

Aufgabe 14: Dispersionsrelation einer Bose-Flüssigkeit: Bijl-Feynman Formel (11 Punkte)

Wir betrachten eine Flüssigkeit zunächst einmal klassisch. Unser Ausgangspunkt ist die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla [\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)] = 0, \quad (1)$$

wobei $\rho(\mathbf{r}, t)$ und $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ die lokale Dichte und Geschwindigkeit bezeichnen. Wir nehmen an, dass die Geschwindigkeiten und die Abweichungen der Dichte vom Mittelwert

$$\bar{\rho} = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

klein sind, wobei V das Volumen des Systems darstellt, so dass sich die Kontinuitätsgleichung vereinfacht:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \bar{\rho} \nabla \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3)$$

a) Führen Sie nun die Fourier-Transformation

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \rho_{\mathbf{q}}(t), \quad \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mathbf{v}_{\mathbf{q}}(t). \quad (4)$$

durch. Wie lassen sich die Fourier-Komponenten $\rho_{\mathbf{q}}(t)$ und $\mathbf{v}_{\mathbf{q}}(t)$ physikalisch interpretieren? Wie lautet die Kontinuitätsgleichung (3) im Fourier-Raum? Mit der zusätzlichen Annahme, dass die Schwingungen gemäß $\mathbf{v}_{\mathbf{q}} = a_{\mathbf{q}} \mathbf{q}$ longitudinal sind, läßt sich die skalare Proportionalitätskonstante $a_{\mathbf{q}}$ bestimmen. Drücken Sie die Geschwindigkeit $\mathbf{v}_{\mathbf{q}}(t)$ durch $\rho_{\mathbf{q}}(t)$, $\dot{\rho}_{\mathbf{q}}(t)$ und \mathbf{q} aus. (3 Punkte)

b) Die gesamte Energie der Flüssigkeit kann als die Summe der kinetischen und der potentiellen Energie dargestellt werden. Für kleine Abweichungen vom Gleichgewicht kann man die Dichtefluktuationen $\delta\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \rho(\mathbf{r}, t) - \bar{\rho}$ in der kinetischen Energie vernachlässigen und man erhält

$$E_K = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}^2(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \bar{\rho} \int d\mathbf{r} \mathbf{v}^2(\mathbf{r}, t) + O(\delta\rho). \quad (5)$$

Drücken Sie diese durch $\mathbf{v}_{\mathbf{q}}(t)$ aus. Setzen Sie dann das am Ende von Teil a) erhaltene Ergebnis ein. (2 Punkte)

c) Die potentielle Energie kann man als funktionale Taylor-Entwicklung in $\delta\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \rho(\mathbf{r}, t) - \bar{\rho}$ darstellen:

$$E_P = E_P(\bar{\rho}) + \int d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) \delta\rho(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta\rho(\mathbf{r}, t) \delta\rho(\mathbf{r}', t) + \dots \quad (6)$$

Begründen Sie die folgenden Aussagen: $\psi(\mathbf{r}) = \text{const}$; $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \varphi(\mathbf{r}', \mathbf{r})$; $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. Welche Wert nimmt das Integral $\int d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) \delta\rho(\mathbf{r}, t)$ an? Verwenden Sie nun auch die Fourier-Entwicklung

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (7)$$

und drücken Sie E_P mittels der Fourier-Komponenten $\rho_{\mathbf{q}}$ und $\varphi_{\mathbf{q}}$ aus. (3 Punkte)

d) Die gesamte Energie von b) und c) kann jetzt als Summe von harmonischen Oszillatoren dargestellt werden:

$$E = E_P(\bar{\rho}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} (|\dot{\rho}_{\mathbf{q}}(t)|^2 + \omega_{\mathbf{q}}^2 |\rho_{\mathbf{q}}(t)|^2) \quad (8)$$

