Statistische Thermodynamik II   Serie 7

Phononengas   15. November 2021

In dieser Übungsserie betrachten wir die statistische Thermodynamik von Vibrationen eines Kristallgitters. Dazu betrachten wir ein lineares und ein kubisches Gitter aus Ionen, deren Vibrationen durch ein System von gekoppelten harmonischen Oszillatoren beschrieben und entsprechend quantisiert wird.

1. Betrachte zuerst ein 1-dimensionales lineares Modell, in welchem Ionen der Masse M auf einem linearen Kristallgitter der Länge L mit Gitterabstand a aufgereiht sind, um ihre Ruheposition vibrieren und mit ihren beiden nächsten Nachbarn gekoppelt sind. Die Hamiltonfunktion ist dann durch

$$H = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \left[\frac{p_n^2}{2M} + \frac{1}{2} M\omega_0^2 (x_{n+1} - x_n - a)^2 \right] \tag{1}$$

gegeben.

   (a) Schreibe die Hamiltonfunktion um, indem du die Verschiebung jedes Ions aus seiner Ruheposition durch $y_n = x_n - na$ beschreibst.

   (b) Führe nun eine Fouriertransformation der Variablen y_n bezüglich des Index n aus,

$$\tilde{y}(k) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} y_n \exp(-ikna)\,. \tag{2}$$

   Welche Werte kann k annehmen und wie sieht die inverse Foureirtransformation aus?

   (c) Leite die Potentialenergie her,

$$V = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{1}{2} M\omega_0^2 \hat{k}^2 a^2 \tilde{y}(k)^\dagger \tilde{y}(k)\,, \tag{3}$$

   und zeige, dass $\hat{k} = 2/a \sin(ka/2)$ ist.

   (d) Leite die Fourier-transformierte kinetische Energie her,

$$T = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{1}{2M} \tilde{y}(k)^\dagger \tilde{y}(k)\,. \tag{4}$$

   (e) Zeige, dass die Hamiltonfunktion nun eine Menge von entkoppelten harmonischen Oszillatoren (einen für jede Wellenzahl k) mit einer k-abhängigen Frequenz

$$\omega(k) = \omega_0 |\hat{k}| a = 2\omega_0 |\sin(ka/2)| \tag{5}$$

   beschreibt.

(f) Die quantisierten Anregungen dieser Oszillatoren werden Phononen genannt. Die entsprechenden Anregungsquanten sind $E(k) = \hbar\omega(k)$, wobei die Grundzustandsenergie wie bei den Photonen ignoriert wird, da sie nur eine konstante Energieverschiebung darstellt. Bestimmme die Dispersionsrelation für $k \to 0$ und berechne die Phononengeschwindigkeit in Analogie zur Lichtgeschwindigkeit bei Photonen.

(g) Die Zustandssumme faktorisiert in ein Produkt von Zustandssummen für jeden Oszillator. Berechne die Zustandssumme für einen einzelnen Oszillator und daraus seine mittlere Energie.

(h) Bestimme die Ausdrücke für die mittlere Energiedichte und die spezifische Wärmekapazität des ganzen Systems im thermodynamischen Limes $L \to \infty$ und werte sie numerisch in einer Figur aus.

(i) Berechne nun die beiden Ausdrücke bei sehr tiefen Temperaturen, für welche die Dispersionsrelation durch $E(k) = \hbar|k|c$ mit $k \in \{-\infty, \infty\}$ angenähert werden kann, und vergleiche sie mit den numerischen Ausdrücken in Aufgabe 1h .

(j) Berechne schliesslich noch die Wärmekapazität bei sehr hohen Temperaturen (was bedeutet das?) und vergleiche sie mit den Resultaten in 1h und 1i.

2. Die Vibrationen in einem 3-dimensionalen Kristallgitter können in erster Näherung analog zu Aufgabe 1 beschrieben werden.

   (a) Welche Änderungen erfährt die Hamiltonfunktion in der Orts- und Impulsdarstellung?

   (b) Wie sieht die Dispersionsrelation aus?

   (c) Welche Form hat der Hamiltonoperator des quantisierten Systems?

   (d) Wiederhole Aufgabe 1g für den 3-dimensionellen Fall.

   (e) Schreibe wiederum die Ausdrücke für die Energiedichte und die spezifische Wärmekapazität auf und berechne die Integrale explizit für tiefe Temperaturen. Inwiefern unterscheidet sich die Energiedichte vom Stefan-Boltzmann-Gesetz?

   (f) Berechne schliesslich noch die spezifische Wärmekapazität für sehr hohe Temperaturen.

Bemerkungen:

- Um die thermische Expansion eines Kristallgitter zu beschreiben müssen anharmonische Korrekturen zum harmonischen Oszillatorpotentials betrachtet werden. Mit diesen Korrekturen können Wechselwirkungen zwischen den Phononen berücksichtigt werden.

- In reellen Festkörpern haben die transversalen und longitudinalen Phononen in der Regel unterschiedliche Dispersionsrelationen.

U. Wenger