zu 3.2.3

Anregungen von wechselwirkenden Festkörperionen:

$$m_s \ddot{u}_s^{\alpha}(n) = -\sum_{\beta,t,m} K_{st}^{\alpha\beta}(n,m)\, u_t^{\beta}(m)$$ (Newtongl. in harmonischer Näherung, Rückstellkraft)

Auslenkung vom s-ten Ion in der n-ten Elementarzelle eines Festkörpers, $K \hat{=}$ Kraftkonstantenmatrix

$\longrightarrow$ System gekoppelter Oszillatoren $\{u_t^{\beta}(m)\}$

<u>Ziel</u>: Transformation zu finden um <u>ungekoppelte</u> Oszillatoren zu beschreiben

Ansatz:

$$\underline{\underline{u_s}}^{\alpha}(n) = \frac{1}{\sqrt{m_s N}} \sum_{k,\lambda} \underline{\underline{A_s}}^{\alpha}(\lambda,k)\, q_{k\lambda}(t)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n}$$

Zeitabhängig — Ortsabhängig

Anzahl d. El-Zelle

zu bestimmende Funktion

K – Wellenzahlvektor

λ – Modenindex (später)

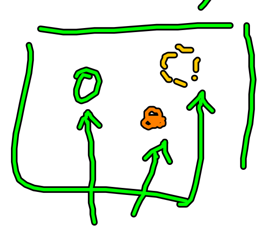
A : Vektorcharakter

q : Zeitfunktion

Fourieransatz $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n}$ ist immer gute Basis in periodisch fortgesetzten Systemen (Elementarzelle)

nächster Schritt einsetzen in die Bewegungsgleichg. für u's:

$$\sum_{k,\lambda} \ddot{q}_{k\lambda}(t)\, A_s^\alpha(k,\lambda) = -\sum_{\substack{t,\beta\\ m,k,\lambda}} \frac{K_{st}^{\alpha\beta}(m-n)}{\sqrt{m_t m_s}}\, A_t^\beta(k,\lambda)\, e^{ik(\vec{r}_m-\vec{r}_n)}\, q_{k\lambda}(t)$$



$t = 1, 2, 3$

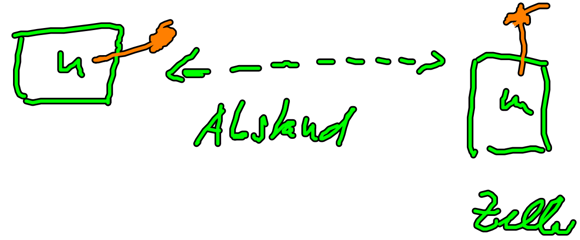
$q_{k\lambda}$ wählen, so daß ein Oszillatorgleichg. erfüllt:

$$\ddot{q}_{k\lambda} + \omega_{k\lambda}^2\, q_{k\lambda} = 0$$

bestimmen und diese Konstante geht in die Bestimmung von $A_s^\alpha(k,\lambda)$ an.

die Kraftkonstante hängen nur von $n-m$

Zelle



Aufgrund der Periodizität kann K nur vom Abstand,

also $K(n-m)$ oder

$K(\vec{r}_n - \vec{r}_m)$ abhängen

Einsetzen der Oszillatorgl. für $q_{k\lambda}$:

$$(*) \quad \omega_\lambda^2(k)\, A_s^\alpha(k) = \sum_{t,\beta} \frac{K_{st}^{\alpha\beta}(k)}{\sqrt{m_s m_t}}\, A_t^\beta(k)$$

$$K_{st}^{\alpha\beta}(k) = \sum_{\substack{r_n - r_m \\ (n-m)}} K_{st}^{\alpha\beta}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)\, e^{i(\vec{r}_n - \vec{r}_m)\cdot\vec{k}}$$

erreicht: 1) man [kann] $q_{k\lambda}(t)$ bestimmen wenn $\omega_\lambda(k)$ bekannt

(1. unbekannte Funktion erledigt)

2) $\omega_\lambda(k)$ kann man als Eigenwert

der Gleichung $*$ finden, ebenso die

Eigenvektoren A^α.

Dimension der Matrix = $3p$

p weil über alle Ionen einer Zelle summiert wird (t)

3 weil über alle 3 Raumdimension (β) summiert wird

Zahl der Ionen in einer Zelle

„einfache Diagonalisierung möglich."

