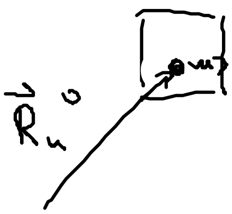
2.3 Phononmoden $(j, \vec{q})$: Klassifizierung u. Anzahl

s-tes Ion in n-ter Zelle, gekoppelt an andere Ionen



$\vec{u}_{ns} = \{ u_{ns}^{\alpha} \}$ α: 3 kartesische Koordinaten

Ansatz zur Entkopplung: $u_{ns}^{\alpha} = A_s^{\alpha}(q) \dfrac{e^{i(\vec{q}\vec{a}_n - \omega(q)t)}}{\sqrt{m_s N}}$

aus Newtongleichung

$$\underline{\underline{\omega_j^2(q)}}\;\underline{A_s^{\alpha}(q)} = \sum_{\beta s'} \left(\sum_m \phi_{\alpha\beta}^{n-m}(ss') \frac{e^{i\vec{q}(\vec{a}_m - \vec{a}_n)}}{\sqrt{m_s m_{s'}}} \right) \underline{A_{s'}^{\beta}}$$

Matrixgleichg. zur Bestimmung von $A_s^{\alpha}(q)$, $\omega_j(q)$

→ $\omega_j = \omega_j(q)$ als Eigenwert einer $(3 \cdot p \times 3 \cdot p)$ Matrix

und beschreibt die Wellendispersion

von β: x, y, z

p maximale Zahl der Atome / Zelle

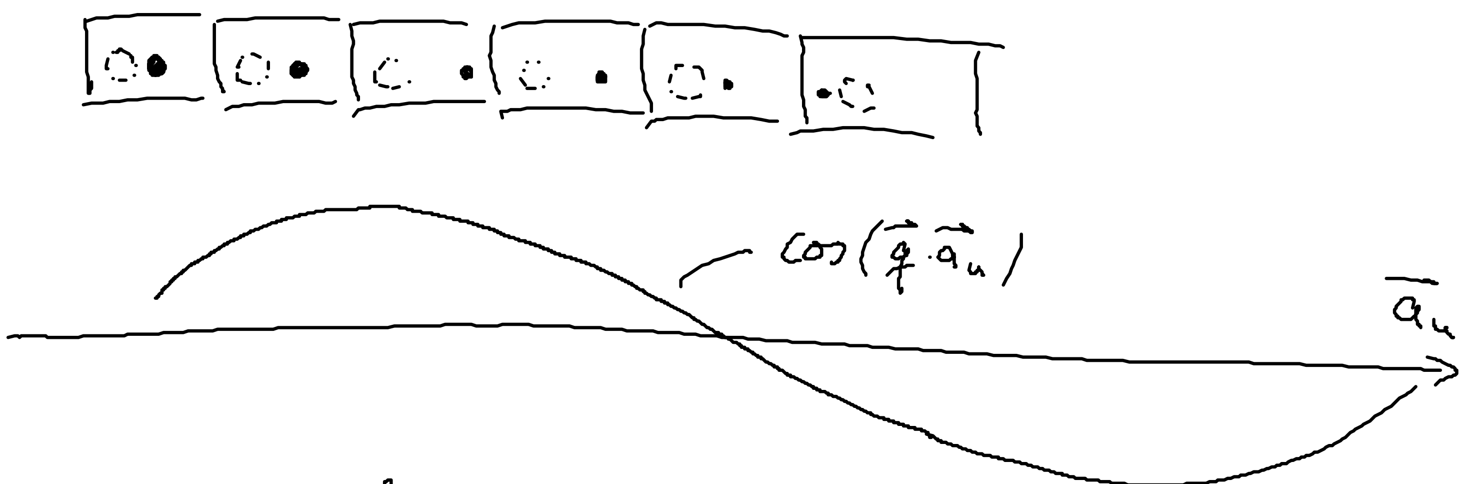
→ $A_s^{\alpha}(q, j)$ als Eigenvektoren,

beschreiben die Richtg. und Wellenzahlabhängigkeit der Auslenkung des s-ten Atoms

$$u_{ns}^{\alpha} = \sum_{j,q} A_s^{\alpha}(q,j)\, e^{i(\vec{q}\cdot\vec{a}_n - \omega_j(q)\, t)} \frac{1}{\sqrt{m_s N}}$$

