

VL

19.12.06

Harmonische Oszillatoren



kleine Schwingungen

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

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

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

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

aus T1) aus

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)} = \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln \left(e^{-\frac{1}{2}\beta \hbar\omega} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar\omega}} \right) \end{aligned}$$

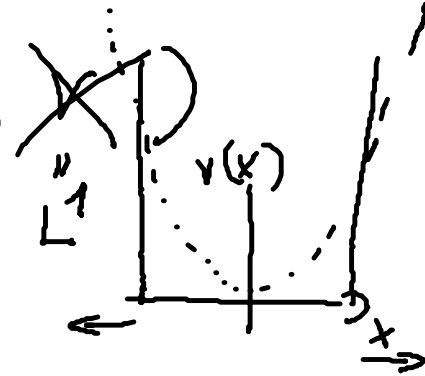
$$\begin{aligned} \uparrow \\ S &= 1 + x + x^2 + x^3 + \dots = 1 + x(1 + x + x^2 + \dots) \\ &= 1 + xS \end{aligned}$$

$$\Rightarrow S = \frac{1}{1-x}$$

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

Nun
GZ-Energie

hier $F = F(T, X)$



Wir führen jetzt eine andere
Beschreibung ein.

1 Teilchenzustandsdichte

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

eines Bosongases Spin $S=0$

$$\Rightarrow \Omega_{\text{bos}} = \beta^{-1} \int d\epsilon \nu_1(\epsilon) \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon - \mu)})$$
$$= \beta^{-1} \ln(1 - e^{-\beta(\hbar\omega - \mu)})$$

gk Potential \longleftrightarrow freie Energie
Legendre Transform

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

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

andere ab auch $F_{\text{osc}} = \frac{\hbar\omega}{2} + \Omega_{\text{bos}}$

\Rightarrow T1) des harmonischen Oszillators ist

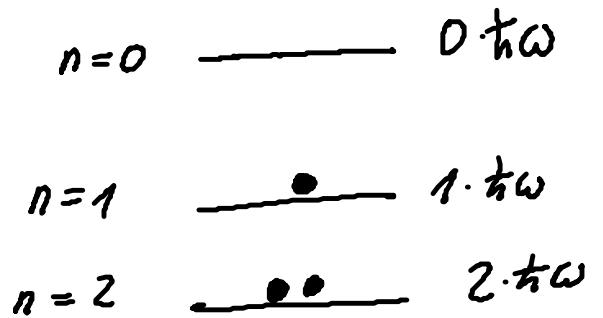
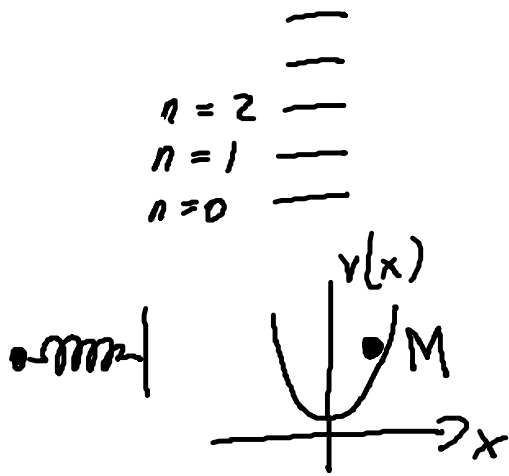
(bis auf konstante GZ Energie $\frac{\hbar\omega}{2}$) äquivalent

zur T1) eines Bosongases mit

$$\nu_1(\epsilon) = \delta(\epsilon - \hbar\omega), \text{ d.h. 1 Niveau}$$

Oszillator

Bosongas



$n=0$ Bosonen $\hat{=}$ GZ des Oszillators
 $n=1$ " $\hat{=}$ 1. angeregten Zustand des Osz.
 $n=5$ " : " 5 Phononen im System "

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

\Rightarrow Leiteroperatoren

$$\begin{aligned}
 a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle && \text{Erzeuger} \\
 a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle && \text{Vernichter}
 \end{aligned}$$

erfüllen

$$[a, a^\dagger] = 1$$

Bosonen heißen hier
Phononen

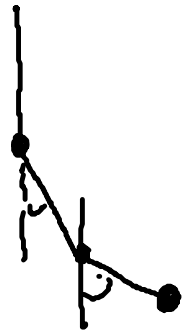
„bosonische Vertauschungsrelationen“

N harmonische Oszillatoren

N Massen



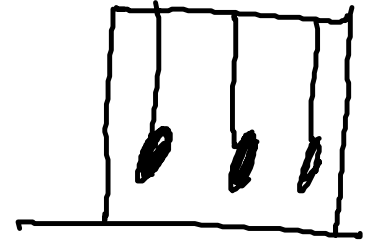
⋮



Kleine Schwingungen
um Ruhelage.

