

Übung zum 5. Zettel: Lineare Kette

Musterlösung: Lorentzraft-Herleitung

$$L_i = \frac{1}{2} m_i \dot{\underline{r}}_i^2 - q \phi(\underline{r}_i, t) + q \dot{\underline{r}}_i \cdot \underline{A}(\underline{r}_i, t)$$

$$\underline{r}_i \equiv (x_1^i, x_2^i, x_3^i) \quad \begin{array}{l} \leftarrow \text{Teilchen "i"} \\ \leftarrow \text{Koordinate } (x_1, y, z) \\ \quad \quad \quad (1, 2, 3) \end{array}$$

also: $L_i = \frac{m_i}{2} \sum_j (\dot{x}_j^i)^2 - q \phi(\underline{r}_i, t) + q \sum_j \dot{x}_j^i A_j(\underline{r}_i, t)$

(~~lösse~~ Teilchenindex "i" weg)

$$\sum_{j=1,2,3} \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} - \frac{\partial L}{\partial x_j} \right\} e_j = 0$$

$$[\nabla L - \nabla L = 0]$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} = \frac{m}{2} 2 \dot{x}_1 + q A_1(\underline{r}, t) \quad (\text{nur 1. Kompon.})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} &= m \ddot{x}_1 + q \frac{d}{dt} A_1(\underline{r}, t) \\ &= m \ddot{x}_1 + q \underbrace{\sum_j \frac{\partial A_1}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} + \frac{\partial A_1}{\partial t}}_{\text{totale Differential}} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = -q \frac{\partial \phi}{\partial x_1} + q \sum_j \dot{x}_j \frac{\partial}{\partial x_1} A_j(\underline{r}, t)$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{x}_1} - \frac{\partial}{\partial x_1} \right) L &= m \ddot{x}_1 - q \underbrace{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial A_1}{\partial t} \right)}_{=: \underline{E}_1} + q \sum_j \left[\frac{\partial A_1}{\partial x_j} \dot{x}_j - \frac{\partial A_j}{\partial x_1} \dot{x}_j \right] \\
&= m \ddot{x}_1 - q \underline{E}_1 + q \{0\} + q \underbrace{\left\{ \frac{\partial A_1}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_1} \right\}}_{= -(\nabla \times \underline{A})_3} \dot{x}_2 \\
&\quad + q \underbrace{\left\{ \frac{\partial A_1}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_1} \right\}}_{= (\nabla \times \underline{A})_2} \dot{x}_3 \\
&= m \ddot{x}_1 - q \underline{E}_1 - q (\underline{\dot{x}} \times \underline{B})_1 \\
\sum_j m \ddot{x}_j \underline{e}_j &= \sum_j \left\{ q \underline{E}_j + q (\underline{\dot{x}} \times \underline{B})_j \right\} \underline{e}_j \\
\underline{F}_L &= q (\underline{E} + \underline{\dot{x}} \times \underline{B}) \quad (\text{Lorentzkraft})
\end{aligned}$$

Litterschwingung:

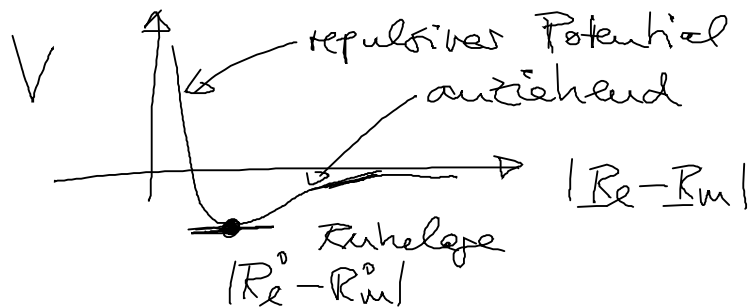
Bisher Littersionen wurden unbeweglich angenommen $V(\underline{R}_e - \underline{R}_m) = V(\underline{R}_e^0 - \underline{R}_m^0)$

jetzt: kleine Schwingung (im Sinne der Amplitude) um Ruhelage (Phononen)

$\hat{=}$ Harmonische Näherung des Litterpotentials

Ausgangspunkt: Potential für N miteinander $\omega\omega$ -Ionen

$$V(\underline{R}_1, \dots, \underline{R}_N) = \frac{1}{2} \sum_{e,m} V(|\underline{R}_e - \underline{R}_m|) + V$$

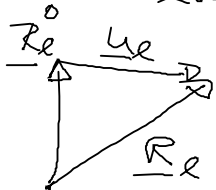


für kleine Auslenkungen aus Ruhelage
 kann das Potential bis zur 2. Ordnung
 um GG-Lage entwickelt werden

$$V(\underline{R}_1, \underline{R}_2, \dots, \underline{R}_N) = V(\underline{R}_1^0, \dots, \underline{R}_N^0) + \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Bandstruktur (Block-Wellen)}}$$

$$+ \sum_{\alpha, \beta = x, y, z} \frac{\partial V}{\partial R_{\alpha}} \bigg|_{\underline{R}^{(0)}} u_{\alpha} = 0 \text{ wegen Minimum des Potentials}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{e,m} \sum_{\alpha, \beta = x, y, z} \frac{\partial^2 V}{\partial R_{\alpha} \partial R_{\beta}} \bigg|_{\underline{R}^{(0)}} u_{\alpha} u_{\beta} + \dots$$



dynamische Lage l-ten Ions

man definiert Kraftkonstanten

$$\phi_{lm}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 V}{\partial R_{\alpha} \partial R_{\beta}} \bigg|_{\underline{R}^{(0)}}$$

