Übungsaufgaben zur Vorlesung
„Einführung in die Theorie der Kondensierten Materie“
Prof. Dr. Nils Blümer
KOMET 337, Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität

Aufgabenblatt 04, Abgabe: 30. 11. 2010

Aufgabe 7. Innere Energie der harmonischen Kette (20 Punkte)

Betrachten Sie das Problem der Gitterschwingungen einer eindimensionalen quantenmechanischen harmonischen Kette mit der Gitterkonstanten a, der Federkonstanten k, Massen M und periodischen Randbedingungen. Der Hamilton-Operator für dieses Problem lautet bekanntlich:

$$\hat{\mathrm{H}} = \sum_{m=1}^{N-1} \hbar\omega(q_m)(\hat{\mathrm{n}}_m + \tfrac{1}{2}) \quad , \quad \omega(q) \equiv 2\sqrt{\frac{k}{M}}\left|\sin\left(\tfrac{1}{2}qa\right)\right| \quad ,$$

wobei die Wellenzahlen durch $q_m \equiv \frac{2\pi m}{Na}$ gegeben sind.

(a) Zeigen Sie, dass sich die innere Energie durch Übergang von einer m-Summe zu einem q-Integral im thermodynamischen Limes in folgender Form schreiben lässt:

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

(b) Bestimmen Sie die innere Energie E und die Wärmekapazität C_V bei konstantem Volumen (und konstanter Ionenzahl N) im Grenzfall hoher Temperaturen.

(c) Bestimmen Sie die innere Energie (relativ zur Grundzustandsenergie) und die Wärmekapazität im Grenzfall tiefer Temperaturen T, wobei T so niedrig sein soll, dass man für $\hbar\omega(q) < k_\mathrm{B}T$ die Phononenenergien durch $\hbar\omega(q) = \sqrt{\frac{k}{M}}\hbar aq \equiv c_s q$ ersetzen kann. Präzisieren Sie diese Bedingung für „niedrige“ Temperatur.

(d) Zeigen Sie, dass man in Debye-Näherung (d. h. unter der Annahme $\hbar\omega(q) = c_s q$ für alle q) für die innere Energie erhält

$$E(T,N) = \frac{Na}{c_s\pi}(k_\mathrm{B}T)^2 D_1\left(\frac{c_s\pi}{ak_\mathrm{B}T}\right) + \frac{N\pi c_s}{2a} \quad , \quad D_n(x) = \int_0^x dt\,\frac{t^n}{e^t-1} \quad ,$$

wobei die Funktionen $D_n(x)$ als *Debye-Funktionen* bezeichnet werden. Diese findet man tabelliert, z. B. in Abramowitz-Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Kapitel 27, oder man kann sie relativ leicht numerisch berechnen. Was ergibt sich in Debye-Näherung für tiefe und hohe Temperaturen?

(e) Berechnen Sie die niedrigsten nicht-verschwindenden Korrekturen zur Debye-Näherung. Machen Sie hierzu in dem Integral aus (a) die Substitution $x = \beta\hbar\omega(q)$. Entwickeln Sie dann im Integranden einen Ausdruck der Form

$$\sqrt{1 - \left(\frac{k_\mathrm{B}Ta}{2c_s}x\right)^2}$$

bis zur niedrigsten nicht-verschwindenden Ordnung in $k_\mathrm{B}T$. Wie gut ist diese Entwicklung gerechtfertigt?

(f) Bestimmen Sie die Temperaturabhängigkeit der inneren Energie $E(T,N)$ und Wärmekapazität $C_V(T)$ *numerisch* [durch numerisches Berechnen des Integrals in (a)] und in Debye-Näherung und mit den ersten Korrekturen aus (e) zur Debye-Näherung. Plotten Sie die 3 Ergebnisse für $E(T,N)/N$ und $C_V(T)/N$.