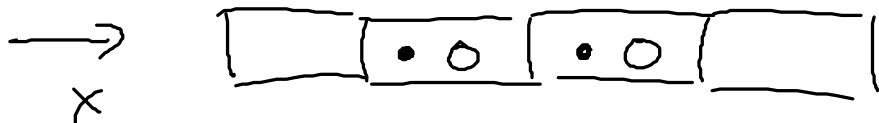


1.2. Lineares, 2atomiges Gitter - Bsp. f. akust. u. optische Phononen

ein dimensionale Struktur mit 2 Ionen pro Zelle $(\bullet \circ)$
 m_1, m_2



Ziel: Matrix $\overset{\leftarrow}{C}$: Eigenwerte zu bestimmen

den da sind Normal Schwingungen (Moden)

$$C(\alpha, \beta, s, s')$$

α, β kartesische Nummer des Atoms in Zelle
 s, s' Koordinate

$s, s' = 1, 2 \quad (\bullet, \circ) \rightarrow C$ ist eine 2×2 Matrix

$$C_{ss'} \equiv \sum_m \phi_{ss'}^{um} e^{-i\vec{q}(\vec{a}_n - \vec{a}_m)} \frac{1}{\sqrt{m_s m_{s'}}}$$

Kraftkonstante

u -beliebig, $u=0$, $\vec{a}_n = 0$ wegen Periodizität

$$0 = \det \begin{pmatrix} C_{11} - \omega^2 & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} - \omega^2 \end{pmatrix}$$

$$\phi_{ss'}^{um} : m_s \ddot{u}_{sn} = - \sum_{m,s'} \phi_{ss'}^{um} u_{s'm} \quad (u=0)$$

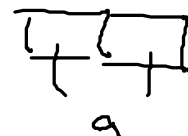
hier m_p man Kraftkonstante
einheiten (gegeben)

Nebenbedingung: $\sum_{m,s'} \phi_{ss'}^{um} = 0$

aus der Bewegungsgleichung durch eine
Translation $\forall u_{s'm}$ in derselben Art und Weise
(konstante Verschiebung $\rightarrow u_{s'm} = \text{konstant}$)

$$C_{ss'} = \frac{1}{\sqrt{m_s m_{s'}}} \sum_m \phi_{ss'}^{um} e^{i q u a}$$

a - Länge einer Elementarzelle

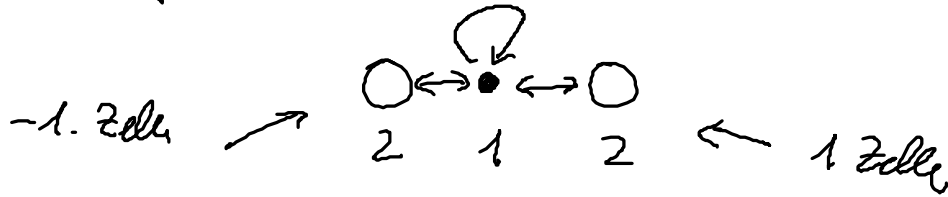


$$\phi_{ss}^m \equiv \phi = \text{bekannt} \hat{=} \text{Rückstellkraft auf } 1 \text{ cm}$$

wenn an ihm gezogen wird, $\phi_{ss'}^u$ liegt dann fest:

$$\sum_{u s'} \phi_{ss'}^u = 0 = \underline{\underline{\phi_{12}^1}} + \underline{\underline{\phi_{12}^{-1}}} + \underline{\underline{\phi_{11}^0}}$$

für festes $s=1$ $= \phi$



Näherung: nächste Nachbarkopplung: $\phi_{12}^1 = \phi_{12}^{-1}$

$$\phi_{12} = -\frac{\phi}{2}$$

Konkret aufschreiben:

$$C^{12} = -\frac{\phi}{2\sqrt{m_1 m_2}} (e^{iqa} + e^{-iqa}) = -\frac{\phi}{\sqrt{m_1 m_2}} \cos(qa)$$

