

### 3.2. Klassische Schwingungen periodischer Kristalle (Fortsetzung)

Hamiltonian, der über Born-Oppenheimer abseparierten Gittergleichung, in harm. Näherung  $\rightarrow$  liefert Bewegungsgleichung für Auslenkungen  $X_i = R_i - R_i^0$

$$M_{\alpha} \ddot{X}_{n\alpha i} + \sum_{n'\alpha'i'} \underbrace{W_{n\alpha i, n'\alpha'i'}}_{3sN \times 3sN \text{ Matrix}} X_{n'\alpha'i'} = 0$$

$n = 1 \dots N$  Zahl der Einheitszellen  
 $\alpha = 1 \dots s$  - Atome pro Elementarzelle  
 $i = 1 \dots 3$  - Koordinaten

Lösungsansatz:  $X_{n\alpha i}^{(j)} = c_{\alpha i}^{(j)}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} \frac{1}{\sqrt{M_{\alpha}}} e^{-i\omega(\mathbf{q})t}$

$\omega^{(j)}(\mathbf{q})$  Dispersionsrelation der Schwingung

wobei  $\omega^{(j)}(\mathbf{q})^2$  die Eigenwerte von  $D_{\alpha i, \alpha'i'}(\mathbf{q})$  sind.  
 $3s \times 3s$  Matrix

und  $e^{(j)}(\mathbf{q})$  die Eigenvektoren.

$\uparrow$   
 Polarisationsrichtung  
 (Schwingungsrichtung der Eigenmode)

$$D_{\alpha i, \alpha'i'}(\mathbf{q}) = \sum_n \frac{1}{\sqrt{M_{\alpha} M_{\alpha'}}} W_{n\alpha i, n'\alpha'i'} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})}$$

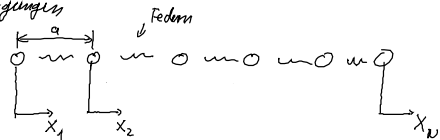
Bsp.:  $s=1$ , ein Atom im Bravais Gitter

$\dim=3$   
 $\underline{W} = \begin{pmatrix} (1 \ 2 \ 3) & \dots & ( ) \\ ( ) & & \\ \vdots & & \\ ( ) & & \end{pmatrix} \begin{matrix} N \\ \\ \\ \end{matrix}$   $\sum_n \rightarrow \frac{D}{3 \times 3} \rightarrow$  Eigenwerte liefern  $\omega^{(j)}(\mathbf{q})$

Lineare Kette mit period. Randbedingungen

$s=1$   
 $\dim=1$

$R_n = na$



$X_{N+1} = X_1$

• nur nächste Nachbar Wechselwirkung

$$W_{n\alpha i, n'\alpha'i'} = W_{n, n'} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 & & & -1 \\ & -1 & 2 & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ -1 & & & & & & & 2 & -1 \\ & & & & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\ddot{X}_n = -\frac{k}{M} [(X_n - X_{n-1}) - (X_{n+1} - X_n)]$$

Möglichkeiten zur Lösung:

→ direkt Bewegungsgleichung lösen

→  $\omega_{nn}$  direkt Eigenwerte bestimmen über Geraden- und Circle-Theorem

$$\lambda_n = 2K(1 - \cos \frac{2\pi n}{N})$$

→ aus D die EW bestimmen

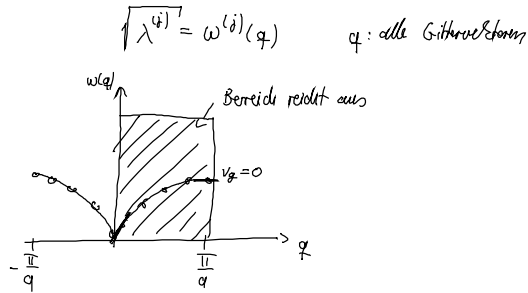
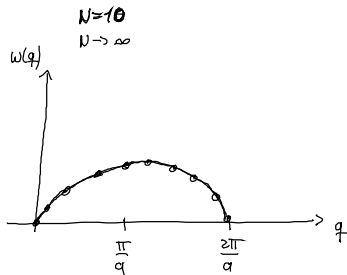
$$D = \sum_{n'} \frac{K}{\sqrt{N}} \omega_{n'n} e^{iq(n'a - na)}$$

$$= \frac{K}{M} (2 - e^{iqa} - e^{-iqa})$$

$$e^{iqaN} = 1$$

$$= \frac{2K}{M} (1 - \cos qa) = \lambda^{(j)}(q)$$

$$q = \frac{2\pi n}{\alpha \cdot N}$$



$$\omega(q) = \omega(-q)$$

wegen  
zeitumkehrinvarianz

$X_n(t)$  sind Wellen mit Phasengeschwindigkeit  $\frac{\omega}{q} = v_{ph}$

Gruppengeschwindigkeit  $\frac{\partial \omega}{\partial q} = v_g$

für  $|q| \ll \frac{\pi}{a}$   $v_{ph} \approx v_g \approx a \sqrt{\frac{K}{M}}$  konstant!

