Theoretische Festkörperphysik

Franz Wegner
Institut für Theoretische Physik
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Vorbemerkung

Der erste Teil des Skriptums (Abschnitte 1 bis 14) gibt eine Einführung in einige Grundbegriffe der theoretischen Festkörperphysik. Es vereinigt einige theoretische Aspekte der Vorlesung "Physik VI" sowie der einstündigen Vorlesung "Theoretische Festkörperphysik I" im Sommer-Semester 2001.

Der zweite Teil (Abschnitt 15 bis 31) bringt dann einige darauf aufbauende weiterführende Kapitel, die Gegenstand der dreistündigen Vorlesung "Theoretische Festkörperphysik II" im Winter-Semester 2001/2002 war.

Literatur

S. Hunklinger / C. Enss, Festkörperphysik, Skriptum
O. Madelung, Festkörpertheorie I+II, Heidelberger Taschenbücher; Introduction to Solid-State Theory, Springer
C. Kittel, Einführung in dei Festkörperphysik, Oldenbourg; Introduction to Solid State Physics, John Wiley
C. Kittel, Quantentheorie der Festkörper, Oldenbourg; Quantum Theory of Solids, John Wiley
auch:
W. Ludwig, Festkörperphysik I,II, Akad. Verlagsges. Frankfurt
J. Ziman, Principles of the Theory of Solids, Cambridge Univ. Press
J. Ziman, Electrons and Phonons, Oxford Clarendon Press
N. Ashcroft, D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinchardt, Winston; jetzt auch in deutsch

Daneben werden im Text auch noch spezielle Literatur-Angaben gemacht.

Übersicht über die Themen im Skriptum von Hunklinger und Enss und in diesem Skriptum

Hier wird angegeben, welche Themen aus dem Skriptum von Hunklinger und Enss in diesem Skriptum und im Elektrodynamik-Skriptum behandelt werden. Dabei können sich der jeweilige Umfang und der jeweilige Überlapp sehr unterscheiden.

Hunklinger-Enss	Wegner	Wegner
1.3	Periodische Gitter: Deckoperationen	2
2.2	Etwas elastische Streuung	3.a
2.3	Gitter und reziprokes Gitter	3.b
2.4	Streuung am Gitter	3.c
3.4	Born-Oppenheimer Näherung	1
5	Born-Oppenheimer Näherung	1
5.1	Kontinuumstheorie	5
5.2, 5.3	Phononen in harmonischer Näherung	4
5.4	Quantisierung der Gitterschwingungen: Phononen	6
5.4	Neutronen-Streuung und Debye-Waller Faktor	8
5.5	Phononenstatistik und spezifische Wärme	7
7.1, 7.2	Unabhängige Elektronen	10
7.3, 7.4	Elektronen im periodischen Potential	11
8.1	Impuls und effektive Massen	12.a
8.1	Spin-Bahn-Kopplung und Zeitumkehr-Invarianz	12.c
8.4	Quanten-Halleffekt	13
10.2, 10.3	Magnonen	14
11.1	Dielektrizitätsk. nach Clausius und Mosotti	E-Dyn. 6.d
11.2	Polaritonen	9
11.2, 11.4	Elektromagn. Wellen in homogenen Leitern	E-Dyn. 17

1 Born-Oppenheimer-Huang-Näherung

Siehe Hunklinger-Enss: 3.4 Kovalente Bindung beim Wasserstoffatom S. 79
Siehe Hunklinger-Enss: 5 Gitterdynamik: Einleitung S. 125

In der Festkörperphysik betrachtet man in der Regel Schwingungsanregungen (Phononen) und elektronische Anregungen als Elementar-Anregungen, zu denen dann weitere in der Regel kollektive Anregungen kommen können.

Begründet wird diese Aufteilung durch die Born-Oppenheimer-Nährung, die auch adiabatische Näherung genannt wird. Man fasst zunächst Atomkerne und die inneren Elektronen zu Ionen zusammen. (Letztere sieht man als annähernd starr an. Soweit notwendig werden die Polarisierbarkeit und die magnetischen Momente der Ionen berücksichtigt.)

Für die starren Ionen und die äusseren Elektronen hat man den Hamilton-Operator

$$
\begin{aligned}
H &= H_{\mathrm{el}} + H_{\mathrm{ion}} + H_{\mathrm{el-ion}} = T + V && (1.1)\\
H_{\mathrm{el}} &= -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} && (1.2)\\
H_{\mathrm{ion}} &= -\sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_i^2} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V_{\mathrm{ion}}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) && (1.3)\\
H_{\mathrm{el-ion}} &= \sum_{i,j} V_{\mathrm{el-ion}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j). && (1.4)
\end{aligned}
$$

Dabei werden die Ortskoordinaten und die Massen der Ionen mit $\mathbf{R}$ und M_i, die der äußeren Elektronen mit $\mathbf{r}$ und m bezeichnet. Da die Massen der Ionen erheblich größer sind als die der Elektronen, vernachlässigt man zunächst die kinetische Energie der Ionen. Dann werden die Ortskoordinaten der Ionen gute Quantenzahlen und man löst für vorgegebene $\mathbf{R}_i$ das Elektronenproblem

$$
\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_j^2} + V(..\mathbf{R}_i..;..\mathbf{r}_j..)\right\}\psi_\alpha(..\mathbf{R}_i..;..\mathbf{r}_j..) = E_\alpha(..\mathbf{R}_i..)\psi_\alpha(..\mathbf{R}_i..;..\mathbf{r}_j..). \quad (1.5)
$$

Die vollständige Schrödinger-Gleichung lautet dann für die Wellenfunktion

$$
\Psi = \textstyle\sum_\alpha \phi_\alpha(..\mathbf{R}_i..)\psi_\alpha(..\mathbf{R}_i..;..\mathbf{r}_j..)
$$

$$
H\Psi = -\sum_{\alpha,i}\frac{\hbar^2}{2M_i}\left(\frac{\partial^2\phi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i^2}\psi_\alpha \underbrace{+2\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i}\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i} + \phi_\alpha\frac{\partial^2\psi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i^2}}\right) + \sum_\alpha E_\alpha\phi_\alpha\psi_\alpha = E\sum_\alpha \phi_\alpha\psi_\alpha \quad (1.6)
$$

Würden die Terme, die durch die geschwungene Klammer gekennzeichnet sind, fehlen, so bliebe die Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktion ϕ_α

$$
-\sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i}\frac{\partial^2\phi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i^2} + E_\alpha(..\mathbf{R}_i..)\phi_\alpha(..\mathbf{R}_i..) = E\phi_\alpha(..\mathbf{R}_i..). \quad (1.7)
$$

Dabei ist E_α das neue effektive Ionenpotential. In dieser Näherung separiert die Gleichung in eine für die Elektronen (ψ_α) und eine für die Gitterschwingungen (ϕ_α).

Der mit der Klammer bezeichnete Anteil in (1.6) stellt die Elektron-Phonon-Wechselwirkung dar.

Die zu Grunde liegende Vorstellung ist, dass sich die Elektronen rasch bewegen und damit den Ionen adiabatisch folgen. Da $m/M_{\mathrm{p}} = 1/1836 \ll 1$, erfolgt die Bewegung der Elektronen und der Ionen auf zwei verschiedenen Zeitskalen.

Jedoch seien zwei Probleme dieser Näherung erwähnt:
1) Die ψ_α sind sehr schwer zu bestimmen, insbesondere wenn die $\mathbf{R}_i$ kein reguläres Gitter bilden. Dazu kommt, dass es für spezielle Werte der $\mathbf{R}_i$ Entartungen gibt.
2) Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung trägt meist nur wenig zur Grundzustandsenergie bei. Aber sie ist trotzdem für viele Festkörper-Effekte wichtig. (Peierls-Instabilität, Supraleitung, el. Leitfähigkeit).

Das gilt vor allem dann, wenn die wesentlichen Elektronen-Anregungsenergien in der Größenordnung der Phononen-Energien sind.

Als Ausgangspunkt hat sich die näherungsweise Entkopplung von Phonon- und Elektron-Freiheitsgraden sehr bewährt.

2 Periodische Gitter: Deckoperationen

Siehe Hunklinger-Enss: 1.3 Struktur der Kristalle S. 8-24

2.a Translationen

Ein periodisches Gitter geht unter Translationen um drei Vektoren $\mathbf{a}^{(1)}$, $\mathbf{a}^{(2)}$, $\mathbf{a}^{(3)}$, die nicht komplanar sind, in sich über. Dadurch entsteht ein Bravaisgitter oder primitives Gitter, das heißt ein Punktgitter, dessen Gitterpunkte sich schreiben lassen

$$\mathbf{R}^{(n)} = n_1\mathbf{a}^{(1)} + n_2\mathbf{a}^{(2)} + n_3\mathbf{a}^{(3)} \tag{2.1}$$

mit ganzen Zahlen n_1, n_2, n_3. Falls die $\mathbf{a}^{(i)}$ so gewählt sind, dass sämtliche Translationen, die das Gitter mit sich zur Deckung bringen, durch $\mathbf{R}^{(n)}$ darstellbar sind, spricht man von primitiven Gittervektoren. Diese $\mathbf{a}^{(i)}$ spannen eine Elementarzelle auf.

Unter einer Wigner-Seitz-Zelle versteht man alle Punkte, die einem Gitterpunkt am nächsten sind. Auf diese Weise entsteht eine Einteilung des Raumes in lauter gleiche Gitterzellen. Beispiele siehe Hunklinger, S. 24, Abb. 1.26 und 1.27, Madelung I, S. 60, Fig. 2.11 und 2.12. Ihr Volumen ist das der Elementarzelle.

Daneben verwendet man auch die (konventionelle) Einheitszelle, ein ganzzahliges Vielfaches der Elementarzelle. Das Volumen der Einheits- oder Elementarzelle ist

$$V_{\mathrm{z}} = |(\mathbf{a}^{(1)} \times \mathbf{a}^{(2)}) \cdot \mathbf{a}^{(3)}|. \tag{2.2}$$

Innerhalb einer Einheits- oder Elementarzelle befinden sich r Atome $i = 1, ...r$, deren Orte man durch

$$\mathbf{R}_{n,i} = (n_1 + s_{1,i})\mathbf{a}^{(1)} + (n_2 + s_{2,i})\mathbf{a}^{(2)} + (n_3 + s_{3,i})\mathbf{a}^{(3)} \tag{2.3}$$

angibt.

Tabelle einiger kubischer Gitter mit einer Einheitszelle in Form eines Würfels der Seitenlänge a, $|\mathbf{a}^{(1)}| = |\mathbf{a}^{(2)}| = |\mathbf{a}^{(3)}| = a$, $\mathbf{a}^{(1)} \cdot \mathbf{a}^{(2)} = \mathbf{a}^{(2)} \cdot \mathbf{a}^{(3)} = \mathbf{a}^{(3)} \cdot \mathbf{a}^{(1)} = 0$.

Gitter	r		$\mathbf{s}_1$ ($\mathbf{s}_5$	$\mathbf{s}_2$ $\mathbf{s}_6$	$\mathbf{s}_3$ $\mathbf{s}_7$	$\mathbf{s}_4$ $\mathbf{s}_8$)	primitive Gittervektoren	Volumen der Elementarzelle
sc	1		(000)				$\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}, \mathbf{a}^{(3)}$	a^3
bcc	2		(000)	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$			$\frac{\mathbf{a}^{(1)}+\mathbf{a}^{(2)}-\mathbf{a}^{(3)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(1)}+\mathbf{a}^{(3)}-\mathbf{a}^{(2)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(2)}+\mathbf{a}^{(3)}-\mathbf{a}^{(1)}}{2},$	$a^3/2$
fcc	4		(000)	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$\frac{\mathbf{a}^{(1)}+\mathbf{a}^{(2)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(1)}+\mathbf{a}^{(3)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(2)}+\mathbf{a}^{(3)}}{2}$	$a^3/4$
NaCl	8	Na	(000)	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	wie fcc	$a^3/4$
		Cl	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}00)$	$(0\frac{1}{2}0)$	$(00\frac{1}{2})$		
CsCl	2	Cs,Cl	(000)	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$			wie sc	a^3
Diamant, ZnS	8	C,Zn	(000)	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	wie fcc	$a^3/4$
		C,S	$(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$	$(\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4})$	$(\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4})$	$(\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4})$		

(2.4)

Dabei steht sc für simple cubic (einfach kubisch), bcc für body-centered cubic (kubisch raumzentriert), fcc für face-centered cubic (kubisch flächenzentriert). Figuren dazu siehe Kittel, Fig. 28 bis 30.

2.b Allgemeine Deckoperationen

Ein Gitter geht im Allgemeinen nicht nur durch Translationen sondern auch durch Drehungen und /oder Spiegelungen in sich über. Im allgemeinen gibt es einen Satz von orthogonalen Transformationen α und Translationen $\mathbf{a}$, so dass das Gitter unter den Transformationen

$$\mathbf{r}' = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{a} = \{\alpha, \mathbf{a}\}\mathbf{r} \tag{2.5}$$

in sich übergeht.

Die Determinante einer orthogonalen Matrix kann entweder $+1$ oder -1 sein. Wir beginnen mit $\det(\alpha) = +1$. Dann gehört die Matrix α zur SO(3).

Ein Spezialfall ist die Einheits-Matrix (Identität): Alle Eigenwerte von α sind $+1$. Dann stellt $(\alpha, \mathbf{a}) = (1, \mathbf{R}^{(n)})$ die **Translationen** dar.
Da alle Eigenwerte einer orthogonalen Matrix betragsmäßig gleich 1 sind, ist ein Eigenwert von α gleich $+1$ (Eigenvektor $\mathbf{n}^{(0)}$, Richtung der Drehachse), die beiden anderen sind $\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\phi}$ mit dem Drehwinkel ϕ. Falls $\mathbf{an}^{(0)} = 0$, dann ist dies eine **Drehung**, falls aber $\mathbf{an}^{(0)} \neq 0$, dann muss man das Gitter auch noch in Richtung der Drehachse verschieben und man spricht von einer **Schraubung**.

Im zweiten Fall ist $\det(\alpha) = -1$. Wir betrachten zunächst zwei Spezialfälle:
Falls alle Eigenwerte gleich -1 sind, $(\alpha, \mathbf{a}) = (-1, \mathbf{a})$, dann stellt die Operation eine **Inversion** am Zentrum $\mathbf{a}/2$ dar, $\mathbf{r}' = \mathbf{a} - \mathbf{r}$.
Ist dagegen ein Eigenwert -1 mit Eigenvektor $\mathbf{n}^{(0)}$ und sind zwei Eigenwerte $+1$, dann hat man es bei $\mathbf{a} \parallel \mathbf{n}^{(0)}$ mit einer **Spiegelung** an einer Ebene senkrecht zu $\mathbf{n}^{(0)}$ durch $\mathbf{a}/2$ und andernfalls mit einer **Gleitspiegelung** zu tun. Generell gilt: Falls die Verschiebung $\mathbf{a}$ Komponenten in den Richtungen mit Eigenwerten $+1$ hat, dann benötigt man zusätzlich zur Drehung oder Spiegelung noch eine Verschiebung. Andernfalls kann man Drehachse oder Spiegelebene so wählen, dass eine Verschiebung nicht notwendig ist.
Allgemein hat man für $\det(\alpha) = -1$ einen Eigenwerte -1 mit Eigenvektor $\mathbf{n}^{(0)}$ und ein Eigenwert-paar $e^{\pm i\phi}$. Dies beschreibt dann eine **Drehspiegelung** mit Drehachse parallel zu $\mathbf{n}^{(0)}$ und Spiegelebene senkrecht darauf.

Wir betrachten noch, welche Drehwinkel ϕ möglich sind (wir tun das hier nur für ein Bravais-Gitter, doch lässt sich der Beweis leicht verallgemeinern): Mit der Notation $R_\mu^{(n)} = \sum_i A_{\mu i} n_i$ mit $A_{\mu i} = a_\mu^{(i)}$, beschreiben wir die Operation $\alpha \mathbf{R}^{(n)} = \mathbf{R}^{(m)}$ in der Matrix-Form $\alpha A n = A m$ oder $m = A^{-1} \alpha A n$. Diese Gleichung ergibt für ein beliebiges ganzzahliges Tripel (n_1, n_2, n_3) ganzzahlige (m_1, m_2, m_3). Daher muss die Matrix $A^{-1} \alpha A$ lauter ganzzahlige Einträge haben. Dann ist aber die Spur

$$\mathrm{Sp}(A^{-1} \alpha A) = \mathrm{Sp}(\alpha) = \pm 1 + 2 \cos \phi \tag{2.6}$$

ganzzahlig. Daher bleiben nur die Möglichkeiten

$$\boxed{\begin{array}{lccccccl} \cos\phi = & +1 & +1/2 & 0 & -1/2 & -1 & \\ & & \text{6-} & \text{4-} & \text{3-} & \text{2-} & \text{zählige Drehachse.} \end{array}} \tag{2.7}$$

2.c Gruppeneigenschaften, Raumgruppe und Punktgruppe

Die zweimalige Anwendung einer Deckoperation stellt wieder eine Deckoperation dar. Auch ist die Rückgängigmachung (also das Inverse) einer Deckoperation wieder eine Deckoperation. Diese stellen also eine Gruppe dar, die Raumgruppe. Man findet für die zweimalige Anwendung und das Inverse

$$\{\alpha|\mathbf{a}\}\{\alpha'|\mathbf{a}'\} = \{\alpha\alpha'|\alpha\mathbf{a}' + \mathbf{a}\}, \tag{2.8}$$
$$\{\alpha|\mathbf{a}\}^{-1} = \{\alpha^{-1}| - \alpha^{-1}\mathbf{a}\}. \tag{2.9}$$

Die Menge der Operationen α bildet selbst eine Gruppe, die Punktgruppe. Je nachdem, ob man a) das Bravaisgitter oder die Kristallstruktur, b) die Punktgruppe oder die Raumgruppe betrachtet, unterscheidet man

	Bravaisgitter	Kristallstruktur
Punktgruppe	7 Kristallsysteme	32 kristallographische Punktgruppen
Raumgruppe	14 Bravaisgitter	230 Kristallklassen

3 Reziprokes Gitter und Streuung

3.a Etwas elastische Streuung

Siehe Hunklinger-Enss: 2.2 Einfache Theorie der Streuung S. 33-35

Trifft ein Teilchen (Elektron, Photon, Neutron) auf einen Körper, so kann unterschiedliches geschehen: Das Teilchen kann unverändert hindurchlaufen, es kann streuen, ohne den Körper zu verändern (elastische Streuung), es kann den Körper in einen anderen Zustand überführen (inelastische Streuung) einschließlich der Möglichkeit, dass dabei andere Teilchen erzeugt oder herausgeschlagen werden, und es kann absorbiert werden. Wir betrachten zunächst nur den einfachsten Fall der elastischen Streuung (tatsächlich nimmt der Körper dabei zumindest Impuls auf, wobei die dadurch bedingte Änderung der Schwerpunktsenergie aber vernachlässigbar ist).

Bei Streuung an einem einzelnen Teilchen (Ion oder Elektron) geht von diesem eine Streuwelle aus. Im einfachsten Fall kann man diese durch die Streulänge f darstellen, die zu einer isotropen Streuung führt. Wird die einlaufende ebene Welle durch eine Amplitude

$$A = A_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}-\omega_0 t)} \tag{3.1}$$

beschrieben, so erhält man für die Streuwelle, die am Ort r' gestreut wird, die Streuamplitude

$$A_\mathrm{s} = A_0 \frac{f}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}'+k_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|-\omega_0 t)} \tag{3.2}$$

Unter der Annahme, dass die Streuwelle in einer Entfernung groß gegenüber der Ausdehnung des Körpers beobachtet wird, vernachlässigt man in Nenner r', ersetzt dort also $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r$, während man im Exponenten den von $\mathbf{r}'$ abhängigen Wegunterschied berücksichtigen muss, $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/r$. Man führt noch den Wellenvektor $\mathbf{k}$ in Richtung des Beobachtungspunktes $\mathbf{r}$ ein, $\mathbf{k} = k_0\mathbf{r}/r$ und erhält dann für die Streuamplitude

$$A_\mathrm{s} = A_0 \frac{f\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 r}}{r} \mathrm{e}^{\mathrm{i}((\mathbf{k}_0-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'-\omega_0 t)}. \tag{3.3}$$

Die Streuamplitude hängt also wesentlich vom Streuvektor $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ ab.

Die Streuung erfolgt im Körper an vielen Streuern und auch diese sind nicht unbedingt punktförmig. Man muss daher die Dichte $\rho(\mathbf{r})$ der Streuer berücksichtigen. Unter Einführung dieser Dichte erhält man die Amplitude in der Form

$$A_\mathrm{s} = A_0 \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_0 r-\omega_0 t)}}{r} \mathcal{A} \tag{3.4}$$

mit der Streuamplitude

$$\mathcal{A} = f \int \mathrm{d}^3 r \rho(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \tag{3.5}$$

Bei Anwesenheit verschiedener Streuer ist $f\rho(\mathbf{r})$ durch $\sum_i f_i\rho_i(\mathbf{r})$ zu ersetzen.

Der Streuquerschnitt ergibt sich dann zu

$$\mathrm{d}\sigma = |A_\mathrm{s}|^2 r^2 \mathrm{d}\Omega/|A_0|^2 = |\mathcal{A}|^2 \mathrm{d}\Omega = f^2 \int \mathrm{d}^3 r d^3 r' \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\Omega. \tag{3.6}$$

Nehmen wir zunächst an, ρ sei konstant. Dann finden wir für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{d\Omega} = f^2\rho^2 \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \int \mathrm{d}^3 r' \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}'} \tag{3.7}$$

Im Wesentlichen folgt für einen makroskopischen Körper hieraus ein $\delta(\mathbf{K})$. Wir können das folgendermaßen sehen: Nehmen wir an, der Körper sei ein Quader. In x-Richtung sei er von 0 bis a ausgedehnt. Die x-Integrationen liefern dann

$$\int_0^a \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}K_x x} \int_0^a \mathrm{d}x' \mathrm{e}^{\mathrm{i}K_x x'} = \frac{4\sin^2(\frac{K_x a}{2})}{K_x^2}. \tag{3.8}$$

Diese Funktion ist bereits von der Beugung am Schlitz bekannt. Sie hat ein ausgeprägtes Maximum bei $K_x = 0$, eine erste Nullstelle bei $K_x = \pi/a$, was für eine makroskopische Ausdehnung a sehr klein ist und fällt unter Oszillationen für größeres K_x wie $1/K_x^2$ ab. Für makroskopische Ausdehnung a kann man sie durch eine δ-Funktion ersetzen. Den Vorfaktor findet man durch Integration

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}K_x \frac{4\sin^2(\frac{K_x a}{2})}{K_x^2} = 2a \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\sin^2 k}{k^2} = 2\pi a. \tag{3.9}$$

Entsprechend werden die Integrationen in den beiden anderen Raumrichtungen durch geführt, so dass man für konstantes ρ schließlich

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = f^2 \rho^2 (2\pi)^3 V_\mathrm{P} \delta^3(\mathbf{K}) \tag{3.10}$$

mit dem Volumen V_P des Körpers erhält. Dies ist eine Streuung in Vorwärtsrichtung (Schatten und Beugung). Sie trägt aber auch dazu bei, dass die Welle nach vorne oder rückwärts phasenverschoben wird, was zu einer Brechzahl verschieden von 1 führt. Für einen Körper anderer (aber hinreichend kompakter) Form gilt (3.10) ebenfalls. Je größer der Körper desto kleiner ist der Bereich, in der die Fourier-Transformierte wesentlich von 0 verschieden ist. Ansonsten verwendet man, dass das Integral über $\mathbf{K}$ eine δ-Funktion in $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ergibt,

$$\begin{aligned} \int d^3K \int_V d^3r \int_V d^3r' \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} &= \int_V d^3r \int_V d^3r' \int d^3K \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\ &= \int_V d^3r \int_V d^3r' (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = (2\pi)^3 V_\mathrm{P}. \end{aligned} \tag{3.11}$$

Interessanter sind die Beiträge, die dadurch entstehen, dass $\rho(\mathbf{r})$ von seinem Mittelwert abweicht. Ersetzen wir $\mathbf{r}$ durch $\mathbf{r} + \mathbf{r}'$, dann bleibt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = f^2 V_\mathrm{P} (\rho^2 (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{K}) + \int d^3r g(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}) \tag{3.12}$$

mit der Korrelationsfunktion

$$g(\mathbf{r}) = \langle \rho(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}' + \mathbf{r}) \rangle - \langle \rho \rangle^2, \tag{3.13}$$

wobei $\langle ... \rangle$ die Raummittelung über $\mathbf{r}'$ anzeigt. In einer amorphen Substanz oder einer Flüssigkeit hängt g nur vom Abstand (nicht von der Richtung) r ab. Der Streuquerschnitt ergibt die (dreidimensionale) Fouriertransformierte von $g(r)$.

Man beachte, dass wir hier nur die Einfach-Streuung betrachtet haben. Der Probekörper muss also so dünn sein, dass Mehrfach-Streuung vernachlässigbar ist.

3.b Gitter und reziprokes Gitter

Siehe Hunklinger-Enss: 2.3 Fourier-Entwicklung von Punktgittern S. 36-42

In einem idealen Kristall berücksichtigt man die langreichweitige Ordnung, die sich darin ausdrückt, dass ρ gitterperiodisch ist

$$\rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \rho(\mathbf{r}). \tag{3.14}$$

Entwickelt man ρ in eine Fourier-Reihe

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \tag{3.15}$$

dann ist

$$\rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}. \tag{3.16}$$

Aus der Gitterperiodizität folgt also, dass $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n}$ für alle $\mathbf{R}_n$ gleich 1 sein muss. Das ist genau dann erfüllt, wenn es für die Basisvektoren $\mathbf{a}$ gilt. Man muss daher

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G} = 2\pi m_i \tag{3.17}$$

mit ganzzahligen m_i fordern. Für allgemeines $\mathbf{R}_n$ gilt dann $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n} = \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\sum_i n_i m_i} = 1$.

Die Vektoren $\mathbf{G}$, die (3.17) erfüllen, heißen reziproke Gittervektoren. Wir bezeichnen sie mit $\mathbf{G}_m$, wobei m aus den drei Indices m_1, m_2, m_3 besteht. (Im Skriptum Hunklinger/Enss mit h, k, l bezeichnet) Die Lösung der Gleichung

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G}_m = 2\pi m_i \tag{3.18}$$

kann zunächst in der Form

$$\mathbf{G}_m = \sum_{j=1}^{3} m_j \mathbf{b}_j, \quad \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{i,j} \tag{3.19}$$

geschrieben werden. Die letztere Gleichung hat die Lösung

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{V_\mathrm{Z}}(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{V_\mathrm{Z}}(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{V_\mathrm{Z}}(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2). \tag{3.20}$$

Dabei ist $V_\mathrm{Z} = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3$ das Volumen der Elementarzelle, das mit dem Volumen der Elementarzelle des reziproken Gitters über $(\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{b}_3 = (2\pi)^3/V_\mathrm{Z}$ verknüpft ist.

Man sieht aus der Darstellung (3.19), dass die reziproken Gittervektoren selbst ein Gitter bilden mit den Basisvektoren $\mathbf{b}$, das reziproke Gitter.

3.c Streuung am Gitter

Siehe Hunklinger-Enss: 2.4 Streuung an Kristallen S. 43-46

Wir betrachten zunächst die Entwicklungskoeffizienten ρ_m in der Entwicklung

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_m \rho_m \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}_m\cdot\mathbf{r}}, \tag{3.21}$$

wobei wir jetzt ρ_m statt $\rho_{\mathbf{G}_m}$ schreiben. Wir erhalten diese Koeffizienten durch Integration über die Elementarzelle, in dem wir über das von den Basisvektoren $\mathbf{a}$ aufgespannte Parallelepiped integrieren,

$$\rho_m = \frac{1}{V_\mathrm{Z}} \int_{V_\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}_m\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}). \tag{3.22}$$

Man führt hier die Fourier-Entwicklung bezüglich der drei Richtungen der $\mathbf{a}$ durch analog zur eindimensionalen Fourier-Entwicklung. Man beachte, dass

$$\int_{V_\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}_m\cdot\mathbf{r}} = \begin{cases} V_\mathrm{Z} & \text{für } \mathbf{G} = 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{3.23}$$

(Man findet das leicht, indem man $\mathbf{r} = \sum_i s_i \mathbf{a}^{(i)}$, $0 \le s_i \le 1$ parametrisiert.) Nachdem aber $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n} = 1$, muss die Integration nicht unbedingt über das Parallelepiped erfolgen. Vielmehr können Volumen-Bereiche auch um Gittervektoren verschoben berücksichtigt werden. Zum Beispiel kann man auch über die Wigner-Seitz-Zelle integrieren, die im vorhergehenden Abschnitt eingeführt wurde.

Für mehrere Arten von Streuern erhält man dann den differentiellen Streuquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |\mathcal{A}|^2 = (2\pi)^3 V_\mathrm{P} \sum_m |\sum_i f_i \rho_{i,m}|^2 \delta^3(\mathbf{G}_m - \mathbf{K}). \tag{3.24}$$

Es entstehen also diskrete Streupeaks an den reziproken Gittervektoren, die über die Fourier-Transformierten von ρ Auskunft geben. Insbesondere findet man die reziproken Gittervektoren, die die Berechnung der $\mathbf{a}$ erlauben. Damit erhält man Aufschluss über die Gitterstruktur.

