Die „Fourier-Operation"

1 Worum geht es?

Bei der **systematischen Behandlung von Gitterschwingungen** mussten wir folgendes LGS lösen[1]

$$\omega^2 A_{n,\alpha}^k = \sum_{n',\beta,k'} \frac{\phi_{n,n';\alpha,\beta}^{k,k'}}{\sqrt{M_k M_{k'}}} A_{n',\beta}^{k'} \tag{1}$$

Dieses ergab sich aus der Newtonschen Bewegungsgleichung nach Einsetzen des Ansatzes $u_{n,\alpha}^k(t) = \frac{A_{n,\alpha}^k}{\sqrt{M_k}} e^{-i\omega t}$. Die Koeffizienten sind gegeben durch (Harmonische Näherung):

$$\phi_{n,n';\alpha,\beta}^{k,k'} = \left. \frac{\partial^2 V_{\mathrm{ii}}^{\mathrm{eff}}}{\partial u_{n,\alpha}^k \partial u_{n',\beta}^{k'}} \right|_{\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0}} \tag{2}$$

Die Indizes sind analog zu denen aus der Vorlesung gewählt.

Bei (1) handelt es sich um ein LGS mit NMd Gleichungen. Um die Dimension des Systems, die wegen der Anzahl an Elementarzellen N enorm groß wird, zu reduzieren, transformieren wir sowohl die Koeffizientenmatrix ϕ als auch die mit $\sqrt{M_k}$ gewichteten Schwingungsamplituden $\boldsymbol{A}_n^k$. Wir werden sehen, dass die Transformation dadurch ermöglicht wird, dass der Tensor der Kraftkonstanten nicht von den absoluten Positionen im Gitter sondern nur vom relativen Abstand abhängt (Translationsinvarianz):

$$\phi_{n,n';\alpha,\beta}^{k,k'} = \phi_{\alpha,\beta}^{k,k'}(\boldsymbol{R}_n^{(0)} - \boldsymbol{R}_{n'}^{(0)}) \tag{3}$$

Betrachten wir nun die Transformation aus der VL ([TKM1], 4.12.12):

$$\underline{D_{a,\beta}^{k,k'}(\boldsymbol{q}) \to \phi_{n,n';\alpha,\beta}^{k,k'}}: \quad \phi_{n,n';\alpha,\beta}^{k,k'} = \frac{\sqrt{M_k M_{k'}}}{N} \sum_{\boldsymbol{q}\in 1.\mathrm{BZ}} e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{R}_n^{(0)} - \boldsymbol{R}_{n'}^{(0)})} D_{a,\beta}^{k,k'}(\boldsymbol{q}) \tag{4}$$

Und die Rücktransformation:

$$\underline{\phi_{n,n';\alpha,\beta}^{k,k'} \to D_{a,\beta}^{k,k'}(\boldsymbol{q})}: \quad D_{\alpha,\beta}^{k,k'}(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_k M_{k'}}} \sum_{n'} e^{-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{R}_n^{(0)} - \boldsymbol{R}_{n'}^{(0)})} \phi_{n,n';\alpha,\beta}^{k,k'} \tag{5}$$

Es fällt auf, dass es sich weder um eine Fourierreihe noch um eine Fouriertransformation in der „normalen" Form handelt.[2] Die Exponentialfunktionen lassen die Transformation jedoch „Fourier-ähnlich" aussehen. Um was handelt es sich also?
Um diese Frage zu beantworten, wird im Folgenden sowohl (4) als auch (5) bewiesen. Dazu kann es hilfreich sein, sich an die „Entwicklung nach orthogonalen Funktionen" zu erinnern.[3]

[1] s. [TKM1], VL am 4.12.12
[2] Eine Überprüfung der Transformation ist möglich, indem man (4) in (5) einsetzt und umgekehrt. Dazu benötigt man sowohl (10) als auch (12); s. unten.
[3] s. z. B. [Nol11] Kap. 2.3.5 oder [Jac06] Kap. 2.8 sowie [Nol11] Kap. 4.3.6

