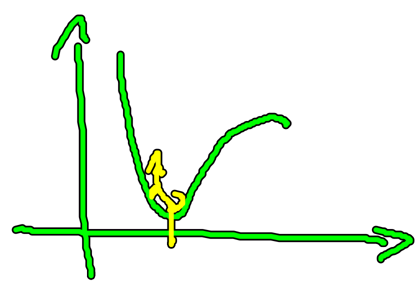
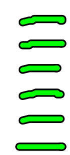
VL

19.12.06

Harmonische Oszillatoren





kleine Schwingungen

Energiespektrum $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$, $n = 0, 1, 2 \ldots$

zu jedem n ein (Mikro) Zustand $|n\rangle$

hier Bewegung in $d=1$, Masse M, Potential $\frac{1}{2}M\omega^2 x^2$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 x^2$$

Dei (T1) aus

$$F = -\frac{1}{\beta}\ln Z = -\frac{1}{\beta}\ln\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}$$

$$= -\frac{1}{\beta}\ln\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)} =$$

$$= -\frac{1}{\beta}\ln\left(e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}\cdot\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

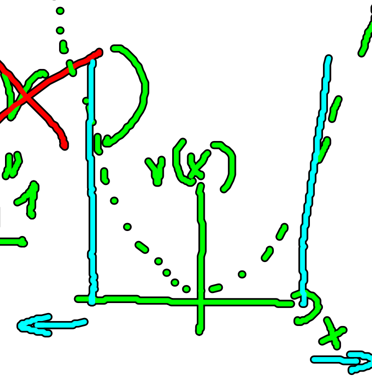
$$\left[\; S = 1+x+x^2+x^3+\ldots = 1+x\left(1+x+x^2+\ldots\right)\right.$$

$$= 1 + xS$$

$$\left.\Rightarrow \quad S = \frac{1}{1-x}\;\right]$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{\beta}\ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)$$

GZ-Energie   hier $F = F(T, \cancel{V})$ L^1



Wir führen jetzt eine andere Beschreibung ein.

1 Teilchenzustandsdichte

$$\nu_1(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \hbar\omega)$$

eines Bosonengases   Spin $s = 0$

$$\Rightarrow \quad \Omega_{bos} = \beta^{-1}\int d\varepsilon\, \nu_1(\varepsilon)\ln\left(1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right)$$

$$= \beta^{-1}\ln\left(1 - e^{-\beta(\hbar\omega-\mu)}\right)$$

gk Potential $\xleftrightarrow[\text{Legendre Trafo}]{}$ freie Energie

$$\| \quad \Omega = F - \mu N \qquad \text{allgemein} \quad \|$$

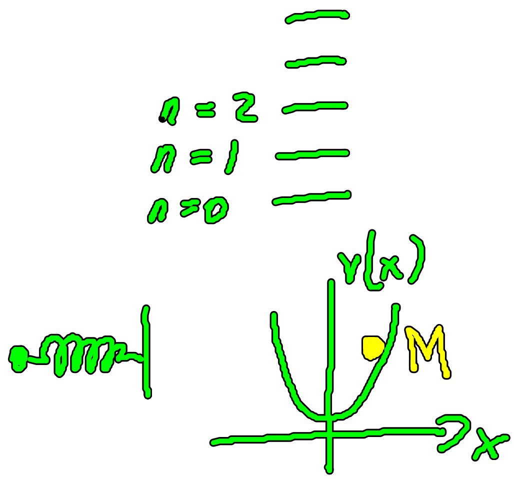
Setzen $\mu = 0$, dann gilt $\Omega = F$,

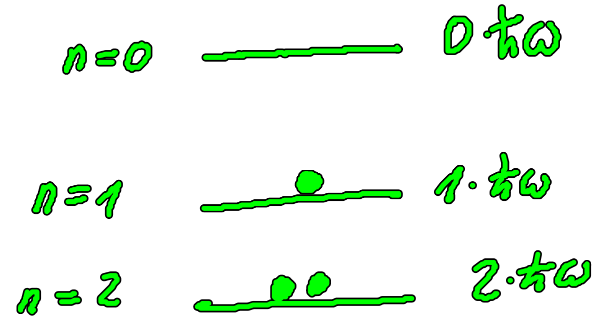
andererseits auch $F_{osc} = \frac{\hbar\omega}{2} + \Omega_{bos}$

$\Rightarrow$ TD des harmonischen Oszillators ist (bis auf konstante GZ energie $\frac{\hbar\omega}{2}$) äquivalent zur TD eines Bosonengases mit

$\nu_1(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \hbar\omega)$, d.h. 1 Niveau

Oszillator   Bosonengas





$n = 0$ Bosonen $\widehat{=}$ GZ des Oszillators

$n = 1$ " $\widehat{=}$ 1. angeregten Zustand des Osz.

$n = 5$ " : "5 Phononen im System"

keine Teilchenzahlerhaltung: Übergänge $n \to n'$, dabei werden Bosonen erzeugt oder vernichtet.

