Theorie der Kondensierten Materie I WS 2018/19

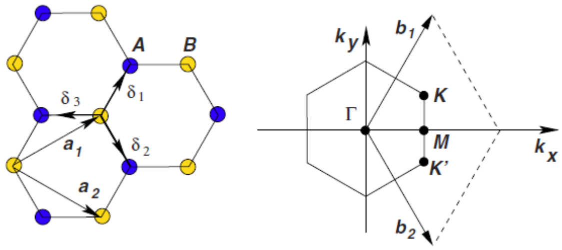
Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny, M.Sc. T. Lüdwig

Blatt 11
Lösungsvorschlag

1. Phonons in Graphene:

Die Gitterkonstante:

$$a = 1.$$



Die Position jedes Ions läßt sich durch die mittlere Ionenposition $\boldsymbol{R}^{(0)}$ und eine Abweichung $\boldsymbol{u}$ (Verschiebungsfeld) ausdrücken. Es gibt zwei Ionen (A und B) pro Elementarzelle. Wählen wir als unsere Elementarzelle das horizontalen Verbindungselement "A–B". Dann bezeichnen wir die Ruhepositionen als

$$\boldsymbol{R}_A^{(0)} = m\boldsymbol{a}_1 + n\boldsymbol{a}_2,$$

und

$$\boldsymbol{R}_B^{(0)} = m\boldsymbol{a}_1 + n\boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{\delta}_3,$$

wobei die Gittervektoren sind

$$\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}\left(\sqrt{3}, 1\right), \quad \boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{\delta}_2 - \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}\left(\sqrt{3}, -1\right),$$

wobei $\boldsymbol{\delta}_j$ zeigt auf den nächsten Nachbarn (sehen Sie bitte die Abbildung):

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{1}{2}\left(1, \sqrt{3}\right), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{1}{2}\left(1, -\sqrt{3}\right), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = (-1, 0).$$

Jetzt können wir die Positionen des Ions A und B aufschreiben

$$\boldsymbol{R}_{m,n}^{(A)} = m\boldsymbol{a}_1 + n\boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{u}_{m,n}^{(A)}, \quad \boldsymbol{R}_{m,n}^{(B)} = m\boldsymbol{a}_1 + n\boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{\delta}_3 + \boldsymbol{u}_{m,n}^{(B)}.$$

Betrachten wir nur die Kraftskonstanten zwischen nächsten Nachbarn. Dann jede Ion A hat drei B Nachbarn und die elastische Energie ist

$$U_{m,n}^{(A)} = \frac{K}{2}\left[\left(\left|\boldsymbol{R}_{m,n}^{(A)} - \boldsymbol{R}_{m,n}^{(B)}\right| - 1\right)^2 + \left(\left|\boldsymbol{R}_{m,n}^{(A)} - \boldsymbol{R}_{m,n-1}^{(B)}\right| - 1\right)^2 + \left(\left|\boldsymbol{R}_{m,n}^{(A)} - \boldsymbol{R}_{m-1,n}^{(B)}\right| - 1\right)^2\right].$$

Die gesamte elastische Energie ist

$$U = \sum_{m,n} U^{(A)}_{m,n}.$$

Hier sind alle Verbindungselemente mitberücksichtigt.

Benutzen wir jetzt die Harmonische N$\ddot{\text{h}}$arung, d.h. die Entwicklung von U in 2.Ordnung in $\boldsymbol{u}$:

$$\begin{aligned}
U^{(A)}_{m,n} = \frac{K}{2} \Bigg\{ & \left[\left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_x - \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n}\right)_x \right]^2 \\
& + \frac{1}{4} \left[\left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_x - \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n-1}\right)_x - \sqrt{3} \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_y + \sqrt{3} \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n-1}\right)_y \right]^2 \\
& + \frac{1}{4} \left[\left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_x - \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m-1,n}\right)_x + \sqrt{3} \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_y - \sqrt{3} \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m-1,n}\right)_y \right]^2 \Bigg\}.
\end{aligned}$$

