Gerhard Kahl & Florian Libisch

STATISTISCHE PHYSIK 1 (VU – 136.020)

7. Tutoriumstermin (10.6.2022)

T20. Wärmekapazität einer dünnen Schicht: ein zweidimensionaler Festkörper (eingebettet in drei Dimensionen) wie zum Beispiel eine Graphen-Membran hat für kleine Phononenenergien zwei akustische Moden (Schwingungen in der Ebene) und eine Mode mit Dispersion $\omega = \alpha q^2$ (Schwingung senkrecht zur Ebene).

(a) Berechnen Sie die phononische Zustandsdichte $g(\omega)$ analog zum Debye-Modell (Sie müssen die Gleichung für ω_D nicht auflösen).

(b) Berechnen Sie die Wärmekapazität im Limes kleiner und hoher Temperaturen.

Lösung:

Im Vergleich zum auf den Folien gerechneten Debye-Modell haben die akustischen Moden nur zwei Dimensionen zur Verfügung und es gibt eine zusätzlich, unabhängige Mode mit der Dispersionrelation $\omega = \alpha q^2$. Daraus erhalten wir

$$\begin{aligned}
g(\omega) &= \sum_{k,p} \delta(\omega - \omega_{k,p}) \\
&= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^2} d^2k \left[\delta(\omega - c_l k) + \delta(\omega - c_t k) + \delta(\omega - \alpha k^2)\right] \\
&\overset{(*)}{=} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 2\pi \int_0^\infty dk\, k \left[\frac{1}{c_l}\,\delta\left(k - \frac{\omega}{c_l}\right) + \frac{1}{c_t}\,\delta\left(k - \frac{\omega}{c_t}\right)\right. \\
&\qquad\qquad \left. + \frac{1}{2\alpha|k|}\delta\left(k - \sqrt{\frac{\omega}{\alpha}}\right)\right] \\
&= \frac{L^2}{2\pi}\left[\left(\frac{1}{c_l^2} + \frac{1}{c_t^2}\right)\omega + \frac{1}{2\alpha}\right] \\
&=: a_1\omega + a_0
\end{aligned}$$

wobei wir für $(*)$ die Formel

$$\delta(f(x)) = \sum_{\substack{x' \in \mathbb{R} \\ f(x')=0}} \frac{1}{|f'(x')|}\delta(x - x')$$

für Funktionen f (ohne mehrfache Nullstellen) verwendet haben. Daraus ergibt sich weiter analog zu den Folien

$$
\begin{aligned}
E &= E_0 + \int_0^\infty d\omega\, g(\omega) \frac{\hbar\omega}{\exp(\beta\hbar\omega)-1} \\
&= E_0 + a_1 \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \frac{\hbar\omega^2}{\exp(\beta\hbar\omega)-1} + a_0 \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \frac{\hbar\omega}{\exp(\beta\hbar\omega)-1} \\
&= E_0 + \frac{a_1\omega_{\max}^2}{3\beta} \widetilde{D}_2(\beta\hbar\omega_{\max}) + \frac{a_0\omega_{\max}}{\beta} \widetilde{D}_1(\beta\hbar\omega_{\max}),
\end{aligned}
$$

wobei sich $\omega_{\max}$ aus

$$
3N \stackrel{!}{=} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega\, g(\omega)
$$

ergibt und wir

$$
\widetilde{D}_\nu(x) := \frac{\nu}{x^\nu} \int_0^x dx' \frac{x'^\nu}{\exp(x')-1}
$$

gesetzt haben. Für $x \gg 1$ gilt

$$
\widetilde{D}_\nu(x) \approx \frac{\nu}{x^\nu} \int_0^\infty dx' \frac{x'^\nu}{\exp(x')-1} \stackrel{T18}{=} \frac{\nu\Gamma(\nu+1)}{x^\nu} g_{\nu+1}(1) = \frac{\nu\Gamma(\nu+1)}{x^\nu} \underbrace{\sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^{\nu+1}}}_{:=\zeta(\nu+1)}
$$

wobei $\zeta(\nu+1)$ hier einfach als Konstante zu verstehen ist. Für $x \ll 1$ lässt sich die Exponentialfunktion durch $\exp(x') \approx 1 + x'$ approximieren und wir erhalten

$$
\widetilde{D}_\nu(x) = \frac{\nu}{x^\nu} \int_0^x dx'\, x'^{\nu-1} = 1.
$$

Unter Verwendung dieser Näherungen gilt für $k_B T \ll \hbar\omega$

$$
E \approx E_0 + \frac{4a_1\zeta(3)k_B^3}{3\hbar^2} T^3 + \frac{a_0\zeta(2)k_B^2}{\hbar} T^2
$$