$\Rightarrow$ Leiteroperatoren

$$a^{\dagger} |n\rangle = \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle \qquad \text{Erzeuger}$$

$$a\, |n\rangle = \sqrt{n}\, |n-1\rangle \qquad \text{Vernichter}$$

erfüllen

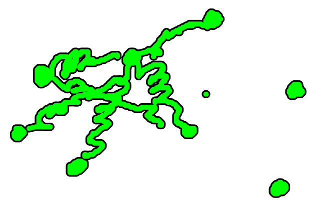
$$[a, a^+] = 1$$

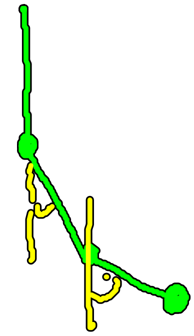
„bosonische Vertauschungsrelationen"

Bosonen heißen hier Phononen

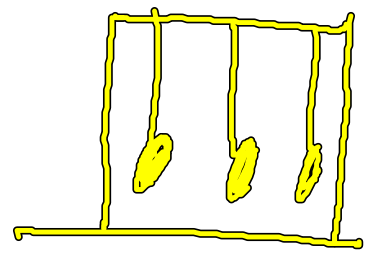
N harmonische Oszillator

N Massen





Kleine Schwingungen um Ruhelage.



Lagrange $L = \frac{1}{2}\dot{\eta}^T T \dot{\eta} - \frac{1}{2}\eta^T V \eta$

verallg. KO $\eta = (\eta_1 \cdots \eta_J)$

T Matrix der kin. Energie

V pot. Energie

Diagonalisierung:

$$VA = TA\lambda, \quad A^T T A = 1$$

$$\eta = Aq$$

$$\lambda = \mathrm{diag}(\omega_1^2, \dots, \omega_J^2), \quad q = (q_1 \cdots q_J)$$

$$\Rightarrow \quad L = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{J}\left(\dot{q}_l^2 - q_l^2\omega_l^2\right)$$

$$\rightarrow \quad \hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{J}\left(\hat{p}_l^2 + \hat{q}_l^2\omega_l^2\right), \quad p_l = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l}$$

$N=2$: 2-atomiges Molekül 

$N>2$: stark geometrieabhängig

Definition: $\omega = \omega_l$ heißt Dispersionsrelation

$$\nu_{osc}(\varepsilon) = \sum_{l=1}^{f} \delta(\varepsilon - \hbar\omega_l)$$

$$F = \sum_l \left[\frac{\hbar\omega_l}{2} + \beta^{-1} \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_l}\right) \right]$$

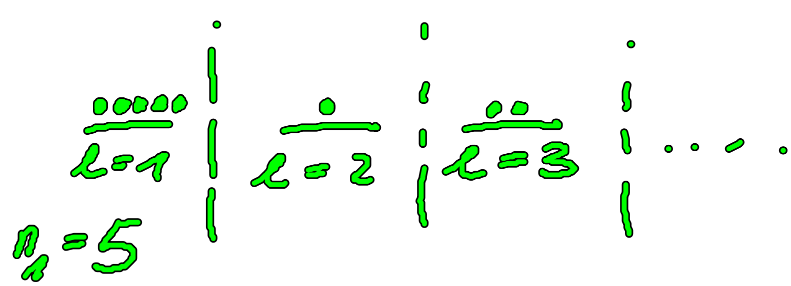
$$= \int d\varepsilon \, \underbrace{\nu_{osc}(\varepsilon)} \left[\frac{\varepsilon}{2} + \beta^{-1} \ln\left(1 - e^{-\beta\varepsilon}\right) \right]$$

Bosonen-Bild: Mikrozustände $\alpha = \{n_l\}$

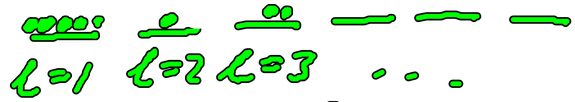
n_l = # der Bosonen im Niveau $\hbar\omega_l$

$$\Omega = \beta^{-1} \int d\varepsilon \, \nu_{osc}(\varepsilon) \ln\left(1 - e^{-\beta\varepsilon}\right)$$

2 Interpr.: 1) Für jede Mode l eine Bosonensorte, die $\hbar\omega_l$ besetzt



2) Nur eine Bosonensorte



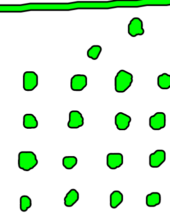
$$\mathcal{H}_{Fock} = \prod_{l=1}^{7}\left(\mathcal{H}_l^{(0)} + \mathcal{H}_l^{(1)} + \mathcal{H}_l^{(2)} \dots\right) = \prod_{l=1}^{7}\sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\mathcal{H}_l^{(n)}}_{\mathcal{H}_l \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_l}$$

$$= \left(\prod_{l=1}^{7}\mathcal{H}_l\right)^{(0)} + \left(\prod_{l}\mathcal{H}_l\right)^{(1)} + \left(\prod_{l}\mathcal{H}_l\right)^{(2)} + \dots =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\prod_{l}\mathcal{H}_l\right)^{(n)}$$

