Übung zum 5. Zettel: Lineare Kette

Musterlösung: Lorentzkraft-Herleitung

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

$$\underline{r}_i \equiv (x_1^i, x_2^i, x_3^i)$$

Teilchen „1"

Koordinate (x,y,z) $(1,2,3)$

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

(lasse Teilchenindex „i" weg)

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

$$\left[\dot{\nabla} L - \nabla L = 0 \right]$$

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

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} = m \ddot{x}_1 + q \frac{d}{dt} A_1(\underline{r}, t)$$

$$= m \ddot{x}_1 + q \underbrace{\sum_j \frac{\partial A_1}{\partial x_j} \frac{d x_j}{dt} + q \frac{\partial A_1}{\partial t}}_{\text{totale Differential}}$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = - q \frac{\partial \phi}{\partial x_1} + q \sum_k \dot{x}_k \frac{\partial}{\partial x_1} A_k(\underline{r}, t)$$

$$\left(\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{x}_1}-\frac{\partial}{\partial x_1}\right)L = m\ddot{x}_1 - q\underbrace{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}+\frac{\partial A_1}{\partial t}\right)}_{=-E_1} + q\sum_j \left[\frac{\partial A_1}{\partial x_j}-\frac{\partial A_j}{\partial x_1}\right]\dot{x}_j$$

$$= m\ddot{x}_1 - qE_1 + q\,\{0\} + q\underbrace{\left\{\frac{\partial A_1}{\partial x_2}-\frac{\partial A_2}{\partial x_1}\right\}}_{=-(\nabla\times \underline{A})_3}\dot{x}_2$$

$$+ q\underbrace{\left\{\frac{\partial A_1}{\partial x_3}-\frac{\partial A_3}{\partial x_1}\right\}}_{=(\nabla\times \underline{A})_2}\dot{x}_3$$

$$= m\ddot{x}_1 - qE_1 - q\,(\dot{\underline{x}}\times\underline{B})_1$$

$$\sum_j m\ddot{x}_j\,\underline{e}_j = \sum_j \left\{qE_j + q\,(\dot{\underline{x}}\times\underline{B})_j\right\}\underline{e}_j$$

$$\underline{F}_L = q\,(\underline{E}+\dot{\underline{x}}\times\underline{B}) \quad \text{(Lorentzkraft)}$$

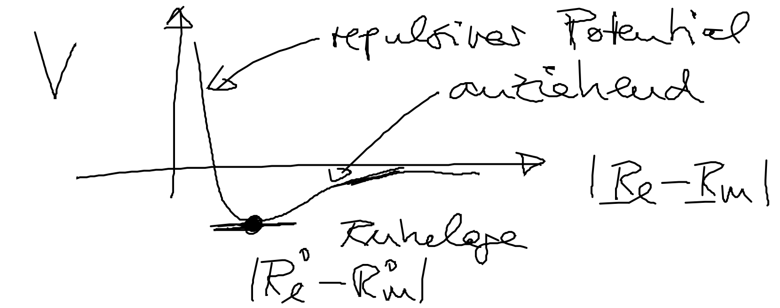
Gitterschwingung:

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

jetzt: kleine Schwingung (im Sinne der Amplitude) um Ruhelage (Phononen)
$\hat{=}$ Harmonische Näherung des Gitterpotentials

Ausgangspunkt: Potential für N miteinander ww-Ionen

$$V(\underline{R}_1, \dots, \underline{R}_N) = \frac{1}{2}\sum_{lm} V(|R_l - R_m|) + V$$

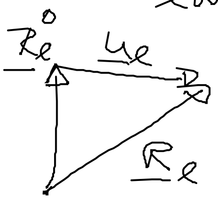


für kleine Auslenkungen aus Ruhelagen kann das Potential bis zur 2. Ordnung um GG-Lage entwickelt werden

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

$$+ \sum_{l,\alpha=x,y,z} \underbrace{\left.\frac{\partial V}{\partial \underline{R}_{l\alpha}}\right|_{R^{(0)}}}_{=0 \text{ wegen Minimum des Potentials}} u_{l\alpha}$$

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



dynamische Lage l-ten Ions

man definiert Kraftkonstanten

$$\phi_{lm}^{\alpha\beta} = \left.\frac{\partial^2 V}{\partial R_{l\alpha}\partial R_{m\beta}}\right|_{R^{(0)}}$$

