

LÖSUNGSVORSCHLAG ZUM ÜBUNGSBLATT NR.9

Aufgabe 1

Wir betrachten eine Kette mit $2N$ Massen m , die durch Federn abwechselnd mit den Federkonstanten K und G gekoppelt sind. Im Prinzip handelt es sich dabei um das Modell eines eindimensionalen Kristallgitters mit zweiatomiger Basis. Durch Verschieben dieser Basis lässt sich das gesamte Gitter aufbauen. Die Auslenkung des ersten Atoms der i -ten Basis bezeichnen wir mit u_i und die Auslenkung des zweiten Atoms mit s_i , wobei i von 1 bis N laufen soll.

$$\mathcal{L}(u_i, s_i; \dot{u}_i, \dot{s}_i) = T - V = \frac{m}{2} \left(\sum_i (\dot{u}_i^2 + \dot{s}_i^2) \right) - \frac{K}{2} \sum_i (u_i - s_i)^2 - \frac{G}{2} \sum_i (u_{i+1} - s_i)^2. \quad (1)$$

Es gibt nur Beiträge, wenn der Index der Funktion dem Index der Funktion entspricht, nach der abgeleitet wird. Somit fällt ein Großteil der Summen beim Ableiten weg. Die Euler-Lagrange-Gleichungen folgen aus

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_n} = m \dot{u}_n, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{s}_n} = m \dot{s}_n, \quad (2a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_n} = K(u_n - s_n) + G(u_n - s_{n-1}), \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s_n} = -K(u_n - s_n) - G(u_{n+1} - s_n), \quad (2b)$$

zu (wobei wir bei der Ableitung nach u_n den Summationsindex verschoben haben):

$$m \ddot{u}_n + K(u_n - s_n) + G(u_n - s_{n-1}) = 0, \quad (3a)$$

$$m \ddot{s}_n - K(u_n - s_n) - G(u_{n+1} - s_n) = 0. \quad (3b)$$

Dabei handelt es sich nun um einen Satz von $2N$ Differentialgleichungen 2.Ordnung (für jedes Atom der Basis gibt es N Differentialgleichungen). Diese lösen wir mit dem Ansatz

$$u_n(t) = u \exp[i(kna - \omega t)], \quad s_n(t) = s \exp[i(kna - \omega t)]. \quad (4)$$

Wir nehmen periodische Randbedingungen an:

$$u_{n+N}(t) = u_n(t), \quad s_{n+N}(t) = s_n(t). \quad (5)$$

Im Prinzip beschreiben die periodischen Randbedingungen eine solche Kette, deren Enden miteinander zu einem Kreis verklebt sind. So entspricht die $N + 1$ Einheitszelle wieder der ersten usw. und damit ist die Auslenkung des ersten Atoms der n -ten Einheitszelle gleich der Auslenkung des ersten Atoms der $n + N$ -ten Einheitszelle und analog gilt das für das zweite Atom der Basis. Aus der ersten periodischen Randbedingung folgt dann durch direktes Einsetzen

$$u \exp[i(k(n + N)a - \omega t)] = u \exp[i(kna - \omega t)] \Rightarrow \exp(ikNa) = 1 \stackrel{!}{=} \exp(2\pi il), \quad l \in \mathbb{Z}. \quad (6)$$

Damit kommen wir sofort auf die Bedingung, dass k gequantelt ist:

$$k = \frac{2\pi}{a} \frac{l}{N}, \quad l \in \mathbb{Z}. \quad (7)$$

Diese Bedingung erhalten wir also zunächst. Fordern wir jetzt jedoch noch zusätzlich, dass die Lösung eindeutig sei, dann wird der Wertebereich von l (und damit auch k) drastisch eingeschränkt:

$$\boxed{k = \frac{2\pi}{a} \frac{l}{N}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, (N - 1)}. \quad (8)$$

Ist nämlich beispielsweise $l = N$, so gilt:

$$u(t) = u \exp[i(kna - \omega t)] = u \exp[i(2\pi n - \omega t)] = u \exp(-i\omega t), \quad (9)$$

was der Lösung für $n = 0$ entsprechen würde. Wir können das erlaubte Intervall auch symmetrisch wählen, also mit

$$m = -\frac{N}{2} + 1, -\frac{N}{2} + 2, \dots, -1, 0, 1, \dots, \frac{N}{2}, \quad (10)$$

und somit k auf den Bereich

$$\boxed{-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}}, \quad (11)$$

einschränken. Dabei handelt es sich um die erste Brillouinzone.

b.)

