Phononen (Fortsetzung)

Ergebnis des allgemeinen Phononhamiltonians:

$$\Big\| \quad H_{ion} = \sum_{j,q} \hbar\omega_{q,j} \left(b^{\dagger}_{q,j}\, b_{q,j} + \frac{1}{2} \right) \quad \Big\|$$

Hamiltonoperator der Kristallschwingungen

(i) Die Quasiteilchen (Quasi, da es sich etw. wie ein Teilchen verhält (vgl. 2. Quantisierung), obwohl dies kollektive Anregungen sind) der Kristallschwingungen werden mit $b^{\dagger}_{q,j}$, $b_{q,j}$ erzeugt und vernichtet.
Sie heißen Phononen!

(ii) Die Vertauschungsrelationen von $b^{\dagger}, b$ haben ein Verhalten wie Boseteilchen. Damit sind die Phononen masselose Bosonen. $\Rightarrow$ Jeder Zustand mit beliebig vielen Teilchen besetzbar!

(iii) Die Form mit Erzeuger Vernichter ist für theoretische Formulierung vorteilhaft. Wir führen diese auch für andere Felder ein: Photonenfeld, Elektronenfeld. Details im Abschnitt über zweite Quantisierung.

(iv) Gitterschwingungen haben Nullpunktsenergie (Quantenfluktuationen)

(v) Energie der Gitterschwingungen ist gequantelt.

(vi) Eigenzustände sind die Phononzahlzustände:

$$| \{n_{q,j}\} \rangle = | n_{q_1,j_1} \ldots \ldots n_{q_n,j_n} \ldots \rangle = \frac{b_{q_1 j_1}^{+\, n_{q_1 j_1}}}{\sqrt{n_{q_1 j_1}!}} \cdots \frac{b_{q_n j_n}^{+\, n_{q_n j_n}}}{\sqrt{n_{q_n j_n}!}} \cdots |0\rangle$$

Zustände mit $n_{q_1 j_1} \ldots n_{q_n j_n}$ – – – – – – –
Phononen in den Moden $q_1 j_1, \ldots q_n j_n \ldots$

(vii) Phononen sind Bosonen, die mittlere Besetzung wird über die Bose-Einstein-Verteilung bestimmt

$$n_{q,j} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_j(q)/(k_B T)} - 1}$$

(viii) Auslenkungen der Ionen mit b und b^+ dargestellt werden können:

$$u_{i\mu\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{M_\mu N}} \sum_{jq} A^\alpha_{\mu j}(q)\, e^{i q \cdot R_i} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{qj}}} \left(b^+_{q,j} + b_{q,j}\right)$$

D.h. $u_{i\mu\alpha}$ hängt direkt von $b^+_{q,j}, b_{q,j}$

Bei thermischer Besetzung:

$$\langle b^+_{q,j} \rangle = 0 \Rightarrow \langle u_{i\mu\alpha} \rangle = 0$$

d.h. die mittleren Auslenkungen verschwinden (keine kohärenten Schwingungen)

Aber die Standardabweichung der Auslenkung

$$\sigma^2 = \langle (\langle u \rangle - u)^2 \rangle \neq 0$$

D.h. die Phononen schwanken um den Mittelwert!

$$\sigma_{q,j}^2 \propto (2 n_{q,j} + 1)$$ erhöht sich mit Temperatur!

(xi) Bislang nur harmonische Näherung.

Anharmonische Effekte z.B. u^3 führen zu Zerfallsprozessen:

$$H_{anh} \propto b^{+}_{q_1 j_1} \, b_{q_2 j_2} \, b_{q_3 j_3} + h.c.$$

wo ein Phonon in niederenergetische Phononen zerfällt!

(Endliche Lebensdauer der Quasiteilchen)

IV.4 Anwendung: die Wärmekapazität

Dieser Abschnitt berechnet den Beitrag der Phononen zur spezifischen Wärmekapazität

Betrachten wir die mittlere Energie der Phononen:

$$\langle H \rangle = E = \sum_{jq} \Big[\underbrace{\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_{qj}}{k_B T}\right) - 1}}_{\text{Bose Verteilung}} + \frac{1}{2} \Big) \hbar \omega_{jq}$$

1) <u>Hochtemperaturlimes:</u> ($k_B T \gg \hbar \omega_{q,j}$, $\frac{\hbar \omega_{qj}}{k_B T}$ klein

