8.2.5 Hamiltonfunktion in Normalkoordinaten

Darstellung der Auslenkung $u^{\alpha}_{ns}(t)$ nach Fourieramplituden:

$$u^{\alpha}_{ns}(t) = \frac{1}{\sqrt{N m_s}} \sum_{\vec{q},j} \underbrace{Q_j(\vec{q},t)}_{\text{Amplitude der Partikulärlösung}} \underbrace{A^{\alpha}_s(\vec{q},j)}_{\text{Polarisationsvektor (Richtung)}} \underbrace{e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}_n}\,\cancel{e^{-i\omega_{qj}t}}}_{\text{Orts- und Zeitabhängigkeit über Fourieranalyse}}$$

N: Gitterzellen; m_s: s-tes Ion

1 spezielle Lösung in $j, \vec{q}$

$\vec{u}$ als Überlagerung von linearen $\vec{q}, j$ Moden, die unabhängig voneinander sind

z.z.: Sinnhaftigkeit der Entwicklung, d.h. wir müssen Unabhängigkeit der Mode in der Hamiltonfunktion zeigen

$E = T + V$ des gesamten Ionsystems

$$= \frac{1}{2} \sum_{n,s,\alpha} m_s \left(\dot{u}^{\alpha}_{sn}\right)^2 + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{1,2} \phi^{n_1 n_2}_{\alpha_1 \alpha_2}(s_1 s_2)\, u^{\alpha_1}_{s_1 n_1} u^{\alpha_2}_{s_2 n_2}}_{\text{gekoppelte Oszillatoren}}$$

Frage: ist die Formulierung f. $Q_j(q,t)$ besser?

dazu $u^{\alpha}_{s_n}$ löschen in E, verwenden

$$\sum_{s,\alpha} A^{*\alpha}_s(q,j)\, A^{\alpha}_s(q,j') = \delta_{jj'} \quad \text{(Orthogonalität)}$$

Resultat (Übung):

$$E = \frac{1}{2}\sum_{qj}\left(\dot{Q}^*_j(q,t)\,\dot{Q}_j(q,t) \underset{(-)}{+} \omega^2_{jq}\, Q^*_j(q,t)\, Q_j(q,t)\right)$$

$$\equiv \sum_{qj} E_{jq} \quad \text{Summe der Energie unabhängiger Oszillatoren}$$

$$L = T\,(-)\,V \quad \text{Übergang zur Lagrangefunktion}$$

$$P_j(q) = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_j} \rightarrow P_j(q) = \dot{Q}^*(q) \quad \text{Def. Impulse}$$

damit kann die Hamiltonfunktion und Quantisierung bestimmt:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{jq}\left(P^*_j(q)\,P_j(q) + \omega^2_j(q)\,Q^*_j(q)\,Q_j(q)\right)$$

klassische H-Funktion von $3Np$ ungekoppelten Oszillatoren, vorher über u^{α}_{ns} waren das $3Np$ gekoppelte Oszillatoren

8.3. Quantisierung der Ionenschwingungen

1) klassische Amplituden in H und Operatoren $P_j \to \underline{P}_j$, $Q_j \to \underline{Q}_j$

(Strich wieder weglassen)

2) Quantisierung über Vertauschungsrelationen:

$$[P_j(q), Q_{j'}(q')] \overset{!}{=} -i\hbar\, \delta_{qq'}\, \delta_{jj'}$$

analog zu:

$$[p^{\alpha}_{s m}, u^{\alpha'}_{s' m'}] = -i\hbar\, \delta_{\alpha\alpha'}\, \delta_{m m'}\, \delta_{s s'} \quad \text{aus QM } \underline{I}$$

3) Einführung v. Leiteroperatoren zur Lösung

$$Q_j = \left(\frac{\hbar}{2\omega_j(q)}\right)^{1/2} \left(b^{+}_{qj} + b_{-qj}\right)$$

$$P_j = i\left(\frac{\hbar\omega_j(q)}{2}\right)^{1/2} \left(b^{+}_{qj} - b_{-qj}\right)$$

b_{qj}, b^{+}_{qj} sind Leiteroperatoren, erfüllen

$$[b_{qj}, b^{+}_{q'j'}]_{-} = \delta_{qq'}\, \delta_{jj'}$$

$$[b^{(+)}_{qj}, b^{(+)}_{q'j'}]_{-} = 0$$

Bosonen, ergibt sich natürlich aus Kommutator von P, Q.