Klassische Betrachtung:

$$\dot{P}^{\alpha}_{n\mu} = m_\mu \ddot{u}^{\alpha}_{n\mu} \leftarrow \text{Richtung}$$

Einheitszelle, μ-te Ion

$$= -\frac{\partial H}{\partial u^{\alpha}_{n\mu}} = -\frac{\partial V}{\partial u^{\alpha}_{n\mu}}$$

Die Bewegungsgl. werden also wie folgt aufgestellt:

$$m_\mu \ddot{u}^{\alpha}_{n\mu} = \frac{1}{2} \sum_{n_1\mu_1} \sum_{n_2\mu_2} \sum_{\alpha_1\alpha_2} \frac{\partial}{\partial u^{\alpha}_{n\mu}} \left(\phi^{\alpha_1\alpha_2}_{n_1\mu_1 n_2\mu_2} u^{\alpha_1}_{n_1\mu_1} u^{\alpha_2}_{n_2\mu_2} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n_1\mu_1} \sum_{n_2\mu_2} \sum_{\alpha_1\alpha_2} \phi^{\alpha_1\alpha_2}_{n_1\mu_1 n_2\mu_2} \left[\underbrace{\left(\frac{\partial u^{\alpha_1}_{n_1\mu_1}}{\partial u^{\alpha}_{n\mu}} \right)}_{\delta_{n,n_1}\,\delta_{\mu,\mu_1}\,\delta_{\alpha,\alpha_1}} u^{\alpha_2}_{n_2\mu_2} + u^{\alpha_1}_{n_1\mu_1} (\ ) \right]$$

$$\boxed{m_\mu \ddot{u}^{\alpha}_{n\mu} = \sum_{n'\mu'\alpha'} \phi^{\alpha\alpha'}_{n\mu n'\mu'} u^{\alpha'}_{n'\mu'}}$$

BWGl. der μ-ten Ions in der n-EZ in Richtung α — die Auslenkung in α

Eigenschaften von $\phi^{\alpha\alpha'}_{n\mu n'\mu'}$:

(i) Symmetrisch, Vertauschung von partiellen Ableitungen

(ii) die Kraftkonstanten ϕ hängen nur von den Abständen zwischen den Ionen ab (von GG-Lagen) $R^{(0)}_n - R^{(0)}_{n'}$
→ Translationsinvarianz mit periodischer Struktur

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

$$\boxed{\sum_{n\mu} \phi^{\alpha\alpha'}_{n\mu\mu' n'} = 0}$$

Lösungsansatz wegen Symmetrie und Translationsinvarianz

$$u^{\alpha}_{n\mu}(t) = \frac{1}{\sqrt{m_\mu}} \underbrace{A^{\alpha}_{\mu}(q)}_{\text{nicht zeitabhängig}} e^{i q \cdot \underline{R}_n^{(0)} - i \underbrace{\omega_q}_{\text{Dispersionsrelation ausrechnen}} t}$$

$$m_\mu \ddot{u}^{\alpha}_{n\mu} = - m_\mu \omega_q^2 \underbrace{\frac{1}{\sqrt{m_\mu}} A^{\alpha}_{\mu}(q) e^{i q \cdot \underline{R}_n^{(0)} - i \omega_q t}}_{= u^{\alpha}_{n\mu}}$$

$$= \sum_{\alpha' \mu' n'} \phi^{\alpha\alpha'}_{n\mu n' \mu'} \frac{1}{\sqrt{m_{\mu'}}} A^{\alpha'}_{\mu'}(q) e^{i q \underline{R}_{n'}^{(0)} - i \omega_q t}$$

Dimension

Zahl der Teilchen

Zahl der Einheitszellen

$$\omega_q^2 A^{\alpha}_{\mu}(q) = \sum_{\mu' \alpha'} \underbrace{\phi^{\alpha\alpha'}_{\mu\mu'}(q)} A^{\alpha'}_{\mu'}(q)$$

$$:= \frac{1}{\sqrt{m_\mu m_{\mu'}}} \sum_n \phi^{\alpha\alpha'}_{\mu\mu'}(\underline{R}_n) e^{i q \cdot \underline{R}_n}$$

⇒ man erhält eine Eigenwertgl. der 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: $u_n(t) = \frac{1}{\sqrt{M}} c\, e^{iqan - i\omega t}$

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

$$\omega^2 = \frac{\phi}{2M}\underbrace{\left(2 - e^{-iqa} - e^{iqa}\right)}$$

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

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

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

Dispersionsrelation

(periodische Randbedingung)