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

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

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

Ansatz zur Entkopplung: $\quad u^{\alpha}_{ns} = A^{\alpha}_{s}(q) \dfrac{e^{i(\vec{q}\vec{a}_n - \omega(q)t)}}{\sqrt{m_s N}}$

an Newtongleichung

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

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

→ $\omega_j = \omega_j(q)$ 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

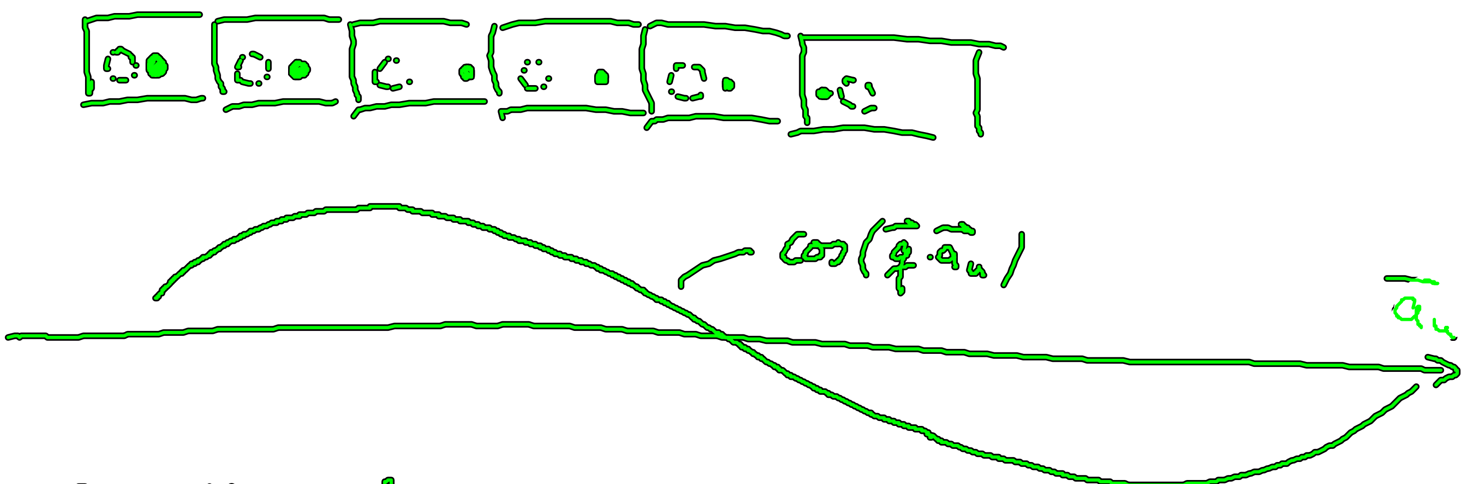
→ $A^{\alpha}_{s}(q,j)$ als Eigenvektoren,

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

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

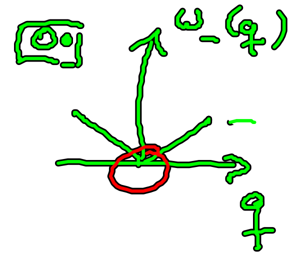
Die Mode j wird „optisch“ genannt wenn $\omega_j(0)\neq 0$

Zum Verständnis der Namen: Matrixgleichg

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

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

<u>a) akustische Moden</u> $\omega_j(0)=0$



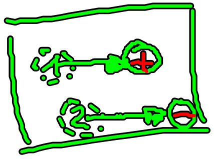
weil $\sum_{ms'}\phi_{\alpha\beta}^{n-m}(s,s')=0$ erfüllt sein muß

(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

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

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

alle Ionen in Zelle

Der Schwerpunkt muß immer fest liegen,

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

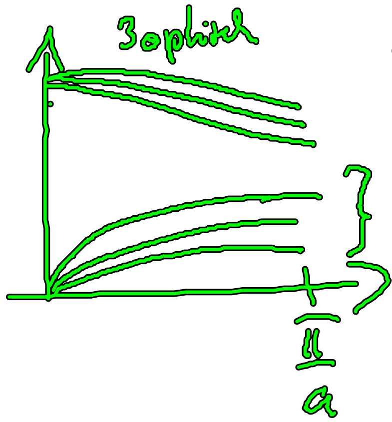
$$u_{n1} < 0 \longrightarrow u_{n2} > 0$$

$t_1 < t_2$

$\Longrightarrow$ zeitlich veränderlicher optischer Dipol

$\Longrightarrow$ Kopplg. an . . elektromagnetische Felder

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



2 Atome / Zelle
Würfel mit $l = a$

Bsp 2 eindimensionales 2atom Gitter

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

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

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

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

3. Das Phonon als Quasiteilchen

Konzept des Quasiteilchens:

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

$\downarrow$

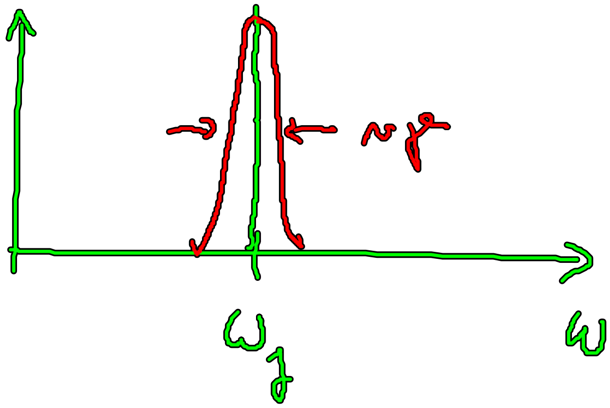
$H_{ph\text{-}ph} \approx u\,u\,u$

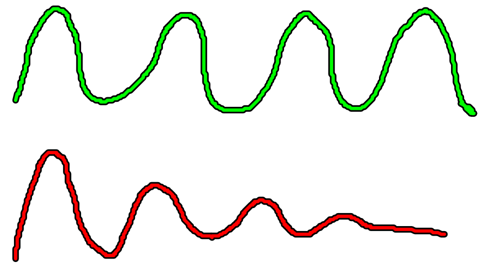
echte Teilchen $\longrightarrow$ Quasiteilchen

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

Phonon: $e^{i\omega(q)t}$ lebt f. 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.