4) einsetzen in H:

$$H = \sum_{\vec{q}j} \hbar \omega_{\vec{q}j} \left(b^+_{\vec{q}j} b_{\vec{q}j} + \frac{1}{2} \right)$$

Bemerkungen:

a) Energie der Gitterschwingung ist gequantelt, lässt sich als Summe über unabhängige Oszillatoren $\{\vec{q}, j\}$ darstellen. $\omega_{\vec{q}j}$ ergibt sich aus Eigenwertproblem (letzte VL)

b) $\exists$ Nullpunktsenergie, meßbar in Lichtstreuexperimenten

c) Interpretation:
Gitteranregungen werden als kollektive Anregungen des gesamten Gitters ausgebildet (alle Ionen nehmen teil), sind wellenartig und heißen „Phononen".
Sprechweise: „3 Phononen in der Mode $\vec{q}_7, j_7$"

d) Eigenzustände einer Mode können durch Besetzungszahlzustände beschrieben werden:

$$|n_{\vec{q}j}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{\vec{q}j}!}} \, b^{+\,n_{\vec{q}j}}_{\vec{q}j} \, |0_{\vec{q}j}\rangle$$

Zahl der Phononen in Mode $\vec{q}j$ — Vakuum

Gesamteigenzustand von H: $|n_{\vec{q}_1 j_1}, n_{\vec{q}_2 j}, \ldots, n_{\vec{q}_{max} j_{max}}\rangle$

e) Gleichgewicht: mittlere Zahl der Phononen gegeben durch die Boseverteilung $\rightarrow$ $f_{qj}^{eq} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{qj}/kT} - 1}$ $(\mu = 0)$

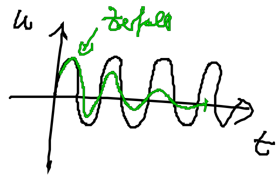
g. Phonon als Quasiteilchen

bisher: Anregungen d. Phonon mit $e^{\pm i\omega_{qj} t}$

in der Realität leben diese Anregungen nicht so lang

jetzt: Berechnung der Lebensdauer als Konsequenz der nichtlinearen Auslenkung u^3 in H

$\Rightarrow$ Anregung $u \sim e^{\pm i\omega_q t - \gamma_q t}$



Konzept d. Quasiteilchen / kollektive Anregung

Gitter-Ionen mit starker WW untereinander	mathematische Trafo $\longrightarrow$	kollektive Anregungen die schwach WW, beschrieben mit Quasiteilchen

Quasiteilchenkonzept ist nur sinnvoll wenn $\omega_{qj} \gg \gamma_q$.

9.1. Wechselwirkungspotential f. Phononen

$$H_{ph-ph} = \frac{1}{3!} \sum_{1,2,3} \phi^{n_1 n_2 n_3}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} \; u^{\alpha_1}_{n_1} \, u^{\alpha_2}_{n_2} \, u^{\alpha_3}_{n_3}$$

ohne Basis

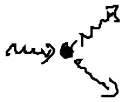
bis zur 2. Ordnung war alles im Kapitel 8 abgearbeitet
u einsetzen:

$$= \frac{1}{3!} \sum_{1,2,3} \phi_{123} \left(\frac{\hbar}{N m}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{A_1 \, A_2 \, A_3}{\sqrt{\omega_1 \, \omega_2 \, \omega_3}} \underbrace{(b_1^+ + b_1)(b_2^+ + b_2)(b_3^+ + b_3)}_{\text{ausmultiplizieren gibt 3 Phononenprozesse}}$$

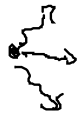
$$e^{i\vec{q}_1 \vec{a}_{n_1}} e^{i\vec{q}_2 \vec{a}_{n_2}} e^{i\vec{q}_3 \vec{a}_{n_3}}$$

$bbb \; \hat{=}$  energetisch ungünstig

 Impulserhaltung

$b^+ b^+ b \; \hat{=}$  Phononenspaltung

$b^+ b b \; \hat{=}$  Phononenfusion

$b^+ b^+ b^+ \; \hat{=}$  energetisch ungünstig

im ∞ ausgedehnten Raum muß Impulserhaltung gelten:

$$\phi^{n_1 n_2 n_3}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} = \phi^{n_1 - n_3 \;\; n_2 - n_3}_{\alpha_1 \; \alpha_2 \; \alpha_3}$$

kann nur von Ionenabstand abhängen

d.h. im Matrixelement aber:

$$\sum_{n_1 n_2 n_3} \underbrace{e^{i(\vec{q}_3 + \vec{q}_1 + \vec{q}_2)\vec{a}_{n_3}} \; e^{i\vec{q}_2 (\vec{a}_{n_2} - \vec{a}_{n_3})} \; e^{i\vec{q}_1 (\vec{a}_{n_1} - \vec{a}_{n_3})}}$$

$$\underbrace{\sum_{n_3} e^{i(\vec{q}_3+\vec{q}_1+\vec{q}_2)\vec{a}_{n_3}}}_{N\,\delta_{-q_3,\,q_1+q_2}} \sum_{\substack{n_1-n_3\\ n_2-n_3}} e^{i\vec{q}_2(\vec{a}_{n_2}-\vec{a}_{n_3})}\, e^{i\vec{q}_1(\vec{a}_{n_1}-\vec{a}_{n_3})}$$