Jetzt können wir die Bewegungsgleichungen aufschreiben

$$M \frac{d^2}{dt^2} \left(\boldsymbol{u}^{(A,B)}_{m,n}\right)_{x,y} = - \frac{\partial U}{\partial \left(\boldsymbol{u}^{(A,B)}_{m,n}\right)_{x,y}}.$$

Explizit:

$$\begin{aligned}
-\frac{M}{K} \frac{d^2}{dt^2} \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_x = {} & \frac{3}{2} \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_x - \left[\left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n}\right)_x + \frac{1}{4} \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n-1}\right)_x + \frac{1}{4} \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m-1,n}\right)_x \right] \\
& + \frac{\sqrt{3}}{4} \left[\left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n-1}\right)_y - \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m-1,n}\right)_y \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{M}{K} \frac{d^2}{dt^2} \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_y = {} & \frac{3}{2} \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_y - \frac{3}{4} \left[\left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n-1}\right)_y + \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m-1,n}\right)_y \right] \\
& + \frac{\sqrt{3}}{4} \left[\left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n-1}\right)_x - \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m-1,n}\right)_x \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{M}{K} \frac{d^2}{dt^2} \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n}\right)_x = {} & \frac{3}{2} \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n}\right)_x - \left[\left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n}\right)_x + \frac{1}{4} \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n+1}\right)_x + \frac{1}{4} \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m+1,n}\right)_x \right] \\
& + \frac{\sqrt{3}}{4} \left[\left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n+1}\right)_y - \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m+1,n}\right)_y \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{M}{K} \frac{d^2}{dt^2} \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n}\right)_y = {} & \frac{3}{2} \left(\boldsymbol{u}^{(B)}_{m,n}\right)_y - \frac{3}{4} \left[\left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n+1}\right)_y + \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m+1,n}\right)_y \right] \\
& + \frac{\sqrt{3}}{4} \left[\left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m,n+1}\right)_x - \left(\boldsymbol{u}^{(A)}_{m+1,n}\right)_x \right].
\end{aligned}$$

Verwenden wir jetzt die Fourier-Transformation:

$$\left(\boldsymbol{u}_{m,n}^{(A,B)}\right)_{x,y} = A_{x,y}^{(A,B)} e^{i\omega t} e{-}i\boldsymbol{R}_A^{(0)}\boldsymbol{q},$$

wobei $\boldsymbol{R}_A^{(0)}$ die koordinate der Elementarzelle ist. Schreiben wir unsere Bewegungsgleichungen in Matrix-Form auf:

$$\frac{M}{K}\,\omega^2 \boldsymbol{A} = \frac{1}{4}\widehat{\mathcal{D}}\boldsymbol{A},$$

wobei

$$\boldsymbol{A}^T = \left(A_x^{(A)}, A_y^{(A)}, A_x^{(B)}, A_y^{(B)}\right),$$

und

$$\widehat{\mathcal{D}} = \begin{pmatrix} 6 & 0 & -\left[4 + e^{i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}} + e^{i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}}\right] & \sqrt{3}\left[e^{i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}} - e^{i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}}\right] \\ 0 & 6 & \sqrt{3}\left[e^{i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}} - e^{i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}}\right] & -3\left[e^{i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}} + e^{i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}}\right] \\ -\left[4 + e^{-i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}} + e^{-i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}}\right] & \sqrt{3}\left[e^{-i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}} - e^{-i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}}\right] & 6 & 0 \\ \sqrt{3}\left[e^{-i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}} - e^{-i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}}\right] & -3\left[e^{-i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}} + e^{-i\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{q}}\right] & 0 & 6 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte von $\widehat{\mathcal{D}}$:

$$E_{01} = 12, \quad E_{02} = 0, \quad E_\pm = 6 \pm 2\sqrt{3 + 4\cos\frac{3q_x}{2}\,\cos\frac{\sqrt{3}q_y}{2} + 2\cos\sqrt{3}q_y}.$$