Klassische Betrachtung:

$$\vec{p}_{n\mu}^{\alpha} = m_{\mu} \dot{u}_{n\mu}^{\alpha} \leftarrow \text{Richtungs-} \\ \text{Einheitsvektor} \quad \mu\text{-te Ion} \quad = -\frac{\partial H}{\partial u_{n\mu}^{\alpha}} = -\frac{\partial V}{\partial u_{n\mu}^{\alpha}}$$

Die Bewegungsgl. werden also wie folgt aufgestellt:

$$m_{\mu} \ddot{u}_{n\mu}^{\alpha} = \frac{1}{Z} \sum_{n_1 \mu_1} \sum_{n_2 \mu_2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \frac{\partial}{\partial u_{n\mu}^{\alpha}} \left(\phi_{n_1 \mu_1 n_2 \mu_2}^{\alpha_1 \alpha_2} u_{n_1 \mu_1}^{\alpha_1} u_{n_2 \mu_2}^{\alpha_2} \right) \\ = \frac{1}{Z} \sum_{n_1 \mu_1} \sum_{n_2 \mu_2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \phi_{n_1 \mu_1 n_2 \mu_2}^{\alpha_1 \alpha_2} \left[\left(\frac{\partial u_{n_1 \mu_1}^{\alpha_1}}{\partial u_{n\mu}^{\alpha}} \right) u_{n_2 \mu_2}^{\alpha_2} + u_{n_1 \mu_1}^{\alpha_1} \left(\frac{\partial u_{n_2 \mu_2}^{\alpha_2}}{\partial u_{n\mu}^{\alpha}} \right) \right]$$

$$m_{\mu} \ddot{u}_{n\mu}^{\alpha} = \sum_{n' \mu' \alpha'} \phi_{n\mu n' \mu'}^{\alpha \alpha'} u_{n' \mu'}^{\alpha'}$$

$\begin{matrix} \delta_{n, n'} \\ \delta_{\mu, \mu'} \\ \delta_{\alpha, \alpha'} \end{matrix}$

BWGL. des μ -ten Ions in der n -EZ in Richtung α — die Auslenkung in α
Eigenschaften von $\phi_{n\mu n' \mu'}^{\alpha \alpha'}$:

(i) Symmetrisch, Vertauschung von partiellen Ableitungen

(ii) die Kraftkonstanten ϕ hängen nur von den Abständen zwischen den Ionen ab (von GG-Lagen) $\mathbb{R}_n^{(b)} - \mathbb{R}_{n'}^{(b)}$

→ Translationsinvarianz mit periodischer Struktur

(iii) werden alle Atome gleich ausgelenkt,
dann wirkt keine Kraft

$$\sum_{n\mu} \phi_{n\mu\mu'}^{\alpha\alpha'} = 0$$

Lösungsansatz wegen Symmetrie und
Translationsinvarianz

$$u_{n\mu}^{\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu'}}} A_{\mu'}^{\alpha}(q) e^{i q \cdot R_n^{(\alpha)} - i \omega_q t}$$

nicht zeitabhängig
Dispersionsrelation ausrechnen

$$m_{\mu} u_{n\mu} = -m_{\mu} \omega_q^2 \underbrace{\frac{1}{\sqrt{m_{\mu'}}} A_{\mu'}^{\alpha}(q) e^{i q \cdot R_n^{(\alpha)} - i \omega_q t}}_{= u_{n\mu}^{\alpha}}$$

$$= \sum_{\alpha'\mu'n'} \phi_{n\mu'n'}^{\alpha\alpha'} \frac{1}{\sqrt{m_{\mu'}}} A_{\mu'}^{\alpha'}(q) e^{i q \cdot R_n^{(\alpha')} - i \omega_q t}$$

Dimension
Zahl der Teilchen
Zahl der Einheitszellen

$$\omega_q^2 A_{\mu}^{\alpha}(q) = \sum_{\mu'\alpha'} \underbrace{\phi_{\mu\mu'}^{\alpha\alpha'}(q)}_{= \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}m_{\mu'}}}} A_{\mu'}^{\alpha'}(q)$$

$$:= \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}m_{\mu'}}} \sum_n \phi_{\mu\mu'}^{\alpha\alpha'}(R_n) e^{i q \cdot R_n}$$

⇒ man erhält eine Eigenwertgl.
des Fouriertransformierten

⇒ für jedes q gibt es also

DM Eigenwerte $\omega_j(q)$ (Moden)

(N wegen Translationsinvarianz
nicht mehr vorhanden)



$$M \ddot{u}_n = -\frac{\phi}{2} (u_n - u_{n+1}) - \frac{\phi}{2} (u_n - u_{n-1})$$

$$= -\frac{\phi}{2} (2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

Ansatz: $u_n(t) = \frac{1}{\sqrt{M}} c e^{i q a n - i \omega t}$

$$\frac{M}{\sqrt{M}} c (-i\omega)^2 e^{i q a n - i \omega t} = -\frac{\phi}{2} (2u_n - u_{n-1} - u_{n+1})$$

$$\omega^2 = \frac{\phi}{2M} \left(2 - e^{-i q a} - e^{i q a} \right)$$

$$= \frac{4}{(2i)^2} \left(e^{i \frac{q a}{2}} - e^{-i \frac{q a}{2}} \right)^2$$

$$= 4 \sin^2 \left(\frac{q a}{2} \right)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{\phi}{2M}} 2 \left| \sin \frac{q a}{2} \right| = \omega(q)$$

Dispersionsrelation
(periodische Randbedingung)