$$
\begin{aligned}
C_V &\approx \frac{4a_1\zeta(3)k_B^3}{\hbar^2} T^2 + \frac{2a_0\zeta(2)k_B^2}{\hbar} T \\
&= \frac{L^2}{2\pi} \left(\frac{1}{c_l^2} + \frac{1}{c_t^2} \right) \frac{4\zeta(3)k_B^3}{\hbar^2} T^2 + \frac{L^2}{2\pi} \frac{\zeta(2)k_B^2}{\alpha\hbar} T
\end{aligned}
$$

und für $k_B T \gg \hbar\omega$

$$
E \approx E_0 + \frac{a_1\omega_{\max}^2 k_B}{3} T + a_0\omega_{\max} k_B T
$$

$$
\begin{aligned}
C_V &\approx \frac{a_1\omega_{\max}^2 k_B}{3} + a_0\omega_{\max} k_B \\
&= \frac{L^2}{2\pi} k_B \left[\left(\frac{1}{c_l^2} + \frac{1}{c_t^2} \right) \frac{\omega_{\max}^2}{3} + \frac{\omega_{\max}}{2\alpha} \right]
\end{aligned}
$$

T21. Betrachten Sie ein ideales Bosegas des Ruhemasse Null in drei Dimensionen,

$$\varepsilon(\vec{k}) = \hbar c \left|\vec{k}\right|.$$

(a) Berechnen Sie den Druck P, die Teilchendichte $n = N/V$ und die innere Energie E als Funktionen von T, V und z.

(b) Bestimmen Sie die kritische Temperatur und die kritische Dichte der Bose-Einstein Kondensation.

(c) Bestimmen Sie die Wärmekapazität des Bosegases in der Nähe von T_C (sowohl kleiner als auch größer).

(d) Bestimmen Sie im Kondensationsgebiet ($z \approx 1$) die Zahl N_0 der Bosonen im Grundzustand als Funktion der Temperatur.

(e) Bestimmen Sie die Phasengrenzkurve $P_C = f(n_C)$ des P-(1/n) Diagramms, und skizzieren Sie ein paar Isothermen.

Lösung:

(a) Aus dem Beispiel T17 aus dem 6. Tutorium wissen wir, dass die totalen Anzahl der möglichen Zustände in einer Box mit dem Volumen V mit folgender Formel gegeben ist:

$$N = \frac{4\pi k^3}{3}\frac{V}{\pi^3}\frac{1}{8} \tag{1}$$

Die Dispersionsrelation ist gegeben mit $E = \hbar c k$, wobei k der Betrag des Vektors ist.
Mit $D(E) = \frac{dN}{dk}\frac{dk}{dE}$ folgt daraus:

$$D(E) = \frac{VE^2}{2\pi^2(\hbar c)^3} \tag{2}$$

$$\hat{D}(E) = \frac{VE^3}{6\pi^2(\hbar c)^3} = \frac{DE}{3} \tag{3}$$

Aus $J = -PV$ kann dann der Druck P berechnet werden:

$$\begin{aligned} P = 1/V \int d\epsilon \hat{D}(\epsilon) f_{BE}(\epsilon) - \frac{k_B T}{V} ln(1-z) = \\ = \int d\epsilon \frac{\epsilon^3}{6\pi^2(\hbar c)^3(z^{-1}e^{\beta\epsilon}-1)} - \frac{k_B T}{V} ln(1-z) = \\ = \frac{(k_B T)^4 \Gamma(4) g_4(z))}{6\pi^2(\hbar c)^3} - \frac{k_B T}{V} ln(1-z) = \\ = \frac{(k_B T)^4 g_4(z))}{\pi^2(\hbar c)^3} - \frac{k_B T}{V} ln(1-z) \end{aligned} \tag{4}$$

Aus $N = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = V\frac{\partial P}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \mu}$ kann die Teilchendichte $n = N/V$ berechnet wer den:

$$
\begin{aligned}
n &= \left(\frac{(k_BT)^4 g_3(z))}{z\pi^2(\hbar c)^3} + \frac{k_BT}{V(1-z)}\right)\frac{z}{k_bT} \\
n &= \frac{(k_BT)^3 g_3(z))}{\pi^2(\hbar c)^3} + \frac{z}{V(1-z)}
\end{aligned} \tag{5}
$$

Und E kann mit $E = \int d\epsilon D(\epsilon) f_{BE}(\epsilon)\epsilon$ berechnet werden:

$$
\begin{aligned}
E = \int d\epsilon D(\epsilon) f_{BE}(\epsilon)\epsilon &= 3\int d\epsilon \hat{D}(\epsilon) f_{BE}(\epsilon) \\
E &= \frac{3V(k_BT)^4 g_4(z))}{\pi^2(\hbar c)^3}
\end{aligned} \tag{6}
$$

