

Phononen (Fortsetzung)

Ergebnis des allgemeinen Phononhamiltonians:

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

Hamiltonoperator der Kristallschwingungen

- (i) Die Quasiteilchen (Quasi, da es sich tw. wie ein Teilchen verhält (vgl. 2. Quantisierung, obwohl dies kollektive Anregungen sind) der Kristallschwingungen werden mit $b_{\mathbf{q}, j}^\dagger$, $b_{\mathbf{q}, j}$ erzeugt und vernichtet.
Sie heißen Phononen!
- (ii) Die Vertauschungsrelation von b^\dagger, b haben ein Verhalten wie Bose-Teilchen. 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 finden diese auch für andere Teilchen an: Photonenfeld, Elektronenfeld. Details im Abschnitt über zweite Quantisierung.
- (iv) Gitterschwingungen haben Nullpunktsenergie (Quantenfluktuation)

(v) Energie der Gitterschwingungen ist quantisiert.

(vi) Eigenzustände sind die Phononzustände:

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

Zustände mit $n_{q_1,j_1} \dots n_{q_n,j_n} \dots$

Phonon in den Moden $q_{j_1} \dots q_{j_n} \dots$

(vii) Phonon sind Bosonen, die mittlere Besetzung wird über die Bose-Einsteinverteilung bestimmt

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

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

$$u_{j,\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{M_j N}} \sum_{j,q} A_{j,q}^\alpha(q) e^{i q \cdot R_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2M_j \omega_j}} (b_{q,j}^\dagger + b_{q,j})$$

D.h. $u_{j,\alpha}$ hängt direkt von $b_{q,j}^\dagger, b_{q,j}$

Bei thermischer Besetzung:

$$\langle b_{q,j}^\dagger \rangle = 0 \Rightarrow \langle u_{j,\alpha} \rangle = 0$$

d.h. die mittlere Auslenkung verschwindet (keine kohärente Schwingung)

Aber die Standardabweichung der Auslenkung

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

D.h. die Phonon schwanken um den Mittelwert!

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

(xi) Bisher nur harmonische Näherung.

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

$$H_{\text{abh}} \propto b_{q_1 j_1}^+ b_{q_2 j_2} b_{q_2 j_2} + \text{l.c.}$$

wo ein Phonon in niederenergetische Phonon zerfällt!

(Endliche Lebensdauer des Quasiteilchen)

IV.4 Anwendung: die Wärmekapazität

Dieser Abschnitt bezieht den Beitrag der Phonon zur spezifischen Wärmekapazität

Betrachten wir die mittlere Energie der Phononen:

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

1) Hochtemperaturlimit: ($k_B T \gg \hbar \omega_{q,j}$, $\frac{\hbar \omega_{q,j}}{k_B T} \ll 1$)

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

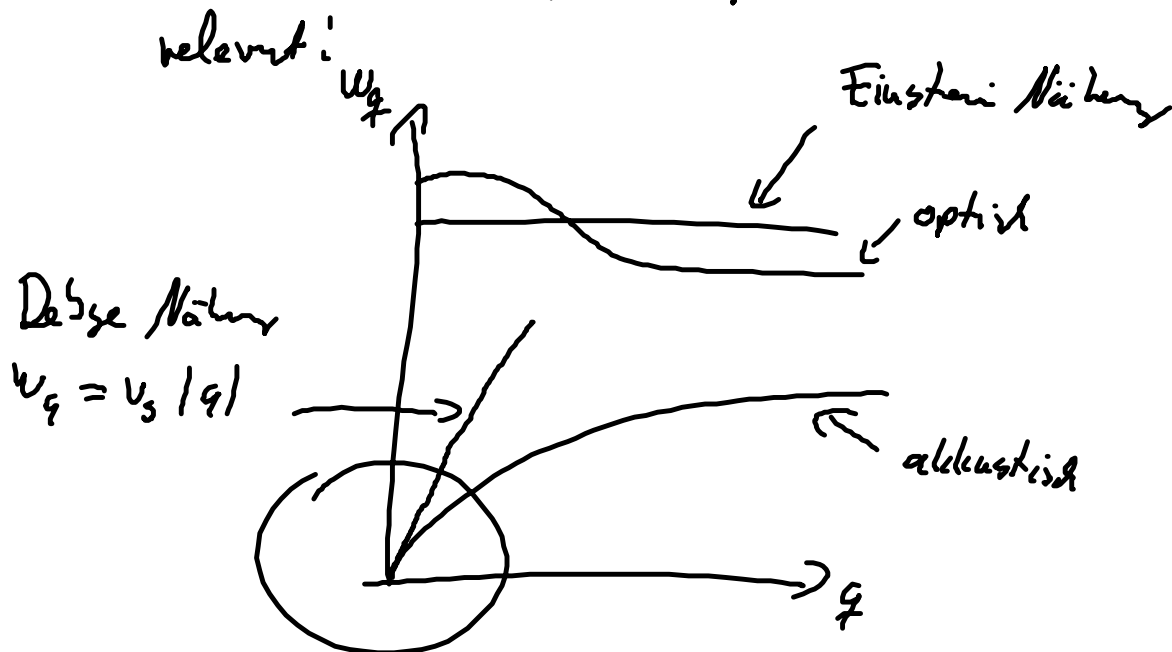
$$E \underset{k_B T \gg \hbar \omega_{q,j}}{\approx} \sum_{j,q} \left[\frac{k_B T}{\hbar \omega_{q,j}} - \frac{1}{2} \frac{\hbar \omega_{q,j}}{k_B T} + \dots + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega_{q,j}$$