2 Kontinuierliche Größen

Wir betrachten zunächst den Fall kontinuierlicher Variablen $\boldsymbol{r}$ und $\boldsymbol{r}'$ und eine skalare Größe $A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$, die nur von der Differenz der Variablen abhängt:

$$A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = A(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

Wir wollen zunächst zeigen, dass

$$\int d^d r \int d^d r'\, u^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) A(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') u(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{p}') = A(\boldsymbol{p})\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{6}$$

gilt, falls

$$u(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) = \mathcal{N} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{7}$$

Dabei ist $\mathcal{N}$ eine Normierungskonstante, die so zu wählen ist, dass die Funktionen $u(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$, nach denen entwickelt wird, orthonormiert sind.

<u>Beweis:</u>

$$\begin{aligned}\int d^d r \int d^d r'\, u^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) A(\underbrace{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}_{=:\boldsymbol{r}''}) u(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{p}') &= \mathcal{N}^2 \int d^d r'' A(\boldsymbol{r}'') e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}''} \underbrace{\int d^d r' e^{i(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}'}}_{=(2\pi)^d\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')} \\ &= \underbrace{\mathcal{N}^2(2\pi)^d}_{:=1} \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \int d^d r'' A(\boldsymbol{r}'') e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}''} \\ &= \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') A(\boldsymbol{p}) \qquad \blacksquare\end{aligned}$$

Im letzten Schritt taucht die Fouriertransformierte $\mathcal{F}\{A(\boldsymbol{r})\}(\boldsymbol{p}) = A(\boldsymbol{p})$ auf. Bei kontinuierlichen Variablen (Ort und Impuls) hilft uns die Fouriertransformation also weiter, wenn eine Größe lediglich vom relativen Abstand $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$ und nicht von den absoluten Orten abhängt.

3 Diskrete Größen

Wir wenden uns nun der eigentlich interessierenden Transformationen zu. Um die Notation übersichtlicher zu gestalten, werden hier die Indizes von ϕ und $\boldsymbol{A}$ sowie die (0) im Exponenten von $\boldsymbol{R}_n$ weggelassen. Wir betrachten eine Größe, für die

$$A_{n,n'} = A(\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_{n'}) \tag{8}$$

gelten soll. Die Besonderheit liegt hier darin, dass wir im Realraum nur die Bravais-Gitterplätze zulassen. Typischerweise sind entweder beide Größen kontinuierlich (→Fouriertransformation) bzw. nur eine von beiden diskret (→Fourier-Reihe).
Analog zu obiger Vorgehensweise erwarten wir wieder einen Zusammenhang folgender Form, dieses Mal mit Summen:

$$\sum_{n,n'} u^*_{m,n} A_{n,n'} u_{n',m'} = U^\dagger A U = A_m \delta_{m,m'} \tag{9}$$

Man kann sich das folgendermaßen vorstellen: Gesucht wird die Transformationsmatrix U mit den Einträgen $u_{n,m}$, welche die zu transformierende Größe, deren mögliche Werte $A_{n,n'}$ in der Matrix A zusammengefasst sind, diagonalisiert. Eine solche Transformation sollte unitär sein, weswegen die Inverse gleich der Adjungierten ist, also $U^{-1} = U^{\dagger}$. Nutzen wir nun (8) aus und versuchen es wieder mit $u_{n,m} = \mathcal{N} e^{i\boldsymbol{p}_m \cdot \boldsymbol{R}_n}$ als Entwicklungsfunktionen:

$$
\begin{aligned}
(9) &= \mathcal{N}^2 \sum_{n,n'} e^{-i\boldsymbol{p}_m \cdot \boldsymbol{R}_n} A(\underbrace{\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_{n'}}_{=:\boldsymbol{R}_l}) e^{i\boldsymbol{p}_{m'} \cdot \boldsymbol{R}_{n'}} \\
&= \mathcal{N}^2 \sum_{n',l} e^{-i\boldsymbol{p}_m \cdot (\boldsymbol{R}_l + \boldsymbol{R}_{n'})} A(\boldsymbol{R}_l) e^{i\boldsymbol{p}_{m'} \cdot \boldsymbol{R}_{n'}} \\
&= \mathcal{N}^2 \sum_{l} e^{-i\boldsymbol{p}_m \cdot \boldsymbol{R}_l} A(\boldsymbol{R}_l) \sum_{n'} e^{i(\boldsymbol{p}_{m'} - \boldsymbol{p}_m) \cdot \boldsymbol{R}_{n'}}
\end{aligned}
$$