(b) Für die kritische Dichte können wir n folgend anschreiben: $n = \frac{(k_BT)^3 g_3(z))}{\pi^2(\hbar c)^3} - \frac{z}{V(1-z)} = n' + n_0$. Und aus der Definition der kritischen Dichte diese dann bestimmen (folgt aus thermodynamischen Limes, bei z = 1):

$$
n_c = n'(T, z=1) = \frac{(k_BT)^3 g_3(1))}{\pi^2(\hbar c)^3} = \frac{(k_BT)^3 \zeta(3)}{\pi^2(\hbar c)^3} \tag{7}
$$

Und T_c ist dann:

$$
T_c = n'(T, z=1) = \frac{\hbar c}{k_B}\left(\frac{n\pi^2}{\zeta(3)}\right)^{1/3} \tag{8}
$$

(c) Die Wärmekapazität berechnet sich aus $c_V = (\frac{\partial E}{\partial T})_{N,V}$.
Für $T > T_c$:

$$
c_V = \frac{3Vk_B^4}{\pi^2(\hbar c)^3}\left(4T^3 g_4(z) + T^4 g_3(z)/z\frac{\partial z}{\partial T}\right) \tag{9}
$$

Für $1/z\frac{\partial z}{\partial T}$ können wir wieder die gleichen Überlegungen wie bei dem Beispiel T19 machen:

$$
(\partial_T N)_{N,V} = 0 => 3T^2 g_3(z) + T^4 g_2(z) 1/z\frac{\partial z}{\partial T} \tag{10}
$$

$$
1/z\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{3g_3(z)}{Tg_2(z)} \tag{11}
$$

Wenn jetzt alles in c_V eingesetzt wird bekommen man:

$$
c_V = Nk_B\left(\frac{12g_4(z)}{g_3(z)} - \frac{9g_3(z)}{g_2(z)}\right) \tag{12}
$$

Für $T < T_c$ wird $g_4(z)$ zu $\zeta(4)$, weil $z = 1$ wird.

$$
c_V = \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{3V(k_BT)^4\zeta(4)}{\pi^2(\hbar c)^3}\right) = \frac{12Vk_B^4T^3\zeta(4)}{\pi^2(\hbar c)^3} \tag{13}
$$

(d) Im Kondesationgebiet kann können die Relation aus Punkt (b) verwendet werden um n umzuschreiben:

$$n = n' + n_0 = n(\frac{T}{T_c})^3 + n_0 => N_0 = N(1 - (\frac{T}{T_c})^3) \tag{14}$$

(e) Im thermodynamischen Limit von $V- > inf$ wird P zu:

$$P = \frac{(k_B T)^4 g_4(z))}{\pi^2 (\hbar c)^3} \tag{15}$$

Die Phasengrenzkurve P_c wird aus $P_c = P(T, z = 1)$ bestimmt. Mit der Relation für die kritische Dichte n_c aus Punkt (b) folgt daraus:

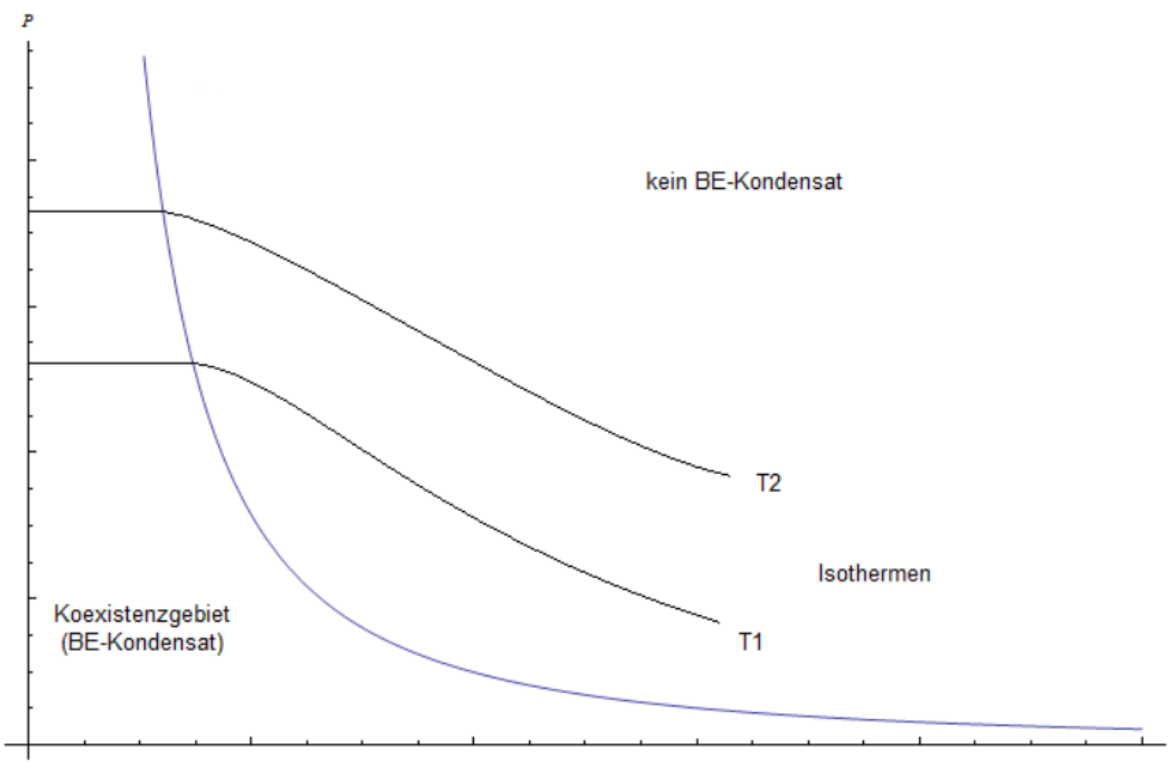
$$P_c = \frac{(k_B T)^4 g_4(1))}{\pi^2 (\hbar c)^3} = \frac{\hbar c \zeta(4)}{\zeta(3)^{4/3}} \pi^{2/3} (n_c)^{4/3} \tag{16}$$

Für $n < n_c$ ist der Druck konstant:

$$P = \frac{\hbar c \zeta(4)}{\zeta(3)^{4/3}} \pi^{2/3} (n_c)^{4/3} \tag{17}$$

und für $n > n_c$ ist der Druck proportional zu den $g(z)$-Funktionen und n:

$$P = \frac{g_4(z)}{g_3(z)} k_B T n \tag{18}$$



T22. Betrachten Sie eine Plattenkondensator bestehend aus einer Graphene-Schicht, einem isolierenden Trägersubstrat mit Dielektrizitätskonstante ε und einer metallischen Leiterplatte. Die Kapazität pro Flächeneinheit der Anordnung sei η. Die Dispersionsrelation der Elektronen in Graphene ist um die Fermi-Energie näherungsweise durch $\epsilon = \hbar v_F k$ gegeben.

- Berechnen Sie die Fermi-Energie als Funktion der am Kondensator angelegten Spannung U für sehr kalte Temperaturen (Nähern Sie die Verteilungsfunktion durch eine Stufenfunktion).

Um die Fermi-Energie zu berechnen, verwenden wir, dass im Kondensator gilt:

$$\begin{aligned}
\eta U = Q = Ne &= e\int_0^\infty \mathcal{D}(\varepsilon) f_{\mathrm{FD}}(\varepsilon) d\varepsilon \\
&\approx e\int_0^\infty \mathcal{D}(\varepsilon)\Theta(E_f - \varepsilon) d\varepsilon \\
&= e\int_0^{E_F} \mathcal{D}(\varepsilon) d\varepsilon,
\end{aligned}$$

wobei wir die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion für kleine Temperaturen als Stufenfunktion angenähert haben. Für die Rechnung benötigen wir die Zustandsdichte, welche aus der gegebenen Dispersionsrelation

$$\varepsilon = \hbar v_F k$$

resultiert. Die auf die Fläche A normierte Zustandsdichte ist gegeben über

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(\varepsilon) &= \frac{1}{A}\sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \\
&= \frac{1}{A}\frac{A}{(2\pi)^2}\cdot 2\int_0^\infty \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) 2\pi k dk \\
&= \frac{1}{\hbar^2 v_F^2 \pi}\int_0^\infty \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)\varepsilon_k d\varepsilon_k \\
&= \frac{\varepsilon}{\hbar^2 v_F^2 \pi}
\end{aligned}$$

Hierbei haben wir eine zweifache innere Entartung aufgrund der Spins berücksichtigt. Nun können wir auf diese Art das Integral in der obigen Formel auswerten:

$$\begin{aligned}
\frac{\eta U}{e} &= \int_0^{E_F} \mathcal{D}(\varepsilon) d\varepsilon \\
&= \frac{E_F^2}{2\hbar^2 v_F^2 \pi} \\
\Rightarrow E_F &= \sqrt{\frac{2\hbar^2 v_F^2 \pi \eta U}{e}}
\end{aligned}$$

Zu kreuzen: 20a, 20b; 21a, 21b, 21c, 21d, 21e, 22