<u>Ergebnisse der Festkörpertheorie</u>

- weil A und ω von $\vec{k}$ abhängen
  muss f. jedes $\vec{k}$ eine Matrix diagonalisiert werden

→ das gibt dann $3p \cdot N$ Lösungen für $\omega_\lambda(k)$

Anzahl period. Elemente

$3p$ Moden, die von der Wellenzahl $\vec{k}$ abhängen.

- zur Erinnerung:

$$\ddot{q}_{k\lambda}(t) + \omega_\lambda^2(k)\, q_{\lambda k}(t) = 0$$

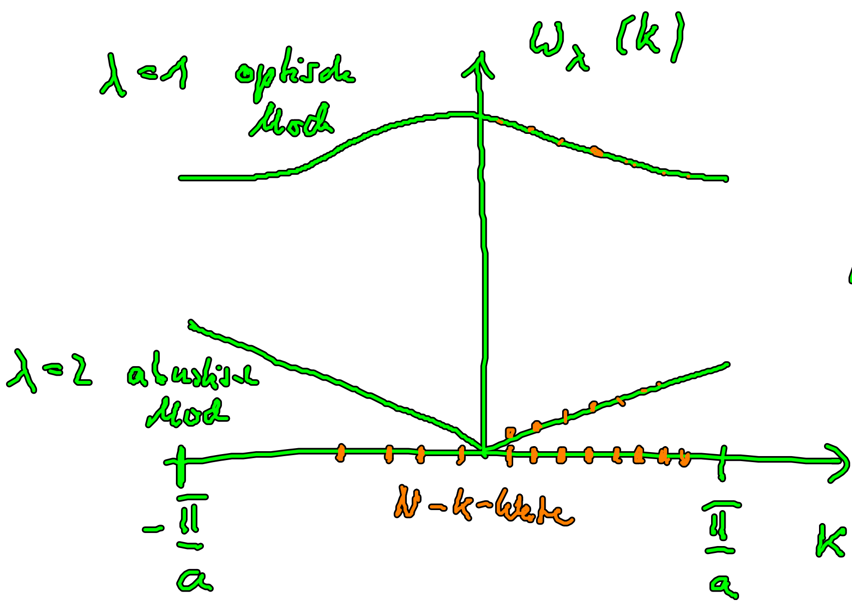
↗

Sind brechenbar

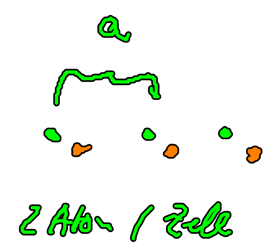
- wir haben damit ein System ungekoppelter, freier Oszillatoren vorliegen ($3p\,N$ Stück)

- Dispersionsrelation: $\omega_\lambda = \omega_\lambda(\vec{k})$ der angesetzten Wellen $e^{i\vec{k}\vec{r}_n}\, e^{-i\omega_\lambda(k)t}$

(Erinnerung: gekoppelte Pendel → Normalkoordinaten)



1 dimensional



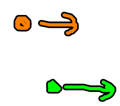
Lösungen ~~3~~ $p\,N$

- optische Mode können an optische Felder koppeln

→ optische Dipol

- akustische Mode hat die niedrigste Dispersion

$$\omega \approx v_{Schall} \cdot k$$

 $\rightarrow$ kein optischer Dipol

Der Hamiltonian für ein Festkörper kann mittels ungekoppelter harmonischer Oszillatoren beschrieben werden.

$$H = \sum_{k,\lambda} \hbar\omega_\lambda(k) \left(a^\dagger_{k\lambda} a_{k\lambda} + \frac{1}{2} \right)$$

„Phonondispersionsrelation"

(Quasiteilchen d. Ionengitter)

3.2.4. Masselose Quasiteilchen als bosonische Oszillatoren

Boson: Photon, Phonone im Vgl. mit Exp. oder Pauli Spin-Statistik Theorem.

