Theorie der Kondensierten Materie I

Notiztitel 22.11.2010

3.2 Klassische Bewegungsgleichungen

Wir setzen nun eine Kristallstruktur voraus, i.A. mit r Atomen pro Einheitszelle (Relativkoordinaten $\vec{R}_\mu$):

$$\vec{R}_{\vec{n}\mu} = \vec{R}_{\vec{n}0} + \vec{R}_\mu + \vec{u}_{\vec{n}\mu}$$

$\uparrow$ Auslenkung des μ-ten Atoms in Einheitszelle $\vec{n}$

Potential in harmonischer Näherung ($E_{0,\text{klass}} = 0$):

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\mu\alpha} \sum_{\vec{n}'\mu'\alpha'} \underbrace{\frac{\partial^2 V}{\partial R_{\vec{n}\mu\alpha}\, \partial R_{\vec{n}'\mu'\alpha'}}}_{\Phi_{\vec{n}\mu\alpha,\vec{n}'\mu'\alpha'}} u_{\vec{n}\mu\alpha}\, u_{\vec{n}'\mu'\alpha'}$$

Klassische Bewegungsgleichung:

$$M_\mu \ddot{u}_{\vec{n}\mu\alpha} = -\frac{\partial V}{\partial u_{\vec{n}\mu\alpha}} = -\sum_{\vec{n}'\mu'\alpha'} \Phi_{\vec{n}\mu\alpha,\vec{n}'\mu'\alpha'}\, u_{\vec{n}'\mu'\alpha'}$$

Kraftkonstante $\Phi_{\vec{n}\mu\alpha,\vec{n}'\mu'\alpha'}$: Kraft auf Atom μ in EZ $\vec{n}$ in Richtung α bei Einheitsauslenkung von Atom μ' in EZ $\vec{n}'$ in α'-Richtung.

Einige Eigenschaften:

(i) Symmetrie $\Phi_{\vec{n}\mu\alpha,\vec{n}'\mu'\alpha'} = \Phi_{\vec{n}'\mu'\alpha',\vec{n}\mu\alpha}$

(ii) eine gleichmäßige Auslenkung aller Atome ruft keine Kraft hervor (freie Verschiebung):

$$\sum_{\vec{n}'\mu'} \phi_{\vec{n}\mu\alpha,\vec{n}'\mu'\alpha'} = 0$$

(iii) Abhängigkeit nur von Relativ-Abständen:

$$\phi_{\vec{n}\mu\alpha,\vec{n}'\mu'\alpha'} = \phi_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{R}_{\vec{n}0} - \vec{R}_{\vec{n}'0})$$

bzw. $$\phi_{\vec{n}\mu\alpha,\vec{n}'\mu'\alpha'} = \phi_{\vec{n}+\vec{m}\mu\alpha,\vec{n}'+\vec{m}\mu'\alpha'}$$

Mit dem (allgemeinen harmonischen) Ansatz

$$u_{\vec{n}\mu\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{M_\mu}} v_{\vec{n}\mu\alpha} e^{-i\omega t}$$

folgt für die zeitunabhängigen Koeffizienten $v_{\vec{n}\mu\alpha}$:

$$\omega^2 v_{n\mu\alpha} = \sum_{\vec{n}'\mu'\alpha'} D_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{R}_{\vec{n}0} - \vec{R}_{\vec{n}'0}) v_{\vec{n}'\mu'\alpha'} \quad (*)$$

mit der dynamischen Matrix $(dNr \times dNr)$

$$D = \frac{1}{\sqrt{M_\mu M_{\mu'}}} \phi$$

Jetzt (wegen Translationssymmetrie) Ansatz ebener Wellen:

$$\vec{v}_{\vec{n}\mu} = \vec{w}_\mu e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_{\vec{n}0}}$$

Einsetzen in Eigenwertgleichung $*$:

$$\omega^2 w_{\mu\alpha} = \sum_{\vec{\mu}'\alpha'} \sum_{\vec{n}'} D_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{R}_{\vec{n}0} - \vec{R}_{\vec{n}'0}) e^{i\vec{q}(\vec{R}_{\vec{n}'0} - \vec{R}_{\vec{n}0})} w_{\vec{\mu}'\alpha}$$

$$\Leftrightarrow \omega^2 w_{\mu\alpha} = \sum_{\mu'\alpha'} D_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{q})\, w_{\mu'\alpha'}$$ $dr \times dr$ Eigenwert-Problem

mit $$D_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{q}) = \sum_{\vec{n}} D_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{R}_n)\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}}$$

Für jedes q: $d\cdot r$ Eigenwerte $\omega_j(\vec{q})$ $(j=1,\dots,dr)$

dr Eigenvektoren $e^{(j)}_{\mu\alpha}$,

aufspaltbar in r d-dimensionale Polarisationsvektoren $\vec{e}^{(j)}_{\mu}$, die Auslenkung des μ-ten Atoms angeben.