Summe über alle Quantenzahlen des vollständigen Systems

t = fest (Blitzlichtaufnahme)



Die Klassifizierg. der Moden j wird durch „akustisch" und „optisch" vorgenommen ($\vec{q} = 0$)

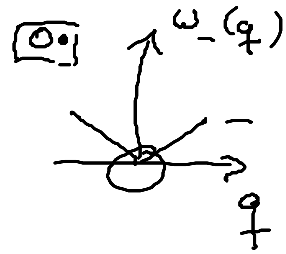
Die Mode j wird „akustisch" genannt wenn $\omega_j(0) = 0$

Die Mode j wird „optisch" genannt wenn $\omega_j(0) \neq 0$

Zum Verständnis der Namen: Matrixgleichung

$$A_s^\alpha(q) \to \underbrace{\tilde{A}_s^\alpha(\vec{q})}_{\sim\, u_{ns}^\alpha} \sqrt{m_s} \,, \quad \vec{q} \to 0$$

$$m_s \, \omega_j^2(0) \, \tilde{A}_s^\alpha(0) = \sum_{\beta s'} \sum_m \phi_{\alpha\beta}^{n-m}(s,s') \, \tilde{A}_{s'}^\beta(0)$$



a) akustische Moden $\omega_j(0) = 0$

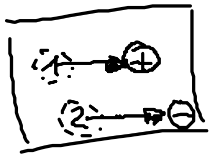
weil $\sum_{m s'} \phi_{\alpha\beta}^{n-m}(s,s') = 0$ erfüllt sein muß

(aus Translationsbewegg.!, vorige VL),

muß gelten $\tilde{A}_{s'}^\beta \to A^\beta$

darf nicht von s' abhängen

weil $u_{ns}^\alpha \sim A^\alpha \to$ Alle Ionen in Zelle bewegen sich gleich!



insbesondere ∄ zeitlich veränderlicher Dipol und damit keine Kopplung an elektromagnetische Felder.

b) optische Moden: $\omega_j(0) \neq 0$

$\sum_s$ bilden der Matrixgleichung

$$\sum_s m_s \, \omega_j^2(0) \, \tilde{A}_s^\alpha(0) = \sum_{\beta s'} \underbrace{\sum_{s_n} \phi_{\alpha\beta}^{a-n}(s,s')}_{=0,\ \text{wie oben}} \tilde{A}_{s'}^\beta(0)$$

$$\sum_s m_s \tilde{A}_s^\alpha(0) = 0$$

Der Schwerpunkt aller Ionen in Zelle muß immer fest liegen,

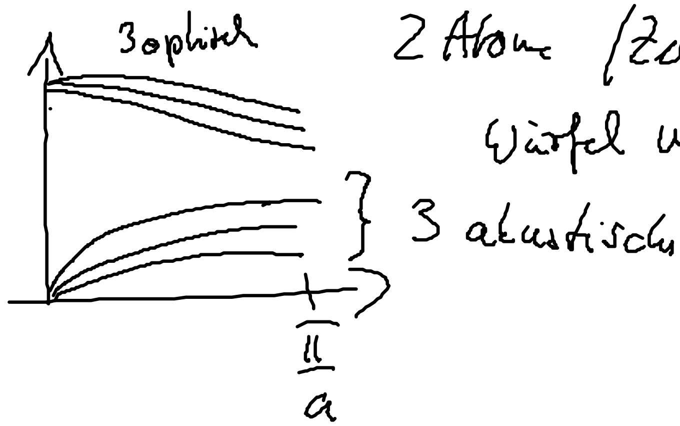
$\tilde{A}_s^\alpha \sim u_{ns}^\alpha$, daher