Gehen wir mit dem Ansatz (4) in den Satz von Differentialgleichungen ein, folgt hieraus:

$$-m\omega^2 u + K(u - s) + G(u - s \exp(-ika)) = 0, \quad (12a)$$

$$-m\omega^2 s - K(u - s) - G(u \exp(ika) - s) = 0. \quad (12b)$$

Wir haben mit dem Ansatz das Differentialgleichungssystem also in einen Satz von algebraischen Gleichungen bezüglich u und s überführt. In Matrixform geschrieben lauten diese beiden Gleichungen:

$$\begin{pmatrix} m/2\omega^2 - (K + G) & K + G \exp(-ika) \\ K + G \exp(ika) & m/2\omega^2 - (k + G) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Das Gleichungssystem besitzt auf jeden Fall die triviale Lösung $u = s = 0$, die jedoch physikalisch uninteressant ist. Damit das Gleichungssystem nichttriviale Lösungen besitzt, muss die Koeffizientendeterminante M verschwinden und dies führt auf:

$$\begin{aligned} \det(M) &= [m\omega^2 - (K + G)]^2 - (K^2 + KG \exp(ika) + KG \exp(-ika) + G^2) = \\ &= [m\omega^2 - (K + G)]^2 - (K^2 + 2KG \cos(ka) + G^2) \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (14)$$

Damit erhalten wir

$$|m\omega^2 - (K + G)| = \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)}, \quad (15)$$

und damit:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{m} \left\{ K + G \pm \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)} \right\}, \quad (16)$$

$$\boxed{\omega_+ = \sqrt{\frac{1}{m} \left\{ K + G + \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)} \right\}}}, \quad (17a)$$

$$\boxed{\omega_- = \sqrt{\frac{1}{m} \left\{ K + G - \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)} \right\}}}. \quad (17b)$$

Für die erste Lösung von ω^2 (mit dem Pluszeichen) gilt

$$\begin{pmatrix} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)} & K + G \exp(-ika) \\ K + G \exp(ika) & \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

also

$$u \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)} + (K + G \exp(-ika))s = 0, \quad (19)$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{s}{u} = -\frac{\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)}}{K + G \exp(-ika)} = -\frac{K + G \exp(ika)}{\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)}}}. \quad (20)$$

Für die zweite Lösung (mit dem Minuszeichen) gilt entsprechend:

$$\frac{s}{u} = \frac{\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)}}{K + G \exp(-ika)} = \frac{K + G \exp(ika)}{\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos(ka)}}. \quad (21)$$

Für kleine k benötigen wir

$$\cos(x) = 1 - \frac{1}{2}x^2 + \mathcal{O}(x^4), \quad \sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x + \mathcal{O}(x^2), \quad (22)$$

und damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2 &= \frac{1}{m} \left\{ K + G \pm \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG - KG(ka)^2} \right\} = \frac{1}{m} \left\{ (K + G) \pm \sqrt{(K + G)^2 - KG(ka)^2} \right\} = \\ &= \frac{1}{m} (K + G) \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{KG}{(K + G)^2} (ka)^2} \right\} = \frac{1}{m} (K + G) \left\{ 1 \pm \left(1 - \frac{KG}{2(K + G)^2} (ka)^2 \right) \right\}, \end{aligned} \quad (23)$$

also unter Vernachlässigung von Termen proportional zu a^2 :

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2}{m}} (K + G), \quad \omega_- = \sqrt{\frac{KG}{2(K + G)}} ka \equiv ck. \quad (24)$$

Weiterhin entwickeln wir die Verhältnisse s/u . Für ω_{\pm} gilt

$$\frac{s}{u} \approx \mp \frac{K + G}{(K + G) \left(1 - \frac{KG}{2(K + G)^2} (ka)^2 \right)} \approx \boxed{\mp 1}. \quad (25)$$