(akustische Phononen)

$$q = \frac{\pi}{a} \quad (\text{Rand der BZ}) \quad v_g = 0$$

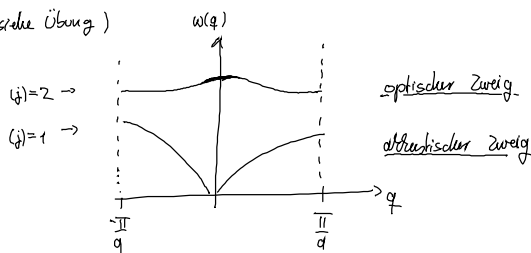
Bsp. 2 atomige Basis der linearen Kette

→

$$O_1 \circ O_2 \circ O_1 \circ O_2 \circ O_1 \circ O_2 \circ O_1 \circ O_2$$

→ → → → → → →

(siehe Übung)



• zusätzlicher opt. Zweig

da  $D$  eine  $2 \times 2$  Matrix ist.

→ 2 EW

Bsp. Schwingungen eines 3-dim. Kristalls

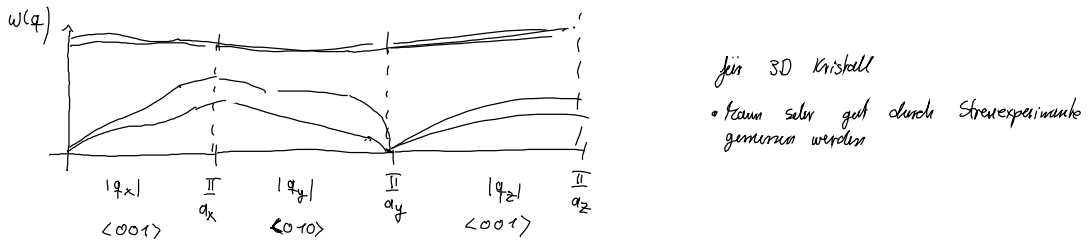
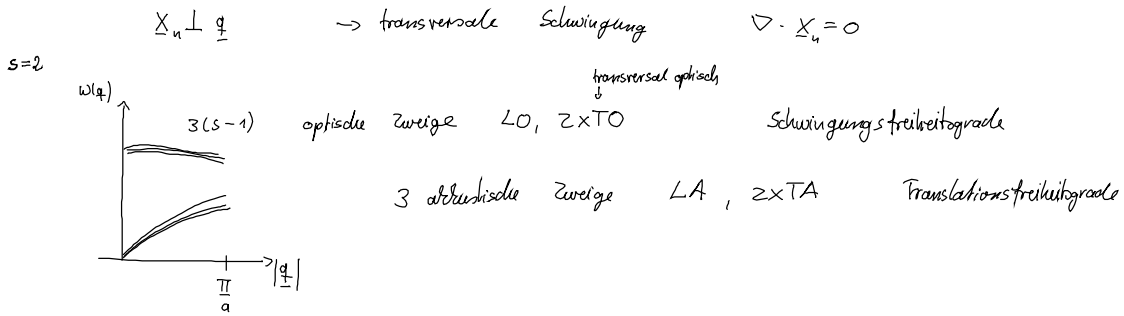
ein Atom pro EZ

→ 3 Polarisationsrichtungen  $\underline{e}^{(j)}(q)$

$(j) : 1 \dots 3$

$\underline{X}_n \parallel \underline{q}$  → longitudinale Schwingung

$$\nabla \times \underline{X}_n = 0$$



- Bemerkungen :
- verschiedene Zweige können entartet sein an Punkten hoher Symmetrie
  - optischer Zweig muss nicht optisch aktiv sein
  - Gitterschwingungen meist nicht streng transversal/longitudinal

### 3.3. Phononen

Ziel: Quantisierung der Gitterschwingungen

Erinnerung: allgemeine Lösung der klass. Schwingungsgleichung

$$X_{nai}(t) = \frac{1}{\sqrt{NM_n}} \sum_{j=1}^{3s} \sum_{\mathbf{q}} Q_j(\mathbf{q}, t) c_{\alpha i}^{(j)}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n}$$

$\uparrow$   $u_i(\mathbf{q}) e^{-i\omega^{(j)}(\mathbf{q})t}$  ← normierte Eigenvektoren

Frage: Ist Beschreibung mit  $Q_j(\mathbf{q}, t)$  als Variable besser?