$$u_{n1} < 0 \Rightarrow u_{n2} > 0$$

$t_1 < t_2$ ⟹ Zeitlich veränderlicher optischer Dipol

⟹ Kopplg. an elektromagnetische Felder

Bsp 1 Ge $\quad j = 1 \dots 3p = 1 \dots 6$



2 Atome / Zelle

Würfel mit $l = a$

Bsp 2 eindimensionales 2atom Gitter

$$\det \begin{pmatrix} \left(\frac{\Phi}{m_1} - \omega^2\right) & -\frac{\Phi}{\sqrt{m_1 m_2}}\cos(qa) \\ -\frac{\Phi}{\sqrt{m_1 m_2}}\cos(qa) & \left(\frac{\Phi}{m_2} - \omega^2\right) \end{pmatrix} = 0$$

$$\left.\frac{A_1}{A_2}\right|_{q=0} = \frac{\Phi/\sqrt{m_1 m_2}}{\frac{\Phi}{m_1} - \omega_j^2(0)} = \begin{cases} \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} & \omega_- = 0 \\ -\sqrt{\frac{m_2}{m_1}} & \omega_+ \neq 0 \end{cases}$$

$$\frac{\tilde{\hat{A}}_1}{\tilde{\hat{A}}_2} = \frac{u_1}{u_2} = 1 \quad \text{f. } \omega_- = 0 \Rightarrow \text{akustisch}$$

$$\frac{m_1 \hat{A}_1}{m_2 \tilde{\hat{A}}_2} = \frac{u_1}{u_2} = -1 \quad \text{f. } \omega_+ \neq 0 \Rightarrow \text{optisch}$$

3. Das Phonon als Quasiteilchen

Konzept des Quasiteilchens:

Gitterionen (u) mit starker Wechselwirkung	$\xrightarrow[\text{auf Quasiteilchen}]{\text{mathem. Trafo}}$	Phononen mit schwacher Wechselwirkung

$\downarrow$

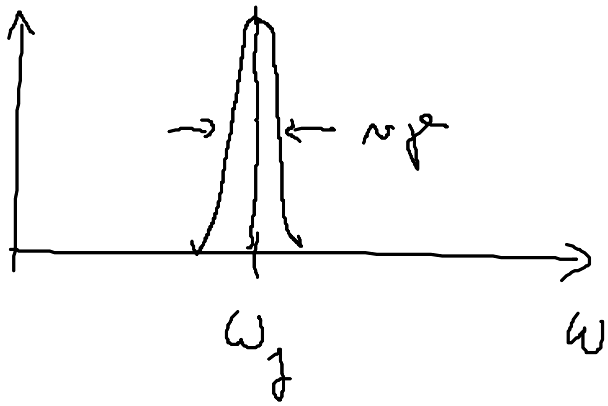
$H_{ph\text{-}ph} \approx u\,u\,u$

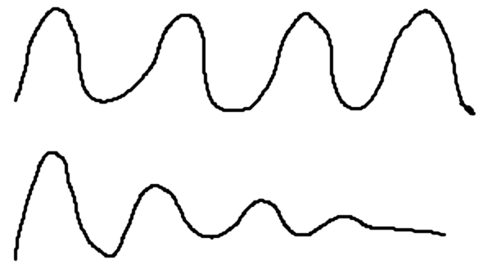
echte Teilchen $\longrightarrow$ Quasiteilchen

charakterisiert durch Dispersion $\omega = \omega(q)$

Phonon : $e^{i\omega(q)t}$ lebt für immer, keine Dämpfg.

WW Phonon : $e^{(i\omega(q)-\gamma)t}$ also gedämpft





Ein gutes Quasiteilchen muß $\omega_j \gg \gamma$ haben.

