)$. Vergewissern Sie sich, dass man den Grenzfall $m_1 \gg m_2$ aus **a)** korrekt rekonstruieren kann. (3 Punkte)

c) Diskutieren Sie die Dispersionsrelation für $0 \leq k \leq \pi/2d$. Warum können Sie sich auf dieses k beschränken? Wie verhält sich ω für kleine k, welchen Wert nimmt es bei $k = \pi/2d$ an und wie groß ist das Verhältnis der beide Frequenzen dort? Setzen Sie speziell $m_1 = m_2$. Erhalten sie dann das aus Aufgabe **1** bekannte Ergebnis? (3 Punkte)

d) Diskutieren Sie die Eigenschwingungen für kleine k und für kleine $k - \pi/2d$ und veranschaulichen Sie sie graphisch. Wie ist das qualitative Verhalten für allgemeines k? (3 Punkte)

e) Das verschiedene Verhalten der Eigenschwingungen führt zu den Bezeichnung *optischer* und *akustischer Zweig.* Licht kann nur dann mit dem Kristall wechselwirken, wenn ein Dipolmoment vorhanden ist, d.h. Ladungen gegeneinader verschoben werden. Akustische Wellen andererseits haben mit Dichteschwankungen zu tun. Wie würden Sie mit Ihrer Kenntnis der Eigenschwingungen die Zweige zuordnen? (1 Punkt)

Aufgabe 10: Anharmonische Korrekturen (12 Punkte)

Um den Einfluß anharmonischer Korrekturen zu untersuchen, betrachten wir nun einen einzelnen harmonischen Oszillator unter dem Einfluß einer anharmonischen Störung

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + U(x) = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{k}{2}\hat{x}^2 - \alpha\hat{x}^3 \tag{4}$$

a) Berechnen Sie den quantenmechanischen Erwartungswert $\langle x \rangle_n = \langle n|\hat{x}|n\rangle$ im Zustand $|n\rangle$ in erster nichtverschwindender Ordnung Störungsrechnung in α. (3 Punkte)

b) Berechnen Sie anschließend den thermodynamischen Erwartungswert

$$\langle x \rangle = \frac{1}{Z}\sum_n \langle x \rangle_n \, e^{-\beta E_n}\,, \qquad Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \tag{5}$$

mit $\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ in niedrigster Ordnung in α. Wie kann man $\langle x \rangle$ interpretieren und welche Temperaturabhängigkeit erhalten Sie für diese Größe? (3 Punkte)

c) Wie lautet das vorhergehende Ergebnis im klassischen Fall? Bestimmen Sie den Gültigkeitsbereich des klassischen Grenzfalls. (3 Punkte)

d) Berechnen Sie den Grüneisen-Parameter $\gamma = -\partial \ln \omega / \partial \ln L$ für eine lineare Kette der Länge L, der Gitterkonstante a und mit einer nächste-Nachbar-Kopplung, die durch das Potenzial (4) beschrieben wird. Hierbei ist $x = d - a$, und d ist die Distanz zwischen den nächsten Nachbarn. (3 Punkte)