Die Entwicklung für kleine q (hier $q = |\boldsymbol{q}|$):

$$E_- \approx \frac{3}{2}\,q^2, \quad E_+ \approx 12 - \frac{3}{2}\,q^2.$$

Deswegen finden wir zwei akustische Phononen

$$\omega_{02} = 0, \quad \omega_- \approx \sqrt{\frac{3K}{8M}}\,q,$$

und zwei optische Phononen

$$\omega_{01} \approx \sqrt{\frac{3K}{M}}, \quad \omega_+ \approx \sqrt{\frac{3K}{M}}\left(1 - \frac{q^2}{16}\right).$$

Die zwei Phononen ω_{01} und ω_{02} haben keine Dispersion. Das ist ein Artefakt unserer Nährung. Um die Phononen in Graphen besser zu beschreiben, muss man weitere (d.h. weiterhin von nächste Nachbarn) Kupplungen betrachten.

2. Debye-Waller factor:

(a) Wir berechnen

$$W = \frac{1}{2}\langle(\boldsymbol{qu})^2\rangle$$
$$= \frac{1}{2N}\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,s_1,s_2}\left\langle\left[\boldsymbol{q}\left(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}_1s_1}e^{i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{R}}+\boldsymbol{u}^\dagger_{\boldsymbol{k}_1s_1}e^{-i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{R}}\right)\right]\left[\boldsymbol{q}\left(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}_2s_2}e^{i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{R}}+\boldsymbol{u}^\dagger_{\boldsymbol{k}_2s_2}e^{-i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{R}}\right)\right]\right\rangle,$$

wobei

$$\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}s} = \sqrt{\frac{1}{2M\omega_{\boldsymbol{k}s}}}\boldsymbol{\epsilon}_s(\boldsymbol{k})\hat{a}_{\boldsymbol{k}s}.$$

Wir berechnen den Mittelwert $\langle\ldots\rangle$ über den gleichen Quantenzustand, deswegen nur die "diagonale" Terme beitragen

$$\left\langle\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\hat{a}_{\boldsymbol{k}s}+\hat{a}_{\boldsymbol{k}s}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\right\rangle = 2n_{\boldsymbol{k}s}+1 = \coth\frac{\omega_{\boldsymbol{k}s}}{2T}.$$

Davon finden wir

$$W = \frac{1}{2N}\sum_{\boldsymbol{k},s}\frac{(\boldsymbol{q}\boldsymbol{\epsilon}_s(\boldsymbol{k}))^2}{2M\omega_{\boldsymbol{k}s}}\coth\frac{\omega_{\boldsymbol{k}s}}{2T} \quad\Rightarrow\quad \frac{V}{2N}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\sum_s\frac{(\boldsymbol{q}\boldsymbol{\epsilon}_s(\boldsymbol{k}))^2}{2M\omega_{\boldsymbol{k}s}}\coth\frac{\omega_{\boldsymbol{k}s}}{2T}.$$

(b) Für akustische Phononen gilt

$$\omega_{\boldsymbol{k}s} = c_s k.$$

Für kleinen k

$$\frac{1}{\omega_{\boldsymbol{k}s}}\coth\frac{\omega_{\boldsymbol{k}s}}{2T}\sim\frac{1}{k^2}.$$

Deswegen divergiert das Integral

$$\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{k^2}$$

für $d<3$.

