Theorie der Kondensierten Materie I

Notiztitel 01.12.2010

Van-Hove-Singularitäten treten für alle Frequenzen auf, bei denen wenigstens eine Dispersion $\omega_j(\vec{q})$ einen verschwindenden Gradienten hat: $\vec{D}_{\vec{q}}\,\omega_j(\vec{q}) = 0$

Man kann dann in der Umgebung entwickeln:

$$\omega(\vec{q}) = \omega(\vec{q}_c) + \vec{D}_{\vec{q}}\,\omega(\vec{q})\big|_{\vec{q}_c} + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j}\omega(\vec{q})\Big|_{\vec{q}_c} (q_i - q_{ci})(q_j - q_{cj}) + \ldots$$

Nach Hauptachsentransformation: $\omega = \omega_c + \sum_{i=1}^{d} \varepsilon_i k_i^2$

In $d = 3$ sind nun 4 Fälle denkbar:

1. $\varepsilon_i > 0 \quad \forall i$ Minimum (relativ)
2. $\varepsilon_i < 0 \quad \forall i$ Maximum "
3. $\varepsilon_{1,2} > 0,\ \varepsilon_3 < 0$ Sattelpunkt Typ 1
4. $\varepsilon_1 > 0,\ \varepsilon_{2,3} < 0$ " Typ 2

(5. $\varepsilon_1 > 0,\ \varepsilon_2 < 0,\ \varepsilon_3 = 0 \rightarrow$ höhere Ordnung)

Die Zustandsdichte ergibt sich zu

$$n(\omega) \sim \int d^3k\ \delta\Big(\omega - \omega_c - \sum_i \varepsilon_i k_i^2\Big)$$

Für ein Minimum (Fall 1) erhält man mit $x_i = \sqrt{\varepsilon}\, k_i$

$$n(\omega) \sim \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3}} \int d^3x \; \delta(\omega - \omega_c - \sum_i x_i^2)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3}} \, 4\pi \int dr \; r^2 \, \delta(\omega - \omega_c - r^2)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3}} \, 2\pi \int d\tilde{r} \, \sqrt{\tilde{r}} \, \delta(\omega - \omega_c - \tilde{r}) \sim \sqrt{\omega - \omega_c}$$

$\uparrow$ $\tilde{r} = r^2 \Rightarrow d\tilde{r} = 2r\,dr \Leftrightarrow dr = \frac{d\tilde{r}}{2\sqrt{\tilde{r}}}$

Analog ergibt sich für ein Maximum $n(\omega) \sim \sqrt{\omega_c - \omega}$

Einen Sattelpunkt kann man durch Übergang zu Zylinderkoordinaten abschätzen, hier für Typ 1 $(\varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0,\ \varepsilon_3 < 0)$ und mit Substitution $x_i = \sqrt{|\varepsilon_i|}\, k_i$

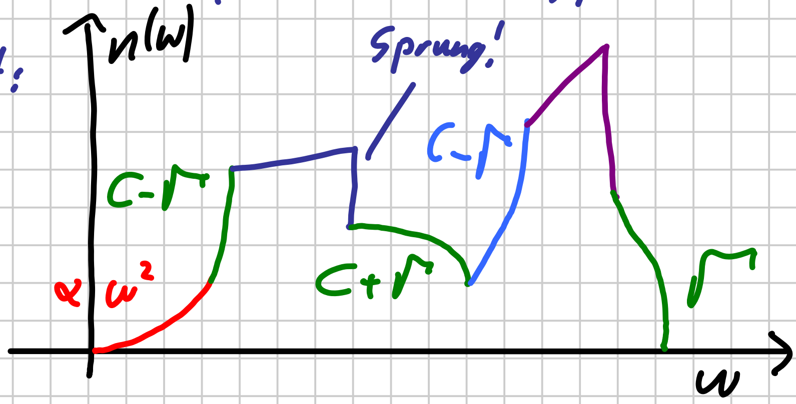
$$n(\omega) \sim \frac{2\pi}{\sqrt{|\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3|}} \int dr\, r \int dz \; \delta(\omega - \omega_c - r^2 + z^2)$$

$$= \frac{\pi}{\sqrt{|\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3|}} \int dr \, \frac{r}{\sqrt{r^2 + \omega_c - \omega}}$$

$$= \frac{\pi}{\sqrt{|\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3|}} \sqrt{r^2 + \omega_c - \omega}\,\Big|_0^{r_m} \sim C - \sqrt{\omega_c - \omega}$$

Analog für Sattelpunkt vom Typ 2: $n(\omega) \sim C - \sqrt{\omega - \omega_c}$

Insgesamt:



Entspricht etwa Zustandsdichte von Ar (fcc)