8.2.5 Hamiltonfunktion in Normalkoordinaten

Darstellung der Auslenkung $u^{\alpha}_{ns}(t)$ nach Fourieramplituden:

$$u^{\alpha}_{ns}(t) = \frac{1}{\sqrt{N m_s}} \sum_{\vec{q},j} \underbrace{Q_j(\vec{q},t)}_{\text{Amplitude der Partikulärlösung}} \underbrace{\vec{A}^{\alpha}_s(\vec{q},j)}_{\text{Polarisationsvektor (Richtung)}} \underbrace{e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}_n} \cancel{e^{-i\omega_{\vec{q}j} t}}}_{\text{Orts- und Zeitabhängigkeit über Fourieranalyse}}$$

Gitterzellen

s-tes Ion

1 spezielle Lösung in $j, \vec{q}$

$\vec{u}$ als Überlagerung von linearen $\vec{q}, j$ Moden, die unabhängig voneinander sind

z.z.: Sinnhaftigkeit der Entwicklung, d.h. wir müssen Unabhängigkeit der Mode in der Hamiltonfunktion zeigen

$E = T + V$ des gesamten Ionsystems

$$= \frac{1}{2} \sum_{n,s,\alpha} m_s \left(\dot{u}^{\alpha}_{sn}\right)^2 + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{1,2} \Phi^{n_1 n_2}_{\alpha_1\alpha_2}(s_1 s_2)\, u^{\alpha_1}_{s_1 n_1} u^{\alpha_2}_{s_2 n_2}}_{\text{gekoppelte Oszillatoren}}$$

Frage: ist die Formulierung f. $Q_j(q,t)$ besser?

dazu $u_{s\mathbf{n}}^{\alpha}$ löschen in E, verwenden

$$\sum_{s,\alpha} A_s^{*\alpha}(q,j)\, A_s^{\alpha}(q,j') = \delta_{jj'} \quad \text{(Orthogonalität)}$$

Resultat (Übung):

$$E = \frac{1}{2} \sum_{qj} \left(\dot{Q}_j^*(q,t)\, \dot{Q}_j(q,t) \underset{(-)}{+} \omega_{jq}^2\, Q_j^*(q,t)\, Q_j(q,t) \right)$$

$$\equiv \sum_{qj} E_{jq} \quad \text{Summe der Energie unabhängiger Oszillatoren}$$

$$L = T(-)V \quad \text{Übergang zur Lagrangefunktion}$$

$$P_j(q) = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_j} \rightarrow P_j(q) = \dot{Q}^*(q) \quad \text{Def. Impulse}$$

damit kann die Hamiltonfunktion und Quantisierung bestimmt:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{jq} \left(P_j^*(q)\, P_j(q) + \omega_j^2(q)\, Q_j^*(q)\, Q_j(q) \right)$$

klassische H-Funktion von $3Np$ ungekoppelten Oszillatoren,
vorher über $u_{n s}^{\alpha}$ waren das $3Np$ gekoppelte Oszillatoren

8.3. Quantisierung der Ionenschwingungen

1) klassische Amplituden in H und Operatoren $P_j \to \underline{P}_j$, $Q_j \to \underline{Q}_j$
(Strich wieder weglassen)

2) Quantisierung über Vertauschungsrelationen:

$$[P_j(q), Q_{j'}(q')] \stackrel{!}{=} -i\hbar\, \delta_{qq'}\, \delta_{jj'}$$

analog zu:

$$[p^{\alpha}_{sm}, u^{\alpha'}_{s'm'}] = -i\hbar\, \delta_{\alpha\alpha'}\, \delta_{mm'}\, \delta_{ss'} \quad \text{aus QM I}$$

3) Einführung v. Leiteroperatoren zur Lösung

$$Q_j = \left(\frac{\hbar}{2\omega_j(q)}\right)^{1/2} \left(b^{+}_{qj} + b_{-qj}\right)$$

$$P_j = i\left(\frac{\hbar\omega_j(q)}{2}\right)^{1/2} \left(b^{+}_{qj} - b_{-qj}\right)$$

b_{qj}, b^{+}_{qj} sind Leiteroperatoren, erfüllen

$$[b_{qj}, b^{+}_{q'j'}]_{-} = \delta_{qq'}\, \delta_{jj'}$$

$$[b^{(+)}_{qj}, b^{(+)}_{q'j'}]_{-} = 0$$

Bosonen, ergibt sich natürlich aus Kommutator von P, Q.