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

verallg. KO $\eta = (\eta_1 \dots \eta_f)$



T Matrix der
kin. Energie
V pot. Energie

Diagonalisierung:

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

$$\eta = Aq$$

$$\lambda = \text{diag}(\omega_1^2, \dots, \omega_f^2), \quad q = (q_1 \dots q_f)$$

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

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^f (\hat{p}_l^2 + \hat{q}_l^2 \omega_l^2), \quad \hat{p}_l = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l}$$

$N=2$: 2-atomiges Molekül 

$N>2$: stark geometrieabhängig

Definition: $\omega = \omega_l$ heißt Dispersionsrelation

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

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

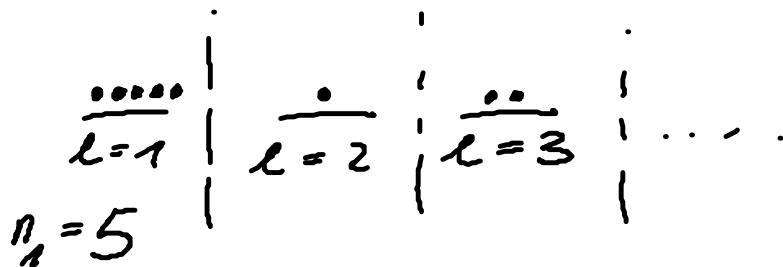
$$= \int d\varepsilon \underbrace{\nu_{osc}(\varepsilon)} \left[\frac{\varepsilon}{2} + \beta^{-1} \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) \right]$$

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

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

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

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

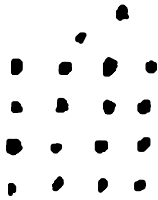


2) Nur line Bohrnsatz

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\text{Fock}} &= \prod_{l=1}^{\infty} \left(\mathcal{H}_l^{(0)} + \mathcal{H}_l^{(1)} + \mathcal{H}_l^{(2)} \dots \right) = \prod_{l=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_l^{(n)} \\
 &= \left(\prod_{l=1}^{\infty} \mathcal{H}_l \right)^{(0)} + \left(\prod_{l=1}^{\infty} \mathcal{H}_l \right)^{(1)} + \left(\prod_{l=1}^{\infty} \mathcal{H}_l \right)^{(2)} + \dots \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\prod_{l=1}^{\infty} \mathcal{H}_l \right)^{(n)}
 \end{aligned}$$

Beispiele für Phononen-Dispersionsrelationen

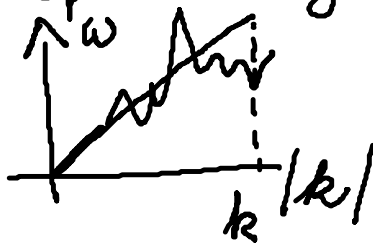
periodisches Gitter



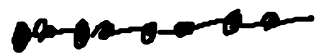
$$\omega = \omega_{\vec{k}, r} \quad \vec{k} \in \mathbb{R}^d \quad r = 1, 2, 3, \dots, n_r$$

n_r Dispersionszweige

→ Festkörpertheorie



akustischer
Zweig



$$\omega_{\vec{k}, r} = c_r |\vec{k}| \theta(k_D - |\vec{k}|) \quad \text{Stufen-fkt.}$$

$$\Rightarrow \nu_{\text{osc}}(\epsilon) \equiv \sum_{\vec{k}, r} \delta(\epsilon - \hbar c_r |\vec{k}|) \theta(k_D - |\vec{k}|)$$

c_r Schallgeschw.

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

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

Debye-Modell

$$\omega_D^r = c_r k_D$$

Debye-Frequenz

Spezifische Wärme:

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

$$S = - \frac{\partial F}{\partial T} = - \frac{\partial F}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} = \int d\epsilon \nu_{\text{osc}}(\epsilon) \left[-\ln(1 - e^{-\beta \epsilon}) + \frac{\beta \epsilon}{e^{\beta \epsilon} - 1} \right]$$

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

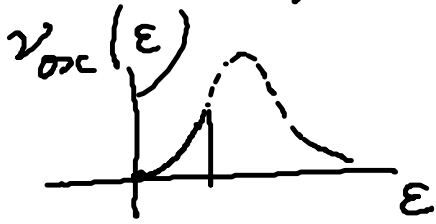
$$U_0 \equiv \int d\epsilon \nu_{\text{osc}}(\epsilon) \frac{\epsilon}{2} \quad \text{GZ-Beitrag}$$

Bose-Verteilung:

$$n_B(\epsilon) \equiv \frac{1}{e^{\beta \epsilon} - 1}$$

Allgemeines Modell für $\nu_{osc}(\epsilon)$

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



ϵ_c cut-off Energie

e.B. $f(x) = \theta(1-x)$

„harter cutoff“

$f(x) = e^{-x}$

„soft“

\Rightarrow Damit $x = \epsilon/\epsilon_c$

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

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

$$U = [y = \beta\epsilon_c x] = U_0 + d\epsilon_c \left(\frac{k_B T}{\epsilon_c}\right)^{\gamma+2} \int_0^\infty dy \frac{y^{\gamma+1}}{e^y - 1} f\left(\frac{y}{\beta\epsilon_c}\right)$$

$$\rightarrow U_0 + d\epsilon_c \left(\frac{k_B T}{\epsilon_c}\right)^{\gamma+2} \underbrace{\int_0^\infty dy \frac{y^{\gamma+1}}{e^y - 1}}_{\Gamma(\gamma+2) \zeta(\gamma+2)} \rightarrow 1$$

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

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

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

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

$$\Rightarrow C_V \approx d k_B \varepsilon_c (\gamma + 2) \Gamma(\gamma + 2) \zeta(\gamma + 2) \times$$

$$\times \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_c} \right)^{\gamma + 1} \quad , \quad k_B T \ll \varepsilon_c$$

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

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