Universität Bielefeld
Theoretische Festkörperphysik
Sommersemester 2011

Dozent: Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster
Tutor: Dr. Mykhaylo Evstigneev
Blatt 6

Aufgabe 11: Mittleres Auslenkungsquadrat (12 Punkte)

Gegeben sei ein d-dimensionaler Kristall (N Gitterplätze) mit einem Atom (der Masse M) pro Elementarzelle, $\mathbf{R}_n$ sei der Gittervektor und $\mathbf{u}_n$ die Auslenkung des Atoms der n-ten Elementarzelle. In harmonischer Näherung läßt sich der Phononen-Hamilton-Operator bekanntlich schreiben als

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{q},j} \hbar\omega_j(\mathbf{q}) \left(\hat{b}^\dagger_{\mathbf{q},j} \hat{b}_{\mathbf{q},j} + \frac{1}{2} \right) \tag{1}$$

Für den Auslenkungsvektor gilt dann

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}_n, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q},j} \mathbf{e}_j(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\,\mathbf{R}_n} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_j(\mathbf{q})}} \left[\hat{b}_{\mathbf{q}j} e^{-i\omega_j(\mathbf{q})t} + \hat{b}^\dagger_{-\mathbf{q}j} e^{i\omega_j(\mathbf{q})t} \right] . \tag{2}$$

a) Berechnen Sie die mittlere thermische Auslenkung $\langle \mathbf{u} \rangle$. (1 Punkt)

b) Berechnen Sie die Korrelationsfunktion $\langle u_\alpha(\mathbf{R}_n, t) u_\beta(\mathbf{R}_{n'}, t') \rangle$, wobei $\langle \cdot \rangle$ den thermischen Mittelwert bezeichnet. (3 Punkte)

c) Zeigen Sie mit Hilfe von **b)**, dass für das mittlere thermische Auslenkungsquadrat gilt

$$\langle \mathbf{u}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2M} \int_0^\infty n(\omega) \frac{1}{\omega} \coth(\hbar\beta\omega) d\omega \tag{3}$$

wobei $n(\omega)$ die Phonen-Zustandsdichte bezeichnet. (2 Punkte)

d) Begründen Sie, dass $\langle \mathbf{u}^2 \rangle$ für $d = 1, 2$ divergiert, für $d = 3$ aber nicht. Welche Konsequenzen hat dies? (2 Punkte)

e) Zeigen Sie, dass für hohe Temperaturen gilt

$$\langle \mathbf{u}^2 \rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{M} \int_0^\infty n(\omega) \frac{1}{\omega^2} d\omega \tag{4}$$

(1 Punkt)

f) Berechnen Sie $\langle \mathbf{u}^2 \rangle$ für hohe Temperaturen im Debye-Modell. (2 Punkte)

g) Der Kristall schmilzt, wenn die mittlere Auslenkung einen bestimmten Bruchteil x_s der Gitterkonstanten a erreicht (Lindemannsches Schmelzkriterium), wenn also

$$\langle \mathbf{u}^2 \rangle = x_s^2\, a^2 \tag{5}$$

gilt. Leiten Sie daraus und aus **f)** eine Formel für die Schmelztemperatur her. (1 Punkt)

Aufgabe 12: Wärmekapazität der linearen Kette (10 Punkte)

a) Zeigen Sie, daß sich die innere Energie der linearen Kette im thermodynamischen Limes in folgender Form schreiben läßt:

$$U = \frac{Na}{\pi} \int_0^{\pi/a} dq \hbar\omega(q) \left[\frac{1}{e^{\hbar\beta\omega(q)} - 1} + \frac{1}{2} \right] . \tag{6}$$

Wie lautet die Dispersionsrelation $\omega(q)$ der Phononen? (2 Punkte)

b) Bestimmen Sie die Wärmekapazität der Gitterschwingungen in den Grenzfällen hoher und tiefer Temperaturen. (2 Punkte)

c) Verwenden Sie nun zur Berechnung der inneren Energie (6) die Debye-Näherung, daß die Dispersionsrelation linear ist: $\omega(q) = c_s q$. Geben Sie die Schallgeschwindigkeit c_s an. Was ergibt sich in Debye-Näherung für die Wärmekapazität in den Grenzfällen für hohe und tiefe Temperaturen? (3 Punkte)

d) Bestimmen Sie die Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität der linearen Kette numerisch sowohl für die Dispersionsrelation in **a)** als auch für die Debye-Näherung in **c**) und vergleichen Sie sie. (3 Punkte)