3.2. Masselose Bosonen

3.2.1. Kollektive Anregungen und Quasiteilchen

Beispiele f. masselose Bosonen sind Phononen, Photonen

Photonen: Quasiteilchen des elektromagnetischen Felds

Phononen: Kollektive Anregungen der Ionenschwingg. in Festkörpern („in Molekülen: „Vibronen")

- kollektive Anregungen sind Anregungen von gekoppelten Systemen wie z.B. gekoppelte Schwingern 

„gemeinsame Anregung"

→ oft kann man auf ein Satz von Koordinaten übergehen, bei dem die Anregungen nicht mehr gekoppelt sind (in den neuen Koordinaten steckt dann die Kopplung)

z.B. Schwerpunkts und Relativkoordinate sind beim nicht verkoppelt und lassen sich wie freie Teilchen beschreiben

Vorteil von kollektiven Koordinaten ist in rechentechnischer Hinsicht

- Quasiteilchen: a) Teilchen + Umgebung = Quasiteilchen, dazu existiert Dispersionsrelation analog zur Schrödingergleichung (Polaron)

  b) Feldanregungen werden als harmonische Oszillatoren repräsentiert mit Besetzungszahl, die kein echtes Teilchen entspricht (Photon)

masselose Teilchen: es gibt keine ablesbare Masse in H, d.h. man kann keinen Index geben um Teilchen durchzunummerieren: man findet nicht $\sum_i \frac{p_i^2}{2m_i}$

Bsp. dafür ist $\int d^3r \left(\frac{\varepsilon_0}{2} E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2\right)$ als H des elektromagn. Felds.

bei Quantisierung von masselosen Teilchen ist

weil in H keine Teilchenzahl steht

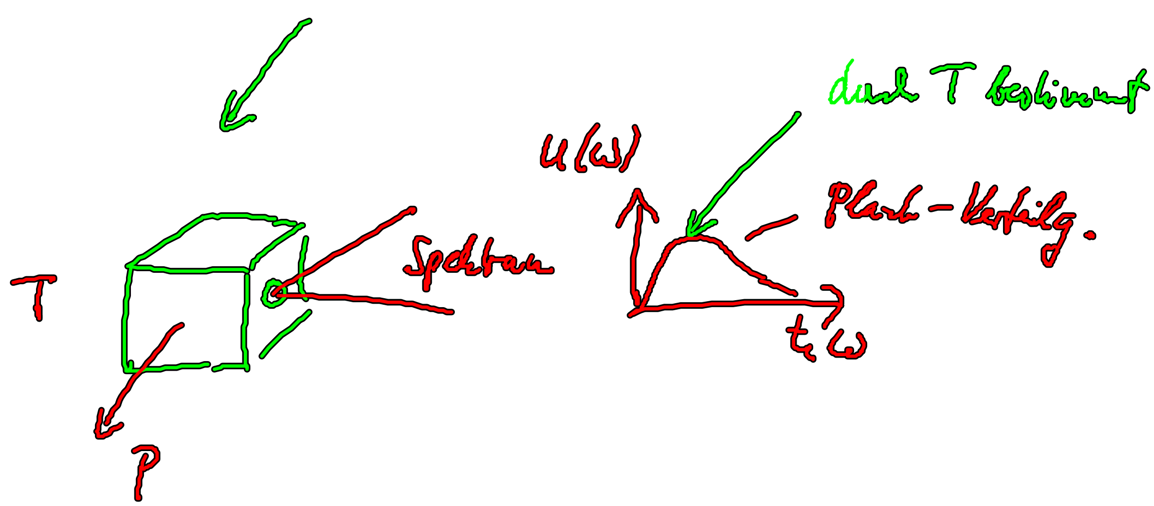
$$\mu = -\frac{\partial J}{\partial \bar{N}} = 0$$

μ ist immer 0 für masselose Teilchen.

Es gibt aber trotzdem die Quasiteilchenzahl die z.B die Zahl der Photonen abzählt, die Quasiteilchenzahl wird von außen durch die Temperatur festgelegt.