3.1. Wechselwirkungspotential der Phononen

$$H_{ph-ph} = \frac{1}{3!} \sum_{1,2,3} \phi_{123}\, u_1\, u_2\, u_3$$

Phonon-Phonon-WW

$$[1] \hat{=} [m_1, s_1, \alpha_1]$$

beschreibt die Terme jenseits quadratischer Auslenkg.,
muß quantisiert werden.

$$(b^+_{qj}, b_{qj}) \Longleftrightarrow (u^\alpha_{ms}, p^\alpha_{ms})$$

$$H_{ph\text{-}ph} = \frac{1}{3!} \sum_{1,2,3} \Phi^{m_1 m_2 m_3}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} \frac{A^{\alpha_1}(q_1, j_1)\, A^{\alpha_2}(q_2, j_2)\, A^{\alpha_3}(q_3, j_3)}{\left(\omega_{j_1}(q_1)\, \omega_{j_2}(q_2)\, \omega_{j_3}(q_3)\right)^{1/2}}$$

einatomiges Gitter ~~S~~

$$\cdot\, e^{i\left(\vec{q}_1 \vec{a}_{m_1} + \vec{q}_2 \vec{a}_{m_2} + \vec{q}_3 \vec{a}_{m_3}\right)}$$

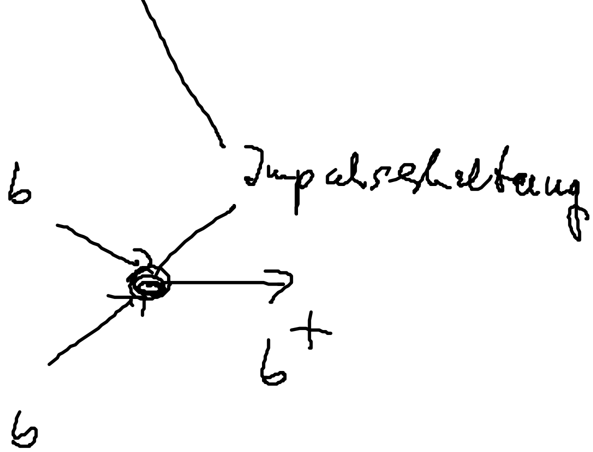
$$\cdot \left(b^+_{-q_1 j_1} + b_{q_1 j_1}\right)\left(b^+_{-q_2 j_2} + b_{q_2 j_2}\right)\left(b^+_{-q_3 j_3} + b_{q_3 j_3}\right)$$

$$\underbrace{\Phi^0 = \Phi^{m_1 - m_3,\, m_2 - m_3} \quad \text{analog} \quad \Phi^{n-m}}_{\text{Bedingg. f. Impulserhaltg.}}$$

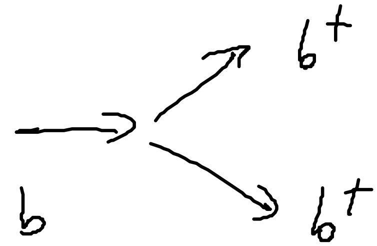
$$H_{ph\text{-}ph} = \sum_{\substack{q_1 q_2 q_3 \\ j_1 j_2 j_3}} V^{q_1 q_2 q_3}_{j_1 j_2 j_3}\, \delta_{-q_3,\, q_1 + q_2} \left(b^+_{-q_1 j_1} + b_{q_1 j_1}\right)\left(b^+_{-q_2 j_2} + b_{q_2 j_2}\right)\left(b^+_{-q_3 j_3} + b_{q_3 j_3}\right)$$

Interpretation:

Phonon fusion: $b^{+} b b$



Phononspaltung $b^{+} b^{+} b$



Vernichtg. v 3 Phonon

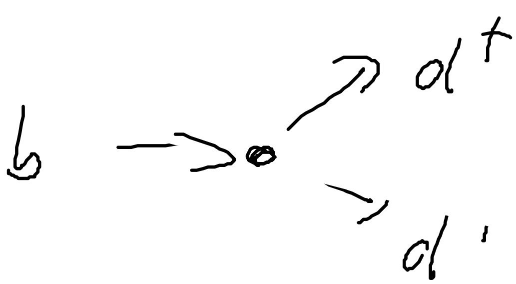
energetisch <u>nur</u> auf kurzen Zeiten erlaubt

Konsequenze f. Phononmode

3.2. Phononlebensdauer

Annahme: optische Mode b^{+}, b $\quad j = 1$

akustische Mode d^{+}, d $\quad j = 2$



Zerfall eines optischen in 2 akustische Phononen

$$H_{pl-ph} = \sum_{q_1 q_2 q_3} \tilde{V} \left(b^+_{-q_1} + b_{q_1}\right)\left(d^+_{-q_2} + d_{q_2}\right)\left(d^+_{-q_3} + d_{q_3}\right)\delta_{-q_3, q_1+q_2}$$

$\tilde{V}$ ← konstant

$\langle b^+ \rangle, \langle b \rangle \sim u \;\hat{=}$ optische Phononwelle

$$-i\hbar\, \dot{b}^+_{-q} = \underbrace{\left[H_{ph}, b^+_{-q}\right]}_{1} + \underbrace{\left[H_{ph-ph}, b^+_{-q}\right]}_{2}$$

$$1\;\left[\sum_{q'} \hbar\omega_{q'} b^+_{q'} b_{q'}, b^+_{-q}\right] = \hbar\omega_q\, b^+_{-q} \quad (\text{freie Bewegung})$$

$$2\;\left[\sum_{1,2,3} V \delta_{-q_3, q_1+q_2}\left(b^+_{-q_1} + b_{q_1}\right), b^+_{-q}\right]\left(d^+_{-q_2} + d_{q_2}\right)\left(d^+_{-q_3} + d_{q_3}\right)$$

$$= \sum_{1,2,3} V \delta_{-q_3, q_1+q_2}\, \underline{\underline{\delta_{q_1, -q}}} \;\leftarrow\; -\,\text{''}\,-$$

Bewegungsgl. f. $\overset{\circ}{b}{}^{+}_{-q}$

$$\dot{b}^{+}_{-q} = \underbrace{i\omega^{0}_{q}}_{\substack{\text{optische}\\\text{Mode}\\\text{(freie Bewegg.)}}} b^{+}_{-q} + \underbrace{i \sum_{2,3} V \delta_{-q_3,-q+q_3} \Big(\underline{d^{+}_{-q_2} d^{+}_{-q_3}} + d^{+}_{-q_2} d_{q_3} + d_{q_2} d^{+}_{-q_3} + d_{q_2} d_{q_3} \Big)}_{\text{Störung}}$$

$$\to \frac{V}{\hbar}$$

Idee: wenn man $\langle \cdot \rangle$ Erwartungswert nimmt,

so entsteht „irgendwie"

$$\langle \dot{b}^{+} \rangle = i\omega^{0}_{q} \langle b^{+} \rangle \underline{\underline{-\gamma}} \langle b^{+} \rangle$$

Man erkennt das Hierarchieproblem!

Operatoren die Observablen darstellen werden durch „höhere" Produkte von Operatoren bestimmt,

$\longrightarrow$ <u>man muß geschickt abbrechen</u>!

der nächste Schritt ist die Herleitung von

$d^{+} d^{+}$ um den Erzeugungsprozeß von 2 akustisch Phonon zu beschreiben und dessen Einfluß auf Ausbreitung der opt. Phononwelle

$$\frac{d}{dt}\left(d^{+}_{-q}\, d^{+}_{-q'}\right) = \dot{d}^{+}_{-q}\, d^{+}_{-q'} + d^{+}_{-q}\, \dot{d}^{+}_{-q'}$$

aus Heisenbergbewegungsgl.