Um den letzten Schritt nachvollziehen zu können, müssen wir noch die **Orthonormalität** der $u_{n,m}$ beweisen. Bislang war es üblich (z. B. in der Quantenmechanik), dass die Orthonormalitätsbedingung durch ein Integral ausgedrückt wird, da der Ort kontinuierlich ist. Hier sind nur diskrete Werte, nämlich die Gitterpunkte, für den Ort zugelassen; also benötigen wir hier auch eine Summe:

$$
\frac{1}{N} \sum_{n'} e^{i(\boldsymbol{p}_{m'} - \boldsymbol{p}_m) \cdot \boldsymbol{R}_{n'}} = \delta_{m,m'} \quad \text{bzw.} \quad \frac{1}{N} \sum_{n} e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{R}_n} = \delta_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{0}} \tag{10}
$$

Es gilt $\boldsymbol{R}_n = n_1 \boldsymbol{a}_1 + n_2 \boldsymbol{a}_2 + n_3 \boldsymbol{a}_3$ und somit:

$$
\begin{aligned}
\sum_{n} e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{R}_n} &= \sum_{n_1} \left(e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{a}_1}\right)^{n_1} \sum_{n_2} \left(e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{a}_2}\right)^{n_2} \sum_{n_3} \left(e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{a}_3}\right)^{n_3} \\
&= \sum_{i=1}^{3} \sum_{n_i=1}^{N_i} \left(e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{a}_i}\right)^{n_i}
\end{aligned}
$$

Dabei ist N_i die Systemlänge des Festkörpers in Richtung i in Einheiten der Gitterkonstanten. Die folgende geometrische Reihe

$$
\sum_{k=m}^{n} a^k = \frac{a^{n+1} - a^m}{a - 1} \qquad \text{für } a \neq 1
$$

und das bereits vom Bloch-Theorem bekannte Ergebnis $e^{iN_i \boldsymbol{p} \boldsymbol{a}_i} = 1$ helfen uns weiter. Für $\boldsymbol{p} \neq \boldsymbol{0}$ gilt:

$$
\sum_{n_i=1}^{N_i} \left(e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{a}_i}\right)^{n_i} = \frac{\left(e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{a}_i}\right)^{N_i+1} - e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{a}_i}}{e^{i\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{a}_i} - 1} = 0
$$

Für $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}$ ergibt die Summe $N = N_1 N_2 N_3$.

■

Damit erhält man

$$\mathcal{N}^2 N \delta_{m,m'} \sum_l e^{-i\boldsymbol{p}_m \cdot \boldsymbol{R}_l} A(\boldsymbol{R}_l) = A(\boldsymbol{p}_m)\delta_{m,m'}$$

und nach Koeffizientenvergleich:

$$\boxed{A(\boldsymbol{p}_m) = \mathcal{N}^2 N \sum_l e^{-i\boldsymbol{p}_m \cdot \boldsymbol{R}_l} A(\boldsymbol{R}_l)} \tag{11}$$

Wir benötigen allerdings auch die Rücktransformation. Diese erhält man, indem man mit dem Komplex-Konjugierten multipliziert und anschließend summiert:

$$\sum_m e^{i\boldsymbol{p}_m \cdot \boldsymbol{R}_n} A(\boldsymbol{p}_m) = \mathcal{N}^2 N \sum_{l,m} e^{i\boldsymbol{p}_m \cdot (\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_l)} A(\boldsymbol{R}_l) = \mathcal{N}^2 N \sum_l A(\boldsymbol{R}_l) \sum_m e^{i\boldsymbol{p}_m \cdot (\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_l)}$$