3.2.2. Photonen – Quasiteilchen (Quanten d. Strahlungsfelds)

interessant: Energiedichte, Druck auf Wand die Strahlg. macht



Feld muß quantisiert werden um das richtige Spektrum:

$$\int d\omega\, \underline{\underline{u(\omega)}} = \int d\omega \frac{E(\omega)}{\underline{\underline{V}}} \;,\quad E(\omega) - \text{Energie in Kasten } V$$

zu berechnen. Brauch sowas wie E, Zustandssumme, Zustände

um Zustände zu bekommen muß Feld quantisiert werden

Startpunkt ist klassisch Maxwelltheorie:

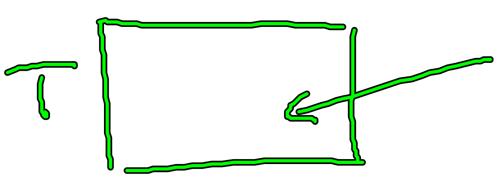
$$\Delta \vec{A}(\vec{r},t) - \frac{1}{c^2}\partial_t^2 \vec{A}(\vec{r},t) = 0$$

$\vec{A}$ – Vektorpotential im Kasten ohne Ladungen + Ströme

Randbedingungen werden durch Kasten bestimmt (ED)

bei einem großen Kasten, Zustände dicht gelegen.

Lösungen sind analog zum Teilchen ebene Welle:



Moden:

Eigenfunktion der $\vec{A}$-Gleichung

Zerlege Feld nach ebenen Wellen mit dem Ortsanteil:

$$\vec f_{\vec k,\lambda(\vec k)} = \frac{e^{i\vec k\cdot\vec r}}{\sqrt{V}}\,\vec e_{\vec k,\lambda(\vec k)}$$

$$\vec A(\vec r,t) = \sum_{\vec k}\sum_{\lambda(\vec k)=1}^{2} \underbrace{q_{\vec k,\lambda}(t)}_{\text{Entwicklungs-koeffizienten (unbekannt)}}\ \underbrace{\vec f_{k\lambda}(\vec r)}_{\text{spannt Raum auf (vollständiges System)}} = \sum_{k} q_k(t)\,\vec f_k(\vec r)$$

k ~ Verbund-index

Ansatz einsetzen in Wellengleichung:

$$\sum_k f_k(r)\Big(\underbrace{i\vec k\cdot i\vec k}_{\text{aus } \Delta = \vec\nabla\cdot\vec\nabla}\, q_k(t) - \frac{1}{c^2}\ddot q_k(t)\Big) = 0$$

vollständiges System, Klammer muß verschwinden

$$\ddot q_k(t) + c^2 \underbrace{k^2}_{|\vec k|^2} q_k(t) = 0$$

Oszillatorgleichung für jeden einzelnen Oszillator mit den Quantenzahl $k = \{\vec{k}, \lambda(\vec{k})\}$.

man hat also Quantitativ die formal als Oszillator beschreiben werden können.

Quantitativ haben Dispersion $\omega = c|\vec{k}|$

$\omega = \omega(\vec{k})$.

jetzt erfolgt die formale Quantisierung nach den Regeln der Quantenmechanik:

$$H_{Strahlfeld} = \sum_{\vec{k}, \lambda(\vec{k})} \hbar \omega_k \left(a^+_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right)$$

in der Heitler darstellung.

(Feld ist jetzt quantisiert, wenn man noch Vertauschungsrelation zwischen den a's fordert:

$$[a^+_{\vec{k}_1\lambda_1}, a_{\vec{k}_2\lambda_2}] = \delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2}$$

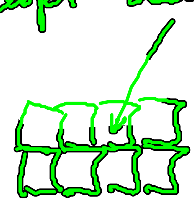
in übereinstimmung mit Experiment.)

Die Leiterdarstellg. führt zu einer konsistenten Formulierg. von Feld / Teilchen.

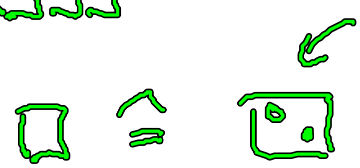
Eigentlich Ziel: Zustandssumme zu berechnen: man braucht Zustandssumme von oszillatorische Systeme.