4 Phononen in harmonischer Näherung

Siehe Hunklinger-Enss: 5.2 Bewegungsgleichung der Gitteratome S. 128-131
Siehe Hunklinger-Enss: 5.3 Gitterschwingungen S. 131-141

4.a Bewegungsgleichungen

In diesem Abschnitt betrachten wir die klassischen Bewegungsgleichungen für die Phononen. Wir tun das, da sehr vieles davon für den quantenmechanischen Fall übernommen werden kann. Das liegt daran, dass die Bewegungsgleichungen für die klassischen Auslenkungen $\boldsymbol{\eta}$ und die quantenmechanischen Operatoren der Auslenkungen die gleichen sind.

Die Ionen befinden sich an den Orten $\mathbf{R}_{n,i} + \boldsymbol{\eta}_{ni}$. Dabei nummeriert $n = (n_1, n_2, n_3)$ die Einheitszellen und i nummeriert das Ion innerhalb dieser Zelle, $i = 1, ...r$. Die kinetische Energie lässt sich dann

$$\mathcal{T} = \sum_{ni\alpha} \frac{M_i}{2} \dot{\eta}_{ni\alpha}^2 \tag{4.1}$$

schreiben. Dabei nummeriert α die kartesischen Komponenten. Die potentielle Energie schreiben wir in harmonischer Näherung

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum V_{ni\alpha}^{mj\beta} \eta_{ni\alpha} \eta_{mj\beta} + O(\eta^3). \tag{4.2}$$

Dabei sind die Matrix-Elemente $V_{\cdots}^{\cdots}$ die zweiten Ableitungen des Potentials nach den Auslenkungen. Die harmonische Näherung besteht darin, dass wir die Terme der Ordnung η^3 vernachlässigen. Daraus ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$M_i \ddot{\eta}_{ni\alpha} = -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \eta_{ni\alpha}} = -\sum_{mj\beta} V_{ni\alpha}^{mj\beta} \eta_{mj\beta}. \tag{4.3}$$

4.b Symmetrien

Wir betrachten nun die Symmetrien der $V_{\cdots}^{\cdots}$. Die Matrix V ist reell. Sie ist auch symmetrisch. Nur in dieser symmetrischen Form ist die Bewegungsgleichung (4.3) richtig. Andernfalls müsste $V_{ni\alpha}^{mj\beta}$ durch $\frac{1}{2}(V_{ni\alpha}^{mj\beta} + V_{mj\beta}^{ni\alpha})$ ersetzt werden, was dann der Symmetrisierung entspricht,

$$V_{ni\alpha}^{mj\beta} = V_{mj\beta}^{ni\alpha}. \tag{4.4}$$

Bei Verschiebung des Festkörpers um einen konstanten Vektor $\delta\eta$, $\eta_{mi\beta} \to \eta_{mi\beta} + \delta\eta_\beta$ ändert sich die Kraft nicht,

$$\sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\beta} = 0. \tag{4.5}$$

Bei Rotation des Gitters um einen konstanten Winkel tritt keine rücktreibende Kraft auf. Die infinitesimale Rotation stellen wir durch die orthogonale Matrix $1 + \delta\phi$ dar. Aus der Orthogonalität folgt $(1 + \delta\phi)(1 + \delta\phi^{\mathrm{t}}) = 1$ in linearer Ordnung in $\delta\phi$. Dabei zeigt der Index $^{\mathrm{t}}$ das Transponierte an. Es muss also

$$\delta\phi + \delta\phi^{\mathrm{t}} = 0 \tag{4.6}$$

gelten. $\delta\phi$ ist also eine antisymmetrische Matrix. Die drei unabhängigen Komponenten $\delta\phi_{12}$, $\delta\phi_{23}$ und $\delta\phi_{31}$ sind die drei infinitesimalen Drehwinkel um z-, x- und y-Achse. Die durch die Rotation aus der Ruhelage entstehende Auslenkung ist gegeben durch

$$\mathbf{R} + \boldsymbol{\eta} = (1 + \delta\phi)\mathbf{R}, \quad \eta_{ni\alpha} = \sum_\beta \delta\phi_{\alpha\beta} R_{ni\beta}. \tag{4.7}$$

Daraus folgt dann

$$\sum_{mj\beta\gamma} V_{ni\alpha}^{mj\beta} \delta\phi_{\beta\gamma} R_{mj\gamma} = 0, \tag{4.8}$$

woraus dann für gegebenes $\beta\gamma$

$$\sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\beta} R_{mj\gamma} = \sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\gamma} R_{mj\beta} \tag{4.9}$$

folgt. Unter Verwendung von (4.5) können wir das auch

$$\sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\beta} (R_{mj\gamma} - R_{ni\gamma}) = \sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\gamma} (R_{mj\beta} - R_{ni\beta}) \tag{4.10}$$

schreiben. Schließlich gilt für ein periodisches Gitter noch

$$V_{ni\alpha}^{mj\beta} = V_{n+l,i\alpha}^{m+l,j\beta} = V_{i\alpha}^{j\beta}(m-n). \tag{4.11}$$

4.c Lösung der Bewegungsgleichungen

Die allgemeine Lösung (siehe Mechanik-Vorlesung) ist durch die Überlagerung von zeitlich periodischen partikulären Lösungen der Form

$$\eta_{ni\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{M_i}} u_{ni\alpha} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{4.12}$$

gegeben. Die Amplitude der Auslenkungen sind die $u/\sqrt{M}$. Der Faktor $1/\sqrt{M}$ wurde eingeführt, damit wir anschließend eine symmetrische Matrix zu diagonalisieren haben. Wir erhalten dann durch Einsetzen und Ausfaktorisieren von $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ die Eigenwertgleichung

$$\omega^2 u_{ni\alpha} = \sum_{mj\beta} \Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} u_{mj\beta}, \quad \Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} = \frac{V_{ni\alpha}^{mj\beta}}{\sqrt{M_i M_j}}. \tag{4.13}$$

Da die Matrix Φ symmetrisch ist, wissen wir, dass die $3rN$ Eigenwerte ω^2 reell sind. Ist ω^2 positiv, so handelt es sich tatsächlich um Oszillatoren. Ist $\omega^2 = 0$, so ist $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ durch $t - t_0$ zu ersetzen; dies findet man für die Translationen und (für kleine Winkel) für die Rotationen. Ist schließlich $\omega^2 < 0$, dann ist $i\omega$ reell und man hat eine exponentiell anwachsende und eine exponentiell verschwindende Lösung; der Festkörper ist instabil. Die harmonische Näherung gilt nur für kleine Auslenkungen. Ist ω^2 negativ, dann wird der Festkörper in eine andere stabile Lage übergehen oder er verliert seine Festigkeit.

Die Matrix Φ hat die Größe $3rN \times 3rN$. Ihre Diagonalisierung wird aber für ein periodisches Gitter sehr vereinfacht. Hier setzt man

$$u_{ni\alpha} = c_{i\alpha}(\mathbf{q}) \mathrm{e}^{\mathbf{iqR}_n} \tag{4.14}$$

an. Die Amplitude der Auslenkung hängt also nur von dem Gitterplatz i innerhalb einer Gitterzelle ab und ist dann noch mit der Phase $\mathrm{e}^{\mathbf{iq}\cdot\mathbf{R}_n}$ multipliziert; es handelt sich um eine ebene Welle mit dem Wellenvektor $\mathbf{q}$. Man beachte, dass $\mathbf{q}$ nur bis auf reziproke Gittervektoren definiert ist.

Man findet mit diesem Ansatz die Eigenwertgleichungen

$$\omega^2 c_{i\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{mj\beta} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \Phi_{i\alpha}^{j\beta}(m-n) c_{j\beta}(\mathbf{q}) \tag{4.15}$$

oder mit der dynamischen Matrix

$$D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) = \sum_m \Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} = \frac{1}{\sqrt{M_i M_j}} \sum_m V_{i\alpha}^{j\beta}(m) \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} \tag{4.16}$$

in der Form

$$\omega^2 c_{i\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{j\beta} D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) c_{j\beta}(\mathbf{q}). \tag{4.17}$$

Die Matrizen D haben die Größe $3r \times 3r$ und führen auf $3r$ Phononenäste $\omega = \omega_\lambda(\mathbf{q})$ mit Amplituden $c_{i\alpha} = c_{i\alpha}^\lambda(\mathbf{q})$. Die speziellen Lösungen haben dann die Form

$$\boldsymbol{\eta}_{ni}(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{M_i}} \mathbf{c}_i^\lambda(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{qR}_n - \omega^\lambda(\mathbf{q})t)}. \tag{4.18}$$

Wir betrachten noch einige Symmetrien:
a) Es gilt

$$\omega_\lambda(\mathbf{q}) = \omega_\lambda(\mathbf{q}+\mathbf{G}), \text{ da } D^{j\beta}_{i\alpha}(\mathbf{q}) = D^{j\beta}_{i\alpha}(\mathbf{q}+\mathbf{G}) \tag{4.19}$$

für alle reziproken Gittervektoren $\mathbf{G}$.
b) Weiter gilt

$$\omega_\lambda(-\mathbf{q}) = \omega_\lambda(\mathbf{q}) \text{ und } \mathbf{c}_i(-\mathbf{q}) = \mathbf{c}^*_i(\mathbf{q}), \text{ da } D^{j\beta}_{i\alpha}(-\mathbf{q}) = D^{j\beta*}_{i\alpha}(\mathbf{q}) \tag{4.20}$$

c) Weiter ist D hermitesch,

$$D^{j\beta}_{i\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_m \Phi^{j\beta}_{i\alpha}(m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} = \sum_m \Phi^{i\alpha}_{j\beta}(-m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} = \sum_m \Phi^{i\alpha}_{j\beta}(m)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} = D^{i\alpha*}_{j\beta}(\mathbf{q}) = D^{i\alpha}_{j\beta}(-\mathbf{q}) \tag{4.21}$$

4.d Periodische Randbedingungen

Genau genommen ist diese Behandlung nur zulässig für einen Körper mit periodischen Randbedingungen. Für große Körper wird das Volumen-Verhalten (bulk) hierdurch korrekt beschrieben. Dagegen sind Oberflächenwellen hier vernachlässigt. Bei periodischen Randbedingungen etwa von der Form

$$\eta_{(n_1,n_2,n_3)i\alpha} = \eta_{(n_1+N_1,n_2+N_2,n_3+N_3)i\alpha}, \tag{4.22}$$

besteht das Periodizitätsvolumen V_P aus $N = N_1N_2N_3$ Elementar- oder Einheitszellen. Dementsprechend gibt es dann N verschiedene q-Werte. Sie müssen den Bedingungen

$$N_i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}^{(i)} = 2\pi\nu_i \tag{4.23}$$

mit ganzen ν_i genügen. Die Lösung findet man am einfachsten, indem man $\mathbf{q}$ nach reziproken Gittervektoren entwickelt

$$\mathbf{q} = \sum_j \alpha_j\mathbf{b}^{(j)} \tag{4.24}$$

Dann folgt mit (3.19)

$$N_i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}^{(i)} = 2\pi N_i\alpha_i = 2\pi\nu_i, \quad \alpha_i = \frac{\nu_i}{N_i}. \tag{4.25}$$

Benachbarte $\mathbf{q}$-Vektoren sind daher um die Vektoren $\mathbf{b}^{(1)}/N_1$, $\mathbf{b}^{(2)}/N_2$, $\mathbf{b}^{(3)}/N_3$ entfernt. Ihre Dichte um $\mathbf{q}$-Raum beträgt daher

$$\frac{N_1N_2N_3}{|(\mathbf{b}^{(1)}\times\mathbf{b}^{(2)})\cdot\mathbf{b}^{(3)}|} = \frac{NV_\mathrm{z}}{(2\pi)^3} = \frac{V_\mathrm{P}}{(2\pi)^3}, \tag{4.26}$$

weshalb man für makroskopische Systeme die Summe über $\mathbf{q}$ ersetzt durch das Integral

$$\frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_\mathbf{q} ... \to \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3q... \tag{4.27}$$

5 Kontinuumstheorie

Siehe Hunklinger-Enss: 5.1 Schallausbreitung S. 125-128

5.a Mikroskopische Kontinuumstheorie

Wir beschränken uns auf ein Bravais-Gitter. Sonst ist noch die Verschiebung der Untergitter gegeneinander zu berücksichtigen, was zu umfangreicheren Rechnungen führt. Wir beginnen mit der Bewegungsgleichung

$$M\ddot{\eta}_{n\alpha} = -\sum_{m\beta} V_{n\alpha}^{m\beta}\eta_{m\beta}. \tag{5.1}$$

Wir nehmen nun an, die Auslenkung $\boldsymbol{\eta}$ sei eine langsam veränderliche Funktion des Ortes und entwickeln $\boldsymbol{\eta}_m$ in eine Taylor-Reihe um $\mathbf{R}_n$.

$$\eta_{m\beta} = \eta_\beta(\mathbf{R}_n) + \sum_\gamma (R_m - R_n)_\gamma \frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{1}{2}\sum_{\gamma,\delta}(R_m - R_n)_\gamma (R_m - R_n)_\delta \frac{\partial^2 \eta_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} + ... \tag{5.2}$$

Es folgt dann die Bewegungsgleichung

$$M\ddot{\eta}_\alpha = -\sum_{m,\beta} V_{n\alpha}^{m\beta}\eta_\beta - \sum_{m,\beta,\gamma}(R_m - R_n)_\gamma V_{n\alpha}^{m\beta}\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} - \frac{1}{2}\sum_{m,\beta,\gamma,\delta}(R_m - R_n)_\gamma (R_m - R_n)_\delta V_{n\alpha}^{m\beta}\frac{\partial^2 \eta_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} - ... \tag{5.3}$$

Wir betrachten nun die verschiedenen Terme in der Entwicklung: Der erste Term verschwindet, da $\sum_m V_{n\alpha}^{m\beta} = 0$ wegen der Translationsinvarianz (4.5).

Wir gehen davon aus, dass im Inneren die Summe

$$\Gamma_{\alpha\gamma}^\beta := \sum_m V_{n\alpha}^{m\beta}(R_{m\gamma} - R_{n\gamma}) \tag{5.4}$$

vom Gitterpunkt n unabhängig ist, und dass die Beiträge am Rand nur von der Größenordnung aV sind, so dass etwaige Abweichungen am Rand in der folgenden Mittelung vernachlässigbar sind. Dann können wir Γ ersetzen durch

$$\Gamma_{\alpha\gamma}^\beta = \frac{1}{N}\sum_{mn} V_{n\alpha}^{m\beta}(R_{m\gamma} - R_{n\gamma}) = \frac{1}{N}\sum_m R_{m\gamma}\sum_n V_{n\alpha}^{m\beta} - \frac{1}{N}\sum_n R_{n\gamma}\sum_m V_{n\alpha}^{m\beta}. \tag{5.5}$$

Da die jeweils innere Summe verschwindet, verschwindet Γ und damit der Entwicklungskoeffizient vor der Ableitung $\frac{\partial \eta}{\partial x}$.

Ähnlich behandeln wir auch die Entwicklungskoeffizienten der zweiten Ableitungen. Wir definieren

$$2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = -\frac{1}{V_\mathrm{Z}}\sum_m (R_m - R_n)_\gamma (R_m - R_n)_\delta V_{n\alpha}^{m\beta} \tag{5.6}$$

Auch hier gehen wir davon aus, dass die Grössen innerhalb des Gitters unabhängig von n sind. Dann haben wir

$$\begin{aligned} 2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= -\frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_{mn}(R_m - R_n)_\gamma (R_m - R_n)_\delta V_{n\alpha}^{m\beta} \\ &= -\frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_m R_{m\gamma}R_{m\delta}\sum_n V_{n\alpha}^{m\beta} + C_{\alpha\delta,\beta\gamma} + C_{\alpha\gamma,\beta\delta} - \frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_n R_{n\gamma}R_{n\delta}\sum_m V_{n\alpha}^{m\beta} \end{aligned} \tag{5.7}$$

mit

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_{mn} R_{m\gamma}R_{n\delta}V_{n\alpha}^{m\beta}. \tag{5.8}$$

Die Koeffizienten C heißen Elastizitäts-Moduln. Die in (5.7) angegebenen expliziten Summen verschwinden, da die innere Summe wegen (4.5) verschwindet. Es bleibt also

$$2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = C_{\alpha\delta,\beta\gamma} + C_{\alpha\gamma,\beta\delta} \tag{5.9}$$

und die Bewegungsgleichung

$$\rho\ddot{\eta}_\alpha = \sum_{\beta\gamma\delta} \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} \frac{\partial^2 \eta_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta}. \tag{5.10}$$

Symmetrien: Vertauschen wir in der Definition von C die Indices $n\alpha\delta$ mit $m\beta\gamma$, so ändert sich C nicht. C ist daher invariant gegenüber Vertauschung des vorderen mit dem hinteren Index-Paar,

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = C_{\beta\gamma,\alpha\delta}. \tag{5.11}$$

Aus der Rotationsinvarianz (4.9) folgt, dass man die vorderen beiden Indices α und δ miteinander vertauschen kann, wie auch die hinteren beiden β und γ,

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = C_{\delta\alpha,\beta\gamma} = C_{\delta\alpha,\gamma\beta}. \tag{5.12}$$

Aus diesen Gleichungen leitet man auch leicht her, dass die gleichen Symmetrien auch für die $\hat{C}$ gelten,

$$\hat{C}_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \hat{C}_{\delta\alpha,\beta\gamma} = \hat{C}_{\delta\alpha,\gamma\beta} = \hat{C}_{\beta\gamma,\alpha\delta}. \tag{5.13}$$

Wir bemerken, dass sich mit Hilfe der Symmetrie-Relationen die C durch die $\hat{C}$ ausdrücken lassen

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} + \hat{C}_{\alpha\gamma,\beta\delta} - \hat{C}_{\alpha\delta,\beta\gamma}. \tag{5.14}$$

Da C invariant ist gegen Vertauschung der beiden hinteren Indices können wir die Bewegungsgleichung auch in der Form

$$\rho\ddot{\eta}_\alpha = \sum_\delta \frac{\partial}{\partial x_\delta} \left(\sum_{\beta\gamma} C_{\alpha\delta,\beta\gamma} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial \eta_\gamma}{\partial x_\beta} \right) \right) \tag{5.15}$$

schreiben. Man bezeichnet die Grösse

$$\epsilon_{\beta\gamma} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial \eta_\gamma}{\partial x_\beta} \right) \tag{5.16}$$

als den Verzerrungstensor. Er ist offensichtlich symmetrisch

$$\epsilon_{\beta\gamma} = \epsilon_{\gamma\beta}. \tag{5.17}$$

Die Größe

$$\sigma_{\alpha\delta} = \sum_{\beta\gamma} C_{\alpha\delta,\beta\gamma} \epsilon_{\beta\gamma} \tag{5.18}$$

bezeichnet man als Spannungstensor. Er ist ebenfalls symmetrisch auf Grund der Symmetrie von C, (5.12)

$$\sigma_{\alpha\delta} = \sigma_{\delta\alpha}. \tag{5.19}$$

Daher kann die Bewegungsgleichung auch

$$\rho\ddot{\eta}_\alpha = \sum_\delta \frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} \tag{5.20}$$

geschrieben werden. Auf Grund der Symmetrien ist es üblich, die Indices der 6 unabhängigen Komponenten des Verzerrungstensors ϵ und des Spannungstensors σ in folgender Weise zusammen zu fassen:

11	22	33	23	13	12
1	2	3	4	5	6

(5.21)

$C_{i,j}$, $i,j = 1..6$ ist dann symmetrisch und hat im Allgemeinen 21 unabhängige Komponenten. Durch Kristallsymmetrie reduziert sich deren Anzahl aber häufig.

5.b Verzerrungs- und Spannungstensor

5.b.α Verzerrungstensor

Wir haben oben den Verzerrungs- und den Spannungstensor definiert. Der Verzerrungstensor ist verknüpft mit den Ableitungen $\frac{\partial\eta_\beta}{\partial x_\gamma}$. Im allgemeinen hat man neun derartige Komponenten. Man zerlegt sie üblicherweise in den symmetrischen und den antisymmetrischen Anteil

$$\frac{\partial\eta_\beta}{\partial x_\gamma} = \epsilon_{\beta\gamma} + \omega_{\beta\gamma}, \quad \epsilon_{\beta\gamma} = \epsilon_{\gamma\beta}, \quad \omega_{\beta\gamma} = -\omega_{\gamma\beta}. \tag{5.22}$$

Der symmetrische Anteil beschreibt (in linearer Ordnung) die Verzerrung. Hierzu bilden wir zunächst die Veränderung des Orte des Gitters in Abhängigkeit von ihrer Ruhelage

$$\mathrm{d}(R+\eta)_\alpha = \mathrm{d}x_\alpha + \frac{\partial\eta_\alpha}{\partial x_\beta}\mathrm{d}x_\beta. \tag{5.23}$$

Hieraus ergibt sich für das Quadrat eines infinitesimalen Abstands dl

$$(\mathrm{d}l)^2 = \mathrm{d}(\mathbf{R}+\boldsymbol{\eta})\cdot\mathrm{d}(\mathbf{R}+\boldsymbol{\eta}) = (\mathrm{d}x_\alpha)^2 + 2\frac{\partial\eta_\alpha}{\partial x_\beta}\mathrm{d}x_\alpha\mathrm{d}x_\beta + \frac{\partial\boldsymbol{\eta}}{\partial x_\alpha}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{\eta}}{\partial x_\beta}\mathrm{d}x_\alpha\mathrm{d}x_\beta = (\delta_{\alpha\beta} + 2\epsilon_{\alpha\beta})\,\mathrm{d}x_\alpha\mathrm{d}x_\beta \tag{5.24}$$

mit

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\eta_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial\eta_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial\boldsymbol{\eta}}{\partial x_\alpha}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{\eta}}{\partial x_\beta}\right). \tag{5.25}$$

In linearer Ordnung stimmt ϵ mit dem oben definierten überein. Man kann ϵ diagonalisieren. Der Körper ist in Richtung der Eigenvektoren um den Faktor $1+\epsilon^{(i)}$ verlängert, wenn $\epsilon^{(i)}$ die Eigenwerte sind. (Dies gilt in linearer Näherung in $\frac{\partial\eta}{\partial x}$. Exakt gilt es, wenn man ϵ durch

$$(\mathrm{d}l)^2 = ((1+\epsilon)^2)_{\alpha\beta}\mathrm{d}x_\alpha\mathrm{d}x_\beta \tag{5.26}$$

definiert. Das Volumen vergrößert sich dann um den Faktor $\prod_i(1+\epsilon^{(i)})$, was in linearer Näherung mit $1+\sum_i\epsilon^{(i)} = 1+$ Spur (ϵ) übereinstimmt.

Der antisymmetrische Anteil von $\frac{\partial\eta}{\partial x}$ beschreibt eine Drehung. Wir hatten ja schon infinitesimale Rotationen eingeführt, die auf Auslenkungen

$$\eta_\alpha = \Phi_{\alpha\beta}x_\beta, \text{ d.h. } \frac{\partial\eta_\alpha}{\partial x_\beta} = \Phi_{\alpha\beta} \tag{5.27}$$

mit antisymmetrischem Φ führten.

5.b.β Spannungstensor

In Gleichung (5.20) haben wir die Kraftdichte als Divergenz des Spannungstensors σ ausgedrückt

$$\rho\ddot{\eta}_\alpha = k_\alpha = \sum_\delta \frac{\partial\sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} \tag{5.28}$$

Die Kraft, die auf ein Volumen V wirkt, kann daher mittels des Gaussschen Satzes in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden

$$K_\alpha = \int_V \mathrm{d}^3r\frac{\partial\sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} = \int_{\partial V}\mathrm{d}f_\delta\sigma_{\alpha\delta}. \tag{5.29}$$

Das Drehmoment, das auf das Volumen wirkt, kann nun wahlweise durch die im Volumen wirkende Kraftdichte oder die Oberflächenkraft ausgedrückt werden. Dabei schreiben wir das Drehmoment als antisymmetrischen Tensor

$$M^{\mathrm{V}}_{\alpha\beta} = \int_V \mathrm{d}^3r(x_\alpha k_\beta - x_\beta k_\alpha), \tag{5.30}$$

$$M^{\mathrm{F}}_{\alpha\beta} = \int_{\partial V}\mathrm{d}f_\delta(x_\alpha\sigma_{\beta\delta} - x_\beta\sigma_{\alpha\delta}). \tag{5.31}$$

Formen wir den zweiten Ausdruck in ein Volumen-Integral um, so erhalten wir

$$\begin{aligned} M^{\mathrm{F}}_{\alpha\beta} &= \int_{\partial V} \mathrm{d}f_\delta (x_\alpha \sigma_{\beta\delta} - x_\beta \sigma_{\alpha\delta}) = \int_V \mathrm{d}^3 r \frac{\partial}{\partial x_\delta} (x_\alpha \sigma_{\beta\delta} - x_\beta \sigma_{\alpha\delta}) \\ &= M^{\mathrm{V}}_{\alpha\beta} + \int_V \left(\frac{\partial x_\alpha}{\partial x_\delta} \sigma_{\beta\delta} - \frac{\partial x_\beta}{\partial x_\delta} \sigma_{\alpha\delta} \right) = M^{\mathrm{V}}_{\alpha\beta} + \int_V (\sigma_{\beta\alpha} - \sigma_{\alpha\beta}) \,. \end{aligned} \tag{5.32}$$

Da die Ausdrücke für das Volumen- und das Flächenintegral übereinstimmen müssen, muss $\sigma_{\beta\alpha} - \sigma_{\alpha\beta}$ verschwinden, das heißt σ muss ein symmetrischer Tensor sein. Die Oberflächenkraftdichte $\sigma \mathrm{d}f$ gibt die Kraft an, die von außen auf das Volumen wirkt. Umgekehrt übt das Volumen auf seine Umgebung die Kraftdichte $-\sigma \mathrm{d}f$ aus. Befindet sich der Körper in einem isotropen Druck p, so ist σ diagonal $\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta}$ und die Oberflächenkraft ergibt sich zu $-p\mathrm{d}\mathbf{f}$. Sie steht also senkrecht auf der Oberfläche. Im allgemeinen ist aber σ nicht proportional zur Einheits-Matrix. Dann treten auch Scherkräfte, das heißt Kräfte parallel zur Oberfläche auf.

5.c Akustische Äste

Die Bewegungsgleichung ergibt sich aus (5.10) mit dem Ansatz einer ebenen Welle

$$\boldsymbol{\eta} = \mathbf{u} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \tag{5.33}$$

wobei $\mathbf{u}$ die Richtung der Auslenkung angibt. Damit erhält man das Eigenwertproblem

$$\rho\omega^2 u_\alpha = \sum_{\beta\gamma\delta} \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} q_\gamma q_\delta u_\beta \tag{5.34}$$

mit der Eigenwertgleichung

$$\det_{\alpha\beta} \left(\sum_{\gamma\delta} \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} q_\gamma q_\delta - \rho\omega^2 \delta_{\alpha\beta} \right) = 0. \tag{5.35}$$

In diesen Gleichungen kann man auch $\hat{C}$ durch C ausdrücken und wegen der Symmetrie in γ und δ letztendlich $\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ durch $C_{\alpha\delta,\beta\gamma}$ ersetzen. Man erkennt aus (5.35), dass sich die Eigenfrequenzen in der Form

$$\omega_\lambda(\mathbf{q}) = q c_\lambda(\hat{q}), \quad \hat{q} = \mathbf{q}/q \tag{5.36}$$

schreiben lassen. Die Frequenzen sind also proportional q, der Proportionalitätsfaktor c ist die Schallgeschwindigkeit. Sie ist im Allgemeinen richtungsabhängig.

5.c.α Spezialfall: Kubischer Kristall

Für den kubischen Kristall setzen wir voraus, dass er durch orthogonale Transformationen, die die x-, y-, und z-Achse ineinander überführen, in sich übergeht. Dann ist

$$C_{11} = C_{22} = C_{33}, \quad C_{12} = C_{13} = C_{23}, \quad C_{44} = C_{55} = C_{66}. \tag{5.37}$$

Hier waren die vier Indices $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ von C jeweils paarweise gleich. Vorzeichenfaktoren bei den orthogonalen Transformationen traten daher jeweils paarweise auf. Sind von den vier Indices drei gleich und der vierte verschieden, so führt eine Drehung um eine dieser beiden Achsen um 180^0 diese Komponente von C in ihr Negatives über (z.B. $x, x, x, y \to x, x, x, -y$ bei Drehung um x-Achse); daher ist diese Komponente gleich 0. Sind von den vier Indices zwei gleich und die beiden anderen jeweils verschieden, so führt eine Drehung um 90^0 um die Achse, die zweifach vorkommt, C in sein Negatives über (z.B. $x, x, y, z \to x, x, z, -y$); daher verschwindet diese Komponente auch.