$$(C^{12})^* = C^{21}$$

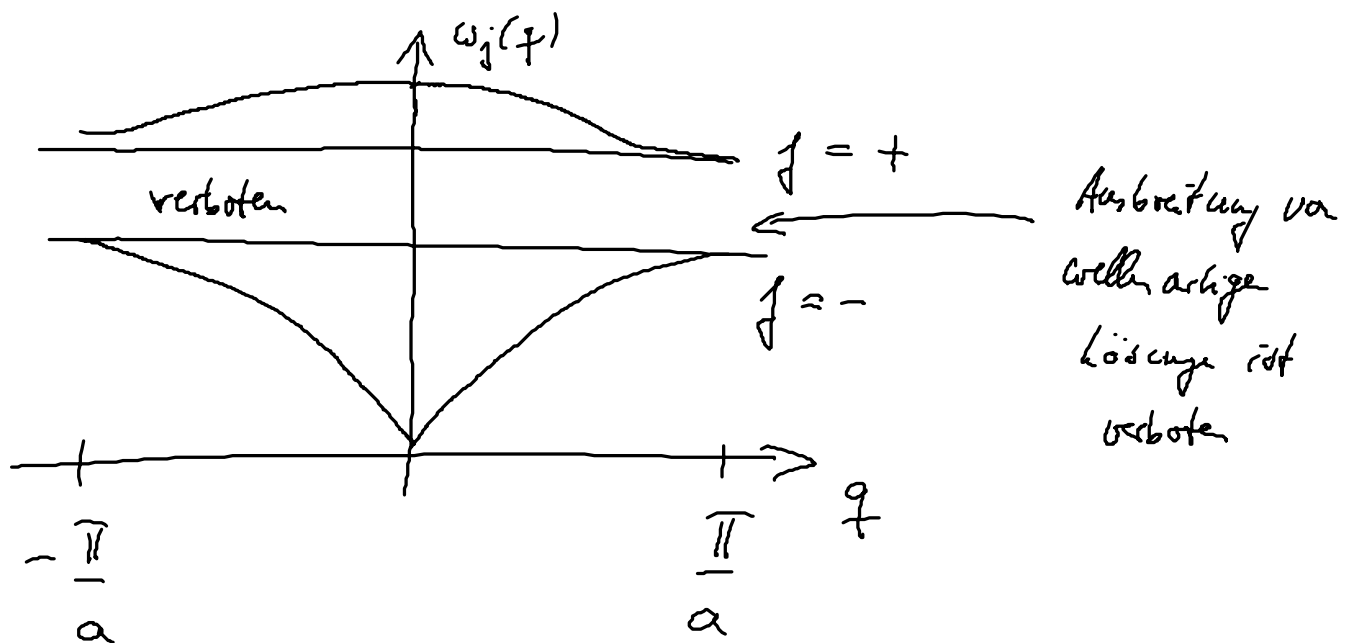
$$C^{11} = \frac{\phi}{m_1}, C^{22} = \frac{\phi}{m_2}$$

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

$$\omega_j^2(q) = \frac{\phi}{2} \left(\frac{m_1 + m_2}{m_1 \cdot m_2} \right) \left(1 \pm \left(1 - \frac{4 m_1 m_2 \sin^2 qa}{(m_1 + m_2)^2} \right)^{1/2} \right)$$


$$j = \begin{matrix} + \\ - \end{matrix}$$

Dispersionsrelation des 2atomigen linearen Gitters,
es existieren 2 Lösungen $j = \pm$, für jedes q



man kann zur Interpretation die Ausbreitung anschauen.