Fassen wir also zusammen:

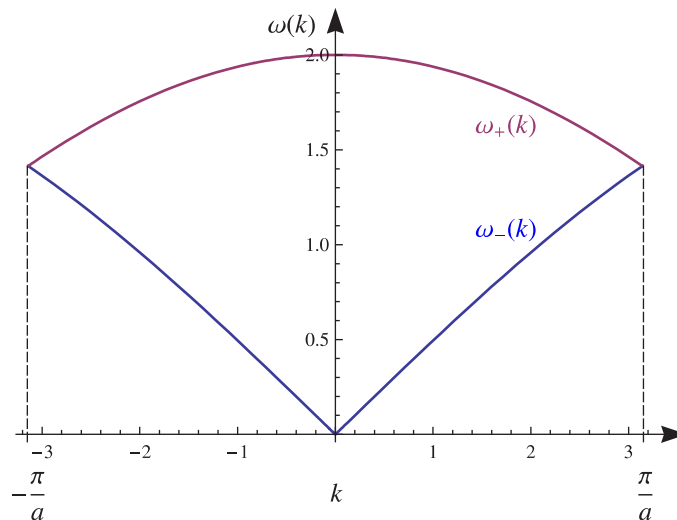
- 1.) Lösung ω_+ : $\omega_+(k) \approx \text{const.}$ für kleine k und $s/u = -1$:

$s/u = -1$ bedeutet, dass die Atome gegeneinander schwingen. Man bezeichnet solche Moden als optisch, weil diese für ein zeitlich änderndes Dipolmoment sorgen, sofern geladene Atome gegeneinander schwingen. Ein sich zeitlich änderndes Dipolmoment kann zur Aussendung von elektromagnetischen Wellen führen und im Falle von optischen Moden liegt die Anregungsfrequenz im Bereich des optisch sichtbaren Lichts.

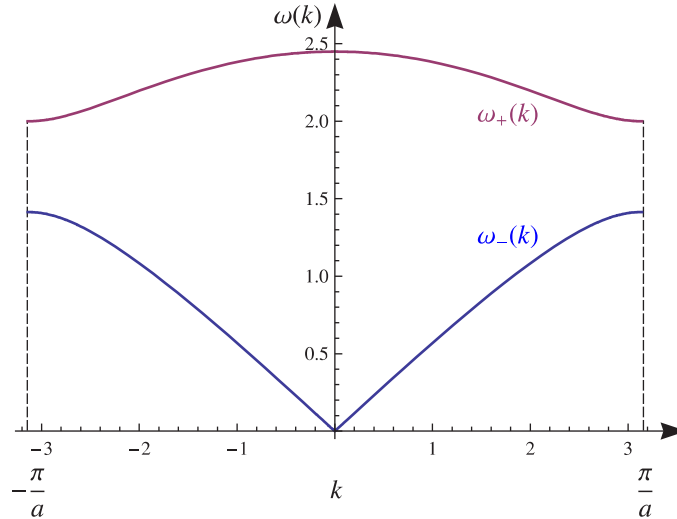
- 2.) Lösung ω_- : $\omega_-(k) \approx ck$ für kleine k und $s/u = 1$:

$s/u = 1$ bedeutet, dass die Atome miteinander schwingen. Im Wesentlichen sind optische Moden so etwas wie Schallwellen, die sich entlang der Kette ausbreiten.

Wir zeichnen nun die Dispersionsrelationen der beiden Moden:



Hier sind die Moden $\omega_+(k)$ und $\omega_-(k)$ innerhalb der ersten Brillouinzone gezeichnet und zwar für $G = K = 1$ und $a = 1$, also für gleiche Federkonstanten. Dann gibt es im Prinzip keine optische Mode. Diese ist dann nichts anderes als die akustische Mode, welche in die erste Brillouinzone zurückgefaltet wurde.