4) einsetzen in H:

$$H = \sum_{\underline{q}j} \hbar \omega_{\underline{q}j} \left(b^+_{\underline{q}j} b_{\underline{q}j} + \frac{1}{2} \right)$$

Bemerkungen:

a) Energie der Gitterschwingung ist gequantelt, lässt sich als Summe über unabhängige Oszillatoren $\{\underline{q}, j\}$ darstellen. $\omega_{\underline{q}j}$ ergibt sich aus Eigenwertproblem (letzte VL)

b) $\exists$ Nullpunktsenergie, meßbar in Lichtstreuexperimenten

c) Interpretation:
Gitteranregungen werden als kollektive Anregungen des gesamten Gitters ausgebildet (alle Ionen nehmen teil), sind wellenartig und heißen „Phononen".
Sprechweise: „3 Phononen in der Mode $\underline{q}_7, j_7$"

d) Eigenzustände einer Mode können durch Besetzungszahl-zustände beschrieben werden:

$$|n_{\underline{q}j}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{\underline{q}j}!}} \, b^{+\,n_{\underline{q}j}}_{\underline{q}j} \, |0_{\underline{q}j}\rangle$$

Zahl Phononen in Mode $\underline{q}j$

Vakuum

Gesamteigenzustand von H: $|n_{\underline{q}_1 j_1}, n_{\underline{q}_2 j}, \ldots, n_{\underline{q}_{max} j_{max}}\rangle$

e) Gleichgewicht: mittlere Zahl der Phononen gegeben durch die

Boseverteilung $\rightarrow$ $$f^{eq}_{qj} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{qj}/kT} - 1} \quad (\mu = 0)$$

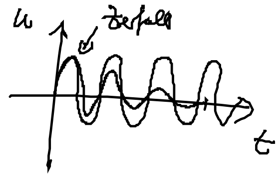
g. Phononen als Quasiteilchen

bisher: Anregungen d. Phononen mit $e^{\pm i\omega_{qj} t}$

in der Realität leben diese Anregungen nicht so lang

jetzt: Berechnung der Lebensdauer als Konsequenz der nichtlinearen Auslenkung u^3 in H

$\Rightarrow$ Anregung $u \sim e^{\pm i\omega_q t - \gamma_q t}$



Konzept d. Quasiteilchen / kollektive Anregung

Gitterionen mit starker WW untereinander	$\xrightarrow{\text{mathematische Trafo}}$	kollektive Anregungen die schwach WW, besteht mit Quasiteilchen

Quasiteilchenkonzept ist nur sinnvoll wenn $\omega_{qj} \gg \gamma_q$.

9.1. Wechselwirkungspotential f. Phononen

$$H_{ph-ph} = \frac{1}{3!} \sum_{1,2,3} \Phi^{n_1 n_2 n_3}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} \, u^{\alpha_1}_{n_1} \, u^{\alpha_2}_{n_2} \, u^{\alpha_3}_{n_3}$$

ohne Basis

bis zur 2. Ordnung war alles im Kapitel 8 abgearbeitet

u einsetzen:

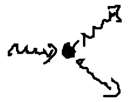
$$= \frac{1}{3!} \sum_{1,2,3} \Phi_{123} \left(\frac{\hbar}{N m}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{A_1 \, A_2 \, A_3}{\sqrt{\omega_1 \, \omega_2 \, \omega_3}} \underbrace{(b_1^+ + b_1)(b_2^+ + b_2)(b_3^+ + b_3)}_{\text{ausmultipliziert gibt 3 Phononoperatoren}}$$

$$\underbrace{e^{i \vec{q}_1 \vec{a}_{n_1}} \, e^{i \vec{q}_2 \vec{a}_{n_2}} \, e^{i \vec{q}_3 \vec{a}_{n_3}}}$$

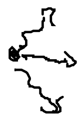
$\Downarrow$

Impulserhaltung

$b b b \;\hat{=}$  energetisch ungünstig

$b^+ b^+ b \;\hat{=}$  Phononenspaltung

$b^+ b b \;\hat{=}$  Phononfusion

$b^+ b^+ b^+ \;\hat{=}$  energetisch ungünstig

im ∞ ausgedehnten Raum muß Impulserhaltung gelten:

$$\Phi^{n_1 n_2 n_3}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} = \Phi^{n_1 - n_3 \;\; n_2 - n_3}_{\alpha_1 \;\; \alpha_2 \;\; \alpha_3}$$

kann nur von Ionenabstand abhängen

d.h. im Matrixelement aber:

$$\sum_{n_1 n_2 n_3} \underbrace{e^{i(\vec{q}_3 + \vec{q}_1 + \vec{q}_2) \vec{a}_{n_3}} \; e^{i \vec{q}_2 (\vec{a}_{n_2} - \vec{a}_{n_3})} \; e^{i \vec{q}_1 (\vec{a}_{n_1} - \vec{a}_{n_3})}}$$

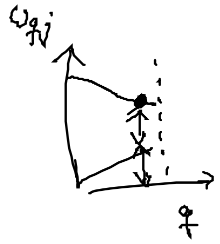
$$\underbrace{\sum_{m_3} e^{i(\vec{q}_3+\vec{q}_1+\vec{q}_2)\vec{a}_{m_3}}}_{N\,\delta_{-q_3,\,q_1+q_2}} \sum_{\substack{m_1-m_3\\ m_2-m_3}} e^{i\vec{q}_2(\vec{a}_{m_2}-\vec{a}_{m_3})}\, e^{i\vec{q}_1(\vec{a}_{m_1}-\vec{a}_{m_3})}$$