$$U_{us}(t) = \sum_j A_s(q, j) e^{i(aq_{ut} - \omega_j t)} \frac{1}{\sqrt{\mu_u N_0}}$$

u-te Zeile

 s=1 s=2

↑
 ergeben sich
 aus Matrix
 wenn ω_j eingesetzt

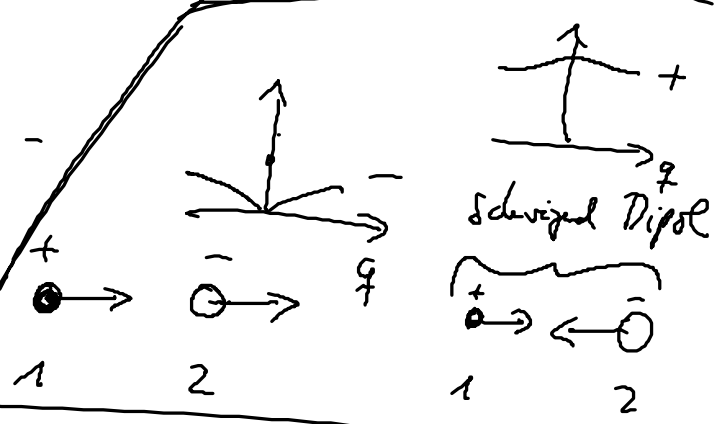
$$j = \pm \rightarrow A_s(q, j)$$

$$\rightarrow \frac{A_1}{A_2} = \frac{\phi - \omega^2 \mu_1}{\phi} = \begin{cases} 1 & j = - \\ 0 & j = + \end{cases}$$

$q \rightarrow 0$ um die Gitterbewegung zu ersetzen

Interpretation der $j = -$

$$\rightarrow A_1 = A_2$$



Käuflich VL nochmal

2. Quant und ant der Kristall Schwingungen

2.1. Hamilton funktion

$H = H(u_{s\alpha}, p_{s\alpha}) \xrightarrow{\text{Ziel}}$ Normalmod, in dem die $u_{s\alpha}$ nicht gekoppelt sind

Wir hoffen die gekoppelte Oszillatoren durch neue koordinat als ungekoppelte Oszillatoren zu beschreiben

$$u_s^{1,2} u_{s\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}, j} A_s^\alpha(\vec{q}, j) e^{i\vec{q} \cdot \vec{a}_n} Q_j(\vec{q}, t)$$

vollständiges System in der 2-Teil.

S-k Atom in

u-to Zelle in Richtung $\alpha(x, y, z)$

$Q_j(\vec{q}, t)$ sind die Erweichungskoeffizienten und

den $u_{s\alpha}$ mit Hilfe des vollständigen Systems

$e^{i\vec{q} \cdot \vec{a}_n} A_s(\vec{q}, j)$ im \vec{q}, j -Raum entwickelt wird.

Vollständigkeit / Orthogonalität:

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

$$\frac{1}{N} \sum_m e^{i(\vec{q}_2 + \vec{q}_1) \cdot \vec{a}_m} = \delta_{\vec{q}_1, -\vec{q}_2}$$

Versuch den H als Funktion von Q_j darzustellen:

$$H = H_{kin} + H_{pot} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{m, s \\ \alpha}} u_s \left(\dot{u}_{sm}^\alpha \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{(i,j)} \phi_{\alpha_1 \alpha_2}^{u_1 u_2} (s_1, s_2) u_{s_1 m_1}^{\alpha_1} u_{s_2 m_2}^{\alpha_2}$$

Ausatz f. u_{ms}^α wird jetzt eingesetzt,

Ergebnis:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{q, i, j} \left(\dot{Q}_j^*(q, t) \dot{Q}_j(q, t) + \omega_j^2(q) Q_j^*(q, t) Q_j(q, t) \right)$$

also ungekoppelte harmonische Oszillatoren!