Die allgemeine Lösung lässt sich somit angeben:

$$\boxed{\vec{u} = \sum_{\vec{q}} \sum_{j=1}^{dr} \frac{1}{\sqrt{M_\mu}}\, \vec{a}^{(j)}_{\mu}(\vec{q})\, e^{i(\vec{q}\cdot\vec{R}_{\vec{n}} - \omega_j(\vec{q})t)}}$$

Beispiel: lineare 1-atomige Kette

$$V = \frac{1}{2} k \sum_n (u_n - u_{n-1})^2$$
$$= \frac{1}{2} k \sum_n (u_n^2 - 2u_n u_{n-1} + u_{n-1}^2)$$

$$\rightsquigarrow D(R_n) = k(2\delta_{n,0} - \delta_{n,-1} - \delta_{n,+1})$$

$$D(q) = \sum_n (2\delta_{n,0} - \delta_{n,-1} - \delta_{n,1})\, e^{iqna}$$
$$= 2k(1 - \cos(qa)) = 4k\sin^2(qa)$$

31 $$\Rightarrow \omega(q) = 2\sqrt{\frac{k}{M}}\,|\sin(qa)|$$

3.3 Periodische (Born-von Kármán) Randbedingungen

Motivation: wir möchten die Zustände abzählen können, um später z.B. die Energie pro Gitterplatz berechnen zu können.

Dazu: wähle Gitter groß aber endlich, setze Gitter und Auslenkungen etc. periodisch fort:

$$f(\dots, x_\alpha + L_\alpha, \dots) = f(\dots, x_\alpha, \dots)$$

$$f(\vec{R}_{\vec{n}}) = f(R_{\vec{n}} + N_\alpha \vec{a}_\alpha)\,; \quad N = \prod_{\alpha=1}^{d} N_\alpha$$

Mit $f(\vec{R}_{\vec{n}}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{R}_{\vec{n}}} f(\vec{q})$

folgt $N_\alpha \vec{q} \cdot \vec{a}_\alpha = 2\pi l_\alpha$ ${}^{\in \mathbb{Z}}$ $\Rightarrow \vec{q} = \sum_\alpha q_\alpha \vec{b}_\alpha\,; \; q_\alpha = \frac{l_\alpha}{N_\alpha}$

Dabei kann $\vec{q}$ auf die erste BZ beschränkt werden:

z.B. $l_\alpha \in \{1, \dots, N_\alpha\}$ oder $l_\alpha \in \{-\frac{N_\alpha}{2}, \dots, \frac{N_\alpha}{2} - 1\}$ für N_α gerade

In der Praxis kann man Impuls-Summen oft (aber nicht immer) durch Integrale ersetzen:

$$\sum_{\vec{q} \in 1.BZ} f(\vec{q}) \to \frac{N}{V_{1.BZ}} \int_{1.BZ} d^3q\, f(\vec{q})$$

$\frac{N}{V_{BZ}} d^3q$ # q-Punkte im inf. Volumen

3.4 Quantisierte Gitterschwingungen, Phononen

Für den allgemeinen harmonischen Oszillator gilt

$$[u_{\ell\alpha}, p_{m\beta}] = i\hbar\, \delta_{\ell m}\, \delta_{\alpha\beta} \quad \text{(vor Trafo)}$$

$$[\bar{u}_i, \bar{p}_j] = i\hbar\, \delta_{ij} \quad (i,j = 1,2,\dots,dN) \quad \text{(nach Trafo)}$$

Lösung durch bosonische Operatoren:

$$b_j = \sqrt{\frac{\omega_j}{2\hbar}}\,\bar{u}_j + i\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_j}}\,\bar{p}_j \;;\quad b_j^+ = \sqrt{\frac{\omega_j}{2\hbar}}\,\bar{u}_j - i\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_j}}\,\bar{p}_j$$

mit $[b_j, b_k^+] = \delta_{jk}$, $[b_j, b_k] = [b_j^+, b_k^+] = 0$

und
$$H_{harm} = \sum_{j=1}^{Nd} \hbar\omega_j \left(\underbrace{b_j^+ b_j}_{\text{Anzahloperator}} + \frac{1}{2}\right)$$