Dazu benötigen wir noch die **Vollständigkeit**:

$$\frac{1}{N} \sum_m e^{i\boldsymbol{p}_m \cdot (\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_l)} = \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{p} \in 1.\mathrm{BZ}} e^{i\boldsymbol{p}_m \cdot (\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_l)} = \delta_{n,l} \tag{12}$$

Wir beweisen dies exemplarisch für eine Dimension, wobei dann

$$p_m = \frac{m}{N}\frac{2\pi}{a} \qquad \text{und} \qquad R = na$$

gilt. Die Summe läuft von $m = 0$ bis $m = N - 1$; die Anzahl an Zuständen innerhalb der ersten BZ entspricht der Anzahl an Elementarzellen N. Für $n \neq m$:

$$\sum_{m=0}^{N-1} \left(e^{i\frac{2\pi}{N}(n-l)}\right)^m = 0$$

Man kann hier wieder die geometrische Reihe (3) verwenden, wenn man berücksichtigt, dass $\exp(\frac{2\pi}{N}(n-l)) = \exp(iNp_{n-l}a) = 1$. Für $n = l$ ergibt sich offensichtlich genau N. Damit ist nun auch geklärt, wie die Rücktransformation funktioniert:

$$\boxed{A(\boldsymbol{R}_n) = \frac{1}{\mathcal{N}^2 N^2} \sum_m e^{i\boldsymbol{p}_m \cdot \boldsymbol{R}_n} A(\boldsymbol{p}_m)} \tag{13}$$

Die Summe läuft über die erste Brillouin -Zone, sodass man statt $\sum_m$ auch $\sum_{\boldsymbol{p} \in 1.\mathrm{BZ}}$ schreiben kann.

4 Anwendung auf Gitterschwingungen

Übertragen auf unsere eigentliches Problem bedeutet das: Die Transformationen (4) und (5) ergeben sich aus den nun hergeleiteten allgemeinen Formen, indem man folgende Wahl für die Normierungskonstante trifft:

$$\mathcal{N}^2 := \frac{1}{\sqrt{M_k M_{k'}} N} \tag{14}$$

<u>Fazit:</u>
Man kann $A^k_{n,\alpha}$ und $\phi^{k,k'}_{n,n';\alpha,\beta}$ unter Ausnutzung der makroskopischen Symmetrie (Born-von-Karmann Randbedingungen) in Fourierreihen entwickeln. Über die Rücktransformation muss man sich jedoch Gedanken machen, da hier die Koeffizienten nicht - wie sonst üblich - durch ein Integral gegeben sind, sondern durch eine Summe! Weiterhin entsteht (4) **nicht** aus einer Fouriertransformation, dessen Integral im Sinne von

$$\sum_{\boldsymbol{k}\in 1.\mathrm{BZ}} \longleftrightarrow V \int\limits_{1.\mathrm{BZ}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

zu einer Summe umgeformt worden ist. Es ist die hier betrachtete spezifische „Fourier-Operation“, welche es ermöglicht die Dimension des Problems von NMd auf Md zu reduzieren.

Dieser Text entspricht der schriftlichen Ausformulierungen der Antworten von Prof. Schmalian auf meine Fragen bezüglich der systematischen Behandlung von Gitterschwingungen während seiner Sprechstunde. Vielen Dank auch an Tim, Michael und Christian für ihre Hilfestellungen.

Literatur

[TKM1] Vorlesungsmitschrieb „Theorie der Kondensierten Materie“. Prof. Schmalian. WiSe 12-13.

[Sch11] SCHMALIAN, Jörg (2011): Lecture Notes: Condensed Matter Theory I.

[Nol11] NOLTING, Wolfgang (2011): Grundkurs Theoretische Physik 3. Elektrodynamik. 9. Auflage. Berlin: Springer.

[Jac06] JACKSON, John David (2006): Klassische Elektrodynamik. 4. Auflage. Berlin: de Gruyter.