Antwort über Einsetzen in  $H = \frac{1}{2} \sum_{nai} M_n \dot{X}_{nai}^2 + \frac{1}{2} \sum_{nai, n'k'i'} X_{nai} W_{nai, n'k'i'} X_{n'k'i'}$

Umformen mit Hilfe von

$$\frac{1}{N} \sum_n e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_n} = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}$$

$$; c_{\alpha i}^{*(j)}(\mathbf{q}) Q_j^*(\mathbf{q}, t) = c_{\alpha i}^{(j)}(-\mathbf{q}) Q_j(-\mathbf{q}, t) \quad (\text{da } X_{nai} \text{ reell})$$

sowie  $\sum_{\alpha i} c_{\alpha i}^{*(j)}(\mathbf{q}) c_{\alpha i}^{(j')}(\mathbf{q}) = \delta_{jj'}$  Orthogonalität der Eigenmoden

und  $P_j(\mathbf{q}, t) = \dot{Q}_j(\mathbf{q}, t)$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{j, \mathbf{q}} \left[ p_j^*(\mathbf{q}, t) p_j(\mathbf{q}, t) + \omega_j^{(\mathbf{q}) 2} Q_j^*(\mathbf{q}, t) Q_j(\mathbf{q}, t) \right]$$

entkoppelt in 3sN harmonische Oszillatoren

$$\ddot{Q}_j + \omega_j^2 Q_j = 0$$

Quantisierung:

$$p_j, Q_j \rightarrow \text{Operatoren mit } [p_j(\mathbf{q}), Q_{j'}(\mathbf{q}')] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{jj'}$$

$$\hat{H} \rightarrow \text{Hamiltonoperator } \hat{H}$$

$$\text{Energie eigenwerte: } E = \sum_{j=1}^{3s} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_j^{(\mathbf{q})} \left( n_j^{(\mathbf{q})} + \frac{1}{2} \right)$$

↑ Besetzungszahl der Schwingungsmode  
 $n_j^{(\mathbf{q})} = 0, 1, 2, \dots$

Besetzungszahldarstellung

Erzeugungsop. eines Phonons  
 der Energie  $\hbar \omega_j^{(\mathbf{q})}$   $\rightarrow b_{j\mathbf{q}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m_j \omega_j}} (m_j \omega_j Q_{j\mathbf{q}}^+ - i p_{j\mathbf{q}})$

Vernichtungsop.  $\rightarrow b_{j\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m_j \omega_j}} (m_j \omega_j Q_{j\mathbf{q}} + i p_{j\mathbf{q}}^+)$

Vertauschungsrelation

$$[b_{j\mathbf{q}}, b_{j'\mathbf{q}'}^+] = \delta_{jj'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$$

$$[b_{j\mathbf{q}}, b_{j'\mathbf{q}'}] = 0$$

$$[b_{j\mathbf{q}}^+, b_{j'\mathbf{q}'}^+] = 0$$

$$\hat{H} = \sum_{j, \mathbf{q}} \hbar \omega_j \left( \underbrace{b_{j\mathbf{q}}^+ b_{j\mathbf{q}}}_{\hat{n}_{j\mathbf{q}}} + \frac{1}{2} \right)$$

Besetzungszahloperator  
Teilchenzahloper.

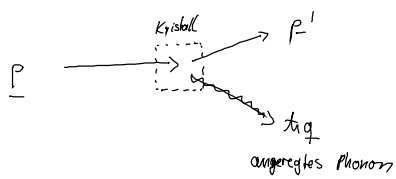
$\mathbf{q}$  ist beschränkt durch  
 endl. Grundgebiet

Quantisierte Kollektivschwingungen : Phononen

"Quasiteilchen" als elementare Anregungen des Festkörpers

- $\hat{H}$  beschreibt ein wechselwirkungsfreies Phonongas
- Phononen sind Bosonen : Jeder Einteilchenzustand  $(j, \mathbf{q})$  kann mit beliebig vielen (unterscheidbaren) Phononen besetzt sein.
- Quasimpuls der Phononen :  $\hbar \mathbf{q}$  (ist nur bis auf  $\vec{a}$  (1. Gittervektor) definiert da  $\hbar \omega_j^{(\mathbf{q})}$  periodisch ist in  $\mathbf{q}$ )

• Quasimpuls-erhaltung bei Streuprozessen



$$p' - p + \hbar q + \hbar G = 0$$

• Phononenspektroskopie: Bestimmung der Dispersionsrelation durch inelast. Streuung