Für $K \neq G$ sind die optische und akustische Mode eindeutig erkennbar. Die akustische Mode verläuft proportional zu k für kleine k und die optische Mode verläuft konstant. An den Zonengrenzen bei $k = -\pi/a$ und $k = \pi/a$ flachen beide Moden ab und besitzen horizontale Tangenten. Horizontale Tangenten bedeutet eine verschwindende Gruppengeschwindigkeit $\partial\omega(k)/\partial k$. An der Zonengrenze entstehen nämlich durch Bragg-Reflexion stehende Wellen mit verschwindender Gruppengeschwindigkeit. Diese können sich nicht entlang der Kette ausbreiten.

Aufgabe 2

a.)

Wir haben in Aufgabe (1) festgestellt, dass die Kette unterschiedliche Schwingungsmoden hat, nämlich optische (+) und akustische (-). Außerdem hängt die Dispersionsrelation noch von der Wellenzahl k ab. Wir bezeichnen eine einzelne Mode mit $\lambda \equiv (k, \pm)$. Jede einzelne solche Mode soll durch einen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$H_\lambda = \hbar\omega_\lambda \left(a_\lambda^\dagger a_\lambda + \frac{1}{2} \right), \quad H_\lambda |n_\lambda\rangle = \hbar\omega_\lambda \left(n_\lambda + \frac{1}{2} \right) |n_\lambda\rangle, \quad (26)$$

beschrieben werden, wobei n_λ die Besetzungszahl eines Modus und $|n_\lambda\rangle$ der zugehörige Eigenzustand ist. Harmonische Oszillatoren verhalten sich wie Bosonen und damit kann die Besetzungszahl beliebige Werte $\in \mathbb{N}_0$ annehmen. Ein Mikrozustand $\{\alpha\}$ ist also wieder durch die Besetzungszahlen der einzelnen Moden charakterisiert: $\{\alpha\} = \{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\}$ mit $n_i \in \mathbb{N}_0$. Bei der kanonischen Zustandssumme summieren wir über alle diese Besetzungszahlen und zusätzlich ist die Gesamtenergie im Exponenten zu berücksichtigen, bei der über alle Besetzungszahlen n_λ eines Mikrozustandes zu summieren ist:

$$E_\alpha = \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda \left(n_\lambda + \frac{1}{2} \right). \quad (27)$$

Damit gilt dann

$$\begin{aligned} Z_K &= \sum_{\{\alpha\}} \exp(-\beta E_\alpha) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \sum_{n_i=0}^{\infty} \dots \exp \left\{ -\beta \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda \left(n_\lambda + \frac{1}{2} \right) \right\} = \\ &= \prod_\lambda \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} \exp \left\{ -\beta \hbar\omega_\lambda \left(n_\lambda + \frac{1}{2} \right) \right\} = \prod_\lambda \left\{ \frac{\exp(-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_\lambda)}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_\lambda)} \right\}. \end{aligned} \quad (28)$$

Wie man die innere Energie aus der Zustandssumme bekommt, wissen wir bereits (Blatt 5):

$$\begin{aligned}
 U &= -\frac{1}{Z_K} \frac{\partial Z_K}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln(Z_K)}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\lambda} \left\{ -\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_{\lambda} - \ln [1 - \exp(-\beta \hbar \omega_{\lambda})] \right\} = \\
 &= \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} \left[\frac{1}{2} + \frac{\exp(-\beta \hbar \omega_{\lambda})}{1 + \exp(-\beta \hbar \omega_{\lambda})} \right] = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} \left[\frac{1}{2} + g(\hbar \omega_{\lambda}) \right]. \quad (29)
 \end{aligned}$$

a.)

Für hohe Temperaturen $k_B T \gg \hbar \omega_{\lambda}$ können wir die Exponentialfunktion in der Bose-Einstein-Verteilung entwickeln:

$$\exp(\beta \hbar \omega_{\lambda}) = 1 + \beta \hbar \omega_{\lambda} + \mathcal{O}(\beta \hbar \omega_{\lambda})^2. \quad (30)$$

Damit gilt dann

$$g(\hbar \omega_{\lambda}) = \frac{1}{1 + \beta \hbar \omega_{\lambda} + \dots - 1} \approx \frac{k_B T}{\hbar \omega_{\lambda}}, \quad (31)$$

und somit ergibt sich:

$$U = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} \left(\frac{1}{2} + \frac{k_B T}{\hbar \omega_{\lambda}} \right) = \sum_{\lambda} k_B T \left(1 + \frac{\hbar \omega_{\lambda}}{2 k_B T} \right) = 2N k_B T + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda}. \quad (32)$$