Mit den Abkürzungen

$$A = C_{11} - C_{44}, B = C_{12} + C_{44}, E = \rho\omega^2 - C_{44} q^2 \tag{5.38}$$

und

$$\sum_{\gamma\delta} C_{1\delta,1\gamma} q_\gamma q_\delta = C_{11} q_1^2 + C_{44}(q_2^2 + q_3^2) = A q_1^2 + C_{44} q^2, \tag{5.39}$$

$$\sum_{\gamma\delta} C_{1\delta,2\gamma} q_\gamma q_\delta = (C_{12} + C_{44}) q_1 q_2 = B q_1 q_2 \tag{5.40}$$

folgt dann die Eigenwertgleichung

$$\begin{vmatrix} Aq_1^2 - E & Bq_1q_2 & Bq_1q_3 \\ Bq_1q_2 & Aq_2^2 - E & Bq_2q_3 \\ Bq_1q_3 & Bq_2q_3 & Aq_3^2 - E \end{vmatrix} = 0. \tag{5.41}$$

Diese Gleichung dritten Grades in E, das die Eigenfrequenz ω enthält, vereinfacht sich für die Symmetrie-Richtungen

$$\mathbf{q} = q \cdot (1,0,0) \quad l \quad \rho\omega_1^2 = C_{11} q^2 \tag{5.42}$$

$$t \quad \rho\omega_{2,3}^2 = C_{44} q^2 \tag{5.43}$$

$$\mathbf{q} = \frac{q}{\sqrt{2}} \cdot (1,1,0) \quad l \quad \rho\omega_1^2 = (\frac{1}{2}C_{11} + \frac{1}{2}C_{12} + C_{44}) q^2 \tag{5.44}$$

$$t \quad \rho\omega_2^2 = (\frac{1}{2}C_{11} - \frac{1}{2}C_{12}) q^2 \tag{5.45}$$

$$t \quad \rho\omega_3^2 = C_{44} q^2 \tag{5.46}$$

$$\mathbf{q} = \frac{q}{\sqrt{3}} \cdot (1,1,1) \quad l \quad \rho\omega_1^2 = (\frac{1}{3}C_{11} + \frac{2}{3}C_{12} + \frac{4}{3}C_{44}) q^2 \tag{5.47}$$

$$t \quad \rho\omega_{2,3}^2 = (\frac{1}{3}C_{11} - \frac{1}{3}C_{12} + \frac{1}{3}C_{44}) q^2 \tag{5.48}$$

Man sieht hier explizit, dass die Schallgeschwindigkeiten richtungsabhängig sind. Im Allgemeinen sind alle drei Schallgeschwindigkeiten wie hier im Fall der (1,1,0)-Richtung voneinder verschieden. Man vergleiche mit Abb. 5.13 auf Seite 149 im Skriptum Hunklinger/Enss.

Im isotropen Fall reduzieren sich die drei Elastizitäts-Konstanten auf zwei. Der Tensor vierter Stufe C muss dann gegenüber beliebigen Rotationen invariant sein. Er reduziert sich dann auf die Form

$$C_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} C_{12} + (\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) C_{44}, \tag{5.49}$$

woraus

$$C_{11} = C_{12} + 2C_{44} \tag{5.50}$$

folgt. In diesem Fall erhält man unabhängig von der Richtung die Frequenzen

$$l \quad \rho\omega_1^2 = C_{11} q^2 \tag{5.51}$$

$$t \quad \rho\omega_{2,3}^2 = C_{44} q^2. \tag{5.52}$$

5.d Ergänzungen

5.d.α Lagrange-Formulierung

Im Rahmen einer phänomenologischen Kontinuumstheorie geht man davon aus, dass man kinetische und potentielle Energie durch die Auslenkungen $\boldsymbol{\eta}$ als Funktion des Ortes und der Zeit ausdrücken kann. Die kinetische Energie lässt sich dann schreiben als

$$\mathcal{T} = \frac{\rho}{2} \int d^3r \dot{\boldsymbol{\eta}}^2(\mathbf{r}, t). \tag{5.53}$$

Die potentielle Energie drückt man durch den Verzerrungstensor aus

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \int d^3r C_{\alpha\beta,\gamma\delta} \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon_{\gamma\delta}. \tag{5.54}$$

Die Bewegungsgleichungen erhält man am einfachsten aus der Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V}, \tag{5.55}$$

wobei sich die Lagrange-Funktion als Integral über die Lagrange-Dichte schreiben lässt.

$$\mathcal{L} = \int \mathrm{d}^3 r L(\dot{\eta}, \frac{\partial \eta}{\partial x}) \tag{5.56}$$

$$L = \frac{\rho}{2} \sum_{\alpha} \dot{\eta}_{\alpha}^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon_{\gamma\delta}. \tag{5.57}$$

Die Bewegungsgleichung erhält man durch Variation der Wirkung

$$S = \int \mathrm{d}t \mathcal{L} \tag{5.58}$$

bezüglich η,

$$\delta S = \int \mathrm{d}t \mathrm{d}^3 r \sum_{\alpha} \delta L = \int \mathrm{d}t \mathrm{d}^3 r \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_{\alpha}} \delta \dot{\eta}_{\alpha} + \sum_{\beta} \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial x_{\beta}}} \delta \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} \right) \tag{5.59}$$

$$= \text{Randterme} - \int \mathrm{d}t \mathrm{d}^3 r \sum_{\alpha} \delta \eta_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_{\alpha}} + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial x_{\beta}}} \right), \tag{5.60}$$

woraus dann die generelle Form der Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_{\alpha}} + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial x_{\beta}}} = 0 \tag{5.61}$$

folgt. Die Auswertung dieser Gleichung führt wieder auf die Bewegungsgleichung (5.10).

5.d.β Kristall unter äußerer Spannung

Wir hatten früher argumentiert, dass das Potential keine Beiträge linear in η hat, da sonst bereits unausgelenkt Kräfte auftreten würden. Steht allerdings ein Kristall unter einer äußeren Spannung, dann gibt es lineare Beiträge des Potentials, die durch die äußeren Kräfte kompensiert werden

$$\mathcal{V}^{\text{Kristall}} = \sum K_{n\alpha} \eta_{n\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{mn} V_{n\alpha}^{m\beta} \eta_{n\alpha} \eta_{m\beta}. \tag{5.62}$$

Hinzu kommen dann die äußeren Kräfte, die durch das Potential

$$\mathcal{V}^{\text{aus}} = -\sum K_{n\alpha} \eta_{n\alpha} \tag{5.63}$$

beschrieben werden.

Steht der Kristall unter homogener Spannung, dann bilden wir das Integral über die auf den Kristall wirkende Kraftdichte multipliziert mit den Ortskoordinaten

$$\int \mathrm{d}^3 r k_{\alpha} x_{\beta} = \int \mathrm{d}^3 r x_{\beta} \frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_{\delta}} = \int \mathrm{d}^3 r \frac{\partial x_{\beta} \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_{\delta}} - \int \mathrm{d}^3 r \frac{\partial x_{\beta}}{\partial x_{\delta}} \sigma_{\alpha\delta} = -\int \mathrm{d}^3 r \sigma_{\alpha\beta} = -V_{\mathrm{P}} \sigma_{\alpha\beta}. \tag{5.64}$$

Hierbei haben wir verwendet, dass die Spannung im Kristall natürlich nur im Kristallvolumen besteht. Ersetzen wir das Integral über die Kraftdichte durch die Summe über die Kräfte, so folgt

$$\sum_n K_{n\alpha} R_{n\beta} = -V_{\mathrm{P}} \sigma_{\alpha\beta}. \tag{5.65}$$

Als nächstes betrachten wir die Rotationsinvarianz. Sie trifft auf das Kristallpotential, aber in der Regel nicht auf das Potential der äußeren Kraft zu. Wir erhalten daher unter der Rotation (4.7)

$$\delta\mathcal{V}^{\text{Kristall}} = \sum K_{n\alpha}\Phi_{\alpha\beta}(R_{n\beta}+\eta_{n\beta}) + \sum V_{n\alpha}^{m\beta}\eta_{n\alpha}\Phi_{\beta\gamma}R_{m\gamma} + O(\eta^2) \tag{5.66}$$

Dieses $\delta\mathcal{V}$ muss identisch verschwinden. Daher folgt für den von η unabhängigen Beitrag

$$\sum K_{n\alpha}R_{n\beta} = \sum K_{n\beta}R_{n\alpha}, \tag{5.67}$$

also die Symmetrie des Spannungstensors. Der mit $\Phi_{\beta\gamma}\eta_{n\alpha}$ multiplizierte Beitrag aus (5.66) muss mit dem mit $\Phi_{\gamma\beta}\eta_{n\alpha}$ multiplizierten übereinstimmen. Daraus folgt

$$\delta_{\alpha\gamma}K_{n\beta} + \sum_m V_{n\alpha}^{m\beta}R_{m\gamma} = \delta_{\alpha\beta}K_{n\gamma} + \sum_m V_{n\alpha}^{m\gamma}R_{m\beta}. \tag{5.68}$$

Multiplizieren wir mit $R_{n\delta}$, summieren über n und setzen wir die Definitionen von C und σ ein, so finden wir

$$-\delta_{\alpha\gamma}\sigma_{\beta\delta} + C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = -\delta_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta} + C_{\alpha\delta,\gamma\beta}. \tag{5.69}$$

Daraus folgt, dass die Grösse

$$S_{\alpha\delta,\beta\gamma} := C_{\alpha\delta,\beta\gamma} + \delta_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta} = C_{\alpha\delta,\gamma\beta} + \delta_{\alpha\gamma}\sigma_{\beta\delta} \tag{5.70}$$

die Symmetrien

$$S_{\alpha\delta,\beta\gamma} = S_{\alpha\delta,\gamma\beta} = S_{\delta\alpha,\beta\gamma} = S_{\beta\gamma,\alpha\delta} \tag{5.71}$$

hat. Für die Größen $\hat{C}$ folgt dann

$$\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \hat{S}_{\alpha\beta,\gamma\delta} - \delta_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta}, \quad \hat{S}_{\alpha\beta,\gamma\delta} := \frac{1}{2}(S_{\alpha\delta,\beta\gamma} + S_{\alpha\gamma,\beta\delta}), \tag{5.72}$$

wobei auch $\hat{S}$ wieder die Symmetrien

$$\hat{S}_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \hat{S}_{\alpha\delta,\gamma\beta} = \hat{S}_{\delta\alpha,\beta\gamma} = \hat{S}_{\beta\gamma,\alpha\delta}. \tag{5.73}$$

folgen. Für einen isotropen Druck $\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta}$ folgen die Symmetrien (5.13) auch für die

$$\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \hat{S}_{\alpha\beta,\gamma\delta} + p\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}. \tag{5.74}$$

6 Quantisierung der Gitterschwingungen: Phononen

Siehe Hunklinger-Enss: 5.4 Experimentelle Bestimmung von Dispersionskurven S. 141-155

6.a Diagonalisierung und Normalkoordinaten

In diesem Abschnitt behandeln wir die Phononen quantenmechanisch unter Verwendung dessen, was wir bereits bei der klassischen Behandlung in Abschnitt 4 hergeleitet haben. Wir schreiben dazu den Hamilton-Operator in einer etwas kompakten Schreibweise mittels Matrizen

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{p}{\sqrt{M}}\right)^\dagger \left(\frac{p}{\sqrt{M}}\right) + \frac{1}{2}\left(\sqrt{M}\eta\right)^\dagger \Phi \left(\sqrt{M}\eta\right). \tag{6.1}$$

Dabei sind p und η Spaltenvektoren, M ist diagonal. Die Diagonalisierung von Φ geschieht mittels einer unitären Transformation

$$\Phi = U^\dagger \hat{\omega}^2 U, \quad U^\dagger U = 1, \tag{6.2}$$

wobei $\hat{\omega}^2$ die Diagonalmatrix mit den Quadraten der Eigenfrequenzen ist. Wir können dann

$$H = \frac{1}{2}\left(U\frac{p}{\sqrt{M}}\right)^\dagger \left(U\frac{p}{\sqrt{M}}\right) + \frac{1}{2}\left(U\sqrt{M}\eta\right)^\dagger \hat{\omega}^2 \left(U\sqrt{M}\eta\right) \tag{6.3}$$

mit

$$\Phi^{mj\beta}_{ni\alpha} = \sum_{\lambda,q} U^{(\lambda)*}_{ni\alpha}(\mathbf{q})\omega^2_\lambda(\mathbf{q})U^{(\lambda)}_{mj\beta}(\mathbf{q}) \tag{6.4}$$

$$U^{\lambda*}_{ni\alpha}(q) = \frac{u^\lambda_{ni\alpha}(\mathbf{q})}{\sqrt{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}}c^\lambda_{i\alpha}(\mathbf{q})\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} \tag{6.5}$$

schreiben. Dabei werden die Indices $\lambda, \mathbf{q}$ als vordere, $mj\beta$ als hintere Indices von $U^{(\lambda)}_{mj\beta}(\mathbf{q})$ angesehen.

Von hier aus können wir die Normalkoordinaten einführen

$$P_\lambda(\mathbf{q}) = \left(U\frac{p}{\sqrt{M}}\right)^{(\lambda)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{ni\alpha} c^{\lambda*}_{i\alpha}(\mathbf{q})\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n}\frac{p_{ni\alpha}}{\sqrt{M_i}} \tag{6.6}$$

$$Q_\lambda(\mathbf{q}) = \left(U\sqrt{M}\eta\right)^{(\lambda)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{ni\alpha} c^{\lambda*}_{i\alpha}(\mathbf{q})\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n}\sqrt{M_i}\eta_{ni\alpha}. \tag{6.7}$$

Diese Transformation haben wir im Abschnitt 4 in zwei Schritten durchgeführt: Erst führten wir eine Fourier-Transformation durch; dies ist eine unitäre Transformation, anschließend diagonalisierten wir die $3r \times 3r$-Matrizen ebenfalls durch eine unitäre Transformation.

Da nach (4.21) $D(-\mathbf{q}) = D^*(\mathbf{q})$, kann man $c^\lambda_{i\alpha}(-\mathbf{q}) = c^{\lambda*}_{i\alpha}(\mathbf{q})$ wählen. Dann erhält man

$$P_\lambda(-\mathbf{q}) = P^\dagger_\lambda(\mathbf{q}), \quad Q_\lambda(-\mathbf{q}) = Q^\dagger_\lambda(\mathbf{q}). \tag{6.8}$$

Die Kommutatoren erhält man zu

$$[Q^\dagger_\lambda(\mathbf{q}), Q_\mu(\mathbf{q}')] = 0, \quad [P^\dagger_\lambda(\mathbf{q}), P_\mu(\mathbf{q}')] = 0. \tag{6.9}$$

und

$$[Q^\dagger_\lambda(\mathbf{q}), P_\mu(\mathbf{q}')] = \sum_{ni\alpha,mj\beta} U^{\lambda*}_{ni\alpha}(\mathbf{q})\sqrt{M_i}U^\mu_{mj\beta}(\mathbf{q}')\frac{1}{\sqrt{M_j}}[\eta_{ni\alpha}, p_{mj\beta}]. \tag{6.10}$$

Der Kommutator auf der rechten Seite ergibt $\mathrm{i}\hbar\delta_{nm}\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}$. Damit reduziert sich der Kommutator auf

$$[Q^\dagger_\lambda(\mathbf{q}), P_\mu(\mathbf{q}')] = \sum_{ni\alpha} U^{\lambda*}_{ni\alpha}(\mathbf{q})U^\lambda_{ni\alpha}(\mathbf{q}') = \mathrm{i}\hbar(UU^\dagger)_{\mu\mathbf{q}',\lambda\mathbf{q}} = \mathrm{i}\hbar\delta_{\lambda,\mu}\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}. \tag{6.11}$$

Der Hamilton-Operator selbst nimmt die Diagonalform

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mathbf{q}}(P^\dagger_\lambda(\mathbf{q})P_\lambda(\mathbf{q}) + \omega^2_\lambda(\mathbf{q})Q^\dagger_\lambda(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q})) \tag{6.12}$$

in Form von entkoppelten Oszillatoren an. (Lediglich die Oszillatoren für $\mathbf{q}$ und $-\mathbf{q}$ sind noch miteinander verknüpft.

6.b Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Wir definieren die Phononen-Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren durch

$$a_\lambda(\mathbf{q}) := \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})}}(\omega_\lambda(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) + i\mathbf{P}_\lambda(\mathbf{q})), \tag{6.13}$$

$$a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) := \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})}}(\omega_\lambda(\mathbf{q})Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) - i\mathbf{P}_\lambda^\dagger(\mathbf{q})). \tag{6.14}$$

Für die Kommutatoren findet man

$$\begin{aligned}[a_\lambda(\mathbf{q}), a_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] &= \frac{1}{2\hbar\sqrt{\omega_\lambda(\mathbf{q})\omega_\mu(\mathbf{q}')}}(-i\omega_\lambda(\mathbf{q})[Q_\lambda(\mathbf{q}), P_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] + i\omega_\mu(\mathbf{q}')[P_\lambda(\mathbf{q}), Q_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] \\ &= \frac{1}{2\hbar\sqrt{\omega_\lambda(\mathbf{q})\omega_\mu(\mathbf{q}')}}(\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})\delta_{\lambda\mu}\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + \hbar\omega_\mu(\mathbf{q}')\delta_{\lambda\mu}\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}) = \delta_{\lambda\mu}\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}. \end{aligned} \tag{6.15}$$

Ähnlich zeigt man auch

$$[a_\lambda(\mathbf{q}), a_\mu(\mathbf{q}')] = 0, \quad [a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), a_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] = 0. \tag{6.16}$$

Für den Phonon-Teilchenzahl-Operator erhalten wir dann

$$a_\lambda^\dagger(\mathbf{q})a_\lambda(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})}\left(\omega_\lambda^2(\mathbf{q})Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) + P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})P_\lambda(\mathbf{q})\right) + \frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\left(Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q})P_\lambda(\mathbf{q}) - P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q})\right). \tag{6.17}$$

Unter Verwendung von (6.8) und (6.11) können wir den letzten Term umformen $P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) = Q_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})P_\lambda(-\mathbf{q}) - \mathrm{i}\hbar$. Berücksichtigen wir noch, dass $\omega_\lambda(-\mathbf{q}) = \omega_\lambda(\mathbf{q})$, so können wir den Hamilton-Operator durch den Phonon-Teilchenzahl-Operator ausdrücken

$$H = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})(a_\lambda^\dagger(\mathbf{q})a_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}). \tag{6.18}$$

Der Grundzustand des Hamilton-Operators ist gegeben durch $a_\lambda(\mathbf{q})|0>= 0$. Der Zustand mit jeweils $n_\lambda(\mathbf{q})$ Phononen in der $(\lambda, \mathbf{q})$-Mode

$$|\{n_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle = \prod_{\lambda\mathbf{q}}\left(\frac{1}{\sqrt{n_\lambda(\mathbf{q})!}}(a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}))^{n_\lambda(\mathbf{q})}\right)|0\rangle \tag{6.19}$$

mit der Energie

$$E = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})(n_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}). \tag{6.20}$$

Für spätere Zwecke drücken wir die Auslenkungen $\boldsymbol{\eta}$ durch die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren aus. Hierzu machen wir die orthogonale Transformation(6.7) rückgängig,

$$\sqrt{M}\eta = U^\dagger Q, \tag{6.21}$$

und setzen aus (6.13) und (6.14)

$$Q_\lambda(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda(\mathbf{q})}}(a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})), \tag{6.22}$$

was explizit

$$\boldsymbol{\eta}_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\lambda\mathbf{q}}\sqrt{\frac{\hbar}{2M_i\omega_\lambda(\mathbf{q})}}c_i^\lambda(\mathbf{q})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}(a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})) \tag{6.23}$$

ergibt. Ersetzen wir für den $a^\dagger$-Term noch $-\mathbf{q}$ durch $\mathbf{q}$, so können wir

$$\boldsymbol{\eta}_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\lambda\mathbf{q}}\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2M_i\omega_\lambda(\mathbf{q})}}\mathbf{c}_i^{\lambda*}(\mathbf{q})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) + \text{h.c.}\right) \tag{6.24}$$

schreiben.

7 Phononenstatistik und spezifische Wärme

Siehe Hunklinger-Enss: 5.5 Spezifische Wärmekapazität S. 155-167

7.a Bose-Statistik

Wie wir gesehen haben, können harmonische Phononen

$$n_\lambda(\mathbf{q}) = 0, 1, 2, ... \tag{7.1}$$

fach angeregt sein; sie genügen daher der Bose-Statistik. Die Wahrscheinlichkeit für eine n-fache Besetzung beträgt

$$p_n = \frac{r^{n+\frac{1}{2}}}{\sum_{n'=0}^{\infty} r^{n'+\frac{1}{2}}} = r^n - r^{n+1}, \quad r = \mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}} \tag{7.2}$$

Als mittlere Besetzung ergibt sich die Bose-Funktion

$$\overline{n} = \sum_{n=0}^{\infty} np_n = 0\cdot(1-r)+1\cdot(r-r^2)+2\cdot(r^2-r^3)+... = r+r^2+r^3+... = \frac{r}{1-r} = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}}{1-\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}-1}. \tag{7.3}$$

7.b Energie und spezifische Wärme I

Die mittlere Energie (Energie-Erwartungswert) ist dann

$$E = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}} - 1} + \frac{1}{2} \right). \tag{7.4}$$

Bei **hohen Temperaturen** $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})$ für alle Äste λ und Wellenvektoren $\mathbf{q}$ folgt

$$\frac{1}{\mathrm{e}^x - 1} + \frac{1}{2} = \frac{1}{x + \frac{x^2}{2} + ...} + \frac{1}{2} = \frac{1}{x} + O(x). \tag{7.5}$$

Damit folgt

$$E = \sum_{\lambda\mathbf{q}} k_\mathrm{B}T + O(\frac{1}{k_\mathrm{B}T}) = 3rNk_\mathrm{B}T + O(\frac{1}{k_\mathrm{B}T}). \tag{7.6}$$

Der führende Term ist das klassische Ergebnis (Dulong-Petit). Bei **tiefen Temperaturen**, das heißt sobald $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})$ für die optischen Phononen, sind deren Beiträge (bis auf das $\hbar\omega/2$) vernachlässigbar.Für die akustischen Phononen kann man bei hinreichend tiefen Temperaturen

$$\omega_\lambda(\mathbf{q}) = c_\lambda(\Omega)q \tag{7.7}$$

setzen. Dabei sind die $c_\lambda(\Omega)$ die Schallgeschwindigkeiten der drei akustischen Äste in Richtung Ω. Dann folgt für die Energie

$$E = E_0 + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar c_\lambda(\Omega)q \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar c_\lambda q}{k_\mathrm{B}T}} - 1} = E_0 + \frac{V_\mathrm{P}}{(2\pi)^3} \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3q\hbar c_\lambda q \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar c_\lambda q}{k_\mathrm{B}T}} - 1}. \tag{7.8}$$

Substituieren wir nun im Integral

$$x := \frac{\hbar c_\lambda}{k_\mathrm{B}T} q, \quad \mathrm{d}^3q = q^2\mathrm{d}q\,\mathrm{d}\Omega = \left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar c_\lambda(\Omega)}\right)^3 x^2\mathrm{d}x\mathrm{d}\Omega, \tag{7.9}$$

dann folgt

$$E = E_0 + \frac{V_\mathrm{P}(k_\mathrm{B}T)^4}{(2\pi\hbar)^3} \sum_\lambda \int \mathrm{d}\Omega \frac{1}{c_\lambda^3(\Omega)} \int_0^{x_\mathrm{max}} \frac{x^3\mathrm{d}x}{\mathrm{e}^x - 1}. \tag{7.10}$$

Dabei ergibt die λ-Summe über die drei akustischen Äste und das Integral über den Raumwinkel Ω gerade $3 \cdot 4\pi\overline{c^{-3}}$. Das x-Integral ist bis $\frac{\hbar c}{k_\mathrm{B}T}q_\mathrm{max}$ zu erstrecken, was im Tieftemperatur-Bereich sehr groß wird, so dass wir bis $x_\mathrm{max} = \infty$ integrieren können. Dann erhält man mit

$$\int_0^\infty \frac{x^3 \mathrm{d}x}{\mathrm{e}^x - 1} = \frac{\pi^4}{15} \tag{7.11}$$

den Beitrag der Phononen zur Energie

$$E - E_0 = \frac{\pi^2}{10\hbar^3} V_\mathrm{P} (k_\mathrm{B}T)^4 \overline{c^{-3}}, \tag{7.12}$$

woraus dann auch das T^3-Gesetz der spezifischen Wärme folgt. Speziell für einen isotropen Körper hängt c nicht von der Richtung ab. Man erhält dann

$$\overline{c^{-3}}_\mathrm{iso} = \frac{1}{3c_\mathrm{l}^3} + \frac{2}{3c_\mathrm{t}^3}. \tag{7.13}$$

7.c Zustandsdichte

Es sei $z(\omega)d\omega$ die Anzahl von Phononenzuständen im Intervall $\omega ... \omega + \mathrm{d}\omega$. Dann können wir die Energie schreiben als

$$E - E_0 = \int \mathrm{d}\omega z(\omega) \frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}} - 1}. \tag{7.14}$$

Für die akustischen Phononen hat man im linearen Bereich $\omega \propto q$

$$\int_0^{\omega_0} z(\omega) \mathrm{d}\omega = C\omega_0^3, \tag{7.15}$$

da die Ausdehnung des Bereichs der Phononen im q-Raum in allen drei Richtungen proportional ω_0 ist. Durch Ableiten nach der oberen Grenze folgt

$$z(\omega) = 3C\omega^2. \tag{7.16}$$

Wir berechnen hieraus die Energie bei tiefen Temperaturen

$$E - E_0 = 3C \int \mathrm{d}\omega \hbar\omega^3 \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}} - 1} = 3C\hbar \left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar}\right)^4 \int \mathrm{d}x \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1} = 3C\hbar \left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar}\right)^4 \frac{\pi^4}{15} \tag{7.17}$$

Durch Vergleich mit (7.12) finden wir

$$C = \frac{V_\mathrm{P}}{2\pi^2}\overline{c^{-3}}, \quad z(\omega) = \frac{3V_\mathrm{P}}{2\pi^2}\omega^2\overline{c^{-3}}. \tag{7.18}$$

7.d Debye-Frequenz und Phononen-Energie II

Die Zustandsdichte (7.18) gilt nur für niedrige Frequenzen. Da keine beliebig hohen Frequenzen auftreten, muss sie für hinreichend große Frequenzen verschwinden. Debye setzte daher näherungsweise

$$z(\omega) = \begin{cases} \frac{3V_\mathrm{P}}{2\pi^2}\omega^2\overline{c^{-3}} & \omega \le \omega_\mathrm{D} \\ 0 & \omega > \omega_\mathrm{D} \end{cases} \tag{7.19}$$

an. Das heißt, er nahm an, dass das ω^2-Gesetz bis zu einer Grenzfrequenz ω_D gilt, es aber keine Phononen mit höheren Frequenzen gibt. Man bezeichnet diese Abschneidefrequenz heute als Debye-Frequenz. Die Debye-Frequenz selbst errechnet sich daraus, dass es insgesamt 3N akustische Phononen gibt,

$$\int_0^\infty z(\omega) \mathrm{d}\omega = 3N = \frac{V_\mathrm{P}}{2\pi^2}\omega_\mathrm{D}^3\overline{c^{-3}}. \tag{7.20}$$

Daraus erhält man die Debye-Frequenz.

Wir können nun die Energie ausdrücken als

$$E - E_0 = \frac{3V_\mathrm{P}}{2\pi^2}\overline{c^{-3}}\int_0^{\omega_\mathrm{D}} \mathrm{d}\omega\hbar\omega^3 \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}-1} = \frac{3V_\mathrm{P}}{2\pi^2}\frac{(k_\mathrm{B}T)^4}{\hbar^3}\overline{c^{-3}}\int_0^{\frac{\hbar\omega_\mathrm{D}}{k_\mathrm{B}T}} \mathrm{d}x \frac{x^3}{\mathrm{e}^x-1}. \tag{7.21}$$

Mit der Debye-Temperatur $k_\mathrm{B}\Theta_\mathrm{D} = \hbar\omega_\mathrm{D}$ erhält man aus (7.20)

$$V_\mathrm{P}\overline{c^{-3}} = \frac{6\pi^2 N}{\omega_\mathrm{D}^3} = 6\pi^2 N\left(\frac{\hbar}{k_\mathrm{B}\Theta_\mathrm{D}}\right)^3 \tag{7.22}$$

und damit

$$E - E_0 = 9Nk_\mathrm{B}\frac{T^4}{\Theta_\mathrm{D}^3}\int_0^{\frac{\Theta_\mathrm{D}}{T}} \frac{x^3}{\mathrm{e}^x-1}\mathrm{d}x \tag{7.23}$$

Ähnlich erhält man durch Differenzieren von (7.21) nach der Temperatur die spezifische Wärme, die von den Phononen herrührt

$$c_\mathrm{D}(t) = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = 3Nk_\mathrm{B}\frac{T^3}{\Theta_\mathrm{D}^3}\int_0^{\frac{\Theta_\mathrm{D}}{T}} \frac{x^4\mathrm{d}x}{(\mathrm{e}^x-1)^2}, \tag{7.24}$$

eine Funktion, die bis auf den Faktor N nur vom Verhältnis T/Θ_D abhängt. Allerdings wird die Zustandsdichte von der Debye-Näherung im Allgemeinen abweichen, so dass diese Funtion nur eine Näherung darstellt.

Zusätzlich hat man optische Phononen. Im einfachsten Fall nimmt man an, sie haben unabhängig von Wellenvektor und den 3(r-1) Ästen die gleiche (Einstein-)Frequenz ω_E. Dann erhält man den Beitrag

$$c_\mathrm{E}(T) = 3N(r-1)k_\mathrm{B}\frac{(\Theta_\mathrm{E}/T)^2}{(\mathrm{e}^{\Theta_\mathrm{E}/T}-1)^2} \tag{7.25}$$

mit der Einstein-Temperatur Θ_E definiert durch $k_\mathrm{B}\Theta_\mathrm{E} = \hbar\omega_\mathrm{E}$.