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

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

einatomige Gitter ~~α~~

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

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

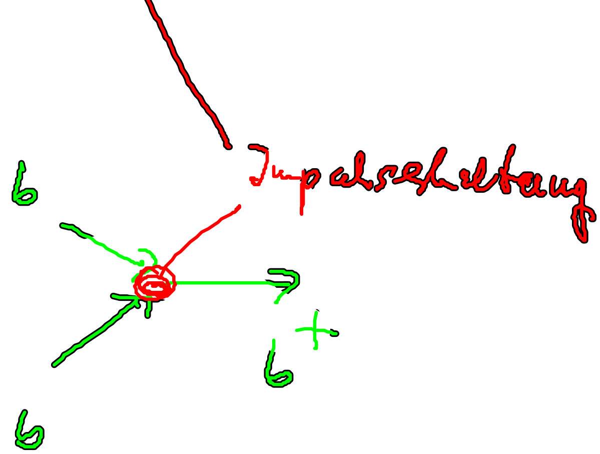
$$\underbrace{\phi = \phi^{m_1 - m_3,\, m_2 - m_3} \quad \text{auch} \quad \phi^{n-m}}$$

Bedingg. f. Impulserhaltg.

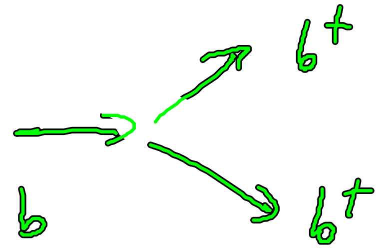
$$H_{ph-ph} = \sum_{\substack{q_1 q_2 q_3 \\ j_1 j_2 j_3}} V^{q_1 q_2 q_3}_{j_1 j_2 j_3}\, \delta_{-q_3, q_1 + q_2} \left(b^+_{-q_1 j_1} + b_{q_1 j_1}\right)\left(b^+_{-q_2 j_2} + b_{q_2 j_2}\right)\left(b^+_{-q_3 j_3} + b_{q_3 j_3}\right)$$

Interpretation:

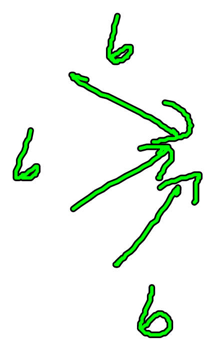
Phonon fusion: $b^+ b b$



Phononspaltung $b^+ b^+ b$



Vernichtg. v 3 Phonon



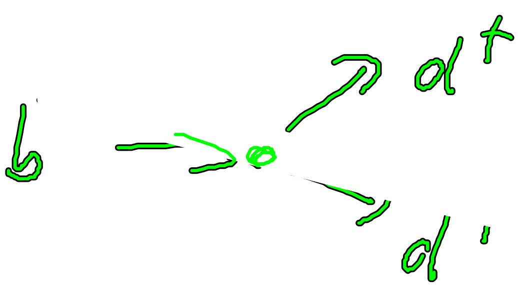
energetisch nur auf kurzen Zeiten erlaubt

Konsequenze f. Phononmode

3.2. Phononlebensdauer

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

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



Zerfall ein optisch in 2 akustisch ph.

$$H_{ph-ph} = \sum_{q_1 q_2 q_3} \underbrace{\tilde{V}}_{\text{Konstant}} (b^+_{-q_1} + b_{q_1})(a^+_{-q_2} + a_{q_2})(a^+_{-q_3} + a_{q_3})\, \delta_{-q_3, q_1+q_2}$$

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

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

1 $\left[\sum_{q'} \hbar\omega_{q'} b^+_{q'} b_{q'}, b^+_{-q}\right] = \hbar\omega_q b^+_{-q}$ (frei Bewegg.)

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

$$= \sum_{1,2,3} V \delta_{-q_3, q_1+q_2} \delta_{q_1, -q} \quad \text{— " —}$$

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

$$\dot{b}^+_{-q} = i\underbrace{\omega^0_q}_{\substack{\text{optische}\\\text{Mode}\\\text{(freie Bewegg.)}}} b^+_{-q} + i\sum_{q_3} \underbrace{V\delta_{-q_3,-q+q_3}}_{\to \frac{V}{\hbar}} \underbrace{\left(d^+_{-q_2} d^+_{-q_3} + d^+_{-q_2} d_{q_3} + d_{q_2} d^+_{-q_3} + d_{q_2} d_{q_3}\right)}_{\text{Störung}}$$

Idee: wenn man $\langle\cdot\rangle$ Erwartungswert nimmt, so entsteht „irgendwie“

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

Man erkennt das Hierarchieproblem!
Operatoren die Observablen darstellen werden durch „höhere“ Produkte von Operatoren bestimmt,
→ man muß geschickt abbrechen!

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.