Der zweite Faktor ist die Summe der Grundzustandsenergien aller harmonischen Oszillatoren und diese kann für hohe Temperaturen gegenüber dem ersten Term vernachlässigt werden. Der erste Term spiegelt den Gleichverteilungssatz wider. Nach diesem gilt nämlich, dass jeder Freiheitsgrad, der in der Lagrangefunktion quadratisch auftaucht, $1/2 k_B T$ zur inneren Energie des Systems beiträgt. In der Lagrangefunktion des harmonischen Oszillators taucht sowohl der Ort x (durch die potentielle Energie) als auch der Impuls p (durch die kinetische Energie) quadratisch auf; deswegen sollte es pro harmonischen Oszillator einen Beitrag von $k_B T$ geben. Da die lineare Kette, die wir in Aufgabe (1) betrachtet haben, aus $2N$ Atomen besteht, ergibt sich die gesamte innere Energie von $2N k_B T$ und das ist gerade der führende Term für hohe Temperaturen! Dann gilt ebenso

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = \boxed{2N k_B}, \quad (33)$$

also das Dulong-Petitsche Gesetz. Allgemein lautet dieses übrigens $C_V = d N r k_B$, wobei d die Raumdimension, N die Anzahl der Einheitszellen und r die Anzahl der Atome pro Einheitszellen ist.

b.)

Jetzt wollen wir den Limes kleiner Temperaturen betrachten. Man könnte nun zunächst gutgläubig vermuten, dass eine Entwicklung nach dem Parameter $k_B T / (\hbar \omega_{\lambda})$ sinnvoll ist. Das ist auch richtig, sofern man nur optische Phononen betrachtet, weil diese aufgrund ihrer Energielücke bei niedrigen Temperaturen nicht angeregt werden. Bei akustischen Phononen ist die Situation jedoch anders. Diese besitzen keine Energielücke und die Dispersionsrelation verläuft linear zu k für kleine Werte von k . Damit gibt es auch bei sehr niedrigen Temperaturen immer akustische Phononen und für diese gilt dann $\hbar \omega_{\lambda} \approx \hbar c k < k_B T$ für noch so kleine Temperatur. Wir führen deshalb keine Entwicklung durch, sondern begnügen uns mit der Näherung $\omega_{\lambda} = c k$ für die akustischen Phononen. Für makroskopische Systeme mit großem Volumen sind die k -Werte im Wesentlichen kontinuierlich und wir können die Summe wieder durch ein Integral ersetzen. Außerdem verwenden wir die Einschränkung $-\pi/a < k \leq \pi/a$, was auch aus Aufgabe (1) folgte:

$$\begin{aligned}
 U &= \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} \left(\frac{1}{2} + g(\hbar \omega_{\lambda}) \right) = \sum_k \hbar c k \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\beta \hbar c k) - 1} \right) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \hbar c k \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\beta \hbar c k) - 1} \right) = \\
 &= \frac{L}{4a^2} \hbar c \pi + \hbar c \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{k}{\exp(\beta \hbar c k) - 1} \stackrel{\beta \hbar c k = x}{=} \frac{L}{4a^2} \hbar c \pi + \frac{L}{2\pi} \frac{(k_B T)^2}{\hbar c} \cdot 2 \int_0^{\pi \hbar c / (a k_B T)} dx \frac{x}{\exp(x) - 1}. \quad (34)
 \end{aligned}$$

Die obere Grenze des Integrals wird für kleine Temperaturen sehr groß und wir können diese auf Unendlich setzen. Verwenden wir außerdem $L = Na$, ergibt sich weiter mit dem angegebenen Integral

$$U = \frac{Na}{\pi} \frac{(k_B T)^2}{\hbar c} \int_0^\infty dx \frac{x}{\exp(x) - 1} = \boxed{\frac{Na\pi}{6} \frac{(k_B T)^2}{\hbar c}}. \quad (35)$$

Daraus können wir die spezifische Wärme folgen zu

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = \boxed{\frac{Na\pi k_B^2}{3\hbar c} T}. \quad (36)$$

c.)