Selbst wenn man die für harmonische Phononen korrekte Gleichung (7.14) verwendet, hat man für höhere Temperaturen Abweichungen auf Grund der Anharmonizitäten zu erwarten.

8 Neutronen-Streuung und Debye-Waller-Faktor

Siehe Hunklinger-Enss: 5.4 Experimentelle Bestimmung von Dispersionskurven S. 141-155

Wir gehen aus von einem Anfangszustand eines einfallenden Neutrons mit Impuls $\hbar\mathbf{k}_0$ und einem Festkörper, dessen Phononen $n^0_\lambda(\mathbf{q})$-fach angeregt sind,

$$\Psi_0 = c_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} |\{n^0_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle \tag{8.1}$$

Wir betrachten nun die Streuwelle bei Streuung an Atomen der Streulänge f_i. Man findet für die Streuwelle

$$\Psi_{\mathrm{str}} = c_0 \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \sum F_{n,n^0}(\mathbf{K}) |\{n_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle \tag{8.2}$$

mit

$$\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0, \quad \mathbf{k} = k\frac{\mathbf{r}}{r}, \quad \frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{n}}}k^2 + E(\{n_\lambda\}) = \frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{n}}}k_0^2 + E(\{n^0_\lambda\}) \tag{8.3}$$

und

$$F_{n,n^0}(\mathbf{K}) = \sum_{mi} \langle \{n_\lambda(\mathbf{q})\}| f_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}_{mi}+\boldsymbol{\eta}_{mi})} |\{n^0_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle. \tag{8.4}$$

Der einfallende Neutronenstrom ist gegeben durch $J_0 = c_0^2 A v_0$, wobei A die Querschnittsfläche des Probekörpers und v_0 die Geschwindigkeit der Neutronen ist. Der gestreute Strom ergibt sich zu $\mathrm{d}J_1 = \sum_{\{n\}} v|F_{n,n^0}(\mathbf{K})|^2 c_0^2 \mathrm{d}\Omega$. Daraus errechnet sich der Wirkungsquerschnitt (pro Elementarzelle)

$$\frac{\mathrm{d}J_1}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{N}{A}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} J_0 = N \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} c_0^2 v_0, \tag{8.5}$$

d.h. zu

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{N} \sum_{\{n\}} \frac{k}{k_0} |F_{n,n^0}(\mathbf{K})|^2. \tag{8.6}$$

Mitteln wir über die Besetzungen $\{n^0\}$ und ziehen wir die Abhängigkeit von ω heraus $\hbar\omega = E_n - E_{n^0}$, so folgt der doppelt differentielle Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega} &= \frac{1}{N} \sum_{\{n\},\{n^0\}} \frac{k}{k_0} |F_{n,n^0}(\mathbf{K})|^2 \delta(\omega - \frac{1}{\hbar}(E_n - E_{n^0})) p(\{n^0\}) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{ij\delta n} \frac{k}{k_0} f_i f_j \delta(\omega - \sum \omega_\lambda(\mathbf{q})\delta n_\lambda(\mathbf{q})) \sum_{mn} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}_{mi}-\mathbf{R}_{nj})} \\
&\times \sum_{\{n^0\}} \langle \{n^0+\delta n\}| \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi}} |\{n^0\}\rangle \langle \{n^0\}| \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{nj}} |\{n^0+\delta n\}\rangle p(\{n^0\}),
\end{aligned} \tag{8.7}$$

wobei $p(\{n^0\})$ die Besetzungswahrscheinlichkeit im Festkörper angibt.

Wir entwickeln nun unter Verwendung von (6.24)

$$\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda\mathbf{q}} \left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} \gamma_i^\lambda(\mathbf{q}) a^\dagger_\lambda(\mathbf{q}) + \mathrm{h.c.} \right), \quad \gamma_i^\lambda(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2M_i\omega_\lambda(\mathbf{q})}} \mathbf{K}\cdot\mathbf{c}_i^{\lambda *}(\mathbf{q}). \tag{8.8}$$

Die Matrixelemente $\langle n^0+\delta n|...|n^0\rangle$ können wir nun faktorisieren in ein Produkt von Matrixelemente für jeweils einen Oszillator

$$\langle \{n^0+\delta n\}| \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi}} |\{n^0\}\rangle = \prod_{\lambda\mathbf{q}} \langle n^0_\lambda(\mathbf{q}) + \delta n_\lambda(\mathbf{q})| \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{N}} (\gamma_i^\lambda(\mathbf{q}) \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} a^\dagger_\lambda(\mathbf{q}) + \mathrm{h.c.}) \right) |n^0_\lambda(\mathbf{q})\rangle. \tag{8.9}$$

Da sich die Besetzungszahlen für die meisten Phononen-Moden nicht oder nur um eins verändern, genügt es, die Matrix-Elemente zu betrachten, bei denen die Besetzungszahl ungeändert bleibt oder sich nur um ± 1 ändern. Da bei fast allen die Änderung der Besetzungszahl 0 ist und N solche Matrix-Elemente zu multiplizieren sind, müssen wir in der Entwicklung der Exponentialfunktion auch noch die Terme der Ordnung $1/N$ mitnehmen. Falls alle $\delta n = 0$ (elastische Streuung), dann folgt durch Entwicklung der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned}\prod_{\lambda\mathbf{q}} \langle n_\lambda^0(\mathbf{q})|\exp(...)|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle &= \prod_{\lambda\mathbf{q}} \langle n_\lambda^0(\mathbf{q})|1 - |\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})|^2 \frac{1}{2N}(a_\lambda^\dagger a_\lambda + a_\lambda a_\lambda^\dagger)|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle \\ &= \exp(-\frac{1}{N}\sum_{\lambda\mathbf{q}} |\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})|^2 (n_\lambda^0(\mathbf{q}) + \frac{1}{2})) =: \exp(-\tilde{W}_i). \qquad (8.10)\end{aligned}$$

Einige Phononen können aber angeregt oder absorbiert werden. Für diese einzelnen ersetzt man den entsprechenden Faktor im Produkt über alle $\lambda, \mathbf{q}$ (der praktisch gleich 1 ist) durch

$$\begin{aligned}\langle n_\lambda^0(\mathbf{q}) + 1|\exp(...)|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle &= \langle n_\lambda^0(\mathbf{q}) + 1|\frac{-\mathrm{i}}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})a_\lambda^\dagger(\mathbf{q})|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle \\ &= \frac{-\mathrm{i}}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})\sqrt{n_\lambda^0(\mathbf{q}) + 1}, \qquad (8.11) \\ \langle n_\lambda^0(\mathbf{q}) - 1|\exp(...)|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle &= \langle n_\lambda^0(\mathbf{q}) - 1|\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}\gamma_i^{\lambda *}(\mathbf{q})a_\lambda(\mathbf{q})|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle \\ &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}\gamma_i^{\lambda *}(\mathbf{q})\sqrt{n_\lambda^0(\mathbf{q})}. \qquad (8.12)\end{aligned}$$

Hierbei wurde ebenfalls die Exponentialfunktion entwickelt. Die 1 trägt nichts bei, der Beitrag linear im Erzeuger bzw. Vernichter ist der Wesentliche, da die höheren wegen der Faktoren $1/\sqrt{N}$ für große Systeme vernachlässigbar sind.

Mit jeder Phononenanregung ($\delta n = 1$) ist ein Phasenfaktor $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}$ verknüpft, mit jeder Phononenvernichtung ein Faktor $\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}$ verknüpft. Bei der Mittelung über die verschiedenen Besetzungen n^0 wird aus $\tilde{W}_i$

$$W_i(\mathbf{K}) = \frac{1}{N}\sum_{\lambda\mathbf{q}} |\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})|^2 (\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}). \qquad (8.13)$$

Unter Verwendung des Ausdrucks (8.8) für $\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi}$ folgt

$$W_i(\mathbf{K}) = \frac{1}{2}\overline{(\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi})^2}. \qquad (8.14)$$

Setzen wir die Ausdrücke in den differentiellen Wirkungsquerschnitt ein, so folgt

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega} &= \frac{1}{N}\frac{k}{k_0}\sum_{\{\delta n\}ij} f_i f_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}_{0i}-\mathbf{R}_{0j})}\delta(\omega - \sum_{\lambda\mathbf{q}}\omega_\lambda(\mathbf{q})\delta n_\lambda(\mathbf{q})) \\ &\times \sum_{mn} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{K}+\sum\delta n_\lambda(\mathbf{q})\mathbf{q})\cdot(\mathbf{R}_m-\mathbf{R}_n))}\mathrm{e}^{-W_i(\mathbf{K})-W_j(\mathbf{K})}\prod_{\lambda\mathbf{q}} S_{\lambda\mathbf{q},i,j}(\delta n_\lambda(\mathbf{q})) \qquad (8.15)\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}S(0) &= 1, \qquad (8.16) \\ S_{\lambda,\mathbf{q},i,j}(+1) &= \frac{1}{N}\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})\gamma_j^{\lambda *}(\mathbf{q})(\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}) + 1), \qquad (8.17) \\ S_{\lambda,\mathbf{q},i,j}(-1) &= \frac{1}{N}\gamma_i^{\lambda *}(\mathbf{q})\gamma_j^\lambda(\mathbf{q})\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}). \qquad (8.18)\end{aligned}$$

Es bleibt die Summe über m und n auszuwerten. Im Gitter mit periodischen Randbedingungen ergibt sie

$$\sum_{mn} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{K}+\sum\delta n_\lambda(\mathbf{q})\mathbf{q})\cdot(\mathbf{R}_m-\mathbf{R}_n)} = N^2\sum_{\mathbf{G}}\delta_{\mathbf{K}+\sum\delta n_\lambda(\mathbf{q})\mathbf{q},\mathbf{G}} \qquad (8.19)$$

wobei $\mathbf{G}$ die reziproken Gittervektoren sind. Wir wollen nun das Kronecker-δ in ein Dirac-δ umwandeln. Hierzu verwenden wir aus (4.27)

$$\sum_{\mathbf{k}} ... \to \frac{V_{\mathrm{P}}}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3 k ... \tag{8.20}$$

woraus dann mit

$$\sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{0}} = 1 = \int \mathrm{d}^3 k \delta^3(\mathbf{k}) \tag{8.21}$$

$$\delta_{\mathbf{k},\mathbf{0}} \to \frac{(2\pi)^3}{V_{\mathrm{P}}} \delta^3(\mathbf{K}) \tag{8.22}$$

folgt. Damit haben wir

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2\sigma_{\mathrm{coh}}}{\mathrm{d}\Omega \mathrm{d}\omega} &= \frac{k}{k_0} \frac{(2\pi)^3}{V_{\mathrm{Z}}} \sum_{\mathbf{G},\{\delta n\}} \delta(\omega - \sum_{\lambda\mathbf{q}} \omega_\lambda(\mathbf{q})\, \delta n_\lambda(\mathbf{q}))\, \delta^3(\mathbf{K} + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \delta n_\lambda(\mathbf{q})\, \mathbf{q} - \mathbf{G}) \\ &\times \sum_{ij} f_i f_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}_{0i} - \mathbf{R}_{0j})} \mathrm{e}^{-W_i(\mathbf{K}) - W_j(\mathbf{K})} \prod_{\lambda\mathbf{q}} S_{\lambda\mathbf{q},i,j}. \end{aligned} \tag{8.23}$$

Man bezeichnet diesen Wirkungsquerschnitt als kohärenten Wirkungsquerschnitt. Es wurde angenommen, dass das Streuverhalten nur von den jeweiligen Platz in der Elementarzelle, das heißt von i abhängt. Wir finden dann zum einen den Debye-Waller-Faktor e^{-2W} oder für verschiedene Atomsorten $\mathrm{e}^{-W_i(\mathbf{K}) - W_j(\mathbf{K})}$. Er hängt nach (8.13) von $\mathbf{K}$ und von der Temperatur ab. Weiter beobachten wir die Energie-Erhaltung, die im $\delta(\omega - ...)$ steckt, das heißt es gilt

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{n}}} k^2 + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \omega_\lambda(\mathbf{q})\, \delta n_\lambda(\mathbf{q}) = \frac{\hbar^2}{m_{\mathrm{n}}} k_0^2. \tag{8.24}$$

Weiter gibt es noch eine Quasi-Impuls-Erhaltung, die in der zweiten δ-Funktion steckt,

$$\mathbf{k} + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \delta n_\lambda(\mathbf{q})\, \mathbf{q} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{G}. \tag{8.25}$$

Dies ist nicht die Impuls-Erhaltung. Abgesehen von den akustischen "Phononen" mit $\mathbf{q} = 0$, die gar keine Oszillatoren sind, tragen die Phononen keinen Impuls, da sie an den verschiedenen Orten in unterschiedlicher Phase schwingen. Tatsächlich wird der Impuls vollständig an diese akustischen "Phononen" mit $\mathbf{q} = 0$ übertragen,das heißt in die Translationsbewegung. Die Quasi-Impuls-Erhaltung rührt nicht von der Translationsinvarianz her (in dem Sinne, dass die Energie des Körpers invariant gegenüber einer Verschiebung aller Atome um einen konstanten Vektor ist), sondern von der Gitterperiodizität. Es handelt sich also um eine zusätzliche Symmetrie, die zu der zusätzlichen Erhaltung des Quasi-Impulses bis auf reziproke Gittervektoren $\mathbf{G}$ führt.

Falls alle $\delta n = 0$ sind, haben wir die elastische Streuung mit der Energie-Erhaltung, $\delta(\omega)$, die als Bragg-Streuung auftritt, $\sum_{\mathbf{G}} \delta^3(\mathbf{K} - \mathbf{G})$, und mit der Amplitude $\sum_i f_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_{0i}} \mathrm{e}^{-W_i(\mathbf{K})}$.

Falls ein $\delta n = \pm 1$, dann erhält man die Faktoren $\delta(\omega \mp \omega_\lambda(\mathbf{q}))$ und $\delta^3(\mathbf{K} \pm \mathbf{q} - \mathbf{G})$. Bis auf reziproke Gittervektoren ändert sich der Impuls des Neutrons um den Quasi-Impuls des Phonons. Die Faktoren $\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}) + 1$ für die Erzeugung eines Phonons und $\overline{n}_\lambda(\mathbf{q})$ für die Vernichtung ergeben die Stokes- und die Anti-Stokes-Linie. Diese Ein-Phonon-Prozesse erlauben die Messung der Phononendispersion. Das Intensitätsverhältnis von Stokes- zu Anti-Stokes-Linie ist durch $(\overline{n} + 1)/\overline{n} = \mathrm{e}^{\hbar\omega/(k_{\mathrm{B}}T)}$ gegeben.

Falls zwei $\delta n = \pm 1$, hat man für festes $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \pm\mathbf{q}_1 \pm \mathbf{q}_2$ eine kontinuierliche Verteilung von $\pm\omega(\mathbf{q}_1) \pm \omega(\mathbf{q}_2)$.

Die Verteilung auf 0-, 1-, 2-Phononen-Prozesse hängt von der Temperatur ab. Der Debye-Waller-Faktor bietet für die Verteilung eine Abschätzung. Berechnen wir für ein primitives Gitter das folgende Integral über den Streuquerschnitt, wobei wir die Beiträge, bei denen insgesamt ν Phononen erzeugt und absorbiert werden, mit p^ν multiplizieren,

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{d}\omega \mathrm{d}^3 K \frac{k_0}{k} \frac{\mathrm{d}^2\sigma_{\mathrm{coh}}}{\mathrm{d}\Omega \mathrm{d}\omega} p^{\sum |\delta n|} = \frac{(2\pi)^3}{V_{\mathrm{Z}}} f^2 \mathrm{e}^{-2W} \prod_{\lambda\mathbf{q}} \sum_{\delta n} S_{\lambda\mathbf{q}}(\delta n) p^{|\delta n|} \\ &= \frac{(2\pi)^3}{V_{\mathrm{Z}}} f^2 \mathrm{e}^{-2W} \mathrm{e}^{\frac{2}{N} \sum_{\lambda\mathbf{q}} p |\gamma^\lambda(\mathbf{q})|^2 (\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2})} = \frac{(2\pi)^3}{V_{\mathrm{Z}}} f^2 \mathrm{e}^{-2W + 2pW}. \end{aligned} \tag{8.26}$$

Durch Entwickeln nach p erhält man die Beiträge für verschiedene $\sum|\delta n|$. Gegenüber dem elastischen Streuqerschnitt ist der Beitrag für $\sum|\delta n|=1$ um den Faktor $2W$ kleiner oder größer, der für $\sum|\delta n|=2$ um den Faktor $2W^2$. Summiert man alle Beiträge auf $(p=1)$, so hebt sich der Debye-Waller-Faktor weg.

Inkohärente Streuung

Bisher waren wir davon ausgegangen, dass das Gitter streng periodisch ist, das heißt auch, dass an allen Gitterorten, die sich um Gittervektoren $\mathbf{R}_m$ unterscheiden, das gleiche Isotop eines Elements mit der gleichen Streulänge sitzt. Dies ist aber in der Regel nicht der Fall, was dazu führt, dass auch die Streulängen unterschiedlich sind. Wir wollen nun annehmen, dass die Isotope zufällig und unkorreliert verteilt sind. Dann hängt die Streulänge nicht nur von i, sondern auch von der Gitterzelle m ab. Dann hat man im Ausdruck für den Wirkungsquerschnitt (8.15) die Mittelung über

$$\overline{f_{mi}f_{nj}} = \overline{f_i}\,\overline{f_j} + \delta_{mn}\delta_{ij}(\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2) \tag{8.27}$$

vorzunehmen. Der erste Term liefert den oben angegebenen Beitrag; man muss nur f_i durch den Mittelwert $\overline{f_i}$ ersetzen. Der zweite Term liefert aber den inkohärenten Beitrag

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma_{\mathrm{inc}}}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega} = \frac{k}{k_0}\sum_{\{\delta n\}i}(\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2)\delta(\omega - \sum_{\lambda\mathbf{q}}\omega_\lambda(\mathbf{q})\delta n_\lambda(\mathbf{q}))\mathrm{e}^{-2W_i(\mathbf{K})}\prod_{\lambda\mathbf{q}}S_{\lambda,\mathbf{q},i,i}. \tag{8.28}$$

Man hat nach wie vor die Energieerhaltung, aber die Delta-Funktion für die Quasi-Impuls-Erhaltung fehlt. Einen ähnlichen Beitrag erhält man für Ionen mit Gesamtspin ungleich Null, da die Streulänge vom Gesamtspin Ion plus Neutron abhängt.

Abschätzung des Debye-Waller-Faktors im kubisch primitiven Kristall:

Aus

$$W(\mathbf{K}) = \frac{\hbar}{2mN}\sum_{\lambda\mathbf{q}}|\mathbf{K}\cdot\mathbf{c}_\lambda(\mathbf{q})|^2\frac{\overline{n}_\lambda(\mathbf{q})+\frac{1}{2}}{\omega_\lambda(\mathbf{q})} \tag{8.29}$$

folgt nach Mittelung $|\mathbf{K}\cdot\mathbf{c}_\lambda(\mathbf{q})|^2 = \mathbf{K}^2|\mathbf{c}_\lambda(\mathbf{q})|^2/3 = K^2/3$ und Verwendung der Debye-Näherung

$$W(\mathbf{K}) = \frac{\hbar\mathbf{K}^2}{6MN}\sum_{\lambda\mathbf{q}}\frac{\overline{n}+\frac{1}{2}}{\omega} = \frac{3\hbar^2K^2}{2M}\left(\frac{T}{\Theta_\mathrm{D}}\right)^2\frac{1}{2k_\mathrm{B}\Theta_\mathrm{D}}\int_0^{\Theta_\mathrm{D}/T}x\frac{\mathrm{e}^x+1}{\mathrm{e}^x-1}\mathrm{d}x. \tag{8.30}$$

Der Integrand kann für große x durch x, für kleine x durch 2 approximiert werden. Daraus folgt

$$\begin{array}{llll} \Theta_\mathrm{D} \gg T & \int \approx \frac{1}{2}\left(\frac{\Theta_\mathrm{D}}{T}\right)^2, & W = \frac{3}{4}\frac{\hbar^2K^2}{2M}\frac{1}{k_\mathrm{B}\Theta_\mathrm{D}} & \text{(Nullpunktsschwingungen)} \\ \Theta_\mathrm{D} \ll T & \int \approx 2\frac{\Theta_\mathrm{D}}{T} & W = 3\frac{\hbar^2K^2}{2m}\frac{k_\mathrm{B}T}{(k_\mathrm{B}\Theta_\mathrm{D})^2} & \text{(Ausdehnungsquadrat } \propto T) \end{array} \tag{8.31}$$

Mössbauer-Effekt

Beim Mössbauer-Effekt geht ein angeregtes Atom unter Abgabe eines γ-Quants in seinen Grundzustand über. Dies ist ein Prozess, der an einem Atom stattfindet. Der Rückstoss, den dieses eine Atom erleidet, wird nun auf eine unterschiedliche Anzahl von Phononen übertragen. Dabei kommt auch der Fall vor, dass kein Phonon angeregt wird. Die Verteilung ist ähnlich wie beim inkohärenten Wirkungsquerschnitt. An die Stelle des Faktors $\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2$ tritt die Zerfalls-Wahrscheinlichkeit des angeregten Zustands. Die Wahrscheinlichkeit, dass kein Phonon angeregt (oder absorbiert) wird ist durch den Debye-Waller-Faktor e^{-2W_i} gegeben. Es gibt umgekehrt auch den Fall, dass die Strahlung wieder absorbiert wird (Resonanz-Absorption). Da die Linie sehr scharf ist, können damit geringe Energieverschiebungen beobachtet werden, zum Beispiel der Energie-Verlust eines γ-Quants, das sich im Gravitationsfeld der Erde um etwa 10 m nach oben bewegt.

9 Polaritonen

Siehe Hunklinger-Enss: 11.2 Elektrische Polarisation S. 370-378

9.a Lagrange-Funktion

In diesem Abschnitt wollen wir das Polariton-Problem, das heißt die Kopplung zwischen optischen Phononen und elektrodynamischem Feld in eine quantenmechanische Form bringen. Wir tun das aus zwei Gründen: Zum einen ist es eine gute Gelegenheit, das elektromagnetische Feld in quantisierter Form einzuführen, zum anderen kann man an dieser Stelle lernen, wie man mit bosonischen Erzeugern und Vernichtern umgeht, wenn der Hamilton-Operator sich nicht als Teilchenzahl-Operator schreiben lässt. Allerdings behandeln wir das Problem in etwas vereinfachter Form: Wir vernachlässigen den elektronischen Anteil zur Dielektrizitätskonstante und berücksichtigen hier den Unterschied zwischen lokalem und mittlerem elektrischen Feld nicht.

Wir gehen aus von der Lagrange-Dichte für das elektromagnetische Feld

$$L_{\mathrm{F}} = -\frac{1}{16\pi}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = -\frac{1}{16\pi}(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu)(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) = -\frac{1}{8\pi}(\mathrm{rot}\mathbf{A})^2 + \frac{1}{8\pi}(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \mathrm{grad}\Phi)^2. \quad (9.1)$$

Der rein mechanische Anteil der Lagrange-Funktion lässt sich

$$L_{\mathrm{M}} = \rho_1 \dot{\boldsymbol{\eta}}_1^2 + \rho_2 \dot{\boldsymbol{\eta}}_2^2 - \frac{C}{2}(\boldsymbol{\eta}_1 - \boldsymbol{\eta}_2)^2 \quad (9.2)$$

schreiben. Wir zerlegen in den akustischen und optischen Anteil (der Einfachheit halber haben wir hier nur den Beitrag zur potentiellen Energie mitgenommen, der von der Verschiebung der beiden Untergitter gegeneinander herrührt.)

$$\boldsymbol{\eta}_1 = \boldsymbol{\eta}_{\mathrm{a}} + \frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{o}}, \quad \boldsymbol{\eta}_2 = \boldsymbol{\eta}_{\mathrm{a}} - \frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{o}}. \quad (9.3)$$

Dann schreibt sich der mechanische Anteil der Lagrange-Funktion

$$L_{\mathrm{M}} = \frac{\rho_1+\rho_2}{2}\dot{\boldsymbol{\eta}}_{\mathrm{a}}^2 + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\boldsymbol{\eta}}_{\mathrm{o}}^2 - \frac{C}{2}\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{o}}^2, \quad \hat{\rho} = \frac{\rho_1\rho_2}{\rho_1+\rho_2}, \quad (9.4)$$

wobei wir $\hat{\rho}$ als reduzierte Massendichte bezeichnen können. Im Folgenden lassen wir den akustischen Freiheitsgrad $\boldsymbol{\eta}_{\mathrm{a}}$ weg und lassen bei dem optischen Freiheitsgrad den Index $_{\mathrm{o}}$ weg.

An dieses wollen wir nun die optischen Phononen ankoppeln. Dieser Kopplungsterm hat die Form

$$L_{\mathrm{K}} = -\frac{1}{c}A^\mu j_\mu = \frac{1}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{j}_{\mathrm{P}} - \Phi\rho_{\mathrm{P}} \quad (9.5)$$

Mit der Polarisations-Stromdichte $\mathbf{j}_{\mathrm{P}} = \dot{\mathbf{P}}$ und der Polarisations-Ladungsdichte $\rho_{\mathrm{P}} = -\mathrm{div}\mathbf{P}$ folgt

$$L_{\mathrm{K}} = \frac{1}{c}\mathbf{A}\cdot\dot{\mathbf{P}} + \Phi\mathrm{div}\mathbf{P} = \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{P}) + \nabla(\phi\mathbf{P}) - (\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \mathrm{grad}\Phi)\cdot\mathbf{P}. \quad (9.6)$$

Da partielle Zeit- und Ortsableitungen nichts zu den Bewegungsgleichungen beitragen, können wir sie vernachlässigen. Berücksichtigen wir jetzt, dass $\mathbf{P} = nq(\boldsymbol{\eta}_1 - \boldsymbol{\eta}_2) = nq\boldsymbol{\eta}$, dann folgt

$$L_{\mathrm{K}} = -nq(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \mathrm{grad}\Phi)\cdot\boldsymbol{\eta}. \quad (9.7)$$

Zur weiteren Behandlung zerlegen wir die Vektorfelder in ihre longitudinalen und transveralen Anteile. Entwickeln wir $\boldsymbol{\eta}$ nach seinen Fourier-Komponenten,

$$\boldsymbol{\eta} = \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}}\sum_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (9.8)$$

so bezeichnen wir die Anteile von $\boldsymbol{\eta}_{\mathbf{k}}$, die parallel zu $\mathbf{k}$ sind, als longitudinal, die senkrecht dazu stehenden als transversal. Weiter wollen wir die Coulomb-Eichung $\mathrm{div}\mathbf{A} = 0$ verwenden, dann ist das Vektorpotential rein transversal, und die Lagrange-Funktion kann in einen Anteil, der nur longitudinale Komponenten enthält, und einen, der nur transversale Komponenten enthält, zerlegt werden,

$$L = L_\mathrm{F} + L_\mathrm{K} + L_\mathrm{M} = L_\mathrm{l} + L_\mathrm{t} \tag{9.9}$$

mit

$$\begin{aligned} L_\mathrm{l} &= \frac{1}{8\pi}(\mathrm{grad}\Phi)^2 - nq\,\mathrm{grad}\Phi \cdot \boldsymbol{\eta}_\mathrm{l} + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\eta}_\mathrm{l}^2 - \frac{C}{2}\eta_\mathrm{l}^2 && (9.10)\\ L_\mathrm{t} &= -\frac{1}{8\pi}(\mathrm{rot}\mathbf{A})^2 + \frac{1}{8\pi c^2}\dot{\mathbf{A}}^2 - \frac{nq}{c}\dot{\mathbf{A}}\dot{\boldsymbol{\eta}}_\mathrm{t} + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\boldsymbol{\eta}}_\mathrm{t}^2 - \frac{C}{2}\boldsymbol{\eta}_\mathrm{t}^2. && (9.11) \end{aligned}$$

Wir untersuchen zunächst den longitudinalen Anteil. Die Variation nach dem Coulomb-Potential ergibt

$$\frac{\delta L}{\delta\Phi} - \nabla(\frac{\delta L}{\delta\nabla\Phi}) = -\mathrm{div}(\frac{1}{4\pi}\mathrm{grad}\Phi + nq\boldsymbol{\eta}_\mathrm{l}) = 0. \tag{9.12}$$

Dies ist die Gleichung für das Coulomb-Potential. Hierdurch wird $\mathrm{grad}\Phi - 4\pi nq\boldsymbol{\eta}_\mathrm{l} = 0$ und man kann

$$L_\mathrm{l} = \frac{1}{8\pi}(\mathrm{grad}\Phi - 4\pi nq\boldsymbol{\eta}_\mathrm{l})^2 + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\eta}_\mathrm{l}^2 - \frac{C + 4\pi n^2q^2}{2}\eta_\mathrm{l}^2 \tag{9.13}$$

schreiben, wobei das erste Quadrat identisch verschwindet und auch unter Variation verschwindet, so dass man es weglassen kann. Dann bleibt noch die Lagrangefunktion für den harmonischen Oszillator mit dem Freiheitsgrad η_l übrig. Man erhält das Quadrat der longitudinalen Eigenfrequenz

$$\omega_\mathrm{l}^2 = \frac{C}{\hat{\rho}} + \frac{4\pi n^2 q^2}{\hat{\rho}}. \tag{9.14}$$