Zustandssummen $\rightarrow$ Zustandsgleichungen ist jetzt Ziel

3.2.4.1 Hamiltonian und Zustände

ein Oszillator: $H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$

viele – " – : $H = \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right)$

k : Sammelindex (Mode k, Wellenzahl $\vec{k}$)

Frage: k muß für jedes System spezialisiert werden.

ein Oszillator $\varepsilon_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \; n = 0, 1, 2, 3 \dots$

viele Oszillatoren: $\varepsilon_n = \sum_k \hbar\omega_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right), \; n_k = 0, 1, 2, 3 \dots$

Besetzungszahl der Mode k, z.B. Vielmodenresonator

Zustand $|n\rangle = |n_1, n_2 \cdots n_k \cdots n_N\rangle$

für Vielmodenfall

3.2.42. Zustandssumme von ungekoppelten Oszillatoren

(i) Zustandssumme f. 1 Oszillator:

$$Z_k = \sum_{\text{alle Zustände } \{n\}} e^{-\beta \varepsilon_n} \quad , \; \varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

masselose Objekte

$\mu = 0$

(kan. = großkanonische Summe)

$$Z_k = \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \hbar\omega}}_{\text{geometrische Reihe}} e^{-\beta \frac{\hbar\omega}{2}}$$

Boson, deshalb $0, \infty$ summiere

$$= \underbrace{\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}} e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}$$

$$\underbrace{\ln Z_k}_{\sim F} = -\frac{\beta\hbar\omega}{2} - \ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)$$

freie Energie

<u>Bsp.</u> für Anwendg. ist kalorische Zustandsgleig.

$$E = -\partial_\beta \ln Z_k$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}\cdot\hbar\omega}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$E = \hbar\omega \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} + \frac{\hbar\omega}{2}$$

Energie des Oszillators im Wärmebad der Temperatur T.

Bemerkungen:

a) kalt $T \to 0$, $\beta \to \infty$ $\Rightarrow$ $E \to \frac{\hbar\omega}{2}$

Im Mittel ist das System mit der Grundzustands-energie ausgestattet

b) warm $T \to \infty$, $\beta \to 0$ $\Rightarrow$

$$\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} \approx \frac{1}{1+\beta\hbar\omega-1} = \frac{kT}{\hbar\omega}$$

$$E = kT$$

Im Mittel ist das System mit der thermischen Energie ausgestattet $\to$ klassischer Grenzfall $(T \to \infty)$

c) mittlere Anzahl von Oszillatorquanten

$$\langle n \rangle = \sum_n n \, \frac{e^{-\varepsilon_n \beta}}{Z_K}$$

Zahl der angeregten Quasiteilchen bzw. Quanten

Objekt, ist zu mitteln

Wahrscheinlichkeit System im Zustand mit n Quanten zu finden

$$= -\frac{\partial_\beta}{\hbar\omega} \sum_n \frac{e^{-\beta \varepsilon_n}}{Z_K} - \frac{1}{2} \sum_n \frac{e^{-\beta \varepsilon_n}}{Z_K}$$

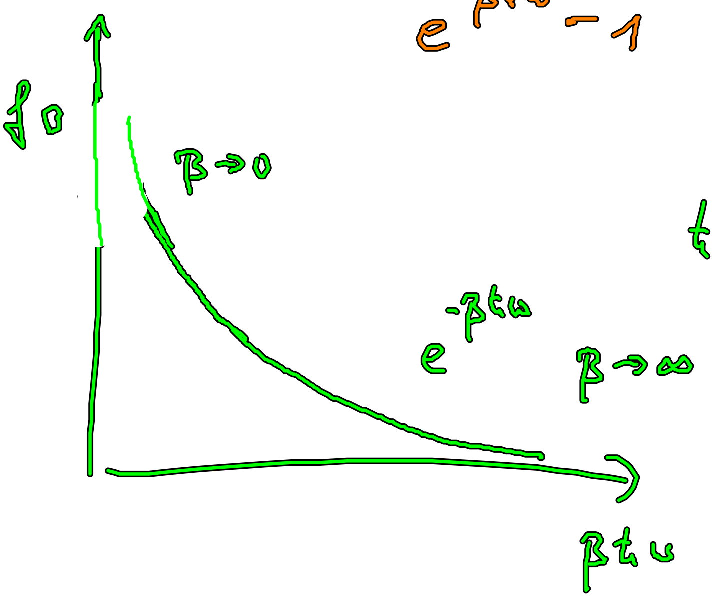
$$\sum_n = Z_K$$

$$= -\partial_\beta \frac{1}{\hbar\omega} \ln Z_K - \frac{1}{2}$$

$$= \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

Die mittlere Zahl der Quanten im Zustand $\langle n \rangle$ ist gegeben durch die sogenannte Bosefunktion

$$f^B = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$



~~(Bosonen sind bestrebt sich im Grundzustand zu versammeln.)~~ kommen drauf zurück

diskutieren wir im Detail in den Anwendungen.