Im Einsteinmodell gilt $\omega_\lambda = \omega_0$ für jede einzelne Mode und damit können wir die Summation über alle $2N$ Moden direkt ausführen. Dann ergibt sich für die innere Energie:

$$U = U_0 + \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda g(\hbar\omega_\lambda) = U_0 + \sum_\lambda \frac{\hbar\omega_0}{\exp(\beta\hbar\omega_0) - 1} = U_0 + 2N \frac{\hbar\omega_0}{\exp(\beta\hbar\omega_0) - 1}. \quad (37)$$

Dieses Ergebnis erhalten wir ebenso, wenn wir anstelle der Summe das Integral über k berechnen, wobei das Ganze sowohl für die optische als auch für die akustische Mode gemacht wird, was zu einem Faktor 2 führt:

$$U = U_0 + \frac{L}{2\pi} \cdot 2 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{\hbar\omega_0}{\exp(\beta\hbar\omega_0) - 1} = U_0 + \frac{L}{a} \frac{\hbar\omega_0}{\exp(\beta\hbar\omega_0) - 1} = U_0 + 2N \frac{\hbar\omega_0}{\exp(\beta\hbar\omega_0) - 1}. \quad (38)$$

Die spezifische Wärme folgt durch Ableiten nach der Temperatur:

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = 2Nk_B \frac{(\hbar\omega_0)^2}{(k_B T)^2} \frac{\exp(\beta\hbar\omega_0)}{[\exp(\beta\hbar\omega_0) - 1]^2}. \quad (39)$$

Führen wir nun noch die Einstein-Temperatur über $k_B\theta_E = \hbar\omega_0$ ein, können wir das Ergebnis in der Form

$$C_V = 2Nk_B \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\theta_E}{T}\right)}{[\exp\left(\frac{\theta_E}{T}\right) - 1]^2}, \quad (40)$$

schreiben. Schauen wir uns nun noch verschiedene Grenzfälle an:

1.) Hohe Temperaturen $T \gg \theta_E$:

Dann lässt sich die Exponentialfunktion entwickeln

$$\exp\left(\frac{\theta_E}{T}\right) = 1 + \frac{\theta_E}{T} + \mathcal{O}\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2, \quad (41)$$

und wir erhalten:

$$U = U_0 + 2N \frac{k_B\theta_E}{\exp\left(\frac{\theta_E}{T}\right) - 1} \approx U_0 + 2N \frac{k_B\theta_E}{1 + \frac{\theta_E}{T} - 1} = \boxed{U_0 + 2Nk_B T}, \Rightarrow \boxed{C_V = 2Nk_B}. \quad (42)$$

2.) Tiefe Temperaturen $T \ll \theta_E$:

Dann wird das Argument der Exponentialfunktion und die Exponentialfunktion selbst groß und es gilt:

$$U = U_0 + 2N \frac{k_B\theta_E}{\exp\left(\frac{\theta_E}{T}\right) - 1} \approx \boxed{U_0 + 2Nk_B\theta_E \exp\left(-\frac{\theta_E}{T}\right)}. \quad (43)$$

Dann folgt die Wärmekapazität entweder durch Näherung des exakten Ausdrucks oder durch Ableiten von (43) nach der Temperatur:

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = 2Nk_B\theta_E \cdot \left(\frac{\theta_E}{T^2}\right) \exp\left(-\frac{\theta_E}{T}\right) = \boxed{2Nk_B \left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\theta_E}{T}\right)}. \quad (44)$$

Wir erkennen, dass sowohl die innere Energie U als auch die Wärmekapazität C_V im Falle kleiner Temperaturen exponentiell unterdrückt sind. Ein solches Verhalten ist charakteristisch für Anregungen mit Energielücke, in diesem Falle akustische Phononen. (Schon klassisch, also nach der Boltzmann-Statistik, ist die Wahrscheinlichkeit für Systemzustände der Energie E exponentiell unterdrückt nach $\exp(-E/(k_B T))$.)

d.)