Falls bei der Bewegung der beiden Untergitter gegeneinander kein Dipolmoment entsteht ($q = 0$, Beispiel Diamant), dann ist ω_l durch den mechanischen Anteil $\omega_0 = \sqrt{C/\hat{\rho}}$ gegeben. Falls der mechanische Anteil nicht vorhanden wäre, dann bliebe die Schwingung mit der Plasmafrequenz $\omega_\mathrm{P} = nq\sqrt{4\pi/\hat{\rho}}$. Insgesamt hat man also

$$\omega_\mathrm{l}^2 = \omega_0^2 + \omega_\mathrm{P}^2. \tag{9.15}$$

Wir betrachten nun den transversalen Anteil. Wir entwickeln das Vektorpotential

$$\mathbf{A} = \frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_{\lambda,\mathbf{k}} \mathbf{e}_\mathbf{k}^\lambda A_{\lambda,\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{9.16}$$

wobei λ zwei transversale Polarisationen beschreibt. Wir verlangen

$$\mathbf{e}_\mathbf{k}^\lambda \cdot \mathbf{k} = 0, \quad \mathbf{e}_\mathbf{k}^{\lambda *} = \mathbf{e}_{-\mathbf{k}}^\lambda, \quad \mathbf{e}_\mathbf{k}^\lambda \cdot \mathbf{e}_{-\mathbf{k}}^{\lambda\prime} = \delta_{\lambda,\lambda'}. \tag{9.17}$$

Damit die Felder reell sind, verlangt man z.B. $\boldsymbol{\eta}_\mathbf{k}^* = \boldsymbol{\eta}_{-\mathbf{k}}$. Wir finden dann den transversalen Anteil der Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L}_\mathrm{t} = \sum_{\lambda,\mathbf{k}} \left(-\frac{1}{8\pi}k^2 A_{\lambda\mathbf{k}}A_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{1}{8\pi c^2}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}}\dot{A}_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}}\dot{\eta}_{\lambda-\mathbf{k}} - \frac{C}{2}\eta_{\lambda\mathbf{k}}\eta_{\lambda-\mathbf{k}} - \frac{nq}{c}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}}\eta_{\lambda-\mathbf{k}} \right). \tag{9.18}$$

Hieraus erhält man die zu $\mathbf{A}$ und $\boldsymbol{\eta}$ kanonisch konjugierten Impulse

$$M_{\lambda\mathbf{k}} = \frac{\mathrm{d}\mathcal{L}_\mathrm{t}}{\mathrm{d}\dot{A}_{\lambda-\mathbf{k}}} = \frac{1}{4\pi c^2}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}} - \frac{nq}{c}\eta_{\lambda\mathbf{k}}, \tag{9.19}$$

$$\Pi_{\lambda\mathbf{k}} = \frac{\mathrm{d}\mathcal{L}_\mathrm{t}}{\mathrm{d}\dot{\eta}_{\lambda-\mathbf{k}}} = \hat{\rho}\dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}} \tag{9.20}$$

Mittels der Lagrange-Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}M_{\lambda\mathbf{k}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \mathcal{L}_\mathrm{t}}{\partial A_{\lambda-\mathbf{k}}}, \quad \frac{\mathrm{d}\Pi_{\lambda\mathbf{k}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \mathcal{L}_\mathrm{t}}{\partial \eta_{\lambda-\mathbf{k}}} \tag{9.21}$$

folgt

$$\frac{1}{4\pi c^2}\ddot{A}_{\lambda\mathbf{k}} - \frac{nq}{c}\dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}} = -\frac{1}{4\pi}k^2 A_{\lambda\mathbf{k}}, \tag{9.22}$$

$$\hat{\rho}\ddot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}} = -C\eta_{\mathbf{k}} - \frac{nq}{c}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}}. \tag{9.23}$$

Setzt man wieder das Zeitverhalten proportional zu $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ an, so muss die charakteristische Matrix

$$\begin{pmatrix} -\frac{\omega^2}{4\pi c^2} + \frac{k^2}{4\pi} & \frac{nq\mathrm{i}\omega}{c} \\ -\frac{nq\mathrm{i}\omega}{c} & -\omega^2\hat{\rho} + C \end{pmatrix} \tag{9.24}$$

verschwinden, woraus sich die Eigenwertgleichung

$$\omega^4 - \omega^2\omega_\mathrm{l}^2 - \omega^2 c^2 k^2 + c^2 k^2 \omega_0^2 = 0 \tag{9.25}$$

für die Frequenzen ω der transversalen Polaritonen ergeben.

9.b Hamilton-Operator und Quantisierung

Wir können nun den Hamilton-Operator für den transversalen Anteil bestimmen,

$$H_\mathrm{t} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} (M_{\lambda-\mathbf{k}}\dot{A}_{\lambda\mathbf{k}} + \Pi_{\lambda-\mathbf{k}}\dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}}) - \mathcal{L}_\mathrm{t} \tag{9.26}$$

$$= \sum_{\lambda\mathbf{k}} \Big(2\pi c^2 M_{\lambda\mathbf{k}}M_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{k^2}{8\pi}A_{\lambda\mathbf{k}}A_{\lambda-\mathbf{k}} + 4\pi cnq\eta_{\lambda\mathbf{k}}M_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{1}{2\hat{\rho}}\Pi_{\lambda\mathbf{k}}\Pi_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{1}{2}(C + 4\pi q^2 n^2)\eta_{\lambda\mathbf{k}}\eta_{\lambda-\mathbf{k}} \Big). \tag{9.27}$$

Als kanonisch konjugierten Variablen bestehen zwischen M und A die Kommutator-Relationen

$$[M_{\lambda\mathbf{k}}, A_{\lambda'-\mathbf{k}'}] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta_{\lambda,\lambda'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \tag{9.28}$$

Damit können wir analog zum harmonischen Oszillator Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Photonen einführen. Ohne Kopplung zur Materie haben wir für das elektromagnetischem Feld

$$H_\mathrm{Ft} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \left(2\pi c^2 M_{\lambda\mathbf{k}}M_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{k^2}{8\pi}A_{\lambda\mathbf{k}}A_{\lambda-\mathbf{k}} \right) = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar ck(b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}b_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) \tag{9.29}$$

mit

$$A_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k}}(b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} + b_{\lambda-\mathbf{k}}), \quad M_{\lambda\mathbf{k}} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar k}{8\pi c}}(b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} - b_{\lambda-\mathbf{k}}) \tag{9.30}$$

und

$$[b_{\lambda,\mathbf{k}}, b^\dagger_{\lambda',\mathbf{k}'}] = \delta_{\lambda,\lambda'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad [b_{\lambda,\mathbf{k}}, b_{\lambda',\mathbf{k}'}] = 0, \quad [b^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}}, b^\dagger_{\lambda',\mathbf{k}'}] = 0. \tag{9.31}$$

Wir haben jetzt tatsächlich diskrete Anzahlen von Photonen, die mit den Photonenzahl-Operatoren $b^\dagger b$ gemessen werden und damit das elektromagnetische feld quantisiert. Die zugehörige Energie eines Photons ist $\hbar ck = \hbar\omega$. Wir haben bei dieser Rechnung die Polarisation durch die Elektronen(bänder) nicht mit berücksichtigt.

Für die Gitterschwingungen können wir nun wieder ähnlich wie früher, aber bereits unter Einbeziehung des Polarisations-Termes proportional zu $4\pi q^2 n^2$ mit $C + 4\pi q^2 n^2 = \hat{\rho}\omega_\mathrm{l}^2$ die Erzeuger und Vernichter für die Phononen einführen

$$\eta_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\mathrm{l}}\hat{\rho}}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} + a_{\lambda-\mathbf{k}}), \quad \Pi_{\lambda\mathbf{k}} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar\omega_\mathrm{l}\hat{\rho}}{2}}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} - a_{\lambda-\mathbf{k}}), \tag{9.32}$$

so dass der Phononen-Beitrag zum Hamilton-Operator

$$H_{\mathrm{Pt}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathrm{l}}(a^{\dagger}_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) \tag{9.33}$$

lautet.

Zwischen beiden Beiträgen gibt es die Kopplung

$$H_{\mathrm{Kt}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} 4\pi c n q \eta_{\lambda\mathbf{k}} M_{\lambda-\mathbf{k}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(a^{\dagger}_{\lambda\mathbf{k}} + a_{\lambda-\mathbf{k}})(b^{\dagger}_{\lambda-\mathbf{k}} - b_{\lambda\mathbf{k}}) \tag{9.34}$$

mit

$$\beta = nq\sqrt{\frac{\pi c}{\omega_{\mathrm{l}}\hat{\rho}}}. \tag{9.35}$$

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die Polaritonen sind nun Linearkombinationen der bisherigen Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

$$\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} = w a^{\dagger}_{\mathbf{k}} + x b^{\dagger}_{\mathbf{k}} + y a_{-\mathbf{k}} + z b_{-\mathbf{k}}. \tag{9.36}$$

Sie müssen

$$[H, \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}] = \hbar\omega_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} \tag{9.37}$$

erfüllen, wobei $\omega_{\mathbf{k}}$ die Anregungsfrequenzen sind. Für positive $\omega_{\mathbf{k}}$ hat man tatsächlich Erzeugungs-Operatoren, für negative Vernichter. Dass dies Erzeugungs-(und Vernichtungs-)Operatoren sind, sieht man folgendermaßen: Es sei $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand, $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Dann gilt

$$H(\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}|\psi\rangle) = [H, \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}]|\psi\rangle + \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} H\psi\rangle = (\hbar\omega_{\mathbf{k}} + E)(\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}|\psi\rangle). \tag{9.38}$$

Daher ist der Zustand $\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}|\psi\rangle$ Eigenzustand von H mit der Energie $\hbar\omega_{\mathbf{k}} + E$, also mit einer um $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$ erhöhten Energie.

Man berechnet daher die Kommutatoren

$$\begin{aligned}
[H, a^{\dagger}_{\mathbf{k}}] &= \hbar\omega_{\mathrm{l}} a^{\dagger}_{\mathbf{k}} + \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(b^{\dagger}_{\mathbf{k}} - b_{-\mathbf{k}}), && (9.39)\\
[H, a_{-\mathbf{k}}] &= -\hbar\omega_{\mathrm{l}} a_{-\mathbf{k}} - \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(b^{\dagger}_{\mathbf{k}} - b_{-\mathbf{k}}), && (9.40)\\
[H, b^{\dagger}_{\mathbf{k}}] &= \hbar c k b^{\dagger}_{\mathbf{k}} - \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(a^{\dagger}_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}), && (9.41)\\
[H, b_{-\mathbf{k}}] &= -\hbar c k b_{-\mathbf{k}} - \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(a^{\dagger}_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}). && (9.42)
\end{aligned}$$

Die Eigenfrequenzen ergeben sich als Eigenwerte der Determinante

$$\begin{pmatrix} \omega_{\mathrm{l}} & 0 & \mathrm{i}\beta\sqrt{k} & -\mathrm{i}\beta\sqrt{k} \\ 0 & -\omega_{\mathrm{l}} & -\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & \mathrm{i}\beta\sqrt{k} \\ -\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & -\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & ck & 0 \\ -\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & -\mathrm{i}\beta\sqrt{k} & 0 & -ck \end{pmatrix}. \tag{9.43}$$

Die Eigenwertgleichung lautet dann

$$\omega_{\mathbf{k}}^4 - \omega_{\mathbf{k}}^2(c^2k^2 + \omega_{\mathrm{l}}^2) + \omega_0^2 c^2 k^2 = 0, \tag{9.44}$$

wobei $\omega_{\mathrm{l}}^2 c^2 - 4c\omega_{\mathrm{l}}\beta^2 = \omega_0^2 c^2$ verwendet wurde. Damit ergeben sich wieder die gleichen Eigenfrequenzen.

Grundzustand

Wie kann man den Grundzustand für das System beschrieben durch den Hamilton-Operator

$$H_{\mathrm{t}} = H_{\mathrm{Ft}} + H_{\mathrm{Pt}} + H_{\mathrm{Kt}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar c k(b^{\dagger}_{\lambda\mathbf{k}} b_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathrm{l}}(a^{\dagger}_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\lambda\mathbf{k}} \mathrm{i}\hbar\beta\sqrt{k}(a^{\dagger}_{\lambda\mathbf{k}} + a_{\lambda-\mathbf{k}})(b^{\dagger}_{\lambda-\mathbf{k}} - b_{\lambda\mathbf{k}}) \tag{9.45}$$

angeben? Er hat die Form

$$|\psi\rangle = \mathrm{e}^B|0\rangle, \tag{9.46}$$

wobei B bilinear in den Erzeugungs-Operatoren $a^\dagger$ und $b^\dagger$ ist

$$B = \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mathbf{k}}\Big(u_{\lambda\mathbf{k}}a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}} + w_{\lambda\mathbf{k}}b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}b^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}} + v_{\lambda\mathbf{k}}(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}b^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}} + b^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a^\dagger_{\lambda-\mathbf{k}})\Big) \tag{9.47}$$

Hierzu verwendet man

$$H\mathrm{e}^B = \mathrm{e}^B\sum_n \frac{1}{n!}H_n, \quad H_0 = H, \quad H_n = [H_{n-1}, B]. \tag{9.48}$$

Wir wollen zunächst diese Beziehung zeigen. Dazu setzen wir die Entwicklung nach λ an

$$\mathrm{e}^{-\lambda B}H\mathrm{e}^{\lambda B} = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!}H_n. \tag{9.49}$$

Wir differenzieren die linke Seite nach λ und erhalten $[\mathrm{e}^{-\lambda B}H\mathrm{e}^{\lambda B}, B]$. Setzen wir nun die Entwicklung ein und differenzieren die rechte Seite von (9.49), so folgt

$$\sum_n \frac{\lambda^n}{n!}[H_n, A] = \sum_n \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!}H_n. \tag{9.50}$$

Setzt man nun links und rechts die Koeffizienten von λ^{n-1} gleich und berücksichtigt, dass für $\lambda = 0$ in (9.48) $H = H_0$ übrig bleibt, so ist (9.48) gezeigt.

Wenn nun B bilinear in den Erzeugungs-Operatoren ist, dann ergibt der Kommutator $H_1 = [H, B]$ wieder einen bilinearen Ausdruck von Erzeugungs-Operatoren, auch einen, in dem ein Faktor Erzeuger und einer Vernichter ist und eine Konstante. Bilden wir nun $H_2 = [H_1, B]$, so ist dieser Ausdruck bilinear in den Erzeugungs-Operatoren und H_3 und höhere verschwinden, da H_2 und B kommutiert, da alle Erzeugungs-Operatoren miteinander kommutieren. Damit lautet die Gleichung

$$H\mathrm{e}^B|0\rangle = \mathrm{e}^B(H + [H, B] + \frac{1}{2}[[H, B], B])|0\rangle \tag{9.51}$$

Damit wir einen Eigenzustand erhalten, muss der Anteil von $H + [H, B] + \frac{1}{2}[[H, B], B]$, der bilinear in den Erzeugungs-Operatoren ist, verschwinden. Das ergibt die Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten in B, die Konstante ergibt die Energie und die Terme von $H + [H, B] + \frac{1}{2}[[H, B], B]$, die einen Vernichter enthalten, ergeben angewandt auf $|0\rangle$ ohnehin Null. Man kann stattdessen auch fordern, dass die Vernichter α angewandt auf den Grundzustand null ergeben, das heißt dann, dass sich die Erzeugungs-Operatoren $a^\dagger$ und $b^\dagger$ in $\alpha + [\alpha, B]$ wegheben müssen.

10 Unabhängige Elektronen

Siehe Hunklinger-Enss: 7.1 Freies Elektronengas S. 201-207
Siehe Hunklinger-Enss: 7.2 Metalleigenschaften im Modell des freien Fermi-Gases: Spez. Wärme S. 207-210

10.a Freies Elektronen-Gas

Als einfachste Beschreibung von Elektronen im Festkörper nimmt man an, dass die Elektronen frei sind, das heißt die Wechselwirkung mit den Ionen und anderen Elektronen nur einen konstanten ortsunabhängigen Beitrag liefern.

Dann gilt für die Wellenfunktionen der Einteilchenzustände

$$H\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi(\mathbf{r}) = \epsilon\psi(\mathbf{r}). \tag{10.1}$$

Nehmen wir an, das System befinde sich in einem Quader mit den Seitenlängen L_1, L_2 und L_3 und periodischen Randbedingungen $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i L_i) = \psi(\mathbf{r})$, so kann man die Einteilchenzustände als ebene Wellen

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_\mathrm{P}}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{10.2}$$

mit dem Peridizitäts-Volumen $V_\mathrm{P} = L_1 L_2 L_3$ schreiben. Dabei ist $k_i = \frac{2\pi m_i}{L_i}$ mit ganzen m_i. Die Einteilchen-Energie beträgt

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2. \tag{10.3}$$

Die Dichte der **k**-Vektoren ist wie in (4.26) gegeben durch

$$\frac{1}{\Delta k_1 \Delta k_2 \Delta k_3} = \frac{L_1 L_2 L_3}{(2\pi)^3} = \frac{V_\mathrm{P}}{(2\pi)^3}. \tag{10.4}$$

Im Grundzustand sind alle Zustände bis zur Energie ϵ_F, der Fermi-Energie besetzt. Diese Zustände erfüllen

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2 < \epsilon_\mathrm{F} = \frac{\hbar^2}{2m}k_\mathrm{F}. \tag{10.5}$$

Sie liegen im **k**-Raum in einer Kugel vom Radius k_F, der Fermikugel. Man bezeichnet $\hbar k_\mathrm{F}$ als den Fermi-Impuls und die Geschwindigkeit der Elektronen auf der Fermi-Kugel als die Fermi-Geschwindigkeit. Man findet den Zusammenhang zwischen Elektronendichte und Fermi-Energie

$$n = \frac{N}{V_\mathrm{P}} = \frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_{k<k_\mathrm{F}} 2 = \frac{1}{8\pi^3}\int_{k<k_\mathrm{F}} \mathrm{d}^3k \cdot 2 = \frac{1}{8\pi^3}\frac{4\pi}{3}k_\mathrm{F}^3 \cdot 2 = \frac{k_\mathrm{F}^3}{3\pi^2}. \tag{10.6}$$

Der Faktor 2 wurde wegen der beiden Spin-Einstellungen eingeführt. Die Fermi-Energie lässt sich damit

$$\epsilon_\mathrm{F} = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3} \tag{10.7}$$

schreiben.

10.b Fermi-Statistik

Im Rahmen eines kanonischen Ensembles der Temperatur T ist die Wahrscheinlichkeit, einen N-Teilchenzustand j der Energie E_j anzutreffen,

$$\rho_j = \mathrm{e}^{-E_j/(k_\mathrm{B}T)}/Z, \tag{10.8}$$

wobei

$$Z = \sum_i \mathrm{e}^{-E_i/(k_\mathrm{B}T)} = \mathrm{e}^{-F/(k_\mathrm{B}T)} \tag{10.9}$$

die Zustandssumme, F die freie Energie und k_B die Boltzmann-Konstante ist.

Die Bedingung einer festen Teilchenzahl N ist für praktische Rechnungen häufig unzweckmäßig. Stattdessen betrachtet man ein großkanonisches Ensemble mit variabler Teilchenzahl, wobei man ein chemisches Potential μ einführen muss, das die mittlere Anzahl der Teilchen festlegt. Dann ist die Wahrscheinlichkeit den Zustand j mit N_j Teilchen und Energie E_j anzutreffen,

$$\rho_j = \mathrm{e}^{-(E_j-\mu N_j)/(k_\mathrm{B}T)}/Y \tag{10.10}$$

mit der großkanonischen Zustandssumme

$$Y = \sum_i \mathrm{e}^{-(E_i-\mu N_j)/(k_\mathrm{B}T)} = \mathrm{e}^{-\Omega/(k_\mathrm{B}T)} \tag{10.11}$$

mit dem großkanonischen Potential Ω. Nun können alle Einteilchen-Zustände unabhängig voneinander besetzt werden. Die Wahrscheinlichkeit f_i, dass der Einteilchenzustand i besetzt ist im Verhältnis dazu, dass er nicht besetzt ist, ist durch den Boltzmann-Faktor gegeben,

$$\frac{f_i}{1-f_i} = \mathrm{e}^{-(\epsilon_i-\mu)/(k_\mathrm{B}T)}, \tag{10.12}$$

woraus die Fermi-Funktion

$$f_i = f_T(\epsilon_i - \mu) = \frac{1}{\mathrm{e}^{(\epsilon_i-\mu)/(k_\mathrm{B}T)}+1} \tag{10.13}$$

folgt. Damit lässt sich die mittlere Teilchenzahl N, die mittlere Energie E und die Entropie S ausdrücken

$$N = \sum_i f_i, \tag{10.14}$$

$$E = \sum_i \epsilon_i f_i, \tag{10.15}$$

$$S = -k_\mathrm{B}\sum_i (f_i \ln f_i + (1-f_i)\ln(1-f_i)). \tag{10.16}$$

10.c Zustandsdichte, spez. Wärme und chemisches Potential

Im Rahmen des Einteilchen-Bildes führt man die Zustandsdichte $D(\epsilon)$ für die Elektronen ein. Sie gibt die Anzahl von Ein-Elektron-Zuständen pro Volumen und Energie-Interval an. Mit dieser Zustandsdichte erhält man für den Grundzustand

$$n = \int^{\epsilon_\mathrm{F}} D(\epsilon) d\epsilon. \tag{10.17}$$

Für freie Elektronen hatten wir

$$n = \frac{k_\mathrm{F}^3}{3\pi^2} = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m\epsilon_\mathrm{F}}{\hbar^2}\right)^{3/2}. \tag{10.18}$$

Daraus folgt dann

$$D(\epsilon) = \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\epsilon} = \frac{(2m)^{3/2}\epsilon^{1/2}}{2\pi^2\hbar^3}\theta(\epsilon), \tag{10.19}$$

wobei wir die Stufenfunktion θ hinzugefügt haben, da es nur für positive ϵ Zustände gibt.

Wir wollen nun unter der Annahme, dass das Einteilchenbild eine gute Näherung darstellt, die Zustandsdichte aber eine allgemeine Form haben kann, das chemische Potential und die spezifische Wärme des Systems betrachten. Dabei sind Summen über Funktionen, die von ϵ abhängen, auszuwerten,

$$\frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_i g(\epsilon_i) = \int D(\epsilon) g(\epsilon) \mathrm{d}\epsilon \tag{10.20}$$

und zwar

$$\begin{aligned} n = \frac{N}{V_{\mathrm{P}}} &= \int D(\epsilon) f(\epsilon - \mu) \mathrm{d}\epsilon, && (10.21)\\ \frac{E}{V_{\mathrm{P}}} &= \int D(\epsilon)\epsilon f(\epsilon - \mu)\mathrm{d}\epsilon && (10.22)\end{aligned}$$

Die Auswertung dieser Integrale erfolgt nach dem Verfahren von Sommerfeld, wobei angenommen wird, dass sich die Zustandsdichte in der Umgebung der Fermikante in einem Bereich der Größe $k_{\mathrm{B}}T$ nur langsam verändert. Es sei

$$G(\mu) = \int g(\epsilon) f(\epsilon - \mu)\mathrm{d}\epsilon = \int^{\mu} g(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon + \int g(\epsilon)(f_T(\epsilon - \mu) - f_0(\epsilon - \mu))\mathrm{d}\epsilon. \tag{10.23}$$

Das zweite Integral gibt nur für $\epsilon \approx \mu$ einen wesentlichen Beitrag, da $f_T(\epsilon - \mu) - f_0(\epsilon - \mu)$ für $|\epsilon - \mu| \gg k_{\mathrm{B}}T$ sehr klein wird. Man entwickelt daher

$$g(\epsilon) = g(\mu) + (\epsilon - \mu)g'(\mu) + ... \tag{10.24}$$

Berücksichtigt man noch, dass

$$f_T(x) + f_T(-x) = \frac{1}{\mathrm{e}^{x/(k_{\mathrm{B}}T)} + 1} + \frac{1}{\mathrm{e}^{-x/(k_{\mathrm{B}}T)} + 1} = 1, \tag{10.25}$$

woraus folgt, dass $f_T(x) - f_0(x)$ eine ungerade Funktion von x ist, dann reduziert sich $G(\mu)$ auf

$$G(\mu) = \int^{\mu} g(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon + 2g'(\mu)\int_0^{\infty} x f_T(x)\mathrm{d}x. \tag{10.26}$$

Substituiert man unter dem Integral $x = k_{\mathrm{B}}Ty$, so folgt

$$\int_0^{\infty} x f_T(x)\mathrm{d}x = \int_0^{\infty} \frac{x\mathrm{d}x}{\mathrm{e}^{x/(k_{\mathrm{B}}T)} + 1} = (k_{\mathrm{B}}T)^2 \int_0^{\infty} \frac{y\mathrm{d}y}{\mathrm{e}^{y} + 1} = (k_{\mathrm{B}}T)^2 \frac{\pi^2}{12} \tag{10.27}$$

und damit

$$G(\mu) = \int^{\mu} g(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 g'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360}(k_{\mathrm{B}}T)^4 g'''(\mu) + ..., \tag{10.28}$$

wobei wir den nächsten nicht verschwindenden Term noch mitgenommen haben. Dies ist die Sommerfeld-Entwicklung.

Wir werten damit nun die Teilchendichte aus

$$n = \int^{\mu} D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 D'(\mu) = \int^{\epsilon_{\mathrm{F}}} D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon + (\mu - \epsilon_{\mathrm{F}})D(\epsilon) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 D'(\epsilon_{\mathrm{F}}). \tag{10.29}$$

Dabei wurde mehrfach μ durch ϵ_{F} ersetzt, wo der Fehler in höherer Ordnung als $(k_{\mathrm{B}}T)^2$ ist. Da die Dichte der Elektronen erhalten bleibt (jedenfalls für konstantes Volumen) und der erste Term nach dem letzten Gleichheitszeichen bereits die Teilchendichte ist, gilt

$$(\mu - \epsilon_{\mathrm{F}})D(\epsilon_{\mathrm{F}}) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 D'(\epsilon_{\mathrm{F}}) = 0. \tag{10.30}$$

Dies führt auf eine Verschiebung des chemischen Potentials

$$\mu = \epsilon_{\mathrm{F}} - \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \frac{D'(\epsilon_{\mathrm{F}})}{D(\epsilon_{\mathrm{F}})} + O(T^4). \tag{10.31}$$

Für die Energie erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned} \frac{E}{V_{\mathrm{P}}} &= \int^{\mu} \epsilon D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2(\mu D(\mu))' \\ &= \int^{\epsilon_{\mathrm{F}}} \epsilon D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon + \underbrace{(\mu - \epsilon_{\mathrm{F}})\epsilon_{\mathrm{F}} D(\epsilon_{\mathrm{F}}) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \epsilon_{\mathrm{F}} D'(\epsilon_{\mathrm{F}})} + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 D(\epsilon_{\mathrm{F}}) && (10.32)\end{aligned}$$

Wegen (10.30) hebt sich der unterklammerte Beitrag weg. Daraus folgt dann

$$\frac{E(T)}{V_{\mathrm{P}}} = \frac{E(0)}{V_{\mathrm{P}}} + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 D(\epsilon_{\mathrm{F}}). \tag{10.33}$$

In die Änderung der Energie geht also die Zustandsdichte der Elektronen an der Fermikante ein. Nur die Elektronen mit Energien von etwa $\epsilon - \epsilon_{\mathrm{F}} = O(k_{\mathrm{B}}T)$ können thermisch angeregt werden und gewinnen jeweils etwa die Energie $k_{\mathrm{B}}T$. Aus diesem Ergebnis erhalten wir die spezifische Wärme der Elektronen pro Volumen

$$c_{\mathrm{V}} = \frac{1}{V_{\mathrm{P}}}(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T})_V = \frac{\pi^2}{3}k_{\mathrm{B}}^2 T D(\epsilon_{\mathrm{F}}), \tag{10.34}$$

die linear mit der Temperatur anwächst.