Was finden Sie für die "Masse" $M_{\mathbf{q}}$ und die Frequenz $\omega_{\mathbf{q}}$? Eine Quantisierung dieser Oszillatoren ergibt die Grundzustandsenergie $E_0(\mathbf{q}) = \hbar\omega_{\mathbf{q}}/2$ der Mode \mathbf{q} . Auf der anderen Seite ist

$$E_0(\mathbf{q}) = \frac{M_{\mathbf{q}}}{2} (\langle |\dot{\rho}_{\mathbf{q}}|^2 \rangle + \omega_{\mathbf{q}}^2 \langle |\rho_{\mathbf{q}}|^2 \rangle) = M_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^2 \langle |\rho_{\mathbf{q}}|^2 \rangle, \quad (9)$$

wobei wir die Tatsache benutzt haben, dass die Mittelwerte von kinetischer und potentieller Energien gleich sind. Benutzen Sie diese zwei Ausdrücke für $E_0(\mathbf{q})$, um $\varphi_{\mathbf{q}}$ durch den Grundzustandsmittelwert $\langle |\rho_{\mathbf{q}}|^2 \rangle$ auszudrücken. Leiten Sie damit die Bijl-Feynman-Formel her:

$$\omega_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2mS(\mathbf{q})}, \quad (10)$$

wobei m die Masse eines Teilchens ist. Welchen Ausdruck finden Sie für den Strukturfaktor $S(\mathbf{q})$? Drücken Sie diesen durch die Dichte-Korrelationsfunktion $\langle \delta\rho(\mathbf{r}, t) \delta\rho(\mathbf{0}, t) \rangle$ aus. (3 Punkte)

Aufgabe 15: Kronig-Penney-Potential

(12 Punkte)

In dieser Aufgabe untersuchen Sie ein einfaches Modell für ein eindimensionales Kristallgitter, das von Kronig und Penney 1931 eingeführt wurde. Dabei werden die Atompotentiale durch Rechteckpotentiale modelliert, bei denen die Minima den Atomkernen entsprechen. Besonders einfach läßt sich das Modell in dem Limes untersuchen, wenn die Potentialbarrieren durch Diracsche Delta-Funktionen ersetzt werden. Betrachten Sie daher im folgenden das sogenannte Kronig-Penney-Potential

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - an), \quad (11)$$

wobei a die Gitterkonstante des Kristallgitters bezeichnet.

a) Zeigen Sie, dass die Energien im Kronig-Penney-Potential durch die transzendente Gleichung

$$\cos ka = \frac{v}{\beta a} \sin \beta a + \cos \beta a \quad (12)$$

zu bestimmen sind, wobei $\beta = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ und $v = mV_0a/\hbar^2$. (4 Punkte)

Hinweis: Verwenden Sie das Bloch-Theorem. Finden Sie erst die Lösung der Schrödinger-Gleichung in einer Elementarzelle und arbeiten Sie dann die Bedingungen für die Stetigkeit der Wellenfunktion am Zellenrand ein.

b) Die Gleichung (12) läßt sich im allgemeinen nur graphisch oder numerisch lösen. Zeigen Sie, dass die entstehende Bandstruktur Energielücken hat, d.h. Energieintervalle wo es keine Lösungen von (12) gibt. Diskutieren Sie insbesondere die beiden Fälle $v \rightarrow 0$ und $v \rightarrow \infty$. (3 Punkte)

c) Berechnen Sie die Zustandsdichte $\rho(E)$, also die Zahl der Zustände mit Energien zwischen E und $E + dE$, die dem Kronig-Penney-Potential für N Elektronen entspricht.

Hinweis: Beachten Sie, dass sich die Zustände durch k nummerieren lassen. Die Zustandsdichte als Funktion von k ist dann die Konstante $L/2\pi$ mit $L = Na$. Eine kurze Überlegung ergibt dann $Ldk/2\pi = \rho(E(k))dE$, so dass sich $\rho(E)$ mit Hilfe der Ableitung dk/dE und (12) berechnen läßt. (3 Punkte)

d) Wie verhält sich die Zustandsdichte $\rho(E)$ an den Rändern eines Energiebandes? (2 Punkte)