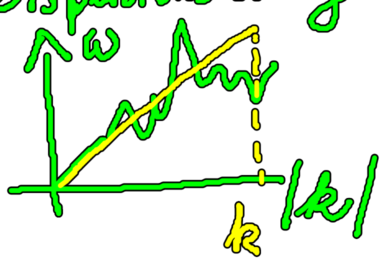
Beispiele für Phononen-Dispersionsrelationen

periodisches Gitter

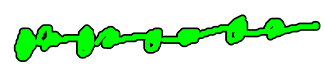


$$\omega = \omega_{\vec{k},r} \qquad \vec{k} \in \mathbb{R}^d \qquad r = 1,2,3,\dots n_r$$

n_r Dispersionszweige $\rightarrow$ Festkörpertheorie

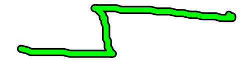


akustischer Zweig



$$\omega_{\underline{k},r} = c_r |\vec{k}| \, \theta(k_D - |k|)$$

Stufenfkt.



c_r Schallgeschw.

$$\Rightarrow \nu_{osc}(\varepsilon) = \sum_{\underline{k},r} \delta(\varepsilon - \hbar c_r |k|)\, \theta(k_D - |k|)$$

$d=3$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_r \int_0^{k_D} dk\, k^2\, 4\pi\, \delta(\varepsilon - \hbar c_r k)$$

$$= \frac{V}{2\pi^2} \sum_r \frac{1}{(\hbar c_r)^3}\, \varepsilon^2\, \theta(\hbar \omega_D^r - \varepsilon)$$

Debye-Modell

$\omega_D^r = c_r k_D$

Debye-Frequenz

Spezifische Wärme:

$$F = \int d\varepsilon\, \nu_{osc}(\varepsilon) \left[\frac{\varepsilon}{2} + \beta^{-1} \ln\left(1 - e^{-\beta\varepsilon}\right) \right]$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial F}{\partial \beta}\frac{\partial \beta}{\partial T} =$$

$$= \int d\varepsilon\, \nu_{osc}(\varepsilon) \left[-\ln\left(1 - e^{-\beta\varepsilon}\right) + \frac{\beta\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \right]$$

$$\| \; U = F + TS = U_0 + \int d\varepsilon\, \nu_{osc}(\varepsilon) \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \; \|$$

$$U_0 = \int d\varepsilon\, \nu_{osc}(\varepsilon) \frac{\varepsilon}{2}$$

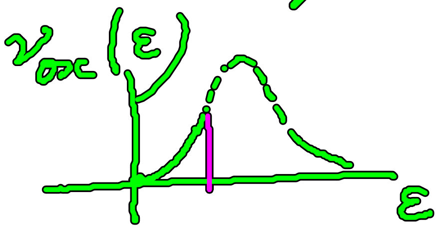
GZ-Beitrag

Bose-Verteilung:

$$\boxed{n_B(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} - 1}}$$

Allgemeineres Modell für $\nu_{osc}(\varepsilon)$

$$\nu_{osc}(\varepsilon) = \frac{\alpha}{\varepsilon_c}\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_c}\right)^{\gamma} \cdot f_c\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_c}\right)$$



ε_c cut-off Energie

z.B. $f(x) = \Theta(1-x)$ „harter cutoff"

$f(x) = e^{-x}$ „soft"

$\Rightarrow$ Damit $x = \varepsilon/\varepsilon_c$

$$U = U_0 + \alpha\varepsilon_c \int_0^\infty dx \, \frac{x^{\gamma+1}}{e^{\beta\varepsilon_c x} - 1} f_c(x)$$

Für tiefe Temperaturen $\beta\varepsilon_c \gg 1$

$$U = [y = \beta\varepsilon_c x] = U_0 + \alpha\varepsilon_c \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_c}\right)^{\gamma+2} \int_0^\infty dy \, \frac{y^{\gamma+1}}{e^{y}-1} \underbrace{f\left(\frac{y}{\beta\varepsilon_c}\right)}_{\to 1}$$

$$\to U_0 + \alpha\varepsilon_c \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_c}\right)^{\gamma+2} \underbrace{\int_0^\infty dy \, \frac{y^{\gamma+1}}{e^{y}-1}}_{\Gamma(\gamma+2)\,\zeta(\gamma+2)}$$

Wir benutzen
$$\int_0^\infty dx \frac{x^{\alpha-1}}{e^x-1} = \Gamma(\alpha)\zeta(\alpha) \qquad \mathrm{Re}(\alpha)>1$$

$$\Gamma(\alpha) \equiv \int_0^\infty dx\, e^{-x} x^{\alpha-1}$$

$$\zeta(\alpha) \equiv \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^\alpha}$$ Riemannsche Zetafkt.

Wir müssen $\gamma > -1$ haben $(\alpha = \gamma+2)$

$$\Rightarrow \quad C_V \approx \alpha k_B \varepsilon_c (\gamma+2)\Gamma(\gamma+2)\zeta(\gamma+2) \times \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_c}\right)^{\gamma+1}, \quad k_B T \ll \varepsilon_c$$

Debye: $\gamma = 2 \Rightarrow C_V \propto T^3$

T^3-Gesetz (Phononen $d=3$, tiefe T)