3.2. Klassische Schwingungen periodischer Kristalle (Fortsetzung)

Hamiltonian, der über Born-Oppenheimer abseparierten Gittergleichung, in harm. Näherung $\longrightarrow$ 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 Einheitszelle
$\alpha = 1 \dots s$ – Atome pro Elementarzelle
$i = 1 \dots 3$ – Koordinaten

Lösungsansatz:
$$X^{(j)}_{n\alpha i} = c^{(j)}_{\alpha i}(\underline{q})\, e^{i\underline{q}\cdot \underline{R}_n} \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}}\, e^{-i\omega^{(j)}(\underline{q})t}$$

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

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

und $\underline{c}^{(j)}(\underline{q})$ die Eigenvektoren.
$\uparrow$
Polarisationsrichtung
(Schwingungsrichtung der Eigenmode)

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

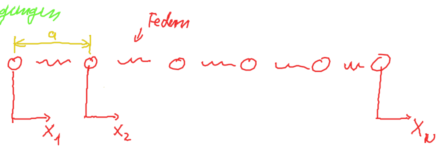
Bsp.: $s = 1$, ein Atom im Bravais Gitter
dim = 3

$$\underline{\underline{W}} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & & \\ 3 & & \end{pmatrix} & \cdots & \begin{pmatrix} & \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} & \end{pmatrix} & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ \begin{pmatrix} & \end{pmatrix} & \cdots & \end{pmatrix}_{N \times N}$$

$\sum_n \longrightarrow \underset{3\times 3}{\underline{\underline{D}}} \longrightarrow$ Eigenwerte liefern $\omega^{(j)}(q)$

Lineare Kette mit period. Randbedingungen
$s = 1$
dim = 1

$R_n = n a$



$X_{N+1} = X_1$

• nur nächste Nachbar Wechselwirkung

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

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

Möglichkeiten zur Lösungen:

→ direkt Bewegungsgleichung lösen

→ aus $W_{nn'}$ direkt Eigenwerte bestimmen über Gershgorin-Circle-Theorem $\lambda_n = 2K\left(1 - \cos\frac{2\pi n}{N}\right)$

→ aus D die EW bestimmen

$$D = \sum_{n'} \frac{K}{\sqrt{M^2}} W_{n'n}\, e^{iq(n'a - na)}$$

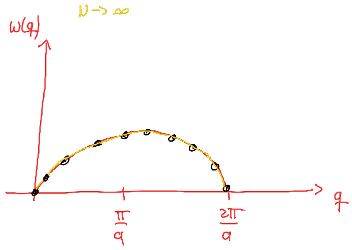
$$= \frac{K}{M}\left(2 - e^{iqa} - e^{-iqa}\right) \qquad e^{iqaN} = 1$$

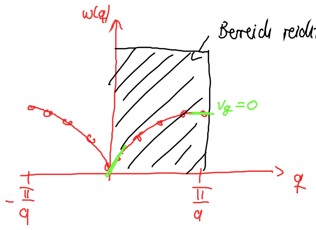
$$= \frac{2K}{M}\left(1 - \cos qa\right) = \lambda^{(j)}(q) \qquad q = \frac{2\pi n}{a \cdot N}$$

$$\sqrt{\lambda^{(j)}} = \omega^{(j)}(q) \qquad q: \text{alle Gittervektoren}$$

N=10

N → ∞





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

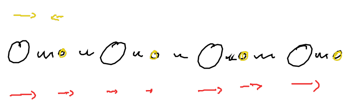
$X_n(t)$ sind Wellen mit Phasengeschwindigkeit $\frac{\omega}{q} = v_{ph}$

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

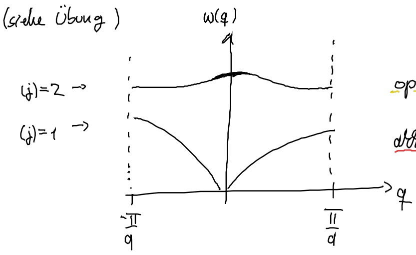
für $|q| \ll \frac{\pi}{a}$ $\quad v_{ph} \approx v_g \approx a\sqrt{\frac{K}{M}}$ konstant! (akustische Phononen)

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

Bsp. 2 atomige Basis der linearen Kette



(siehe Übung)



• zusätzlicher opt. Zweig da $\underline{D}$ eine 2x2 Matrix ist.