$$= \sum_{j,q} k_B T \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar \omega_{q,j}}{k_B T} \right)^2 \right)$$

$$\approx 3 \cdot N k_B T \quad \text{Ergebnis des Dulong-Petit}$$

2) Niedrigtemperaturlimit

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



$$E_{\text{akustisch}} = \sum_j \frac{\hbar v_{s,j} |q|}{\exp\left(\frac{\hbar v_{s,j} |q|}{k_B T}\right) - 1} + \underbrace{E_0}_{\text{Nullpunktsenergie}}$$

Wenn das Kristalle groß genug ist:

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

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_j \int d^3 q \frac{\hbar v_{s,j} |q|}{\exp\left(\frac{\hbar v_{s,j} |q|}{k_B T}\right) - 1} \stackrel{\text{Kugel}}{=} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \int_0^{q_{\max}} dq q^2 \frac{\hbar v_{s,j} |q|}{\exp\left(\frac{\hbar v_{s,j} |q|}{k_B T}\right) - 1}$$

$$\stackrel{\text{Kugel}}{=} \frac{V}{(2\pi)^3 \hbar^3} (k_B T)^4 \sum_j \frac{4\pi}{v_j^3} \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Substitution

$$x = \frac{\hbar v_{s,j} |q|}{k_B T}$$

Für niedrige Temperaturen können wir $q_{\max} \rightarrow \infty$ setzen, 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 Festkörper der Wärme kapazität für niedrige Temperatur dominiert.

3) Zwischenbereich

Für Temperaturen zwischen dem niedrig Temperaturlimit und dem Hochtemperaturlimit. Müssen wir uns Gedanken um q_{max} machen! Schnell ist die Anzahl der erlaubten q festgelegt.

Wir wählen für q_{max} ein Wert, so dass die von q_{max} umschlossene Kugel entsprechend viel q Volumen enthält.

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \frac{\omega_{j0}^3}{v_{s,j}^3} = N$$

Kugelvolumen.

=> Bestimmung der Debye Frequenz ω_{j0}

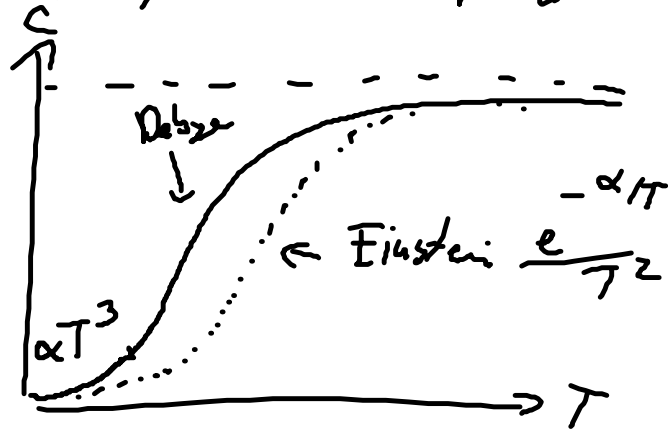
bzw.