3.2.3. Phononen – die kollektiven Anregungen von Ion-Schwingungen in Festkörper

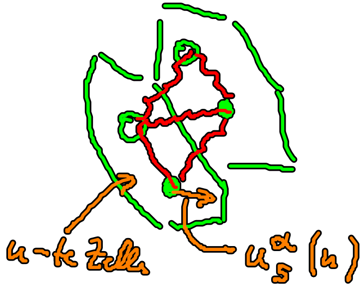
Festkörper: periodische Aneinanderreihung von Untereinheiten, die kleinste Untereinheit heißt Elementarzelle (kann aber mehrere Atome/Ionen enthalten)



z.B NaCl



Es gibt p Ionen pro Elementarzelle und es gibt N Elementarzellen die insgesamt ein Volumen V aufbauen



elektromagnetische Kräfte

(„Federn")

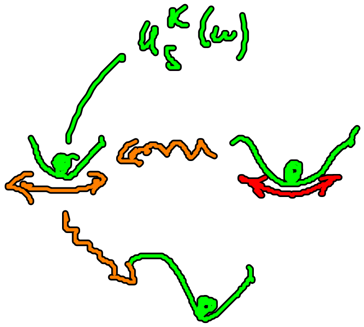
$\sim$ $s = 1, 2$

Man hat die folgende Newtongleichung für die α-Komponente des s-ten Ions in der n-ten Zelle:

$$m_s \, \ddot{u}_s^\alpha(n) = - \underbrace{\sum_{\beta, t, m} K_{st}^{\alpha\beta}(n,m) \, u_t^\beta(m)}$$

Σ über alle Kräfte die bei ein Auslenkg. des t-ten Teilchens in der m-ten Zelle in Richtg β verursacht wird,

K – Kraftkonstante



Ansatz ist zielführend Kraft im Sinne des harmonischen Oszillators

man erkennt, daß alle Oszillatoren verkoppelt sind.

$\rightarrow$ Normalkoordinaten sind nötig um auf „kein" kollektiven, nicht gekoppelten Oszillatoren zu kommen

Ansatz: $$u_s^\alpha(n) = \frac{1}{\sqrt{N m_s}} \sum_{\vec k,\lambda}^{N\;3p} A_s^\alpha(\lambda,\vec k)\, q_{\vec k\lambda}(t)\, e^{i\vec k\cdot\vec r_n}$$

$\vec k,\lambda$: Modeindex

$q_{\vec k\lambda}(t)$: hoffentl. ungekoppelte Oszillatoren

Ansatz in Form Welle,

A's, q's müssen bestimmt werden:

Forderung: $$\ddot q_{\vec k,\lambda} + \omega_\lambda^2(\vec k)\, q_{\vec k\lambda} = 0$$

$q_{\vec k,\lambda}$ soll analog Strahlungsfeld einer Oszillatorgl. genügen mit Dispersionsrelation $\omega_\lambda(\vec k)$.

$\lambda : 1 \dots 3p$, $k : n\frac{2\pi}{L}$, $n = 0, \dots N$.

u-Ansatz einsetzen in Newtongl.

$$\omega_\lambda^2(\vec k)\, A_s^\alpha(\vec k) = \sum_{t,\beta}\ \sum_{\underbrace{n-m}_{*}} \frac{K_{st}^{\alpha\beta}(\overbrace{n-m}^{*})}{\sqrt{m_s m_t}}\, e^{-i(\vec r_n-\vec r_m)\vec k}\, A_t^\beta(\vec k)$$

$\omega_\lambda^2(\vec k)$: kommt durch 2. Ableitung in Zeit

* alle Größen in einem periodischen Festkörper können nur von Differenz v. Abstand von 2 Zellen abhängen