→ 2 EW

Bsp. Schwingungen eines 3-dim. Kristalls

ein Atom pro EZ

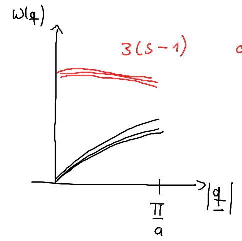
→ 3 Polarisationsrichtungen $\underline{c}^{(j)}(q)$ $\qquad$ d·s = 3·s ↓ $\quad (j): 1 \dots 3$

$\underline{X}_n \parallel \underline{q}$ → longitudinale Schwingung $\qquad \nabla \times \underline{X}_n = 0$

$\underline{X}_n \perp \underline{q}$ → transversale Schwingung $\nabla \cdot \underline{X}_n = 0$

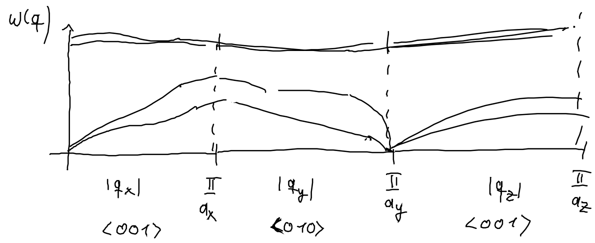
$s=2$

transversal optisch



$3(s-1)$ optische Zweige LO, 2xTO Schwingungsfreiheitsgrade

3 akustische Zweige LA, 2xTA Translationsfreiheitsgrade



für 3D Kristall

- kann sehr gut durch Streuexperimente gemessen werden

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

$$X_{n\alpha i}(t) = \frac{1}{\sqrt{NM_\alpha}} \sum_{j=1}^{3s} \sum_{\underline{q}} Q_j(\underline{q},t)\, c_{\alpha i}^{(j)}(\underline{q})\, e^{i\underline{q}\underline{R}_n}$$

$Q_j(\underline{q},t)$: $u_j(q)\, e^{-i\omega^{(j)}(q)t}$

$c_{\alpha i}^{(j)}(\underline{q})$: normierte Eigenvektoren

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

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

umformen mit Hilfe von

$$\frac{1}{N}\sum_n e^{i(q-q')\underline{R}_n} = \delta_{\underline{q}\underline{q}'} \quad ; \quad c_{\alpha i}^{*(j)}(q)\, Q_j^*(q,t) = c_{\alpha i}^{(j)}(-q)\, Q_j(-q,t)$$

(da $X_{n\alpha i}$ reell)

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

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

$$\Rightarrow \boxed{H = \frac{1}{2} \sum_{j\underline{q}} \left[P_j^*(q,t)\, P_j(q,t) + \omega^{(j)}(\underline{q})^2\, Q_j^*(q,t)\, Q_j(q,t) \right]}$$

entkoppelt in 3sN harmonische Oszillatoren

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

Quantisierung:

$P_j, Q_j \longrightarrow$ Operatoren mit $[P_j(q), Q_{j'}(q')] = \frac{\hbar}{i} \delta_{qq'} \delta_{jj'}$

$H \longrightarrow$ Hamiltonoperator $\hat{H}$

Energieeigenwerte: $E = \sum_{j=1}^{3s} \sum_{q} \hbar\omega^{(j)}(q) \left(n^{(j)}(q) + \frac{1}{2} \right)$

Besetzungszahl der Schwingungsmode $n^{(j)}(q) = 0, 1, 2 \ldots$

Besetzungszahldarstellung

Erzeugungsop. eines Phonons der Energie $\hbar\omega^{(j)}(q)$ $\rightarrow$ $b_{jq}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{jq}}} \left(\omega_{jq} Q_{jq}^+ - i P_{jq} \right)$

Vernichtungsop. $\rightarrow$ $b_{jq} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{jq}}} \left(\omega_{jq} Q_{jq} + i P_{jq}^+ \right)$

Vertauschungsrelation

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

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

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

$$\hat{H} = \sum_{jq} \hbar\omega_{jq} \left(\underbrace{b_{jq}^+ b_{jq}}_{\hat{n}_{jq}} + \frac{1}{2} \right)$$

Besetzungszahloperator
Teilchenzahlop.

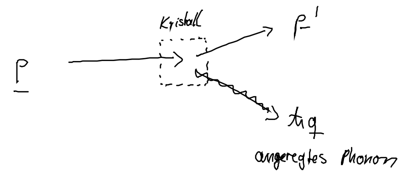
$\underline{q}$ ist beschränkt durch endl. Grundgebiet

Quantisierte Kollektivschwingungen: Phononen

"Quasiteilchen" als elementare Anregungen des Festkörpers

- $\hat{H}$ beschreibt ein wechselwirkungsfreies Phononengas
- Phononen sind Bosonen: Jeder Einteilchenzustand (j, q) kann mit beliebig vielen (ununterscheidbaren) Phononen besetzt sein.
- Quasiimpuls der Phononen: $\hbar q$ (ist nur bis auf $\underline{G}$ (rez. Gittervektor) definiert da $\hbar\omega^{(j)}(q)$ periodisch ist in q)

- Quasiimpulserhaltung bei Streuprozessen



$$\underline{p}' - \underline{p} + \hbar \underline{q} + \hbar \underline{G} = 0$$

- Phononenspektroskopie : Bestimmung der Dispersionsrelation durch inelast. Streuung