(man summiert über alle mögl. Modi q, i, j)

jeder einzelne Modus ist Oszillator:

„Normalmoden“ weil ungekoppelt

am Beispiel der kinetischen Energie vorrechnen:

$$\frac{1}{2} \sum_{ms\alpha} m_s (\dot{a}_{sm}^\alpha)^2 =$$

$$\frac{1}{2} \sum_{ms\alpha} \frac{1}{N} \sum_{j_1 j_2} A_s^\alpha(q_1, j_1) A_s^\alpha(q_2, j_2) e^{i(\vec{q}_1 \vec{a}_m + \vec{q}_2 \vec{a}_m)} \dot{Q}_{j_1}(q_1) \dot{Q}_{j_2}(q_2)$$

Anzahl der Zellen

$$= \left| \begin{array}{l} = \delta_{j_1 j_2} \\ = \delta_{q_1, -q_2} \end{array} \right| = \sum_{j_1 j_1} \dot{Q}_{j_1}(q_1) \dot{Q}_{j_1}(-q_1)$$

es gilt: $Q_j(-q, t) = Q_j^*(q, t)$

(zum Beweis $u_{ms}^\alpha = \sum_q \leftrightarrow \sum_{q \rightarrow -q}$)

$$H_{kin} = \sum_{j, q} \frac{1}{2} \dot{Q}_j^*(q) \dot{Q}_j(q)$$

Beweis f. die potentielle Energie erfolgt analog.

Aufstellung der Hamiltonfunktion:

$$L = T - V = \frac{1}{2} \sum_{j,j'} \left(\dot{Q}_j^*(q) \dot{Q}_{j'}(q) - \omega_j^2(q) Q_j^*(q) Q_{j'}(q) \right)$$

$$P_j(q) = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_j(q)} = \dot{Q}_j^*(q)$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j,j'} \left(\underline{P_j^*(q) P_{j'}(q)} + \omega_j^2(q) \underline{Q_j^*(q) Q_{j'}(q)} \right)$$

klass. harmon. Oszillators: $H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{k^2}{2} x^2$

Man hat also eine Summe ungekoppelter harmonischer Oszillatoren

2.2. Quantisierung der Gitterschwingungen

a) klassisch Amplituden $P_j Q_j \rightarrow \underline{P_j}, \underline{Q_j}$ + Vertauschungsrelationen

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

folgt aus / konsistent mit:

$$[P_{sm}^\alpha, Q_{sm'}^{\alpha'}] = -i\hbar \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{ss'} \delta_{mm'}$$

b) Einführung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die Oszillatordröße P, Q :

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

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

c) einsetz in den Hamiltonian:

$$H = \sum_{j,j'} \hbar\omega_j(q) \left(b_{jj}^+ b_{jj} + \frac{1}{2} \right)$$

Reduzierung: siehe Quantenmechanik

Bemerkungen:

(i) Der Hamiltonian des Gitterschwingungen läßt sich als Summe über ungekoppelte Oszillatoren schreiben, die Summe läuft über alle Modi j, q .

es gibt $3Np$ Modi

N - Anzahl der Zellen } $q = 1 \dots N$
 p - Anzahl der Atome pro Zelle } $j = 1 \dots 3p$
 3 - 3d. Festkörper

$\omega_j(q)$ muß aus der C -Matrix berechnet

werden (Eigenwertproblem für $\omega_j^2(q)$)

$b_{qj}^\dagger b_{qj}$ ist der Teilchenzahloperator

Spreadweise: b_{qj}^\dagger "erzeugt" ein Quant in Mode qj

b_{qj} "vernichtet" — " —

(ii) Eigenzustände des H :

für ein Oszillator q, j sind die Eigenzustände

$$|u_{qj}\rangle = \frac{1}{\sqrt{u_{qj}!}} \left(b_{qj}^\dagger\right)^{u_{qj}} |0\rangle$$

$$E_{qj} = u_{qj} \epsilon_{qj}(q)$$

bzw. Produktzustände aller Zustände $|u_{qj}\rangle$

für die Gesamtkonstante a mit der Summe

aller E_{qj} für die Gesamtempie

(iii) im folgendem ist der Mittelwert

$$\text{von } \hat{u}_{qj}, \text{ also } \langle \hat{u}_{qj} \rangle = u_{qj}$$

eine Funktion der Umgebungstemperatur:

$$u_{qj} = \int_{qj}^{\rho_B} = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{qj}(q)}{kT}} - 1}$$

Bose-Verteilung