(c) In einem 3D monoatomischen Kristall treten drei akustische Zweige auf: 1 longitudinaler und 2 transversale. Wir wählen den Zweig mit

$$\boldsymbol{\epsilon}_s(\boldsymbol{k})\parallel\boldsymbol{q} \qquad\Rightarrow\qquad (\boldsymbol{q}\boldsymbol{\epsilon}_s(\boldsymbol{k}))^2 = q^2.$$

Dann führen wir die Zustandsdichte der Phononen

$$\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sum_s\to\int_0^{\omega_D}d\omega D(\omega), \qquad D(\omega) = \frac{3\omega^2}{2\pi^2c^3},$$

und finden

$$2W = \frac{V}{N}\int_0^{\omega_D}d\omega\frac{3\omega^2}{2\pi^2c^3}\frac{q^2}{2M\omega}\coth\frac{\omega}{2T} = \frac{3q^2}{4M}\frac{V}{N\pi^2c^3}\int_0^{\omega_D}d\omega\omega\coth\frac{\omega}{2T}.$$

Bei $T=0$

$$\coth\frac{\omega}{2T}\to 1 \qquad \Rightarrow \qquad 2W=\frac{3q^2}{4M}\frac{1}{ck_D}.$$

Bei $T\gg\omega_D$

$$\coth\frac{\omega}{2T}\to \frac{2T}{\omega} \qquad \Rightarrow \qquad 2W=\frac{3q^2}{4M}\frac{4T}{c^2k_D^2}.$$

Here haben wir die Normalisierung des Spektrums der Phononen berücksichtigt.

(d) Hier entwickeln wir den Strukturfaktor bis zur ersten Ordnung

$$\exp\left\langle (\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{u}(0))\,(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{R}))\right\rangle \approx 1+\left\langle (\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{u}(0))\,(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{R}))\right\rangle .$$

Ketzt berechnen wir den Mittelwert

$$\begin{aligned}
&\left\langle (\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{u}(0))\,(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{R}))\right\rangle = \\
&= \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,s_1,s_2}\left\langle \left[\boldsymbol{q}\left(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}_1s_1}+\boldsymbol{u}^\dagger_{\boldsymbol{k}_1s_1}\right)\right]\left[\boldsymbol{q}\left(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}_2s_2}e^{i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{R}-i\omega_2t}+\boldsymbol{u}^\dagger_{\boldsymbol{k}_2s_2}e^{-i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{R}+i\omega_2t}\right)\right]\right\rangle \\
&= \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k},s}\left\langle \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\hat{a}_{\boldsymbol{k}s}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}s}t}+\hat{a}_{\boldsymbol{k}s}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}s}e^{i\omega_{\boldsymbol{k}s}t}\right\rangle e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}} \\
&= \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k},s}\frac{(\boldsymbol{q}\boldsymbol{\epsilon}_s(\boldsymbol{k}))^2}{2M\omega_{\boldsymbol{k}s}}\left\langle (n_{\boldsymbol{k}s}+1)e^{i\omega_{\boldsymbol{k}s}t}+n_{\boldsymbol{k}s}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}s}t}\right\rangle e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}}.
\end{aligned}$$

Davon finden wir den Strukturfaktor

$$S^{(1)}=e^{-2W}\frac{(\boldsymbol{q}\boldsymbol{\epsilon}_s(\boldsymbol{q}))^2}{2M\omega_{\boldsymbol{q}s}}\left[(n_{\boldsymbol{k}s}+1)\delta(\omega+\omega_{\boldsymbol{q}s}+n_{\boldsymbol{k}s}\delta(\omega-\omega_{\boldsymbol{q}s}\right].$$

Die δ-Funktionen entsprechen die Erhaltungssätze:

Erzeugung (Emission) des Phonons $\quad \dfrac{k^2}{2m}=\dfrac{k'^2}{2m}+\omega_{\boldsymbol{q}s};$

Absorption des Phonons $\quad \dfrac{k^2}{2m}=\dfrac{k'^2}{2m}-\omega_{\boldsymbol{q}s}.$

Impulserhaltung: ($\boldsymbol{K}$ sei ein reziproke Gittervektor)

$$\boldsymbol{k}'\pm\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K},$$

und zwar ($\omega_{\boldsymbol{q}}=\omega_{-\boldsymbol{q}}$)

$$\frac{k^2}{2m}=\frac{k'^2}{2m}\pm\omega_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}',s}.$$