Bis jetzt haben wir Bosegase betrachtet, in denen die Teilchenzahl erhalten war (beispielsweise ${}^4_2\text{He}$ und ${}^7_3\text{Li}$). Helium- und Lithiumatome vernichten und erzeugen sich nicht einfach so. Wenn wir das System als großkanonisch betrachten, also gekoppelt an ein Wärmebad und ein Teilchenreservoir, kann es sich Teilchen aus dem Reservoir holen und diese an das Reservoir abgeben. Charakteristisch ist jedoch, dass es das Gas entweder als positiv oder als negativ empfindet, Teilchen aus dem Reservoir aufzunehmen bzw. ins Reservoir abzugeben; in andere Worten formuliert heißt das, dass es dem Gas Energie bringt oder kostet. Bei Phononen (und analog auch Photonen) ist das Ganze nicht so. Phononen sind keine „richtigen“ Teilchen, sondern nur Quasiteilchen, die wir eingeführt haben, um Oszillatormoden $\lambda = (k, \pm)$ zu besetzen. Auch die Anzahl von Photonen in einem Photongas ist nicht erhalten, können nämlich Photonen immer wieder absorbiert und emittiert werden (beispielsweise an den Gefäßwänden).

Das bedeutet, dass es einem Phonongas (bzw. Photongas) weder Energie bringt noch kostet, Teilchen aus dem Reservoir aufzunehmen bzw. abzugeben. (Natürlich gilt weiterhin Energieerhaltung, aber die Energie selbst kommt dann nicht aus dem Gas, sondern aus dem angekoppelten Wärmebad). Dies bedeutet nun, dass das chemische Potential für das Phonongas (wie auch das Photongas) verschwinden muss: $\mu \equiv 0$. Um es nochmals zu betonen: Die Bedingung $\mu = 0$ stecken wir hier rein aufgrund der phänomenologischen Beobachtungen darüber, wie sich die Gase verhalten. Sie folgt erst einmal nicht aus der Theorie selbst.

Wenn aber die Teilchenzahl nicht erhalten ist, dann wird auch keine Bose-Einstein-Kondensation stattfinden. Je kleiner man die Temperatur macht, umso weniger Phononen werden angeregt, bis in der Nähe des absoluten Nullpunkts der Temperatur schließlich alle Phononen verschwinden. Es bildet sich also überhaupt kein Kondensat!

e.)

Die Rechnung funktioniert analog zu Aufgabenteil (b). Es ist über alle Moden λ zu summieren, wobei $\lambda = (k, s)$ und s die akustischen Phononen sind. Es ist also über s und über den Wellenvektor \mathbf{k} zu summieren, wobei die Summe über s zu einem zusätzlichen Faktor 3 führt, weil es pro Raumdimension einen akustischen Phononenzweig gibt. Die Summe über k ersetzen wir erneut durch ein Integral über die erste Brillouinzone und erhalten:

$$U - U_0 = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_s \int_{\mathbf{k} \in 1.\text{BZ}} d^3k \frac{\hbar c |\mathbf{k}|}{\exp(\beta \hbar c |\mathbf{k}|) - 1} = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 3 \int_{\mathbf{k} \in 1.\text{BZ}} d^3k \frac{\hbar c |\mathbf{k}|}{\exp(\beta \hbar c |\mathbf{k}|) - 1}. \quad (45)$$

Da die Dispersionsrelation isotrop ist, können wir Kugelkoordinaten verwenden, um das Integral auszuwerten:

$$\begin{aligned} U - U_0 &= \frac{3V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int_0^\infty dk \frac{\hbar c k^3}{\exp(\beta \hbar c k) - 1} \stackrel{\beta \hbar c k = x}{=} \frac{3V}{2\pi^2} \frac{1}{\beta^4 (\hbar c)^3} \int_0^\infty dx \frac{x^3}{\exp(x) - 1} = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3} \cdot \frac{\pi^4}{15} = \\ &= \boxed{\frac{\pi^2}{10} \frac{V}{(\hbar c)^3} (k_B T)^4}. \end{aligned} \quad (46)$$

Damit erhalten wir die Wärmekapazität:

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = \boxed{\frac{2\pi^2}{5} V k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3}. \quad (47)$$

Für akustische Phononen gilt ganz allgemein $C_V \sim T^d$, wobei d die Raumdimension ist.