Impulserhaltung bei obigen Prozessen

$$H_{ph\text{-}ph} = \frac{1}{3!}\sum_{1,2,3} \underbrace{\frac{\phi^{m_1 m_2}_{\kappa_1\kappa_2\kappa_3}}{(2NM)^{3/2}} \frac{A^{\kappa_1}(q_1 j_1)\,A^{\kappa_2}(q_2 j_2)\,A^{\kappa_3}(q_3 j_3)}{(\omega_{j_1 q_1}\,\omega_{j_2 q_2}\,\omega_{j_3 q_3})^{1/2}}\, e^{i\vec{q}_1\vec{a}_{m_1}+i\vec{q}_2\vec{a}_{m_2}}}_{V\ =\ \text{konstant}\ ;\ \text{mächtige Approximation!}}$$

$$\delta_{-q_3,\,q_1+q_2}\left(b^+_{-q_1 j_1}+b_{q_1 j_1}\right)\left(b^+_{-q_2 j_2}+b_{q_2 j_2}\right)\left(b^+_{-q_3 j_3}+b_{q_3 j_3}\right)$$

9.2. Phononlebensdauer (schematisch)



Konkretes Bsp.: optische Phonon zerfällt in zwei akustische Phonon ($j=1,2$)

$$H_{ph\text{-}ph} = \sum_{1,2,3} V \underbrace{\left(b^+_{-q_1}+b_{-q_1}\right)}_{\text{optisch}} \underbrace{\left(d^+_{-q_2}+d_{q_2}\right)\left(d^+_{-q_3}+d_{q_3}\right)}_{\text{akustisch}}$$

wählen dieser aus: $b^+ \rightsquigarrow \bullet \rightsquigarrow d^+,\ d^+$

Heisenbergbewegungsgl. um WW zu berechnen:

$$-i\hbar\, \dot{b}^{+}_{-q} = \left[H_{ph} + H_{ph-ph},\ b^{+}_{-q} \right]_{-}$$

$\nearrow$ freier Anteil Kapitel 8 $\qquad$ $\nearrow$ Phonon-Phonon WW

$$\dot{b}^{+}_{-q} = i\,\omega^{opt.}_{q}\, b^{+}_{q} + i \sum_{2,3} \delta_{-q_3,-q+q_2} \left(d^{+}_{-q_2} d^{+}_{-q_3} + d^{+}_{-q_2} d_{q_3} + d_{q_2} d^{+}_{-q_3} + d_{q_2} d_{q_3} \right)$$

freie Bewegg.

nehmen nur energetisch Größen $d^{+}_{-q_2} d^{+}_{-q_3}$ mit

$$\left(e^{i\omega^{opt}_{q} t} \ \hat{=}\ e^{i 2\omega^{akust}_{q} t} \right)$$

(1) Gleichg. f. Amplitude $\quad \langle \dot{b}^{+}_{-q} \rangle = i\,\omega^{opt}_{q} \langle b^{+}_{-q} \rangle + i \sum_{2} V \langle d^{+}_{-q_2} d^{+}_{q_2-q} \rangle$

Hierarchieproblem! koppelt an $\langle d^{+} d^{+} \rangle$

$$\langle \dot{d}^{+}_{-q}\, d^{+}_{-q'} \rangle = i \left(\omega_q + \omega_{q'} \right) \langle d^{+}_{-q}\, d_{-q'} \rangle \quad \text{freie Bewegg.}$$

$$+\ 2iV \sum_{3} \left(\langle b^{+}_{-q_3-q}\ d_{q_3}\ d^{+}_{-q'} \rangle + \langle b^{+}_{q_3+q'}\ d_{-q}\ d_{q_3} \rangle \right)$$

hier sind nur energieerhaltende Terme mitgenommen

z.B. $b^{+} d^{+} d^{+}$ ist verboten!

Faktorisierung: $\langle b^+ d d^+ \rangle \to \langle b^+ \rangle \langle d d^+ \rangle$

$\langle b^+ d^+ d \rangle \to \langle b^+ \rangle \langle d^+ d \rangle$

analog zu unabhängigen Wahrscheinlichkeiten

$\langle d d^+ \rangle \to 1 + \langle d^+ d \rangle$

$$(1)\quad \langle \dot{b}^+_{-q} \rangle = i\omega^0_q \langle b^+_{-q} \rangle + iV \sum_{q_2} \langle d^+_{-q}\, d^+_{q_2-q} \rangle$$

$$(2)\quad \langle \dot{d}^+_{-q}\, d^+_{-q'} \rangle = i(\omega_q + \omega_{q'}) \langle d^+_{-q'}\, d^+_{-q'} \rangle$$

$$+ 2iV \langle b^+_{q'-q} \rangle \cdot (1 + n_{q'} + n_q)$$

spontane Prozesse

stimuliert

$\langle d^+_{q'} d_{q'} \rangle$ = Boseverteilung $n_{q'}$

gekoppeltes System, ist lösbar und führt zu einer

Lebensdauer v. opt. Phononen.

offensichtlich führt die Ausbreitung b^+_q in (2) zu einer

Anregung v. 2 Phononen (akustische), diese wirken auf b^+_q

über (1) zurück und lassen zum E-Verlust in b^+_q führen