11 Elektronen im periodischen Potential

Siehe Hunklinger-Enss: 7.3 Elektronen im periodischen Potential S. 219-236
Siehe Hunklinger-Enss: 7.4 Einfluss der Brillouinzone S. 237-242

11.a Bloch-Theorem, Bänder

Um die Elektronen im Festkörper zu beschreiben, geht man aus von einem effektiven Potential, das die Ionen und die anderen Elektronen auf ein Elektron ausüben. In einem periodischen Gitter wird dies ein periodisches Potential sein,

$$V(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = V(\mathbf{r}), \tag{11.1}$$

wobei $\mathbf{R}$ ein beliebiger Gittervektor unseres Kristalls ist. Wir führen nun einen Translations-Operator $T_{\mathbf{R}}$ ein,

$$T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}+\mathbf{R}). \tag{11.2}$$

Es gilt dann

$$T_{\mathbf{R}}V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}+\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = V(\mathbf{r}+\mathbf{R})T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}). \tag{11.3}$$

Da dies für eine beliebige Wellenfunktion ψ gilt, folgt als Wirkung des Translations-Operators

$$T_{\mathbf{R}}V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}+\mathbf{R})T_{\mathbf{R}}. \tag{11.4}$$

Die explizite Darstellung für den Translations-Operator lautet

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}} &= \mathrm{e}^{\mathbf{R}\cdot\nabla} = 1 + \mathbf{R}\cdot\nabla + \frac{1}{2}(\mathbf{R}\cdot\nabla)^2 + ... && (11.5)\\ \mathrm{e}^{\mathbf{R}\cdot\nabla} &= \mathrm{e}^{R_x\partial_x}\mathrm{e}^{R_y\partial_y}\mathrm{e}^{R_z\partial_z} && (11.6)\\ \mathrm{e}^{\mathbf{R}\cdot\nabla}\psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}) + R_\alpha\partial_\alpha\psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}R_\alpha R_\beta\partial_\alpha\partial_\beta\psi(\mathbf{r}) + ..., && (11.7) \end{aligned}$$

wobei dieser Ausdruck gerade die Taylor-Entwicklung darstellt. Wir beobachten aus dieser Darstellung weiterhin, dass

$$T_{\mathbf{R}}\nabla = \nabla T_{\mathbf{R}}, \text{ also } [T_{\mathbf{R}}, \mathbf{p}] = 0. \tag{11.8}$$

Für einen gitterperiodischen Hamilton-Operator

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n) \tag{11.9}$$

gilt also

$$[T_{\mathbf{R}_n}, H] = 0. \tag{11.10}$$

Nun ist $T_{\mathbf{R}_n}T_{\mathbf{R}_m} = T_{\mathbf{R}_n+\mathbf{R}_m} = T_{\mathbf{R}_m}T_{\mathbf{R}_n}$, das heißt $T_{\mathbf{R}_n} = (T_{\mathbf{a}_1})^{n_1}(T_{\mathbf{a}_2})^{n_2}(T_{\mathbf{a}_3})^{n_3}$ und $T^\dagger_{\mathbf{R}} = \mathrm{e}^{\mathbf{R}\cdot\nabla^\dagger} = \mathrm{e}^{-\mathbf{R}\cdot\nabla} = T_{-\mathbf{R}}$, also $T^\dagger_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}} = T_0 = 1$. Der Translationsoperator ist also ein unitärer Operator. Zu unitären Operatoren gibt es genauso wie zu hermiteschen Operatoren einen Satz orthogonaler Eigenfunktionen. (Man sieht das folgendermaßen: Da $T^\dagger T = TT^\dagger = 1$, kommutiert T mit $T^\dagger$ und damit auch $T+T^\dagger$ mit $i(T-T^\dagger)$. Da letztere hermitesch sind, haben sie gemeinsame orthogonale Eigenfunktionen. Allerdings sind die Eigenwerte von T in der Regel nicht reell. Sie sind aber betragsmäßig gleich 1. Ist nämlich der Eigenwert zu $T+T^\dagger$ gleich $2a$ und zu $i(T-T^\dagger)$ gleich $2b$, wobei a und b reell sind, so ist der zu T $(a-\mathrm{i}b)$ und der zu $T^\dagger$ $(a+\mathrm{i}b)$. Da aber $TT^\dagger = 1$, folgt $(a-\mathrm{i}b)(a+\mathrm{i}b) = a^2+b^2 = 1$).

Daher haben H, T_{a_1}, T_{a_2} und T_{a_3} gemeinsame orthogonale Eigenfunktionen mit Eigenwerten ψ,

$$H\psi = \epsilon\psi, \quad T_{\mathbf{a}_i}\psi = c_i\psi, \quad T_{\mathbf{R}_n}\psi = c_1^{n_1}c_2^{n_2}c_3^{n_3}\psi \tag{11.11}$$

Wir wollen nun die Eigenwerte c_j in der Form $c_i = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i}$ ausdrücken, dann gilt nämlich

$$T_{\mathbf{R}_n}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\psi(\mathbf{r}), \tag{11.12}$$

das heißt die Eigenfunktionen von H lassen sich in der Form

$$\psi(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{11.13}$$

schreiben, wobei $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ gitterperiodisch ist (Blochsches Theorem).

Wir betrachten noch die Bestimmung des Wellenvektors $\mathbf{k}$ aus $c_i = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i}$. Es folgt

$$\frac{\ln c_i}{\mathrm{i}} + 2\pi m_i = \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i. \tag{11.14}$$

Dieses Gleichungssystem haben wir schon in 3.18 kennengelernt. Die Lösung ist

$$\mathbf{k} = \sum_j (m_j + \frac{\ln c_j}{2\pi\mathrm{i}})\mathbf{b}_j. \tag{11.15}$$

Der Wellenvektor ist also bis auf reziproke Gittervektoren festgelegt. Man kann ihn daher immer innerhalb der (ersten) Brillouinzone wählen. Man charakerisiert daher die Wellenfunktionen mit dem Wellenvektor $\mathbf{k}$ und einem zusätzlichen Index n, dem Band-Index, $\psi(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Der Eigenwert $\epsilon_n(\mathbf{k})$ wird als die Band-Energie des Elektrons bezeichnet.

11.b Fast freie Elektronen

Wir gehen aus von einem gitterperiodischen Potential

$$V(\mathbf{r}) = \sum_m V(\mathbf{G}_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}_m\cdot\mathbf{r}}, \tag{11.16}$$

das wir nach seinen Fourier-Komponenten entwickelt haben (vgl. die Entwicklung der gitterperiodischen Dichte in (3.15), wobei die G_m die reziproken Gittervektoren sind,

$$V(\mathbf{G}_m) = \frac{1}{v_\mathrm{z}}\int_{\mathrm{Gitterzelle}} \mathrm{d}^3r V(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}_m\cdot\mathbf{r}}. \tag{11.17}$$

Mit

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_\mathrm{P}}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\sum_m u(\mathbf{G}_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}_m\cdot\mathbf{r}} \tag{11.18}$$

folgt durch Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung

$$\sum_m \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{G}_m)^2 u(\mathbf{G}_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}+\mathbf{G}_m)\cdot\mathbf{r}} + \sum_{ml} V(\mathbf{G}_l)u(\mathbf{G}_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}+\mathbf{G}_m+\mathbf{G}_l)\cdot\mathbf{r}} = \sum_m \epsilon(\mathbf{k})u(\mathbf{G}_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}+\mathbf{G}_m)\cdot\mathbf{r}}. \tag{11.19}$$

Für den Koeffizienten der Fourier-Komponente $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k+\mathbf{G}_m}$ folgt dann

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{G}_m)^2 - \epsilon(\mathbf{k})\right)u(\mathbf{G}_m) + \sum_l V(\mathbf{G}_l)u(\mathbf{G}_{m-l}) = 0. \tag{11.20}$$

Für ein schwaches Potential ergibt die Störungstheorie ($|u(0)| \gg |u(\mathbf{G}_{m\neq 0})|$)

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + V(0) + \sum_{l\neq 0}\frac{V(\mathbf{G}_l)V(-\mathbf{G}_l)}{\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}^2 - (\mathbf{k}-\mathbf{G}_l)^2)}. \tag{11.21}$$

Diese Entwicklung bricht zusammen, wenn für einen reziproken Gittervektor $k^2 = (\mathbf{k}-\mathbf{G}_l)^2$ gilt, das heißt für $2\mathbf{k}\cdot\mathbf{G}_l = G_l^2$. Mit $\mathbf{k} = \mathbf{G}_l/2 + \delta\mathbf{k}$ führen wir dann entartete Störungstheorie für die beiden (fast) entarteten Komponenten durch

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\mathbf{G}}{2}+\delta\mathbf{k})^2 - \epsilon + V(0)\right)u(0) + V(\mathbf{G})u(-\mathbf{G}) = 0, \tag{11.22}$$

$$V(-\mathbf{G})u(0) + \left(\frac{\hbar^2}{2m}(\delta\mathbf{k}-\frac{\mathbf{G}}{2})^2 + V(0) - \epsilon\right)u(-\mathbf{G}) = 0, \tag{11.23}$$

woraus sich die Energien

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{G^2}{4} + \delta\mathbf{k}^2\right) + V(0) \pm \sqrt{V(\mathbf{G})V(-\mathbf{G}) + (\frac{\hbar^2}{2m})^2(\mathbf{G}\cdot\delta\mathbf{k})^2}. \tag{11.24}$$

ergeben. Entwickeln wir die Wurzel nach $(\mathbf{G}\cdot\delta\mathbf{k})$, so folgt

$$\sqrt{...} = |V(\mathbf{G})| + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\mathbf{G}\cdot\delta\mathbf{k})^2}{2|V(\mathbf{G})|} + ... \tag{11.25}$$

Es entsteht also eine Energielücke von $2|V(\mathbf{G})|$. Die hier betrachtete Aufhebung der Entartung tritt gerade an den Grenzen der Brilouin-Zonen auf und führt dort zur Aufspaltung der Bänder.

11.c Tight-binding Näherung

Im Rahmen dieser Näherung gehen wir von einer starken Bindung zwischen Elektronen und Ionen aus und nehmen gleichzeitig eine schwache Wechselwirkung zwischen den Elektronen an benachbarten Atomen. Es sei $\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r})$ eine Elektron-Wellenfunktion im Atom, d.h.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V_\mathrm{a}(\mathbf{r})\right)\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r}) = \epsilon_\mathrm{a}\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r}). \tag{11.26}$$

Als Näherungslösung für das periodische Potential

$$V(\mathbf{r}) = \sum_m V_\mathrm{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_m) \tag{11.27}$$

setzen wir die Überlagerung

$$\psi_\mathbf{k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n) \tag{11.28}$$

an. Diese hat die Eigenschaft, dass sie bereits dem Bloch-Theorem genügt, das heißt bei Verschiebung um den Gittervektor $\mathbf{R}_m$ multipliziert sie sich mit $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}$. Die Einteilchenenergie ergibt sich dann als Erwartungswert zu

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\langle\psi_\mathbf{k}|H|\psi_\mathbf{k}\rangle}{\langle\psi_\mathbf{k}|\psi_\mathbf{k}\rangle}. \tag{11.29}$$

Für die Normierung erhält man

$$\langle\psi_\mathbf{k}|\psi_\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{R}_n\mathbf{R}_{n'}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{n'}-\mathbf{R}_n)}\int \mathrm{d}^3r\Phi^*_\mathrm{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n'}) = \frac{1}{N}\sum_{nn'}c_{n-n'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{n-n'}} = \sum_n c_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \tag{11.30}$$

mit

$$c_n = \int \mathrm{d}^3r\Phi^*_\mathrm{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r}). \tag{11.31}$$

Bei der Berechnung des Matrixelements $\langle H\rangle$ erhält man

$$\langle\psi_\mathbf{k}|H|\psi_\mathbf{k}\rangle = \sum\epsilon_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \tag{11.32}$$

mit

$$\begin{aligned}\epsilon_n &= \int \mathrm{d}^3r\Phi^*_\mathrm{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\mathbf{r})\right)\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r}) \\ &= \underbrace{\int \mathrm{d}^3r\Phi^*_\mathrm{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V_\mathrm{a}(\mathbf{r})\right)\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r})}_{\epsilon_\mathrm{a}\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r})}}_{\epsilon_\mathrm{a}c_n} \\ &+ \underbrace{\int \mathrm{d}^3r\Phi^*_\mathrm{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)\left(V(\mathbf{r})-V_\mathrm{a}(\mathbf{r})\right)\Phi_\mathrm{a}(\mathbf{r})}_{\hat{\epsilon}_n}\end{aligned} \tag{11.33}$$

Sind die Ionen weit voneinander entfernt, dann sind die Matrixelemente $\hat{\epsilon}_n$ klein, da das Potential des Ions am Ort des Elektrons nicht mit der atomaren Wellenfunktion multipliziert wird. Ebenso sind die Überlapp-Matrixelemente c_n außer für $c_0 = 1$ klein. Damit erhält man

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathrm{a}} + \frac{\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\hat{\epsilon}_n}{\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}c_n} \tag{11.34}$$

Näherungsweise kann man den Nenner gleich 1 setzen und sich bei der Summe im Zähler auf den Term am gleichen Ort und den nächsten Nachbarn beschränken. Für ein fcc-Gitter erhält man dann zum Beispiel

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_{\mathrm{a}} + \hat{\epsilon}_0 + 4\hat{\epsilon}_1\left(\cos(\frac{k_1 a}{2})\cos(\frac{k_2 a}{2}) + \cos(\frac{k_1 a}{2})\cos(\frac{k_3 a}{2}) + \cos(\frac{k_2 a}{2})\cos(\frac{k_3 a}{2})\right) \tag{11.35}$$

Dabei hängen die Matrixelemente ϵ_0 und ϵ_1 vom Gitterabstand a ab. Für große Abstände gehen sie wegen des fehlenden Überlapps rasch gegen Null.

11.c.α Das Bandspektrum von Diamant und ein nützlicher Satz über die Eigenwerte von Matrizen

Wir beginnen mit dem Satz: Hat eine hermitesche Matrix A die Eigenwerte a_1, a_2, ... a_n und eine andere Matrix B Eigenwerte zwischen $b_{\min}$ und $b_{\max}$, so liegen die Eigenwerte von $A + B$ in der Vereinigungsmenge $\cup_i[a_i + b_{\min}...a_i + b_{\max}]$. Man kann sich von der Richtigkeit überzeugen, indem man die Eigenwerte von $A+\lambda B$ in Abhängigkeit von λ betrachtet. Ist $|n(\lambda)\rangle$ Eigenfunktion von $A+\lambda B$ mit Eigenwert ϵ, dann gilt $\frac{d\epsilon}{d\lambda} = \langle n(\lambda)|B|n(\lambda)\rangle$. Dieser Erwartungswert liegt aber zwischen $b_{\min}$ und $b_{\max}$. Daher gilt $b_{\min} \leq \frac{d\epsilon}{d\lambda} \leq b_{\max}$. Geht man vom Eigenzustand mit Eigenwert a_i zu A aus, so kann er sich nur zwischen $b_{\min}$ und $b_{\max}$ von a_i entfernen, womit der Satz gezeigt ist.

Diesen Satz wollen wir nun auf die Bandstruktur von Diamant anwenden. Im Rahmen des Tight-binding-Modells können wir H darstellen als Summe zweier Beiträge. Der erste berücksichtigt die s- und p-Wellenfunktionen an den Gitterplätzen

$$\begin{aligned} A &= \epsilon_{\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{R},i}|\mathbf{R}+\mathbf{r}_i, s\rangle\langle\mathbf{R}+\mathbf{r}_i, s| \\ &+ \epsilon_{\mathrm{p}}\sum_{\mathbf{R},i}\left(|\mathbf{R}+\mathbf{r}_i, p_x\rangle\langle\mathbf{R}+\mathbf{r}_i, p_x| + |\mathbf{R}+\mathbf{r}_i, p_y\rangle\langle\mathbf{R}+\mathbf{r}_i, p_y| + |\mathbf{R}+\mathbf{r}_i, p_z\rangle\langle\mathbf{R}+\mathbf{r}_i, p_z|\right) \end{aligned} \tag{11.36}$$

wobei wir die Notation mit bras $\langle|$ und kets $|\rangle$ benützt haben. Der zweite berücksichtigt die kovalente Bindung in Form eines tight-binding Matrixelements zwischen den überlappenden Orbitalen.

$$B = -t\sum_{\mathbf{R},\delta}\left(|\mathbf{R},\delta\rangle\langle\mathbf{R}+\delta,-\delta| + |\mathbf{R}+\delta,-\delta\rangle\langle\mathbf{R},\delta|\right). \tag{11.37}$$

Die Summe läuft über das eine Untergitter, $\mathbf{R}$. Die benachbarten Atome liegen auf dem anderen Untergitter. Vom ursprünglichen Gitter erreicht man es durch Verschiebung um $\delta = \frac{a}{4}(v_x, v_y, v_z)$, wobei die v_i gleich ± 1 sind und $v_x v_y v_z = +1$. Das ket $|\mathbf{R},\delta\rangle$ steht für das hybridisierte Orbital

$$|\mathbf{R},\delta\rangle = \frac{1}{2}\left(|\mathbf{R},s\rangle + v_x|\mathbf{R},p_x\rangle + v_y|\mathbf{R},p_y\rangle + v_z|\mathbf{R},p_z\rangle\right). \tag{11.38}$$

Der Anteil A des Hamilton-Operators hat die Eigenwerte ϵ_{s} und ϵ_{p}, der Anteil B die Eigenwerte $-t$ und $+t$ für den bindenden und antibindenden Zustand. Alle Eigenwerte sind hoch entartet. Addiert man nun die Beiträge, so findet man, solange $2t < \epsilon_p - \epsilon_s$ zwei erlaubte Energiebereiche in den Intervallen $[\epsilon_{\mathrm{s}} - t ... \epsilon_{\mathrm{s}} + t]$ und $[\epsilon_{\mathrm{p}} - t ... \epsilon_{\mathrm{p}} + t]$. Sobald aber $2t > \epsilon_p - \epsilon_s$, geht erneut eine Bandlücke auf, denn jetzt kann man im Satz A mit B vertauschen und findet, dass man nur Bandenergien in den Intervallen $[\epsilon_{\mathrm{s}} - t ... \epsilon_{\mathrm{p}} - t]$ und $[\epsilon_{\mathrm{s}} + t ... \epsilon_{\mathrm{p}} + t]$ hat. Siehe Figur 7.26 im Skriptum Hunklinger/Enss.

11.d Wannier-Funktionen

Wir hatten bereits die Bloch-Funktionen eingeführt, die die Eigenzustände zum Einteilchen-Hamilton-Operator sind,

$$H\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{11.39}$$

mit

$$\int \mathrm{d}^3 r \psi^*_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{nn'}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \tag{11.40}$$

Wir bilden nun die Überlagerung aller Wellenfunktionen eines Bandes

$$\Phi_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{11.41}$$

Es folgt nun

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m - \mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{11.42}$$

Berücksichtigt man, dass u gitterperiodisch ist, $u(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$, so ergibt die obige Summe

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) = \Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m). \tag{11.43}$$

Die Funktionen $\Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$ heißen Wannier-Funktionen. Sie sind orthogonal zu einander und liefern durch Umkehr der Fourier-Transformation wieder die Blochfunktionen

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{m} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}\Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \tag{11.44}$$

und

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}^3 r \Phi^*_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)\Phi_{n'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{m'}) &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m - \mathrm{i}\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{m'}} \underbrace{\int \mathrm{d}^3 r \psi^*_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r})}_{\delta_{nn'}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} \\ &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'})}\delta_{nn'} = \delta_{nn'}\delta_{mm'}.\end{aligned} \tag{11.45}$$

Die Wannier-Funktionen sind (in der Regel) um $\mathbf{R}_m$ lokalisierte Wellenfunktionen, die gemäß (11.43) die Bloch-Funktionen ergeben, und zugleich die angenehme Eigenschaft haben, an verschiedenen Gitterorten orthogonal zu sein, was für die Atomwellenfunktionen nicht galt. Auf Grund dieser Eigenschaften verwendet man die Wannier-Funktionen gerne als lokale Basis von Wellenfunktionen. Die Wannierfunktionen sind nicht eindeutig festgelegt, da die Phasen der Blochfunktionen willkürlich sind. Man wird jedoch die Wahl in der Regel so treffen, dass die Wellenfunktionen möglichst gut lokalisiert sind. Man ist vielleicht erstaunt, dass man alle Wellenfunktionen eines Bandes in eine einzige Wannierfunktion packen kann. Man muss aber bedenken, dass die Blochfunktionen gitterperiodisch sind, das heißt jede Blochfunktion ist bereits bestimmt, wenn man sie für eine Gitterzelle kennt. Die Menge aller N Blochfunktionen kann man dann im Volumen $NV_\mathrm{z} = V_\mathrm{P}$ also dem Volumen des Probekörpers unterbringen. Genau über dieses Volumen aber ist die Wannierfunktion festzulegen.

12 Einige Eigenschaften von Bändern

12.a Impuls und effektive Massen

Siehe Hunklinger-Enss: 8.1 Bewegungsgleichung und effektive Masse S. 244-246

In diesem Abschnitt wollen wir den Zusammenhang zwischen Impuls, Gruppengeschwindigkeit und Energie herleiten und eine effektive Masse einführen. Dazu entwickeln wir die Wellenfunktion $\psi_{n,\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ nach den $\psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ mit infinitesimalem $\delta\mathbf{k}$,

$$\psi_{n,\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_m \alpha_m \psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{12.1}$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung gibt

$$\begin{aligned} H\psi_{n,\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_m \alpha_m \psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \epsilon_n(\mathbf{k}+\delta\mathbf{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_m \alpha_m \psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_m \alpha_m \left(\frac{\hbar^2(\delta k)^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{\mathrm{i}m}\delta\mathbf{k}\cdot\nabla - \frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V\right)\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \tag{12.2}$$

Hieraus folgt

$$\sum_m \alpha_m \left(\frac{\hbar^2(\delta\mathbf{k})^2}{2m} + \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p} + \epsilon_m(\mathbf{k}) - \epsilon_n(\mathbf{k}+\delta\mathbf{k})\right)\psi_{m,\mathbf{k}} = 0. \tag{12.3}$$

Für kleines $\delta\mathbf{k}$ können wir $\alpha_n = 1$ und $\alpha_m = O(\delta k)$ setzen. Bilden wir nun das Skalarprodukt von (12.3) mit $\psi_{m,\mathbf{k}}$, $m \neq n$, so folgt

$$\alpha_m(\epsilon_m(\mathbf{k}) - \epsilon_n(\mathbf{k}) + O(\delta k)) + \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{mn} = O((\delta k)^2), \tag{12.4}$$

was uns erlaubt, α_m in Ordnung $\delta\mathbf{k}$ auszudrücken. Bei Multiplikation von (12.3) mit ψ_n folgt

$$\frac{\hbar^2(\delta\mathbf{k})^2}{2m} + \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{nn} + \epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_n(\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}) + \sum_{m\neq n} \alpha_m \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{nm} = 0, \tag{12.5}$$

woraus man bis einschließlich Ordnung $(\delta k)^2$

$$\epsilon_n(\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}) = \epsilon_n(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2(\delta\mathbf{k})^2}{2m} + \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{nn} + \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{m\neq n}\frac{|\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{mn}|^2}{\epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_m(\mathbf{k})} \tag{12.6}$$

bekommt. Falls $\epsilon_n(\mathbf{k})$ nicht entartet ist, ist diese Einteilchenenergie stetig und differenzierbar,

$$\mathbf{p}_{nn} = \langle\mathbf{p}\rangle = \frac{m}{\hbar}\,\mathrm{grad}_{\mathbf{k}}\epsilon_n(\mathbf{k}), \tag{12.7}$$

das heißt gleich der Masse m multipliziert mit der Gruppengeschwindigkeit. Die zweite Ableitung der Einteilchenenergie

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2\epsilon}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = \frac{1}{m}\delta_{\alpha,\beta} + \frac{1}{m^2}\sum_{m\neq n}\frac{p^\alpha_{mn}p^\beta_{nm} + p^\beta_{mn}p^\alpha_{nm}}{\epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_m(\mathbf{k})} =: \left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} \tag{12.8}$$

stellt das Inverse der effektiven Masse des Kristallelektrons dar. Sie ist ein symmetrischer Tensor mit positiven oder negativen Eigenwerten. Das heißt, die Masse kann positiv oder negativ sein. An der Bandkante gilt in der Regel

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2}\sum_\alpha \frac{(k_\alpha - k_{0\alpha})^2}{m^*_\alpha}, \tag{12.9}$$

wobei die Eigenwerte m^*_α an der unteren Bandkante positiv, an der oberen negativ sind.

12.b Symmetrien

12.b.α Folgerungen aus der Punktgruppe

Aus der Translationsgruppe (Gitterperiodizität) erhielten wir das Blochsche Theorem, das

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \tag{12.10}$$

für alle reziproken Gittervektoren $\mathbf{G}$ impliziert. Allgemein ist jedoch unser Hamilton-Operator unter der Raumgruppe

$$\mathbf{r}' = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{a} \tag{12.11}$$

invariant. Ist daher $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ mit gitterperiodischem u_n Eigenfunktion von H mit Eigenwert $\epsilon_n(\mathbf{k})$, so ist auch

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\alpha\mathbf{r}+\mathbf{a}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\alpha\mathbf{r}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} u_{n\mathbf{k}}(\alpha\mathbf{r}+\mathbf{a}) \tag{12.12}$$

Eigenfunktion zum gleichen Eigenwert. $u_{n\mathbf{k}}(\alpha\mathbf{r}+\mathbf{a})$ ist gitterperiodisch, da $\alpha\mathbf{R}_m$ Gittervektor ist, denn

$$\{\alpha|\mathbf{a}\}\{1|\mathbf{R}_m\}\{\alpha|\mathbf{a}\}^{-1} = \{1|\alpha\mathbf{R}_n\} \tag{12.13}$$

ist Element der Translationsgruppe. Dann ist $\psi_{n\mathbf{k}}(\alpha\mathbf{r}+\mathbf{a})$ Eigenfunktion mit dem Wellenvektor $\alpha^{\mathrm{t}}\mathbf{k} = \alpha^{-1}\mathbf{k}$ mit der gleichen Energie, da $\mathbf{k}\cdot\alpha\mathbf{r} = (\alpha^{\mathrm{t}}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$, wobei der Index $^{\mathrm{t}}$ das Transponierte anzeigt. Daraus folgt

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n(\alpha^{-1}\mathbf{k}) \text{ oder } \epsilon_n(\alpha\mathbf{k}) = \epsilon_n(\mathbf{k}). \tag{12.14}$$

Die Energien haben also die volle Symmetrie der Punktgruppe. Alle Vektoren $\alpha\mathbf{k}$ haben für festes $\mathbf{k}$ dieselben Energien. Speziell für Inversions-Symmetrie folgt (Annahme Inversionszentrum im Ursprung)

$$\psi_{n-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(-\mathbf{r}), \quad \epsilon_n(-\mathbf{k}) = \epsilon_n(\mathbf{k}). \tag{12.15}$$

12.b.β Spezielle Symmetrie-Richtungen

Für Wellenvektoren $\mathbf{k}$, die in bestimmten Symmetrierichtungen liegen, gibt es αs, für die $\alpha\mathbf{k} = \mathbf{k}+\mathbf{G}_m$ mit reziprokem Gittervektor $\mathbf{G}$ gilt. Diese αs bilden eine Untergruppe der Punktgruppe. Für diese $\mathbf{k}$-Vektoren kann man die Eigenzustände gemß ihres Transformationsverhaltens unter den Operationen α klassifizieren.

Beispiel: In einem kubischen Gitter sei die Spiegelung $x' = x$, $y' = y$, $z' = -z$ eine Symmetrie-Operation α. Dann geht $\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$ in sich über. Zustände können bei dieser Spiegelung ihr Vorzeichen ändern oder erhalten, da $\alpha^2 = 1$, $\psi(x,y,z) = \pm\psi(x,y,-z)$. Für $\mathbf{k} = k\cdot(1,0,0)$, $\frac{k}{\sqrt{2}}(1,1,0)$, $\frac{k}{\sqrt{3}}(1,1,1)$ gibt es mehr Symmetrie-Operationen. Diese Zustände werden nach den irreduziblen Darstellungen der entsprechenden Untergruppen klassifiziert.

Beispiel: Vierzählige Achse (α) und Spiegelung (S) an der x-Achse (zweidimensionale Betrachtung). Verhalten für $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Nach diesem Schema wird zum Beispiel die supraleitende Wellenfunktion in den CuO_2-Schichten der Hochtemperatur-Supraleiter klassifiziert.

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{12.16}$$

Wegen $\alpha^4 = 1$ folgt für $\alpha\psi = \lambda\psi$ die Gleichung $\lambda^4 = 1$, also $\lambda = \pm 1, \pm\mathrm{i}$. Es sei nun $\psi' = S\psi$. Mit $\alpha S = S\alpha^{-1}$ folgt

$$\alpha\psi' = \alpha S\psi = S\alpha^{-1}\psi = \lambda^{-1}S\psi = \lambda^{-1}\psi'. \tag{12.17}$$

Für $\lambda = \pm 1$ gilt mit $\alpha\psi = \pm\psi$ auch $\alpha\psi' = \pm\psi'$. Man kann daher Linearkombinationen $S(\psi\pm\psi') = \pm(\psi\pm\psi')$ bilden, die simultan Eigenfunktionen von α und S sind (eindimensionale Darstellungen) und zwar kann man sie kennzeichnen durch

$$\begin{array}{rcc} & \lambda & M \\ s_1 & +1 & +1 \\ s_{xy(x^2-y^2)} = g & +1 & -1 \\ d_{x^2-y^2} & -1 & +1 \\ d_{xy} & -1 & -1 \end{array}, \tag{12.18}$$

wobei M der Eigenwert unter Spiegelung ist. Man bezeichnet sie als s- oder d- (auch g-)Wellenfunktionen. Der Index von s und d enthält das einfachste Beispiel einer Funktion dieser Symmetrie. Alle diese Funktionen haben positive Parität, da die Parität durch eine Drehung um 180^0 erzeugt wird, und hierzu α^2 mit dem Eigenwert λ^2 gehört.

Für die Zustände mit $\lambda = \pm\mathrm{i}$ kommutieren α und S nicht. Aus $\alpha S = S\alpha^{-1}$ folgt $\alpha S = S\alpha\lambda^{-2} = -S\alpha$. Man kann sie daher nicht simultan diagonalisieren, es bleiben zweidimensionale Darstellungen. Sie haben ungerade Parität und man bezeichnet sie als p-Zustände. Einfachste Funktionen sind x und y. Offensichtlich ist

$$\alpha x = -y, \quad \alpha y = x, \quad Sx = x, \quad Sy = -y. \tag{12.19}$$

Im Allgemeinen werden die Untersuchungen mit Methoden der Gruppentheorie durchgeführt.