$$\frac{1}{\exp(x) - 1} = \frac{1}{x} - \frac{1}{2} + \frac{x}{12} + \ldots)$$

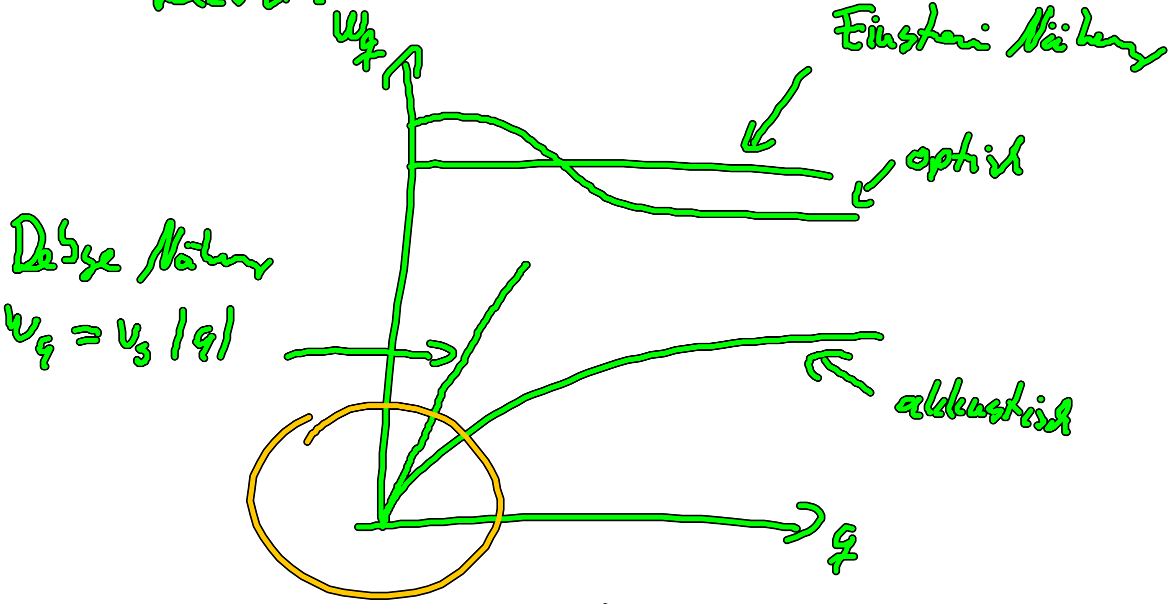
$$\underset{k_B T \gg \hbar\omega_{qj}}{E =} \sum_{jq} \Big[\frac{k_B T}{\hbar \omega_{qj}} - \frac{1}{2} \frac{\hbar \omega_{qj}}{k_B T / 12} + \ldots + \frac{1}{2} \Big) \hbar \omega_{jq}$$

$$= \underbrace{\sum_{jq} k_B T}\Big(1 + \frac{1}{2}\Big(\frac{\hbar \omega_{qj}}{k_B T}\Big)^2\Big)$$

$$\simeq 3 r N k_B T$$ Ergebnis des Dulong-Petit

2) Niedrigtemperatur Limes

Wegen der hohen Energie der optischen Phononen nur akustische Phononen relevant:



$$E\Big|_{akku} = \sum_{jq} \frac{\hbar v_{s_j} |q|}{\exp\left(\frac{\hbar v_{s_j} |q|}{k_B T}\right) - 1} + \underbrace{E_0}_{\text{Nullpunktsenergie}}$$

Wenn das Kristall groß genug ist:

$$\sum_q \to \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 q$$

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_j \int d^3 q \, \frac{\hbar v_{s_j} |q|}{\exp\left(\frac{\hbar v_{s_j} |q|}{k_B T}\right) - 1} \underset{\uparrow \atop kk}{=} \frac{V}{(2\pi)^3} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta}_{4\pi} \sum_j \int_0^{q_{max}} dq \, q^2 \frac{\hbar v_{s_j} |q|}{\exp\left(\frac{\hbar v_{s_j} |q|}{k_B T}\right) - 1}$$

$$\underset{\uparrow}{=} \frac{V}{(2\pi)^3 \hbar^3} (k_B T)^4 \sum_j \frac{4\pi}{v_{s_j}^3} \int_0^{x_{max}} \frac{x^3}{e^x - 1} \, dx$$

Substitution

$$x = \frac{\hbar v_{s_j} |q|}{k_B T}$$

Für niedrige Temperaturen können wir $q_{max} \to \infty$ gehen lassen, da der Integrand schnell abfällt.

Wir sehen dass dann $E \propto T^4$ für niedrige Temperaturen gilt.

An der Potenz der Temperaturabhängigkeit kann man feststellen, welcher Beitrag in Festkörpern der Wärmekapazität für niedrige Temperaturen dominiert.

3) Zwischenbereich

Für Temperaturen zwischen dem niedrig Temperaturlimit und dem Hochtemperaturlimit. Müssen wir uns Gedanken um q_{max} machen! Generell ist die Anzahl der erlaubten q festgelegt. Wir wählen für q_{max} einen Wert, so dass die von q_{max} umschlossene Kugel entsprechend viel q Volumen enthält.