Speziell im Kristall hat die Transformation die Form

$$C_{\vec{q},R} = \frac{1}{\sqrt{N}}\, e^{i\vec{q}\vec{R}}$$

und der Hamilton-Operator

$$H_{harm} = \sum_{\vec{q}} \sum_{j=1}^{dr} \hbar\omega_j(\vec{q})\left(b_{j\vec{q}}^+ b_{j\vec{q}} + \frac{1}{2}\right)$$

System wechselwirkungsfreier Bosonen, der Phononen

Wichtig: Phononen sind Quasiteilchen – kein chemisches Potential, keine Teilchenzahlerhaltung!

Analog zu Photonen (Hohlraumstrahlung)

Energie: $$E = \sum_{j\vec{q}} \hbar\omega_j(\vec{q})\left(n_{j\vec{q}} + \frac{1}{2}\right)$$

Die Besetzungszahlen $n_{j\vec{q}}$ können alle natürlichen Zahlen annehmen.

Es gibt dr Dispersionsrelationen = Zweige des Phononen-Spektrums, diese sind periodisch im reziproken Gitter: $\omega_j(\vec{q}) = \omega_j(\vec{q}+\vec{G})$

Wichtig: bei d Zweigen des Phononenspektrums verschwindet die Dispersion für $\vec{q}\to 0$:

$\underbrace{\text{Betrachte}}_{\text{zum Beweis}}$ Auslenkung in eine Richtung, die für alle Atome einer GZ gleich ist: $\vec{u}_{\vec{n}\mu} = \vec{u}_{\vec{n}\mu'}$

$$\rightsquigarrow \; M_\mu \omega_j^2(\vec{q})\, u_\alpha\, e^{i\vec{q}\vec{R}_{\vec{n}}} = \sum_{\vec{n}'\mu'} \phi_{\vec{n}\mu\alpha,\vec{n}'\mu'\alpha'}\, u_\alpha\, e^{i\vec{q}\vec{R}_{\vec{n}'}}$$

Wir entwickeln nun beide Seiten für kleine q:

$$M_\mu\left(\omega_j(0) + \vec{\nabla}_{\vec{q}}\,\omega_j(\vec{q})\big|_{\vec{q}=0}\cdot\vec{q} + \dots\right)^2 = \sum_{\vec{n}\mu} \phi_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{R})$$
$$\left(1 - i\vec{q}\cdot\vec{R} - \frac{1}{2}(\vec{q}\cdot\vec{R})^2 + \dots\right)$$

und vergleichen die Ordnungen:

0. Ordnung: $$M_\mu\, \omega_j^2(0) = \sum_{\vec{R}\mu} \phi_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{R}) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \omega_j(\vec{q}=0) = 0$$

1. Ordnung:

$$M_\mu \underbrace{2\omega_j(0)}_{=0} \left(\vec{\nabla}_{\vec{q}}\, \omega_j(\vec{q})\big|_{\vec{q}=0} \cdot \vec{q} \right) = \sum_{\vec{R}\mu'} \phi_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{R})(-i\vec{q}\cdot\vec{R})$$

$$\Rightarrow \sum_{\vec{R}\mu'} \phi_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{R})\vec{R} = 0$$ (neue Summenregel)

2. Ordnung:

$$M_\mu \left(\vec{\nabla}_{\vec{q}}\, \omega_j(\vec{q})\big|_{\vec{q}=0} \cdot \vec{q} \right)^2 = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{R}\mu'} \phi_{\mu\alpha,\mu'\alpha'}(\vec{R})(\vec{R}\cdot\vec{q})^2$$

$$\Rightarrow \vec{\nabla}_{\vec{q}}\, \omega_j(\vec{q})$$ ist von Ordnung 1

genauer: $\omega_j(\vec{q}) = \sum_{\alpha\alpha'} c_{\alpha\alpha'} q_\alpha q_{\alpha'}$ für kleine $|\vec{q}|$

Diese Zweige mit asymptotisch linearer Dispersion nennt man akustische Phononen (d Zweige), im Gegensatz zu $d(r-1)$ Zweigen optischer Phononen mit $\omega_j(\vec{q}) \xrightarrow{|\vec{q}|\to 0} \omega_0 > 0$