12.c Spin-Bahn-Kopplung und Zeitumkehr-Invarianz

Siehe Hunklinger-Enss: 8.1 $E(\mathbf{k}) \uparrow = E(-\mathbf{k}) \downarrow$ S. 248-249

Bisher haben wir spinabhängige Beiträge zum Potential vernachlässigt. Mit der Spin-Bahn-Kopplung (bewirkt die Feinstrukturaufspaltung im Atom) lautet der Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\mathbf{r}) + \lambda\nabla V(\mathbf{r}) \cdot (\frac{1}{\mathrm{i}}\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) \tag{12.20}$$

mit der Kopplung λ und den Pauli-Matrizen

$$\lambda = \left(\frac{\hbar}{2mc}\right)^2, \quad \boldsymbol{\sigma} = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right). \tag{12.21}$$

Wir zeigen nun, dass es in einem solchen System trotz der Spinabhängigkeit immer eine zweifache Entartung gibt. Es sei $H\psi = \epsilon\psi$. Wir bilden das Konjugiert-Komplexe in der Ortsdarstellung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\mathbf{r}) + \lambda\nabla V(\mathbf{r}) \cdot (\frac{1}{\mathrm{i}}\nabla \times (-\boldsymbol{\sigma}^*))\right)\psi^* = \epsilon\psi^*. \tag{12.22}$$

Man rechnet leicht nach, dass

$$-\boldsymbol{\sigma}^* = \sigma_y^{-1}\boldsymbol{\sigma}\sigma_y, \quad \sigma_y^{-1}H\sigma_y\psi^* = \epsilon\psi^*, \quad H(\mathrm{i}\sigma_y\psi^*) = \epsilon(\mathrm{i}\sigma_y\psi^*). \tag{12.23}$$

Man bezeichnet

$$\psi_{\mathrm{T}} = i\sigma_y\psi^* = \begin{pmatrix} -\psi_\downarrow^* \\ \psi_\uparrow^+ \end{pmatrix} \text{ als den zu } \psi = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix} \tag{12.24}$$

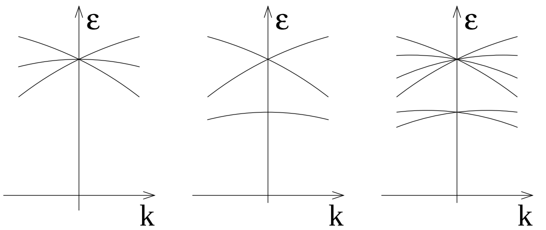
zeitumgekehrten Zustand. Aus $\psi = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ folgt der zeitumgekehrte Zustand $\psi_{\mathrm{T}} = \psi_{-\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Bei Zeitumkehrinvarianz gilt daher $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{-\mathbf{k}}$. (Die Zeitumkehr-Invarianz wird durch ein äußeres Magnetfeld oder spontane Magnetisierung gebrochen.)

12.d Inversion und Zeitumkehrinvarianz

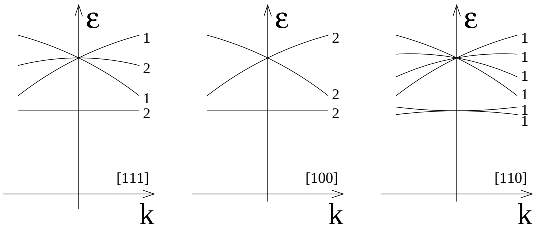
Die zeitumgekehrte und die raumgespiegelte Eigenfunktion sind orthogonal zu einander,

$$\sum_s \int \mathrm{d}^3 r\psi_{T,s}^*(\mathbf{r})\psi_s(-\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}^3 r\,(-\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(-\mathbf{r}) + \psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow(-\mathbf{r})) = 0. \tag{12.25}$$

Falls beide Invarianzen bestehen, sind alle Zustände zu gegebenem $\mathbf{k}$-Vektor (mindestens) zweifach entartet: Kramers-Entartung.



In der Figur wird die Situation für p-Bänder gezeigt. In der ersten der drei Figuren wird der Fall ohne Spin-Bahn-Kopplung gezeigt: für $k = 0$ hat man 6-fache Entartung, für endliches k dreimal zweifache Entartung (Spin-Entartung).
Zweite Figur: Mit Spin-Bahn-Kopplung und Inversions-Zentrum (z.B. Ge) hat man für $k = 0$ vierfache und zweifache Entartung ($p_{3/2}$ und $p_{1/2}$), für $k \neq 0$ besteht dreimal eine zweifache Entartung (Ge).
Dritte Figur: Mit Spin-Bahn-Kopplung, aber ohne Inversions-Zentrum hat man für $k = 0$ wieder vierfach und zweifach Entartung, für $k \neq 0$ bleibt keine Entartung außer in Symmetrie-Richtungen (InSb).
In allen Fällen besteht die Invarianz $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$. Diese Darstellung gilt für eine allgemeine k-Richtung. In der Regel werden die Bandenergien aber für bestimmte Symmetrie-Richtungen wiedergegeben.



Das sieht für InSb (Indium-Antimonid) dann etwa so aus (vgl. Quanten-Kittel Fig. 14.6). Man erkennt, dass nur in [110]-Richtung die Entartung vollständig aufgehoben ist. In [100]-Richtung sind alle Zustände zweifach entartet, in [111]-Richtung sind sie teilweise zweifach entartet.

13 Quanten-Halleffekt

Siehe Hunklinger-Enss: 8.4 Quantisierung der Elektronenbahnen im Magnetfeld S. 274-286

13.a Freie Elektronen im Magnetfeld und im elektrischen Feld

13.a.α Wiederholung aus der Mechanik und Bewegungsgleichungen

In der Hamilton-Mechanik leitet man für ein Elektron im elektromagnetischen Feld die Lagrangefunktion

$$L = \frac{m}{2}v^2 - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{v} + e\Phi(\mathbf{r}) \tag{13.1}$$

her. Dabei ist $\mathbf{A}$ das Vektor-Potential und Φ das skalare Potential des elektromagnetischen Feldes. Hieraus ergeben sich die Komponenten des kanonischen Impulses

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial v_\alpha} = mv_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha \tag{13.2}$$

und damit die Hamilton-Funktion

$$H = p_\alpha v_\alpha - L = (mv_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha)v_\alpha - \frac{m}{2}v^2 + \frac{e}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{v} - e\Phi = \frac{m}{2}v^2 - e\Phi \tag{13.3}$$

oder, wenn wir $\mathbf{v} = \frac{1}{m}(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A})$ einsetzen

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - e\Phi. \tag{13.4}$$

Dabei ist $\mathbf{p}$ der kanonische Impuls, für den klassisch die kanonischen Poisson-Klammern und quantenmechanisch die kanonischen Kommutator-Relationen gelten. Hingegen ist $\mathbf{P} = m\mathbf{v} = \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$ der mechanische Impuls.

Für diesen gelten die Kommutator-Relationen

$$[P_\alpha, P_\beta] = [p_\alpha + \frac{e}{c}A_\alpha, p_\beta + \frac{e}{c}A_\beta] = \frac{e\hbar}{\mathrm{i}c}(\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha) = \frac{e\hbar}{\mathrm{i}c}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\gamma. \tag{13.5}$$

Die Komponenten des mechanischen Impulses kommutieren also nicht miteinander. Man erhält die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}
\dot{\mathbf{r}} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathbf{r}, H] = \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}([\mathbf{r}, p_\alpha]P_\alpha + P_\alpha[\mathbf{r}, p_\alpha]) = \frac{\mathbf{P}}{m}, & (13.6)\\
\dot{\mathbf{P}} &= \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}[\mathbf{P}, P^2] + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathbf{P}, e\mathbf{E}\cdot\mathbf{r}] = \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}([\mathbf{P}, P_\alpha]P_\alpha + P_\alpha[\mathbf{P}, P_\alpha]) - e\mathbf{E} & \\
&= -\frac{e}{2c}(\dot{\mathbf{r}}\times\mathbf{B} - \mathbf{B}\times\dot{\mathbf{r}}) - e\mathbf{E} & (13.7)
\end{aligned}$$

wie in der klassischen Mechanik. (Hieraus folgt für homogene Felder die Überlagerung von Zyklotron-Schwingungen der Frequenz $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ und falls $\mathbf{E}$ senkrecht zu $\mathbf{B}$ steht eine Trift mit der Geschwindigkeit $\frac{cE}{B}$.)

13.a.β Quantenmechanische Behandlung

Wir bestimmen nun die Eigenfunktionen in einem Magnetfeld, dessen Richtung wir parallel zur z-Achse annehmen, und einem dazu senkrecht stehenden in x-Richtung orientierten elektrischen Feld,

$$\mathbf{B} = \mathrm{rot}\mathbf{A} = B\mathbf{e}_z, \qquad \mathbf{A} = Bx\mathbf{e}_y, \tag{13.8}$$

$$\mathbf{E} = -\mathrm{grad}\Phi = E\mathbf{e}_x, \qquad \Phi = -eEx. \tag{13.9}$$

Der Schrödinger-Gleichung lautet dann

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{eB}{c}x\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + eEx\right)\psi = \epsilon\psi \tag{13.10}$$

Da die y- und z-Komponenten des Impulses mit H vertauschen, können wir für die Wellenfunktion ψ ansetzen

$$\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_y y + k_z z)} \hat{\psi}(x). \tag{13.11}$$

Damit lautet die Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} (\hbar k_y + \frac{eB}{c} x)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 + eEx \right) \hat{\psi} = \epsilon \hat{\psi} \tag{13.12}$$

oder mit

$$\omega_{\mathrm{c}} = \frac{eB}{mc}, \quad x_0 = -\frac{\hbar c k_y}{eB} + \frac{mc^2 E}{eB^2} \tag{13.13}$$

finden wir

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega_{\mathrm{c}}^2 (x - x_0)^2 \right) \hat{\psi} = \left(\epsilon - \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 - eEx_0 + \frac{mc^2 E^2}{2B^2} \right) \hat{\psi}. \tag{13.14}$$

Dies ist die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators der Frequenz ω_{c}, der um x_0 zentriert ist. Die Energie-Eigenwerte ergeben sich dann zu

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 + eEx_0 - \frac{mc^2 E^2}{2B^2} + \hbar \omega_{\mathrm{c}} (\nu + \frac{1}{2}). \tag{13.15}$$

Die Quantenzahl ν charakterisiert das jeweilige Landau-Niveau. Ohne äußeres elektrisches Feld sind die Energien von x_0 unabhängig. Wir wollen feststellen, wieviele Zustände in einem Niveau liegen, und betrachten dazu ein Quadrat in der x, y-Ebene mit Kantenlänge L. In y-Richtung verlangen wir periodische Randbedingungen. Dann erhalten wir für benachbarte Zustände

$$\Delta k_y = \frac{2\pi}{L}, \quad \Delta x_0 = \frac{2\pi \hbar c}{LeB}. \tag{13.16}$$

Damit ergibt sich eine Entartung

$$\hat{N} = \frac{L}{\Delta x_0} = \frac{L^2 eB}{2\pi \hbar c} \tag{13.17}$$

Man hat also pro Flächeneinheit $\frac{eB}{2\pi\hbar c}$ Zustände in einem Landau-Niveau. Wir betrachten nun den Halleffekt und bestimmen dazu die Geschwindigkeiten der Elektronen

$$\langle v_x \rangle = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \langle \partial_x \rangle = 0, \quad \langle v_y \rangle = \frac{1}{m} \langle \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \partial_y \rangle + \frac{eB}{mc} \langle x \rangle = \frac{1}{m} (\hbar k_y + \frac{eB}{c} x_0) = c \frac{E}{B}. \tag{13.18}$$

Für ein gefülltes Landau-Niveau eines zweidimensionalen Elektronengases erhält man damit die Hallstromdichte

$$j_y = en \langle v_y \rangle = e \frac{\hat{N}}{L^2} \langle v_y \rangle = \frac{e^2 B}{hc} c \frac{E}{B} = \frac{e^2}{h} E \tag{13.19}$$

Dabei ist n die Dichte der Elektronen pro Fläche. Man erhält also eine Hallleitfähigkeit pro gefülltem Landau-Niveau

$$\sigma_{\mathrm{H}} = \frac{j_y}{E_x} = \frac{e^2}{h}. \tag{13.20}$$

13.b Ganzzahliger Halleffekt

Der ganzzahlige Quanten-Halleffekt wurde von v. Klitzing entdeckt, Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 496. Erste Erklärungen wurden gegeben von Laughlin, Phys. Rev. B 23 (1981) 5632 und Halperin, Phys. Rev. B 25 (1982) 2158. Beobachtet wurde, dass in Schichten, die Elektronen tragen, bei Anlegen eines starken Magnetfeldes senkrecht zur Schicht bei tiefen Temperaturen in Abhängigkeit vom Magnetfeld Plateaux in der Hallleitfähigkeit bei ganzzahligen Vielfachen von $\frac{e^2}{h}$ mit hoher Präzission auftreten. Im ersten Moment würde man argumentieren, dass ja zwischen Landau-Niveaus große Energie-Lücken liegen, so dass die Fermikante meist zwischen den Niveaus liegt und daher fast immer nur gefüllte Landau-Niveaus beitragen, was dann zu diesem Ergebnis führt. Aber die Erklärung ist falsch, denn die Zahl der Elektronen ist vorgegeben und damit auch die teilweise Füllung des obersten besetzten Landau-Niveaus.

Tatsächlich spielt eine Rolle, dass sich auf Grund von Unordnung die Elektronen in einem Zufallspotential bewegen. Um zu sehen, was passiert, wollen wir die folgende Geometrie betrachten. Wir nehmen an, die Elektronen können sich auf einem Zylinder bewegen. Wir bezeichnen die Koordinate in Richtung der Zylinderachse mit x und längs des Zylinderumfangs mit y. Durch den Zylinder geht ein magnetischer Fluss $\Phi_{\rm m}$, der in x-Richtung variiert und dadurch ein Magnetfeld senkrecht zum Zylinder-Mantel erlaubt. Weiterhin sei dieser Fluss zeitabhängig. Die zeitliche Veränderung induziert eine Spannung $\frac{1}{c}\frac{\partial \Phi_{\rm m}}{\partial t}$ längs des Umfangs. Das Vektorpotential ist dann

$$\mathbf{A} = \mathbf{e}_y(Bx + \frac{\Phi_{\rm m}}{L_y}) = \mathbf{e}_y(Bx - cE_y t), \tag{13.21}$$

wobei L_y der Zylinder-Umfang ist. damit hat man das zeitabhängige Problem für freie Elektronen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{eBx}{c} - E_y t\right)^2\right)\psi = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} \tag{13.22}$$

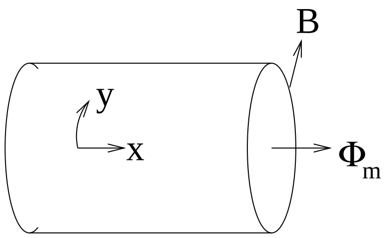
mit der (partikulären) Lösung

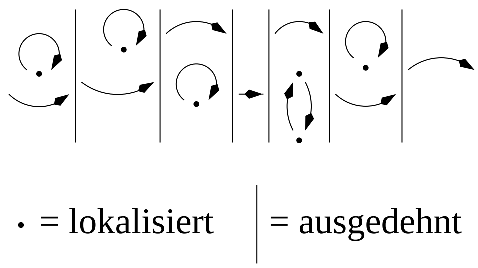
$$\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_x x + k_y y - \epsilon t/\hbar)}\hat{\psi}(x - x_0(t)), \tag{13.23}$$

wobei $\hat{\psi}$ wieder die Wellenfunktion des harmonischen Oszillators ist und

$$x_0 = \frac{cEt}{B} - \frac{\hbar c k_y}{eB}, \quad \frac{\hbar k_x}{m} = \frac{cE}{B}, \quad \epsilon = \hbar\omega_{\rm c}(\nu + \frac{1}{2}) + \frac{c^2E^2}{2mB^2} \tag{13.24}$$

Die Wellenfunktionen verschieben sich in dieser Beschreibung mit der Geschwindigkeit cE/B in x-Richtung. Für freie Elektronen ergibt sich damit wieder die gleiche Geschwindigkeit und der gleiche Beitrag zur Hallleitfähigkeit.





Tatsächlich bewegen sich die Elektronen aber in einem Zufallspotential. Generell gilt für die Komponente P_y des mechanischen Impulses bei Änderung des magnetischen Flusses $\Phi_{\rm m}$ um $\Delta\Phi_{\rm m}$

$$\begin{aligned} P_y(\Delta\Phi_{\rm m})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}e\Delta\Phi_{\rm m}}{\hbar c L_y}y} &= \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c}(A_y + \frac{\Delta\Phi_{\rm m}}{L_y})\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}e\Delta\Phi_{\rm m}}{\hbar c L_y}y} \\ &= \mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}e\Delta\Phi_{\rm m}}{\hbar c L_y}y}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c}A_y\right) = \mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}e\Delta\Phi_{\rm m}}{\hbar c L_y}y}P_y(0). \end{aligned} \tag{13.25}$$

Damit folgt mit einem beliebigen Potential auf dem Zylinder aus

$$H(\Phi_{\rm m})\psi = \epsilon\psi \tag{13.26}$$

auch

$$H(\Phi_{\rm m} + \Delta\Phi_{\rm m})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}e\Delta\Phi_{\rm m}}{\hbar c L_y}y}\psi = \epsilon\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}e\Delta\Phi_{\rm m}}{\hbar c L_y}y}\psi. \tag{13.27}$$

Die Wellenfunktion muss längs des Zylinderumfangs periodisch sein. Dies ist für $\Delta\Phi_{\rm m} = \frac{hc}{e}$ erfüllt. Man erhält also bei Änderung von $\Phi_{\rm m}$ um ein halbes Flussquant bis auf eine Phase $\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}y/L_y}$ die gleichen Eigenfunktionen. Das heißt eine Veränderung von $\Phi_{\rm m}$ um hc/e bewirkt eine Abbildung Eigenfunktion $\to$ Eigenfunktion. Eigenfunktionen im ungeordneten Potential können bereits ohne äußere magnetischen oder elektrischen Felder lokalisiert oder ausgedehnt sein. Bei Anlegen des Magnetfeldes werden die lokalisierten Zustände sich wenig ändern. Bei Variation von $\Phi_{\rm m}$ werden sie sich in sich abbilden. Dagegen werden sich ausgedehnte im wesentlichen in x-Richtung bewegen. Bei vollständiger Besetzung der ausgedehnten Zustände innerhalb eines Landau-Niveaus wird bei Änderung von $\Phi_{\rm m}$ um hc/e sich eine ganze Zahl von Elektronen, in der Regel eins (man stelle sich an einer Stelle einen idealen Draht vor, der freie Elektronenbewegung erlaubt) durch den Querschnitt bewegen. Wenn daher die Fermikante außerhalb des Bereichs der ausgedehnten Zustände liegt, so erhält man in der Tat als Hall-Leitfähigkeit die Anzahl der Landau-Niveaus, deren ausgedehnte Zustände besetzt sind, multipliziert mit e^2/h. Diese Größe wurde wegen ihrer hervorragenden Reproduzierbarkeit inzwischen als Leitwert-Normal eingeführt. Das Inverse wurde zu $h/e^2 = 25812.8\Omega_{\rm K}$ definiert, wobei der Index K für v. Klitzing steht. Die ausgedehnten Zustände liegen in der Regel in der Nähe des Landau-Niveaus ohne Störung, während die weiter entfernten Zustände lokalisiert sind. Geht daher die Fermi-Energie bei Variation des Magnetfeldes durch das Zentrum des Bandes mit den ausgedehnten Zuständen, dann verändert sich die Hallleitfähigkeit; in diesem Bereich erhält man auch einen Beitrag zur Parallel-Leitfähigkeit. Bewegt sich die Fermikante durch den Bereich der lokalisierten Zustände, dann nimmt die Hallleitfähigkeit ihren quantisierten Wert an und die Parallelleitfähigkeit verschwindet.

Ein topologische Argument, das auch für wechselwirkende Systeme gilt, wurde von Avron und Seiler, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 259 gegeben. Die Frage, wie sich die Landau-Niveaus aufspalten und welchen Beitrag diese zum quantisierten Halleffekt liefern, wird von Thouless, Kohmoto, Nightingale und den Nijs, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 405 gegeben.

13.c Gebrochenzahliger quantisierter Halleffekt

Entdeckung durch Tsui, Störmer und Gossard, Phys. Rev. Lett. 48 (1982) 496, Laughlin-Wellenfunktion Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 1395.

Wir bestimmen zunächst nochmals die Wellenfunktionen des freien Elektronengases im starken Magnetfeld ohne elektrisches Feld. Wir verwenden die symmetrische Eichung $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x)$

$$H = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\rm i}\partial_x - \frac{eB}{2c}y\right)^2 + \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\rm i}\partial_y + \frac{eB}{2c}x\right)^2. \tag{13.28}$$

Wir führen nun die Koordinaten

$$(\xi, \eta) = \sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}}(x, y) \tag{13.29}$$

ein, womit sich H in der Form

$$H = \frac{\hbar}{4}\omega_{\rm c}\left((\frac{1}{\rm i}\partial_\xi - \eta)^2 + (\frac{1}{\rm i}\partial_\eta + \xi)^2\right) = \frac{\hbar}{4}\omega_{\rm c}\left(-\partial_\xi^2 - \partial_\eta^2 + \xi^2 + \eta^2 + 2{\rm i}(\eta\partial_\xi - \xi\partial_\eta)\right) \tag{13.30}$$

schreiben lässt und setzen schließlich

$$z = \xi - {\rm i}\eta, z^* = \xi + {\rm i}\eta, \tag{13.31}$$

woraus

$$\partial_\xi = \partial_z + \partial_{z^*}, \quad \partial_\eta = -{\rm i}\partial_z + {\rm i}\partial_{z^*} \tag{13.32}$$

mit

$$\partial_z z = 1, \quad \partial_z z^* = 0, \quad \partial_{z^*} z = 0, \quad \partial_{z^*} z^* = 1. \tag{13.33}$$

folgt. Damit lässt sich der Hamilton-Operator in der Form

$$H = \hbar\omega_{\rm c}(-\partial_z + \frac{1}{2}z^*)(\partial_{z^*} + \frac{1}{2}z) + \frac{1}{2}\hbar\omega_{\rm c} \tag{13.34}$$

schreiben.

Für das unterste Landau-Niveau muss nun gelten

$$(\partial_{z^*} + \frac{1}{2}z)\psi(z, z^*) = 0. \tag{13.35}$$

Daraus folgt

$$\frac{\partial \ln \psi}{\partial z^*} = -\frac{1}{2} z \tag{13.36}$$

mit der Lösung

$$\psi = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2} z z^*} f(z), \tag{13.37}$$

wobei f eine beliebige holomorphe Funktion von z ist. Alle diese Wellenfunktionen gehören zum untersten Landau-Niveau mit $\epsilon = \frac{1}{2}\hbar\omega_{\mathrm{c}}$. Die höheren Landau-Niveaus erhält man durch mehrfaches Anwenden des Aufsteige-Operators

$$\psi_\nu = (-\partial_z + \frac{1}{2} z^*)^\nu (\mathrm{e}^{-\frac{1}{2} z z^*} f(z)) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2} z z^*} (-\partial_z + z^*)^\nu f(z) \tag{13.38}$$

mit Energie $\epsilon_\nu = \hbar\omega_{\mathrm{c}}(\nu + \frac{1}{2})$, da

$$[-\partial_z + \frac{1}{2} z^*, \partial_{z^*} + \frac{1}{2} z] = -1. \tag{13.39}$$

Ein Satz orthogonaler Eigenfunktionen im untersten Landau-Niveau kann damit in der Form

$$\psi_l = z^l \mathrm{e}^{-\frac{1}{2} z z^*} \tag{13.40}$$

geschrieben werden. Laughlin hat nun für den gebrochenzahligen Quantenhall-Effekt die folgende Mehrteilchen-Wellenfunktion vorgeschlagen:

$$\psi(z_1, z_2, ..., z_N) = \prod_{i<j} (z_i - z_j)^m \prod_i \mathrm{e}^{-\frac{1}{2} z_i z_i^*}. \tag{13.41}$$

Für $m = 1$ ist dies die Slater-Determinante = Vandermonde-Determinante

$$\begin{pmatrix} z_1^{N-1} & z_1^{N-2} & ... & z_1 & 1 \\ z_2^{N-1} & z_2^{N-2} & ... & z_2 & 1 \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ z_{N-1}^{N-1} & z_{N-1}^{N-2} & ... & z_{N-1} & 1 \\ z_N^{N-1} & z_N^{N-2} & ... & z_N & 1 \end{pmatrix} = \prod_{i<j} (z_i - z_j) \tag{13.42}$$

für alle Zustände bis $l = N - 1$. Man kann natürlich auf der linken Seite zur Potenz von z_i noch das jeweilige $\mathrm{e}^{-z_i z_i^*/2}$ multiplizieren und erhält dann die N-Teilchen-Wellenfunktion. Da die Elektronen Fermionen sind, muss die Wellenfunktion bei Vertauschung zweier Elektronen ihr Vorzeichen wechseln. Dies ist der Fall für ungerades m. Diese Laughlin-Zustände stellen eine sehr gute Näherung der Mehrteilchen-Wellenfunktion dar, da bei Annäherung zweier Elektronen die Wellenfunktion wie a^m verschwindet, wobei a der Abstand der Elektronen ist. Damit wird der gegenseitigen Abstoßung gut Rechnung getragen.

Wir entnehmen der Wellenfunktion, dass eine Besetzung bis $z^{m(N-1)}$ stattfindet. Das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $(z^* z)^{mN} \mathrm{e}^{-z^* z}$ liegt bei $z^* z = m(N-1) \approx mN$, das heißt bei $x^2 + y^2 = \frac{2\hbar c}{eB} mN$, was einer Kreisfläche $\frac{hc}{eB} mN$ entspricht. Die Maximalzahl von Elektronen auf dieser Fläche ist mN, das heißt der Füllfaktor definiert als die Anzahl der Elektronen N durch die maximal mögliche Elektronenzahl mN beträgt $1/m$. Die Hall-Leitfähigkeit ergibt sich dann zu $\sigma_{\mathrm{H}} = \frac{e^2}{hm}$, da nur der Bruchteil $1/m$ der Elektronen beiträgt. Es wurden $m = 3, 5, 7$ gefunden, aber auch andere Brüche mit ungeraden Nennern. Auf die Erklärung dieser Zustände können wir hier nicht eingehen.

Eine gute weiterführende Übersicht gibt 'The Quantum Hall Effect', Prange und Girvin (Herausgeber), Springer-Verlag 1987.