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \underbrace{\frac{4\pi}{3} \frac{\omega_{jD}^3}{v_{sj}^3}}_{\text{Kugelvolumen}} = N$$

$\Rightarrow$ Bestimmung der Debye Frequenz ω_{jD}

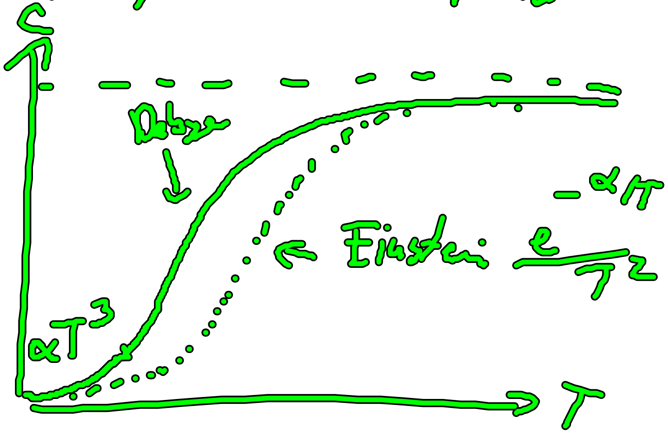
bzw.

$$q_{jD} = \left(\frac{6\pi^2 N}{V_{sj}}\right)^{\frac{1}{3}} = (6\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$$

$$\Downarrow$$

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3 \hbar^3} (k_B T)^4 \sum_j \frac{4\pi}{v_j^3} \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}} \frac{x^3}{e^x - 1} \, dx$$

Für die spezifische Wärmekapazität $f\left(\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}\right)$



Beitrag der optischen Phononen (Einstein Näherung)

In Einstein Näherung wird angenommen (für optische Phononen)

$$\omega_{qj} = \underbrace{\omega_{jE}}_{\text{konstante Energie}}$$

$$E - F_0 = \frac{V}{(2\pi)^3}\, 4\pi \sum_j \int_0^{q_{max,j}} dq\, q^2 \,\frac{\hbar\omega_{jE}}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{jE}}{k_B T}\right)-1}$$

$$= 3N \,\frac{\hbar\omega_{jE}}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{jE}}{k_B T}\right)-1}$$

Mit $k_B T_E = \hbar\omega_{jE}$ ist T_E die Einstein Temperatur

Ergebnis:

(i) Die Debye Temperatur

$k_B T_D = \hbar\omega_D$ (Typisch $T_D \approx 100K$)

trennt den klassischen vom quantenmechanischen Bereich

(ii) klassischer Grenzfall $\frac{T_D}{T} \to 0$ ergibt $3pNkT = E$

(iii) Quanteneffekte $\frac{T}{T_D} \to 0$ mit $E \propto T^4$

(iv) spezifische Wärme $\propto T^3$ (für kleine T)

$\propto$ konstant (für große T)

(v) optische Phononen spielen für die Tieftemperatureigenschaften keine Rolle!

V 2. Quantisierung (kurze Einführung)

Erinnerung an harmonischen Oszillator der Quantenmechanik:

Operatoren b und b^+ erzeugen und vernichten.

Quant (Phonons) in einem Zustand des harm. Oszillators

Ziel: Hamiltonoperator und Zustände (Elektronen, Photonen etc. ...) mit Erzeugern und Vernichtern von Teilchen in verschiedenen Zuständen zu beschreiben. Elegante und einheitliche Formulierung

Vorgehen: Mehrere Wege

1) Konstruktiv: z.B Fermionen

Einteilchen Schrödingergl. => Slaterdeterminante

=> Einführung von Erzeugern und Vernichtern

zw. Räumen verschiedener Teilchenzahl.

2) Mit Methoden der Quantenfeldtheorie
Vorteil: Herleitung aller Teilchen (auch Quasiteilchen) mit einheitlichen Prinzipien.

V.1 Mathematische Rüstzeug: Funktionalableitung und Lagrange Gl. für Felder

Punktmechanik:

Lagrange Fkt von endlich vielen Koordinaten $q_i, \dot{q}_i$

Bei Quantisierung von Feldern: z.B. $\psi^x(x)$ ist der Ort der Index. Analogon zur partiellen Ableitung + Lagrange Fkt!

1. Schritt Funktional Ableitung (Regeln) (Herleitung s. Feynman und Hibbs, Quantenmechanik und Pfadintegral)

1.) $\dfrac{\partial q_i}{\partial q_k} = \delta_{ij}$ | $\dfrac{\delta \psi(x)}{\delta \psi(x')} = \delta(x-x')$

$\dfrac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{q}_k} = \delta_{ik}$ | $\dfrac{\delta \dot{\psi}(x)}{\delta \dot{\psi}(x')} = \delta(x-x')$

Kettenregel:

2. $\dfrac{d f(q_i)}{d q_i} = \dfrac{\partial f(q_k)}{\partial q_k} \dfrac{\partial q_k}{\partial q_i}$ | $\dfrac{\delta f(\psi(x))}{\delta \psi(x')} = \dfrac{\partial f(\psi(x))}{\partial \psi(x)} \dfrac{\delta \psi(x)}{\delta \psi(x')}$

Sowie

3. $$\frac{\delta}{\delta \psi(x')} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \underset{dx \to 0}{=} \frac{\delta}{\delta \psi(x')} \frac{\psi(x+dx)-\psi(x)}{dx}$$

$$= \frac{1}{dx}\left(\delta(x+dx-x') - \delta(x-x')\right) = \frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$$

Lagrange Gl.

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \Rightarrow \frac{d}{dt}\frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}(x)} = \frac{\delta L}{\delta \varphi(x)}$$