

Übungen zu „Theorie ungeordneter Systeme“

Prof. Walter Schirmacher, WS 2009/10

Blatt 6

1) Bewegungsgleichung des elastischen Mediums

Leiten Sie aus der Lagrangedichte des elastischen Mediums

$$\mathcal{L}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} \rho \sum_{i=1}^3 (\dot{u}_i(\vec{r}, t))^2 - \frac{\lambda}{2} \left(\sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ii}(\vec{r}, t) \right)^2 - \mu \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij}(\vec{r}, t) \varepsilon_{ij}(\vec{r}, t)$$

mit Hilfe der Euler-Lagrange-Gleichungen die Bewegungsgleichungen für $u_i(\vec{r}, t)$ her. $\varepsilon_{ij}(\vec{r}, t)$ ist dabei der Dehnungstensor

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} (\partial_i u_j(\vec{r}, t) + \partial_j u_i(\vec{r}, t)).$$

2) 2-site CPA für „skalare Schwingungen“

Wir betrachten folgende Bewegungsgleichung für „skalare Auslenkungen“ $u_i(t)$ auf einem einfachkubischen Gitter

$$\frac{d^2}{dt^2} u_i(t) = - \sum_j K_{ij} (u_i(t) - u_j(t))$$

wobei K_{ij} räumlich fluktuierende Kraftkonstanten zwischen nächsten Nachbarn sind. In der Coherent-Potential Approximation (CPA) betrachtet man ein Referenzsystem, das als effektives Medium bezeichnet wird. In diesem fluktuieren die Kraftkonstanten nicht, sondern sind komplexe Größen, die von dem komplexen Frequenzparameter $z = -\omega^2 - i\varepsilon$ abhängen. Die Greensche Funktion des effektiven Mediums gehorcht der Bewegungsgleichung

$$zG_{ij}(z) - \delta_{ij} = Z\Gamma(z) (G_{lj}(z) - G_{ij}(z)) \quad (1)$$

wobei $Z = 6$ die Koordinationszahl, l ein beliebiger Nachbar-Gitterplatz und $\Gamma(z)$ die Kraftkonstante des effektiven Mediums ist. Wir betrachten nun eine spezielle Bindung zwischen den Gitterplätzen i_0 und j_0 . Bei dieser Bindung ersetzen wir die effektive Kraftkonstante $\Gamma(z)$ durch die tatsächliche Kraftkonstante $K_{i_0 j_0}$, so dass wir die „Störung“ $v_{i_0 j_0}(z) = K_{i_0 j_0} - \Gamma(z)$ erhalten.

- Zeigen Sie, dass der durch die „Störung“ verursachte Zusatzterm V_{ij} des Hamiltonoperators vier von Null verschiedene Einträge hat.
- Die CPA-Bedingung zur Bestimmung von $\Gamma(z)$ lautet, dass die gemittelte Greensche Funktion des „gestörten“ Systems gleich der des effektiven Mediums ist, d.h. die gemittelte T -Matrix der Störung soll gleich 0 sein. Dies ist eine zweidimensionale Matrixgleichung. Zeigen Sie durch explizite Matrixinversion und unter Verwendung von (1), dass diese Gleichung zu

$$\left\langle \frac{K - \Gamma(z)}{1 + (K - \Gamma(z)) \frac{2}{Z\Gamma(z)} (1 - zG_{ii}(z))} \right\rangle = 0$$

führt und bestimmen Sie die Funktion $G_{ii}(z)$.

- Zeigen Sie, dass diese Gleichung geschrieben werden kann als

$$\Gamma(z) = \left\langle \frac{K}{1 + (K - \Gamma(z)) \frac{2}{Z\Gamma(z)} (1 - zG_{ii}(z))} \right\rangle.$$

und leiten Sie, in dem sie in 2. Ordnung den Nenner nach $K - \Gamma$ entwickeln eine „2-site SCBA“ für die Größe $\Sigma(z) = -[\Gamma(z) - \langle K \rangle]$ her.