13.d Zyklotron-Bewegung

Wir können an dieser Stelle auf die Zyklotronbewegung eingehen und uns die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für ein Elektron, $H\psi = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ ansehen. Eine (spezielle) Lösung lässt sich als Gaußsches Wellenpaket schreiben

$$\psi = \mathrm{e}^{-\frac{a}{2} z^2 - \frac{b}{2} z^{*2} - c z z^* + \alpha^* z + \beta z^* + \mathrm{i}\phi} \tag{13.43}$$

Dabei wollen wir erlauben, dass α, β und ϕ von der Zeit abhängen. Die zeitliche Veränderung von α und β bewirkt eine Veränderung des Schwerpunkts des Wellenpakets und gibt damit seine Bewegung wieder. Im Prinzip könnten auch a, b und c von der Zeit abhängen. Dies würde eine Veränderung der Breite des Wellenpakets beschreiben. Solche Bewegungen interessieren hier nicht. Wir wenden nun H und $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ auf ψ an und erhalten

$$\begin{aligned}
(\partial_{z^*} + \frac{1}{2}z)\psi &= (-bz^* - cz + \beta + \frac{1}{2}z)\psi && (13.44) \\
(-\partial_z + \frac{1}{2}z^*)(\partial_{z^*} + \frac{1}{2}z)\psi &= \left((az + cz^* - \alpha^* + \frac{1}{2}z^*)(-bz^* - cz + \beta + \frac{1}{2}z) + c - \frac{1}{2}\right)\psi && (13.45) \\
\frac{\partial}{\partial t}\psi &= (z\dot{\alpha}^* + z^*\dot{\beta} + \mathrm{i}\dot{\phi})\psi. && (13.46)
\end{aligned}$$

Damit folgt dann aus $H\psi = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$

$$\hbar\omega_\mathrm{c}\left((az + cz^* - \alpha^* + \frac{1}{2}z^*)(-bz^* - cz + \beta + \frac{1}{2}z) + c\right) = \mathrm{i}\hbar(z\dot{\alpha}^* + z^*\dot{\beta} + \mathrm{i}\dot{\phi}). \tag{13.47}$$

Die bilinearen Beiträge in z und z^* treten nur auf der linken Seite der Gleichung auf. Es muss daher gelten

$$(az + cz^* + \frac{1}{2}z^*)(-bz^* - cz + \frac{1}{2}z) = 0, \tag{13.48}$$

das heißt einer der beiden Faktoren muss verschwinden. Daher ist entweder $a = 0$, $c = -\frac{1}{2}$ oder $b = 0$, $c = \frac{1}{2}$. Ein normierbares ψ erhält man nur für $c > 0$, da die Beiträge proportional zu z^2 und z^{*2} im Exponenten nicht in allen Richtungen y/x abfallen. Daher müssen wir die zweite Lösung $b = 0$, $c = \frac{1}{2}$ verwenden. Der Koeffizient a ist unbestimmt. Damit die Funktion in allen Richtungen abfällt, muss $|a| < 1$ gelten. Der Grenzfall $|a| = 1$ ergibt in einer Richtung, die von der Phase von a abhängt (a muss nicht reell sein) abgesehen von einem Eichfaktor ebene Wellen, wie wir sie auch früher schon kennengelernt haben. Für das folgende wollen wir aber $a = 0$ wählen, was einen gleichmässigen Abfall des Wellenpakets in alle Richtungen ergibt

$$\psi = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}zz^* + \alpha^* z + \beta z^* + \mathrm{i}\phi}. \tag{13.49}$$

Es bleibt nun für α, β und ϕ die Gleichung

$$\omega_\mathrm{c}\left((z^* - \alpha^*)\beta + \frac{1}{2}\right) = \mathrm{i}(z\dot{\alpha}^* + z^*\dot{\beta} + \mathrm{i}\dot{\phi}) \tag{13.50}$$

oder aufgeteilt in die Koeffizienten von z, z^* und dem konstanten Term

$$\dot{\alpha}^* = 0, \quad \omega_\mathrm{c}\beta = \mathrm{i}\dot{\beta}, \quad \omega_\mathrm{c}(\frac{1}{2} - \alpha^*\beta) = -\dot{\phi} \tag{13.51}$$

zu lösen. Man findet

$$\alpha = \mathrm{const} = \alpha_0, \quad \beta(t) = \beta_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\mathrm{c}t}, \quad \phi = -\frac{1}{2}\omega_\mathrm{c}t + \mathrm{i}\alpha_0^*\beta(t) + \phi_0. \tag{13.52}$$

und

$$\psi = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}zz^* + \alpha_0^* z + \beta(t)z^* - \alpha_0^*\beta(t) - \frac{1}{2}\mathrm{i}\omega_\mathrm{c}t + \mathrm{i}\phi_0}. \tag{13.53}$$

Wir zerlegen nun den Exponenten der Wellenfunktion in seinen Real- und Imaginärteil und finden

$$\psi = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(z-\alpha-\beta)(z^*-\alpha^*-\beta^*) + \frac{1}{2}(z\alpha^* - z^*\alpha + z^*\beta - z\beta^* - \alpha^*\beta + \alpha\beta^*) - \frac{1}{2}\mathrm{i}\omega_\mathrm{c}t}, \tag{13.54}$$

wobei wir den konstanten Faktor $\exp(\frac{1}{2}(\alpha^*\alpha + \beta^*\beta) + \mathrm{i}\phi_0)$ weggelassen haben. Dieser Zerlegung entnehmen wir, dass der Schwerpunkt des Wellenpakets durch

$$z = \alpha + \beta = \alpha_0 + \beta_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\mathrm{c}t} \tag{13.55}$$

gegeben ist. Dieser durchläuft also einen Kreis, dessen Mittelpunkt durch α_0 und dessen Radius (im ξ, η-Raum) durch $|\beta_0|$ gegeben ist, mit der Zyklotronfrequenz ω_c.

14 Magnonen

14.a Ferromagnet

Siehe Hunklinger-Enss: 10.2 Ferromagnetismus S. 355-359

Wir gehen aus von einem Modell wechselwirkender Spins $\mathbf{S}_\mathbf{r}$, die an Gitterplätzen lokalisiert sind (Heisenberg-Modell). Der Hamilton-Operator sei

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{r},\mathbf{d}} \mathbf{S}_\mathbf{r} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} - g\mu_\mathrm{B} \mathbf{H}_0 \cdot \sum_\mathbf{r} \mathbf{S}_\mathbf{r}, \tag{14.1}$$

wobei $\mathbf{d}$ über die nächsten Nachbarn läuft. Da jedes Spin-Produkt in der Summe zweimal vorkommt, haben wir den Faktor $\frac{1}{2}$ eingeführt. Der Operator des Gesamtspins ist

$$\mathbf{S}_\mathrm{tot} = \sum_\mathbf{r} \mathbf{S}_\mathbf{r}. \tag{14.2}$$

Ist J positiv, dann ist es energetisch günstig, wenn sich die Spins alle parallel einstellen. Es ergibt sich ein Zustand mit Gesamtspin NS. Ohne Magnetfeld ist der Zustand $2NS+1$-fach entartet. Ist das Magnetfeld positiv, so ist der Zustand mit maximalem S^z energetisch am günstigsten und man hat für den Grundzustand $|0\rangle$

$$\mathbf{S}_\mathrm{tot} \cdot \mathbf{S}_\mathrm{tot}|0\rangle = NS(NS+1)|0\rangle, \quad S^z_\mathrm{tot}|0\rangle = NS|0\rangle. \tag{14.3}$$

14.a.α Spinwellen-Näherung

Wir betrachten zunächst die Spinwellen-Näherung. Dazu verwenden wir die Bewegungsgleichung

$$\mathrm{i}\hbar\dot{A} = [A, H], \tag{14.4}$$

die aus

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|[A,H]|\psi\rangle \tag{14.5}$$

folgt. Abgesehen von der Termen in der Wechselwirkung, die nicht vom Spin $\mathbf{S}_\mathbf{r}$ abhängen, können wir die Wechselwirkung in der Form

$$\mathbf{S}_\mathbf{r} \cdot \mathbf{f}, \quad \mathbf{f} = -J\sum_\mathbf{d} \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} - g\mu_\mathrm{B}\mathbf{H}_0 \tag{14.6}$$

schreiben. Es folgt dann

$$\mathrm{i}\hbar\dot{S}^\alpha_\mathbf{r} = [S^\alpha_\mathbf{r}, S^\beta_\mathbf{r}]f^\beta = \mathrm{i}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}S^\gamma_\mathbf{r}f^\beta = -\mathrm{i}(\mathbf{S}\times\mathbf{f})^\alpha, \tag{14.7}$$

also

$$\hbar\dot{\mathbf{S}}_\mathbf{r} = \mathbf{S}_\mathbf{r} \times (J\sum_\mathbf{d}\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + g\mu_\mathrm{B}\mathbf{H}_0). \tag{14.8}$$

Der Spin präzessiert um ein effektives Magnetfeld, das sich aus dem angelegten Magnetfeld $\mathbf{H}_0$ und dem Wechselwirkungs-Magnetfeld der Nachbar-Spins zusammensetzt.

Wir wollen nun annehmen, dass das Magnetfeld in z-Richtung ausgerichtet ist, und dass die Spins im Mittel in z-Richtung ausgerichtet sind. Wir ersetzen daher die Faktoren $S^z_\mathbf{r}$ jeweils durch $\langle S^z\rangle$

$$\hbar\dot{S}^x_\mathbf{r} = (Jz\langle S^z\rangle + g\mu_\mathrm{B}H_0)S^y_\mathbf{r} - J\langle S^z\rangle\sum_\mathbf{d} S^y_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}, \tag{14.9}$$

$$\hbar\dot{S}^y_\mathbf{r} = -(Jz\langle S^z\rangle + g\mu_\mathrm{B}H_0)S^x_\mathbf{r} + J\langle S^z\rangle\sum_\mathbf{d} S^x_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}. \tag{14.10}$$

Setzen wir nun ebene Wellen in einem primitiven Gitter an,

$$S^x_\mathbf{r} = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\mathrm{i}\omega t}, \quad S^y_\mathbf{r} = B\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\mathrm{i}\omega t}, \tag{14.11}$$

so folgt

$$\begin{aligned}
-\mathrm{i}\hbar\omega A &= \hbar\omega_{\mathbf{k}} B, && (14.12)\\
-\mathrm{i}\hbar\omega B &= -\hbar\omega_{\mathbf{k}} A, && (14.13)\\
\gamma_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{z}\sum_{\mathbf{d}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}}, && (14.14)\\
\hbar\omega_{\mathbf{k}} &= Jz\langle S^z\rangle(1-\gamma_{\mathbf{k}}) + g\mu_{\mathrm{B}} H_0, && (14.15)
\end{aligned}$$

wobei $\omega_{\mathbf{k}}$ die Eigenfrequenzen der Magnonen sind. Für kleines $\mathbf{k}$ ist

$$z(1-\gamma_{\mathbf{k}}) \approx \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{d}}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{d})^2, \tag{14.16}$$

so dass man Anregungsenergien

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} \approx g\mu_{\mathrm{B}} H_0 + \frac{J\langle S^z\rangle}{2}\sum_{\mathbf{d}}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{d})^2 \tag{14.17}$$

findet, was sich für ein einfach kubisches, kubisch raumzentriertes und kubisch flächenzentriertes Gitter der Gitterkonstante a auf

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = g\mu_{\mathrm{B}} H_0 + J\langle S^z\rangle(ka)^2 \tag{14.18}$$

reduziert, was wir auch

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = g\mu_{\mathrm{B}} H_0 + \hbar^2 k^2/(2m^*) \tag{14.19}$$

mit $J\langle S^z\rangle a^2 = \hbar^2/(2m^*)$ schreiben können.

14.a.β Behandlung mit der Holstein-Primakoff-Transformation

Holstein und Primakoff drücken die Spin-Operatoren durch Bose-Operatoren $a^\dagger_{\mathbf{r}}$ und $a_{\mathbf{r}}$ aus

$$\begin{aligned}
S^+_{\mathbf{r}} &= S^x_{\mathbf{r}} + iS^y_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}(1-a^\dagger_{\mathbf{r}}a_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}a_{\mathbf{r}}, && (14.20)\\
S^-_{\mathbf{r}} &= S^x_{\mathbf{r}} - iS^y_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}a^\dagger_{\mathbf{r}}(1-a^\dagger_{\mathbf{r}}a_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}, && (14.21)\\
S^z_{\mathbf{r}} &= S - a^\dagger_{\mathbf{r}}a_{\mathbf{r}}. && (14.22)
\end{aligned}$$

Man beachtet zunächst, dass $S^+_{\mathbf{r}}$ und $S^-_{\mathbf{r}}$ hermitesch adjungiert zueinander sind. Man überzeugt sich davon, dass diese Operatoren die richtigen Eigenschaften haben. Für den Kommutator

$$\begin{aligned}
[S^z, S^+] &= (S-a^\dagger a)\sqrt{2S}(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}a - \sqrt{2S}(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}a(S-a^\dagger a)\\
&= \sqrt{2S}(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}[S-a^\dagger a, a] = \sqrt{2S}(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}a = S^+. && (14.23)
\end{aligned}$$

Dabei haben wir verwendet, dass $(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}$ mit $a^\dagger a$ kommutiert, da ersteres nur von $a^\dagger a$ abhängt. Ähnlich zeigt man $[S^z, S^-] = -S^-$. Weiter findet man

$$\begin{aligned}
S^-S^+ &= 2Sa^\dagger(1-a^\dagger a/(2S))a = 2Sa^\dagger a - a^\dagger a^\dagger aa, && (14.24)\\
S^+S^- &= 2S(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}aa^\dagger(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}\\
&= 2S(1-a^\dagger a/(2S))(1+a^\dagger a) = 2S + (2S-2)a^\dagger a - a^\dagger a^\dagger aa. && (14.25)
\end{aligned}$$

Dabei haben wir verwendet, dass $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$ ist und dies mit $(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}$ kommutiert. Hieraus lesen wir ab, dass

$$\begin{aligned}
[S^+, S^-] &= 2S - 2a^\dagger a = 2S^z, && (14.26)\\
\mathbf{S}\cdot\mathbf{S} &= \frac{1}{2}(S^+S^- + S^-S^+) + S^{z2}\\
&= S + (2S-1)a^\dagger a - a^\dagger a^\dagger aa + (S-a^\dagger a)^2 = S(S+1). && (14.27)
\end{aligned}$$

Damit ist der Nachweis erbracht, dass man die Spin-Operatoren auf diese Weise darstellen kann. Wir haben hier nur die Spinkomponenten des Spins am gleichen Ort betrachtet. Es ist offensichtlich, dass diese an verschiedenen Orten kommutieren, da auch die zugehörigen Bose-Operatoren kommutieren. Wir beobachten, dass aber die Anwendung der Bose-Operatoren auf $a^\dagger a \le 2S$ beschränkt ist, da sonst die Wurzel aus einem negativen Ausdruck zu ziehen ist. In Näherungen wird dies nicht immer berücksichtigt, so dass diese dann nur für $\langle a^\dagger a\rangle \ll 2S$ gültig sind.

Für sehr niedrige Temperaturen kann man

$$S^+_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}a, \quad S^-_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}a^\dagger \tag{14.28}$$

approximieren. Vernachlässigt man im Produkt

$$S^z_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{r}'} = (S - a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}})(S - a^\dagger_{\mathbf{r}'} a_{\mathbf{r}'}) \approx S^2 - S(a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}} + a^\dagger_{\mathbf{r}'} a_{\mathbf{r}'}) \tag{14.29}$$

den Anteil $a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}} a^\dagger_{\mathbf{r}'} a_{\mathbf{r}'}$, das heißt überall im Hamilton-Operator Beiträge, die Produkte aus vier Bosonen-Operatoren enthalten, so bleibt

$$\begin{aligned} H &= -\frac{J}{2}\sum_{\mathbf{r},\mathbf{d}}\left(\frac{1}{2}(S^+_{\mathbf{r}} S^-_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + S^-_{\mathbf{r}} S^+_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}) + S^z_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}\right) - g\mu_{\mathrm{B}} H_0 \sum_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{r}} \\ &= -\frac{JS}{2}\sum_{\mathbf{rd}}\left(a^\dagger_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} a_{\mathbf{r}} + a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + S - a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}} - a^\dagger_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} a_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}\right) - g\mu_{\mathrm{B}} H_0 \sum_{\mathbf{r}}(S - a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}}) \end{aligned} \tag{14.30}$$

Wir können nun die Bose-Operatoren wieder der Fourier-Transformation unterwerfen

$$a^\dagger_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}, \quad a_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \tag{14.31}$$

und erhalten

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \left(JzS(1-\gamma_{\mathbf{k}}) + g\mu_{\mathrm{B}} H_0\right) \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad E_0 = -\frac{J}{2} NzS^2 - g\mu_{\mathrm{B}} H_0 NS. \tag{14.32}$$

Durch Berücksichtigung der Terme vierter Ordnung in den Bose-Operatoren kann man dann Korrekturen bei höheren Temperaturen bestimmen.

14.a.γ Spezifische Wärme und Magnetisierung

Wir wollen noch die Energie und die Magnetisierung bei tiefen Temperaturen und ohne äußeres Feld, $H_0 = 0$, betrachten. Für die Energie ergibt sich

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1} = E_0 + \frac{V_{\mathrm{P}}}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1}. \tag{14.33}$$

Mit $\mathrm{d}^3k = 4\pi k^2 \mathrm{d}k$ und der Substitution $z = \beta\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \beta\hbar^2 k^2/(2m^*)$ folgt

$$E = E_0 + \frac{V_{\mathrm{P}} k_{\mathrm{B}} T (2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{(2\pi)^2\hbar^3}\int \frac{z^{3/2}\mathrm{d}z}{\mathrm{e}^z - 1} = E_0 + \frac{\Gamma(5/2)\zeta(5/2) V_{\mathrm{P}} k_{\mathrm{B}} T (2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{(2\pi)^2\hbar^3}. \tag{14.34}$$

Der Beitrag zur spezifischen Wärme ergibt sich zu

$$C_{\mathrm{V}} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = \frac{5\Gamma(5/2)\zeta(5/2) V_{\mathrm{P}} k_{\mathrm{B}} (2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{8\pi^2\hbar^3}. \tag{14.35}$$

Die spontane Magnetisierung ergibt sich ganz analog zu

$$\begin{aligned} M(T) &= g\mu_{\mathrm{B}}\langle S^z_{\mathrm{tot}}\rangle = g\mu_{\mathrm{B}}(NS - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}) \\ &= g\mu_{\mathrm{B}}(NS - \frac{V_{\mathrm{P}}(2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{(2\pi)^2\hbar^3}\int \frac{z^{1/2}\mathrm{d}z}{\mathrm{e}^z - 1}) \\ &= M(0) - g\mu_{\mathrm{B}}\frac{\Gamma(3/2)\zeta(3/2) V_{\mathrm{P}}(2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{(2\pi)^2\hbar^3)^{3/2}}. \end{aligned} \tag{14.36}$$

Es gilt also sowohl für die spezifische Wärme wie auch für die Abnahme der Magnetisierung ein $T^{3/2}$-Gesetz.

Dabei ist $\zeta(\nu)$ die Riemannsche ζ-Funktion

$$\zeta(\nu) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^\nu} \tag{14.37}$$

Der Zusammenhang ergibt sich auf folgende Weise

$$\int_0^\infty \frac{z^\nu \mathrm{d}z}{\mathrm{e}^z - 1} = \int_0^\infty \frac{z^\nu \mathrm{e}^{-z} \mathrm{d}z}{1-\mathrm{e}^{-z}} = \int_0^\infty z^\nu \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-nz} \mathrm{d}z = \Gamma(\nu+1) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{\nu+1}} = \Gamma(\nu+1)\zeta(\nu+1). \tag{14.38}$$

Man findet speziell $\Gamma(3/2)\zeta(3/2) = 2.315$, $\Gamma(5/2)\zeta(5/2) = 1.783$.

14.b Antiferromagnet

Siehe Hunklinger-Enss: 10.3 Antiferromagnetismus S. 361-363

14.b.α Spinwellen-Näherung

Wir betrachten nun ein Gitter mit Spins, zwischen denen eine antiferromagnetische Kopplung besteht. Wir wollen annehmen, dass man das Gitter in zwei Untergitter A und B zerlegen kann, so dass nur jeweils eine Wechselwirkung zwischen Spins auf zwei verschiedenen Untergittern besteht. Das heißt im Hamilton-Operator

$$H = J \sum_{\mathbf{r},\mathbf{d}} \mathbf{S}_\mathbf{r} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} - g_A H_{0A} \mu_\mathrm{B} \sum_{\mathbf{r}\in A} S^z_\mathbf{r} - g_B H_{0B} \mu_\mathrm{B} \sum_{\mathbf{r}\in B} S^z_\mathbf{r} \tag{14.39}$$

wollen wir annehmen, dass alle Orte $\mathbf{r}$ auf dem Untergitter A, alle Orte $\mathbf{r}+\mathbf{d}$ aber auf dem Untergitter B liegen. Als Beispiel kann man sich vorstellen, dass auf einem einfachen Gitter mit den Gitterpunkten $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ die Gitterpunkte mit geradem $n_1+n_2+n_3$ zum Untergitter A, die mit ungeradem zum Untergitter B gehören. Auf einem zentrierten Gitter gehören etwa die mit den Gitterpunkten $n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ zu A, die mit $(n_1+1/2)\mathbf{a}_1 + (n_2+1/2)\mathbf{a}_2 + (n_3+1/2)\mathbf{a}_3$ zu B. Ein flächenzentriertes Gitter ist nicht geeignet.

Wir nehmen nun an, dass die Spins auf dem Untergitter A vorwiegend nach oben, die auf dem Untergitter B vorwiegend nach unten ausgerichtet sind auf Grund der antiferromagnetischen Wechselwirkung und äußerer (fiktiver) Magnetfelder $H_A \geq 0$, $H_B \leq 0$.

Wir führen nun wieder die Spinwellen-Näherung durch. Mit $S^+ = S^x + \mathrm{i}S^y$ folgt dann

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} S^+_{A\mathbf{r}} = (-Jz\langle S^z_b\rangle + g_A\mu_\mathrm{B} H_{0A}) S^+_{A\mathbf{r}} + J\langle S^z_A\rangle \sum_\mathbf{d} S^+_{B\mathbf{r}+\mathbf{d}}, \tag{14.40}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} S^+_{B\mathbf{r}} = (-Jz\langle S^z_a\rangle + g_B\mu_\mathrm{B} H_{0B}) S^+_{B\mathbf{r}} + J\langle S^z_B\rangle \sum_\mathbf{d} S^+_{A\mathbf{r}+\mathbf{d}}. \tag{14.41}$$

Die Bestimmung der Anregungsfrequenzen für die ebenen Wellen reduziert sich dann auf die Bestimmung der Eigenwerte von

$$\begin{pmatrix} -Jz\langle S^z_b\rangle + g_A\mu_\mathrm{B} H_{0A} & Jz\langle S^z_a\rangle\gamma_\mathbf{k} \\ Jz\langle S^z_b\rangle\gamma_\mathbf{k} & -Jz\langle S^z_a\rangle + g_B\mu_\mathrm{B} H_{0B} \end{pmatrix}. \tag{14.42}$$

Speziell ohne äußeres Feld und für $\langle S^z_b\rangle = -\langle S^z_a\rangle$ ergibt sich

$$\hbar\omega_\mathbf{k} = +Jz\langle S^z_a\rangle\sqrt{1-\gamma^2_\mathbf{k}}. \tag{14.43}$$

Für kleine $\mathbf{k}$ folgt in diesem Fall aus dem ferromagnetischen Analogon $JSz(1-\gamma_\mathbf{k}) = \hbar^2k^2/(2m^*)$ für den antiferromagnetischen Fall $J\langle S^z_a\rangle\sqrt{1-\gamma^2_\mathbf{k}} = \hbar c^* k$, also eine lineare Dispersion mit der Magnonengeschwindigkeit c^*.

14.b.β Holstein-Primakoff-Transformation

Wir verwenden auf dem Untergitter A wieder die Darstellung (14.20-14.22) für die Spins, auf dem Untergitter B aber wegen der anderen Orientierung die Darstellung

$$
\begin{aligned}
S^+_{\mathbf{r}} &= S^x_{\mathbf{r}} + \mathrm{i}S^y_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}b^\dagger_{\mathbf{r}}(1 - b^\dagger_{\mathbf{r}}b_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}, && (14.44)\\
S^-_{\mathbf{r}} &= S^x_{\mathbf{r}} - \mathrm{i}S^y_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}(1 - b^\dagger_{\mathbf{r}}b_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}b_{\mathbf{r}}, && (14.45)\\
S^z &= b^\dagger_{\mathbf{r}}b_{\mathbf{r}} - S. && (14.46)
\end{aligned}
$$

Man überzeugt sich leicht, dass auch hier die Kommutator-Relationen und das Quadrat des Spins die richtigen Werte ergeben. Wir führen wieder die harmonische Näherung durch und erhalten

$$
\begin{aligned}
H &= JS\sum_{\mathbf{r},\mathbf{d}}\left(a_{\mathbf{r}}b_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + a^\dagger_{\mathbf{r}}b^\dagger_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} - S + a^\dagger_{\mathbf{r}}a_{\mathbf{r}} + b^\dagger_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}b_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}\right)\\
&\quad - g_A H_{0A}\mu_{\mathrm{B}}\sum_{\mathbf{r}\in A}(S - a^\dagger_{\mathbf{r}}a_{\mathbf{r}}) + g_B H_{0B}\mu_{\mathrm{B}}\sum_{\mathbf{r}\in B}(S - b^\dagger_{\mathbf{r}}b_{\mathbf{r}}). \qquad (14.47)
\end{aligned}
$$

Wir führen jetzt wieder die Fourier-Transformation (14.31) und analog

$$
b^\dagger_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}}, \quad b_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{b}_{\mathbf{k}} \qquad (14.48)
$$

durch. Dann lässt sich der Hamilton-Operator

$$
\begin{aligned}
H &= E_0 + JSz\sum_{\mathbf{k}}\left(\gamma_A\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} + \gamma_B\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}}\hat{a}_k\hat{b}_{-\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{k}}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}b^\dagger_{-\mathbf{k}}\right), && (14.49)\\
E_0 &= JS^2z(1 - \gamma_A - \gamma_B), \quad \gamma_A = 1 + \frac{g_A H_{0A}\mu_{\mathrm{B}}}{JSz}, \quad \gamma_B = 1 - \frac{g_B H_{0B}\mu_{\mathrm{B}}}{JSz}. && (14.50)
\end{aligned}
$$

schreiben.

Um Grundzustandsenergie und Anregungsenergien zu finden, muss man den Hamilton-Operator diagonalisieren. Dies geschieht durch eine geeignete unitäre Transformation. Wir setzen

$$
\begin{aligned}
\hat{a}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}\beta^\dagger_{-\mathbf{k}}, && (14.51)\\
\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\alpha^\dagger_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}\beta_{-\mathbf{k}}, && (14.52)\\
\hat{b}_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\beta_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}\alpha^\dagger_{\mathbf{k}}, && (14.53)\\
\hat{b}^\dagger_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\beta^\dagger_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}. && (14.54)
\end{aligned}
$$

Wir setzen der Einfachheit halber voraus, dass u und v reell sind. Die Operatoren α und β werden als Bose-Operatoren vorausgesetzt. Man überzeugt sich, dass das äquivalent ist dazu, dass auch a und b Bose-Operatoren sind. Voraussetzung ist allerdings, dass $u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}} = 1$ gilt. Diese Operatoren setzen wir nun in den Hamilton-Operator ein. Man erhält dann

$$
\begin{aligned}
H &= E_0 + JSz\sum_{\mathbf{k}}\left(\gamma_A v^2_{\mathbf{k}} + \gamma_B v^2_{\mathbf{k}} - 2\gamma_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\right)\\
&+ JSz\sum_{\mathbf{k}}\left(\gamma_A u^2_{\mathbf{k}} + \gamma_B v^2_{\mathbf{k}} - 2\gamma_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\right)\alpha^\dagger_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}\\
&+ JSz\sum_{\mathbf{k}}\left(\gamma_A v^2_{\mathbf{k}} + \gamma_B u^2_{\mathbf{k}} - 2\gamma_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\right)\beta^\dagger_{-\mathbf{k}}\beta_{-\mathbf{k}}\\
&+ JSz\sum_{\mathbf{k}}\left(-(\gamma_A + \gamma_B)u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}}(u^2_{\mathbf{k}} + v^2_{\mathbf{k}})\right)(\alpha^\dagger_{\mathbf{k}}\beta^\dagger_{-\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}}\beta_{-\mathbf{k}}). \qquad (14.55)
\end{aligned}
$$

Wir verlangen nun, dass der Koeffizient bei den anormalen Termen $\alpha^\dagger\beta^\dagger + \alpha\beta$ verschwindet,

$$
-(\gamma_A + \gamma_B)u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}}(u^2_{\mathbf{k}} + v^2_{\mathbf{k}}) = 0, \qquad (14.56)
$$

woraus mit $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \quad u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\gamma_A + \gamma_B}{2\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \tag{14.57}$$

$$\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\left(\frac{\gamma_A + \gamma_B}{2}\right)^2 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}, \tag{14.58}$$

$$(\gamma_A + \gamma_B)\frac{u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2}{2} - 2\gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tag{14.59}$$

folgt. Damit reduziert sich der Hamilton-Operator auf

$$\begin{aligned} H &= E_0 + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\gamma_A + \gamma_B}{2} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \\ &+ JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\gamma_A - \gamma_B}{2} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\gamma_B - \gamma_A}{2} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \tag{14.60}$$

Falls kein äußeres Magnetfeld anliegt, reduzieren sich mit $\gamma_A = \gamma_B = 1$ die Anregungsenergien auf $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = JSz\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}$ und für kleine k hat man $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \hbar c^* k$.

14.b.γ Spezifische Wärme und Untergittermagnetisierung

Unter der Annahme, dass keine äußeren Magnetfelder anliegen, wollen wir nun Energie und Untergitter-Magnetisierung bestimmen. Wir beobachten zunächst, dass in diesem Fall $\gamma_A = \gamma_B = 1$. Damit folgt

$$\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}. \tag{14.61}$$

Wir waren bei der Betrachtung ausgegangen von einem Zustand, in dem die Spins auf A nach oben, die auf B nach unten ausgerichtet sind. Solch einen Zustand bezeichnet man als Néel-Zustand. Tatsächlich ist der Grundzustand ein komplizierterer Zustand. Der hier berechnete Zustand stellt eine bessere Näherung dar, was man schon daran erkennt, dass seine Energie E_{g} niedriger als die Energie E_0 des Néel-Zustandes liegt,

$$E_{\mathrm{g}} = E_0 - JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}\right). \tag{14.62}$$

Die Magnetisierung des Untergitters A ergibt sich zu

$$M_A^z = g_A \mu_{\mathrm{B}} \sum_{\mathbf{k}} (S - \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle) = g_A \mu_{\mathrm{B}} NS - g_A \mu_{\mathrm{B}} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = g_A \mu_{\mathrm{B}} N(S + \frac{1}{2}) - \frac{g_A \mu_{\mathrm{B}}}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}}, \tag{14.63}$$

wobei wir $\hat{a}^\dagger \hat{a} = (u\alpha^\dagger - v\beta)(u\alpha - v\beta^\dagger)$ verwendet haben. Der Beitrag $(-v\beta)(-v\beta^\dagger)$ ergibt das v^2. Sie ist gegenüber dem des Néel-Zustands reduziert.

Zur spezifischen Wärme brauchen wir keine neue Rechnung anstellen. Wegen der linearen Dispersion wird die Rechnung wie bei akustischen Phononen durchgeführt und ergibt einen Beitrag zur spezifischen Wärme proportional zu T^3. Zu beachten ist, dass es zwei Magnonenäste an Stelle von drei akustischen Phononen-Ästen gibt.