$$\omega_{j0} = \left(\frac{6\pi^2 N}{v_{s,j}} \right)^{\frac{1}{3}} = (6\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$$

⇓

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} (k_B T)^4 \sum_j \frac{4\pi}{v_{s,j}^3} \int_0^{\frac{\hbar \omega_{j0}}{k_B T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

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)

$$\omega_{q,j} = \omega_j E$$

konstante Energie

$$\begin{aligned} E - E_0 &= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \sum_j \int_0^{q_{max,j}} dq q^2 \frac{\hbar \omega_j E}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_j E}{k_B T}\right) - 1} \\ &= 3N \frac{\hbar \omega_j E}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_j E}{k_B T}\right) - 1} \end{aligned}$$

Mit $k_B T_E = \hbar \omega_j E$ ist T_E die Einstein Temperatur

Ergebnis:

(i) Die Debye Temperatur

$$k_B T_D = \hbar \omega_D \quad (\text{Typisch } T_D \approx 100\text{K})$$

trennt den klassischen vom quantenmechanischen Bereich

(ii) klassischer Grenzwert $\frac{T_D}{T} \rightarrow 0$ ergibt $3p N k_B T = E$

(iii) Quanten effekte $\frac{T}{T_D} \rightarrow 0$ mit $E \propto T^4$

(iv) spezifische Wärm $\propto T^3$ (für kleine T)
 $\propto \text{konst}$ (für große T)

(v) optische Phänomene spielen für die Teiltemperaturen eigentlich keine Rolle!

V 2. Quantisierung (kurze Einführung)

Erinnerung an harmonische Oszillatoren der Quantenmechanik:

Operatoren b und b^\dagger erzeugen und vernichten.

Quant (Photon) in einem Zustand des harm. Oszillators

Ziel: Hamiltonoperatoren und Zustände (Elektronen, Photonen ...)
mit Erzeugen und Vernichten von Teilchen in verschiedenen
Zuständen zu beschreiben. Elegante und eingängige Formulierung

Vorgehen: Mehrere Wege

1) Konstruktiv: z.B. Fermionen

Ein Teilchen Schrödingerst. \Rightarrow Slater determinante

\Rightarrow Einführung von Erzeugen und Vernichten
zw. räumlich verschiedenen Teilchen z.B.

2) Mit Methode der Quantenfeldtheorie

Vorteil: Herleitung aller Teile (auch Quasiteile) mit einheitlichen Prinzipien.

V.1 Mathematische Rüstzeug: Funktionalableitung und Lagrange-F. für Felder

Punktmechanik:

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

Bei Quantisierung von Feldern: z.B. $\mathcal{L}^x(x)$ ist der Ort der Index. Analogie zur partiellen Ableitung + Lagrange Fkt!

1. Schritt Funktional Ableitung (Regeln) (Herleitung s.

$$1.) \left. \begin{array}{l} \frac{\partial q_i}{\partial q_k} = \delta_{ij} \\ \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{q}_k} = \delta_{ik} \end{array} \right| \begin{array}{l} \frac{\delta \mathcal{L}(x)}{\delta \mathcal{L}(x')} = \delta(x-x') \\ \frac{\delta \dot{\mathcal{L}}(x)}{\delta \dot{\mathcal{L}}(x')} = \delta(x-x') \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{Feynmann und Hibbs,} \\ \text{Quantenmechanik und Pfadintegral} \end{array}$$

Kettenregel:

$$2. \frac{d f(q_i)}{d q_j} = \frac{\partial f(q_i)}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial q_j} \quad \left| \quad \frac{\delta f(\mathcal{L}(x))}{\delta \mathcal{L}(x')} = \frac{\partial f(\mathcal{L}(x))}{\partial \mathcal{L}(x)} \frac{\delta \mathcal{L}(x)}{\delta \mathcal{L}(x')}$$

Somit

$$3. \frac{\delta}{\delta \mathcal{L}(x')} \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial x} \stackrel{\text{mit}}{\approx} \frac{\delta}{\delta \mathcal{L}(x')} \frac{\mathcal{L}(x+dx) - \mathcal{L}(x)}{dx}$$
$$= \frac{1}{dx} (\delta(x+dx-x') - \delta(x-x')) = \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x')$$

Lagrange Gl.

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