Bestimmungsgleichg. für $\omega_\lambda(\vec{k})$, also

alle Moden der ungekoppelten Oszillatoren q

und für die $A_s^\alpha(k)$

$\longrightarrow$ steht in Form ein Eigenwertproblem

dicht Matrix

$\omega_\lambda(k) \;\hat{=}\;$ Eigenwerte

$A_s^\alpha(k) \;\hat{=}\;$ Eigenvektoren

wenn $\omega_\lambda(k)$ berechnet ist, so

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

analog zu Photonen

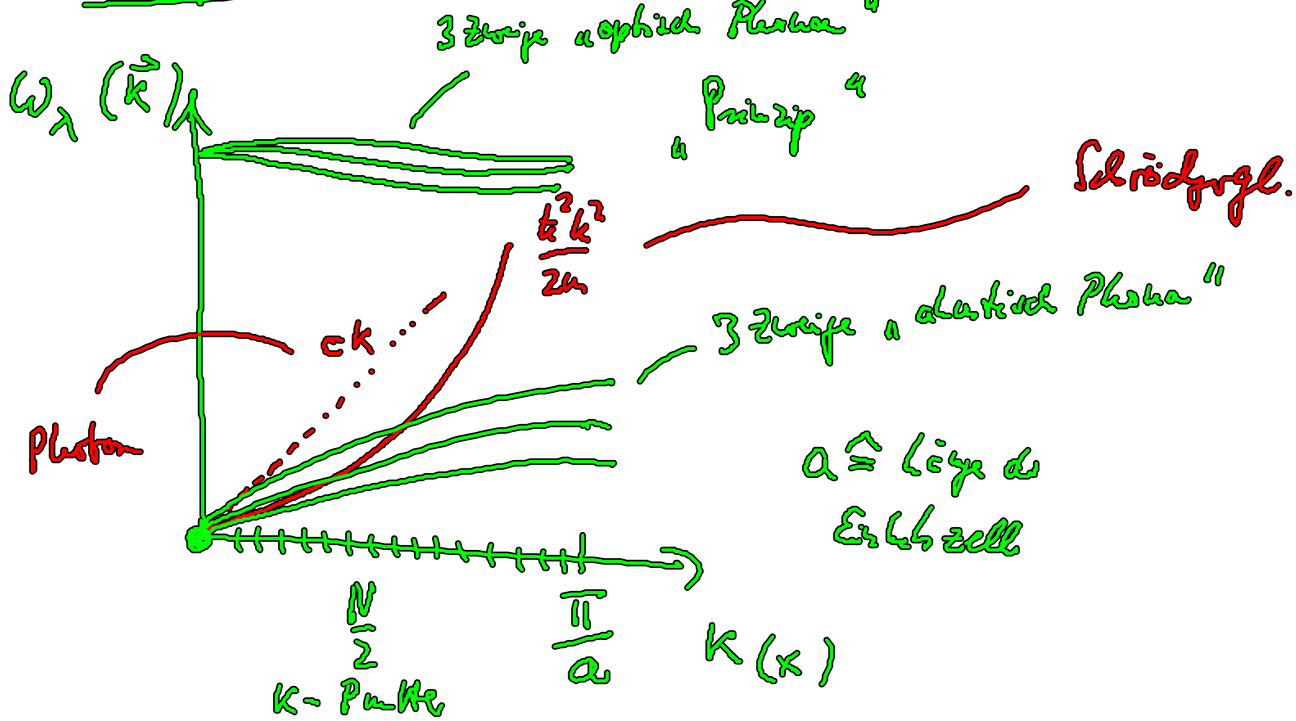
Merkregeln für $\omega_\lambda(\vec{k})$: (siehe Festkörpertheorie)

- es gibt weiterhin $3pN$ Oszillatoren,
  Anzahl der Freiheitsgrade = konstant

Aufteilg. $\lambda: 1, 2 \cdots 3p$

$\vec{k}: \frac{n 2\pi}{L}, \quad n = 0, \cdots N$

Beispiel für ein 2atomige Elementarzelle:



- aus den $3Np$ gekoppelten Oszillatoren

  werden $3N$ akustische Phononen

  $(3p-3)N$ optische Phononen

- akustische Phononen $\equiv \omega(|\vec{k}| \to 0) = 0$
- $\underbrace{\text{optische Phononen}}$ $\equiv \omega(|\vec{k}| \to 0) \neq 0$

Namen weil diese Phononen an optische Felder koppeln,

$\oplus \;\; \ominus$ „gegenphasige Schwingg." $\Rightarrow$ „Dipol"

$\rightarrow \;\; \leftarrow$

akust. Phonon : „gleichphasige Schwingung"

$\oplus \rightarrow \ominus \rightarrow$