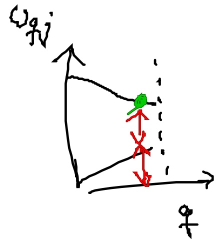
Impuls erhaltg bei obigen Prozessen

$$H_{ph-ph} = \underbrace{\frac{1}{3!}\sum_{1,2,3} \frac{\phi^{n_1 n_2}_{\kappa_1\kappa_2\kappa_3}}{(2N m)^{3/2}} \frac{A^{\alpha_1}(q_1 j_1)\, A^{\alpha_2}(q_2 j_2)\, A^{\alpha_3}(q_3 j_3)}{(\omega_{j_1 q_1}\,\omega_{j_2 q_2}\,\omega_{j_3 q_3})^{1/2}}\, e^{i\vec{q}_1\vec{a}_{n_1}+i\vec{q}_2\vec{a}_{n_2}}}_{V}$$

V = konstant ; mächtige Approximation !

$$\delta_{-q_3,\,q_1+q_2}\left(b^+_{-q_1 j_1}+b_{q_1 j_1}\right)\left(b^+_{-q_2 j_2}+b_{q_2 j_2}\right)\left(b^+_{-q_3 j_3}+b_{q_3 j_3}\right)$$

9.2. Phononlebensdauer (schematisch)



konkretes Bsp.: optische Phonon zerfällt in zwei akustische Phonon ($j=1,2$)

$$H_{ph-ph} = \sum_{1,2,3} V \underbrace{\left(b^+_{-q_1}+b_{-q_1}\right)}_{\text{optisch}} \underbrace{\left(d^+_{-q_2}+d_{q_2}\right)\left(d^+_{-q_3}+d_{q_3}\right)}_{\text{akustisch}}$$

wählen dieser aus: $b^+ \rightsquigarrow \cdot$ $\rightsquigarrow d^+$, $\rightsquigarrow d^+$

Heisenbergbewegungsgl. um WW zu berechnen:

$$-i\hbar \dot{b}^+_{-q} = [H_{ph} + H_{ph-ph}, b^+_{-q}]_-$$

$\nearrow$ freies Anteil Kapitel 8 $\quad$ $\nearrow$ Phonon - Phonon WW

$$\dot{b}^+_{-q} = i\omega^{opt.}_q b^+_q + i\sum_{2,3} \delta_{-q_3,-q+q_2}\left(d^+_{-q_2} d^+_{-q_3} + d^+_{-q_2} d_{q_3} + d_{q_2} d^+_{-q_3} + d_{q_2} d_{q_3}\right)$$

freie Bewegg.

nehmen nur energetisch Gunstigsten $d^+_{-q_2} d^+_{-q_3}$ mit

$$\left(e^{i\omega^{opt}_q t} \hat{=} e^{i2\omega^{akust}_q t} \right)$$

(1) Gleichg. f. Amplitude

$$\langle \dot{b}^+_{-q} \rangle = i\omega^{opt}_q \langle b^+_{-q} \rangle + i\sum_2 V \langle d^+_{-q_2} d^+_{q_2-q} \rangle$$

Hierachie problem! koppelt an $\langle d^+ d^+ \rangle$

$$\langle \dot{\overline{d^+_{-q} d^+_{-q'}}} \rangle = i(\omega_q + \omega_{q'}) \langle d^+_{-q} d_{-q'} \rangle \quad \text{freie Bewegg.}$$

$$+ 2iV \sum_3 \left(\langle b^+_{-q_3-q} d_{q_3} d^+_{-q'} \rangle + \langle b_{q_3+q'} d_{-q} d_{q_3} \rangle \right)$$

hier sind nur energieerhaltende Terme mitgenommen

z.B $b^+ d^+ d^+$ ist verboten!

Faktorisierung: $\langle b^+ d d^+ \rangle \to \langle b^+ \rangle \langle d d^+ \rangle$

$$\langle b^+ d^+ d \rangle \to \langle b^+ \rangle \langle d^+ d \rangle$$

analog zu unabhängigen Wahrscheinlichkeiten

$$\langle d d^+ \rangle \to 1 + \langle d^+ d \rangle$$

$$(1) \quad \langle \dot{b}_{-q}^+ \rangle = i \omega_q^0 \langle b_{-q}^+ \rangle + i V \sum_{q_2} \langle d_{-q}^+ d_{q_2-q}^+ \rangle$$

$$(2) \quad \langle \dot{d}_{-q}^+ d_{-q'}^+ \rangle = i(\omega_q + \omega_{q'}) \langle d_{-q}^+ d_{-q'}^+ \rangle$$

$$+ 2iV \langle b_{q'-q}^+ \rangle \cdot (1 + n_{q'} + n_q)$$

spontaner Prozess

stimuliert

$\langle d_{q'}^+ d_{q'} \rangle$ = Besetzung $n_{q'}$

gekoppeltes System, ist lösbar und führt zu einer Lebensdauer v. opt. Phononen.

Offensichtlich führt die Ausbreitung b_q^+ in (2) zu einer Anregung v. 2 Phononen (akustische), diese wirken auf b_q^+ über (1) zurück und lassen zum E-Verlust in b_q^+ führen