Die Bose-Verteilung gibt an, welche mittlere Zahl von Quanten bei einer festen Temperatur vorliegen.

Sie zeigt eine Singularität f. $\beta \to 0$,

für $\beta \to \infty$ wird $f_B \to 0$, weil $T \to 0$ (im Mittel im tiefsten n-Zuständen)

(ii) Viel-Oszillator Zustandssumme

$\omega \to \omega_k \qquad (k \to \vec{k}, \lambda)$

$\uparrow$

viele Oszillatoren (z.B. Moden d. elektromagn. Feldes)

$$Z_K = \sum_{\text{alle Zustände}} e^{-\beta E_n}$$

über alle Mode ist E_n verteilt

$$= \sum_{\substack{\text{alle mögl.} \\ \{n_k\} \text{ summieren}}} e^{-\beta \sum_k n_k \varepsilon_k} \qquad n_k : 0 - \infty$$

1 Oszillator-Zustands-Summe

$$= \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar\omega_1 (n_1 + \frac{1}{2})} \cdots \underbrace{\sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega_k (n_k + \frac{1}{2})}}$$

$$\cdots \sum_{n_N=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega_N (n_N + \frac{1}{2})}$$

$$= \prod_{k=1}^{N} \frac{e^{-\beta\frac{\hbar\omega_k}{2}}}{\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_k}\right)}$$

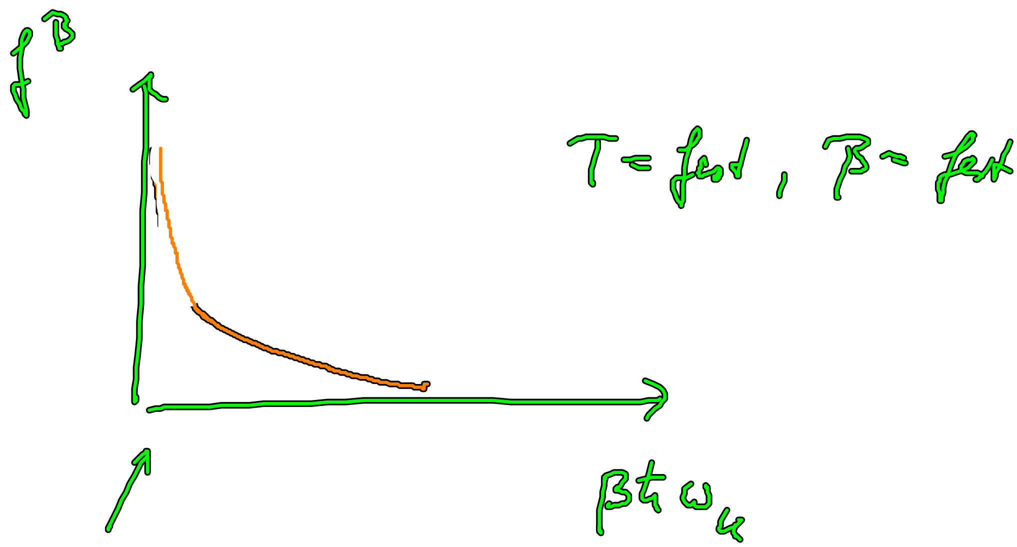
aus obiger Rechng. zum 1 Oszillator-Modell

<u>analy. Rechng.</u> :

$$\ln Z_K = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} + \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{e^{\beta\hbar\omega_k} - 1}$$

$$\langle n_k \rangle = f_k^B = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_k}-1}$$

- Bei unabhängigen Oszillatoren zerfällt die Zustandssumme in ein Produkt von Einoszillatorzustandssummen.
- Die mittlere Zahl der Quanten im k-ten Oszillator ist durch die Boseverteilung gegeben:



$\omega_k \to 0$

d.h. niedrig energetische Oszillatoren

$\to$ man beobachtet die Tendenz, daß sich Bosonen f. festgehaltenem T im Zustand kleinster Energie (Grundzustand) versammeln.