Aufgabenblatt 05, Abgabe: 07. 12. 2010

Aufgabe 8. Gitterschwingungen des Quadratgitters (11 Punkte)

Betrachten Sie das quantenmechanische Problem der harmonischen Gitterschwingungen eines (zweidimensionalen) Quadratgitters mit der Gitterkonstanten a, der Federkonstanten k, Massen M und periodischen Randbedingungen. Das Quadratgitter hat die Ausdehnung $N_1 a$ in $\hat{\mathbf{e}}_1$- und $N_2 a$ in $\hat{\mathbf{e}}_2$-Richtung und enthält somit insgesamt $N \equiv N_1 N_2$ Einheitszellen. Der Hamilton-Operator dieses Problems lautet in üblicher Notation nach der kanonischen Transformation $\hat{\mathbf{p}}'_\mathbf{m} \equiv \hat{\mathbf{p}}_\mathbf{m}/\sqrt{M}$, $\mathbf{y}'_\mathbf{m} \equiv \sqrt{M}(\mathbf{y}_\mathbf{m} - \mathbf{y}_{0,\mathbf{m}})$ mit $\mathbf{a}_i = a\hat{\mathbf{e}}_i \quad (i = 1, 2)$:

$$\hat{\mathrm{H}} = \tfrac{1}{2}\sum_\mathbf{m} (\hat{\mathbf{p}}'_\mathbf{m}) + \frac{k}{2M}\sum_\mathbf{m}\left[(\mathbf{y}'_{\mathbf{m}+\mathbf{a}_1} - \mathbf{y}'_\mathbf{m})^2 + (\mathbf{y}'_{\mathbf{m}+\mathbf{a}_2} - \mathbf{y}'_\mathbf{m})^2\right] \quad .$$

Bestimmen Sie die Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{q})$ der möglichen Gitterschwingungen. Welche $\mathbf{q}$-Werte sind möglich? Wieviele akustische Schwingungsmoden gibt es? (Zeigen Sie dies anhand Ihrer Lösung.) Breiten sich die akustischen Schwingungen auf dem Quadratgitter für $\mathbf{q} \to \mathbf{0}$ isotrop oder anisotrop aus?

Aufgabe 9. Wärmekapazität für tiefe Temperaturen in d Dimensionen (9 Punkte)

Aus der Vorlesung ist bekannt, dass die Dispersionsrelation für akustische Phononen in einem beliebigen (möglicherweise auch mehr-atomigen) d-dimensionalen Festkörper für $\mathbf{q} \to \mathbf{0}$ immer in der Form $\omega_j(\mathbf{q}) \sim \left(\sum_{l=1}^{d} c_{jl}^2 q_l^2\right)^{1/2}$ mit $j = 1, 2, \ldots, d$ und $c_{jl} > 0$ für alle (j, l) geschrieben werden kann.

(a) Zeigen Sie zuerst allgemein:

$$n(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{1.\mathrm{BZ}} d\mathbf{q} \sum_{j=1}^{rd} \delta\left(\omega - \omega_j(\mathbf{q})\right) \quad ,$$

wobei ein Index $j = 1, 2, \ldots, d$ die akustischen und $j = d+1, d+2, \ldots, rd$ die optischen Phononen angibt.

(b) Zeigen Sie nun: $n(\omega) \propto \omega^{d-1}$ für $\omega \downarrow 0$.

(c) Leiten Sie aus (b) ab für den phononischen Anteil der Wärmekapazität: $C_\mathcal{V}(T) \propto T^d$ für $T \downarrow 0$. [Für $d = 3$ wird dieses Resultat als das „Debye'sche T^3-Gesetz“ bezeichnet.]