

# Über den Impuls der Schallquanten II

Von GEORG SÜSSMANN

Aus dem Institut für theoretische Physik der Universität München

(Z. Naturforschg. 13 a, 1–6 [1958]; eingegangen am 3. Oktober 1957)

Die Untersuchung der DE BROGLIESchen Relation für das Phonon wird fortgesetzt. Die Beziehungen zwischen dem Impuls des Gitters und dem Pseudoimpuls ( $\sum n \hbar k$ ) seines Schallfeldes werden in folgenden Punkten diskutiert: a) Wechselwirkung mit einem Elektron, b) Übergang von der linearen, periodisch fortgesetzten Kette zum dreidimensionalen Gitter mit Oberflächeneffekten, c) optische Eigenschwingungen des Gitters, d) Drehimpuls.

Im ersten Teil dieser Arbeit<sup>1</sup> haben wir die DE BROGLIESche Relation für das Phonon am Beispiel einer linearen Kette untersucht und gezeigt, daß das Phonon keinen Impuls besitzt, daß aber der „Pseudoimpuls“  $\hbar k$  sich unter gewissen Voraussetzungen wie eine echte Impulsgröße verhält. Die Differenz  $P - \Pi = M \dot{R} - \sum_k n_k \hbar k$  zwischen dem Gitterimpuls und dem gesamten Pseudoimpuls des Schallfeldes ist nämlich in vielen Fällen nahezu konstant. Genauer: die Größe  $\exp[ia(P - \Pi)/\hbar]$  ist bei periodischen Randbedingungen unter der Einwirkung beliebiger konservativer Kräfte streng eine Konstante der Bewegung; folglich ist  $P - \Pi$  konstant modulo  $(\hbar/a)$ . Bei den sog. Umklapp-Prozessen<sup>2</sup>, deren Prototyp die LAUE-Streuung ist, springt  $P - \Pi$  um ein ganzes Vielfaches von  $\hbar/a$ . Wechselwirkungen, die nur an die langen Schallwellen angriffen (elastische Näherung), machen aber praktisch keine Umklapp-Prozesse. – In diesem zweiten, abschließenden Teil der Arbeit sollen einige wichtige Spezialfälle und Verallgemeinerungen der genannten Aussage diskutiert werden.

## 1. Die Kette und ein Elektron

Ein typisches Beispiel für die Wechselwirkung der Kette mit ihrer Umwelt erhält man durch Hinzufügen eines weiteren Teilchens, eines „Elektrons“, das imstande ist, mit den „Atomen“ der Kette Impuls auszutauschen. Einfachheit halber denken wir uns die Bewegungen dieses Elektrons auf die Gerade beschränkt, in der sich die (periodisch fortgesetzte) Kette befindet. Die bisherigen Lagevariablen  $r_x$

(bzw.  $q_x$ ) werden damit um eine weitere vermehrt, und zwar um den *Elektronenort*  $r$ , der – wie die Atomorte  $r_x$  – auch nur bis auf ganze Vielfache der Kettenlänge  $A$  definiert sein soll:

$$\psi(\dots r_x \dots; r + A) = \psi(\dots r_x \dots; r), \quad (1)$$

vgl. (I, 4). Die dazugehörige kanonische Variable ist der Elektronenimpuls

$$p = \mu \dot{r} = -i \hbar \partial / \partial r;$$

$\mu$  ist die Masse des Elektrons. Es gilt  $[r, p] = i \hbar$ , aber mit den Variablen der Kette sind  $r$  und  $p$  vertauschbar. Die Zeitabhängigkeit des Gesamtsystems „Kette + Elektron“ ist durch einen HAMILTON-Operator

$$H_G = H_G^{(0)} + H_G^{(1)}(t) \quad \text{mit} \quad H_G^{(0)} = H^{(0)} + \frac{p^2}{2\mu}$$

gegeben, vgl. (I, 18), wobei die Wechselwirkung

$$H_G^{(1)} = H_G^{(1)}(\dots r_x, p_x \dots; r, p; t)$$

$$\text{bzw.} \quad = H_G^{(1)}(R, P; \dots b_k \dots; r, p)$$

den Störoperator  $H^{(1)}$  von Teil I umfassen soll, wozu u. a. die anharmonischen Terme gehören.

Wir wollen nun annehmen, daß wir es mit einem *abgeschlossenen System* zu tun haben. Dann sind alle Raumpunkte physikalisch gleichartig, d. h. es gilt<sup>3</sup>

$$H_G^{(1)}(\dots r_x + l \dots, r + l) = H_G^{(1)}(\dots r_x \dots, r)$$

oder

$$H_G^{(1)}(R + l, \dots, r + l) = H_G^{(1)}(R, \dots, r)$$

mit beliebigem  $l$ . Der Operator  $H_G^{(1)}$  hängt demnach von  $R$  und  $r$  nur über die Differenz  $R - r$  ab. Im

<sup>1</sup> G. SÜSSMANN, Z. Naturforschg. 11 a, 1 [1956]; im folgenden als I zitiert. Vgl. dazu auch S. ZIENAU, Ph. D. Thesis, Liverpool 1953; H. FRÖHLICH, Adv. Phys. 3, 329 [1954]; G. BECK, Anais. Acad. Brasil. Ci. 26, 65 [1954]; W. BREINIG, Z. Phys. 143, 168 [1955].

<sup>2</sup> R. PEIERLS, Ann. Phys., Lpz. (5) 4, 121 [1930]; 12, 154 [1932].

<sup>3</sup> Hier wie auch in entsprechenden Gleichungen weiter unten werden die ungeänderten Variablen weggelassen.



Limes  $l=0$  folgt daraus

$$\frac{\partial H_G^{(1)}}{\partial R} - \frac{\partial H_G^{(1)}}{\partial r} = 0. \quad (3)$$

Da für  $H_G^{(0)}$  selbstverständlich dasselbe gilt, ist damit der Impuls-Erhaltungssatz gewährleistet. Der *Gesamtimpuls*

$$P_G = P + p \quad (4)$$

ist mit dem HAMILTON-Operator vertauschbar,

$$[H_G, P_G] = 0, \quad (5)$$

d. h. er ist eine Konstante der Bewegung.

Wegen der *Gleichheit der Atome* folgt aus der Invarianz von  $H_G^{(1)}$  gegen die Verschiebung um eine Gitterkonstante, daß es auch gegen die entsprechende Verstellung der Kette invariant sein muß, wenn das Elektron gleichzeitig um das Stück  $l=a$  verschoben wird. In Zeichen:

$$\begin{aligned} H_G^{(1)}(\dots r_{x-a} + a, p_{x-a} \dots; r+a) \\ = H_G^{(1)}(\dots r_{x-a}, p_{x-a}, \dots, r) \\ = H_G^{(1)}(\dots r_x, p_x \dots, r) \end{aligned}$$

oder, vgl. (I, 39) mit (I, 37) und (I, 38),

$$\begin{aligned} H_G^{(1)}(\dots b_k e^{-iak} \dots; r+a) \\ = H_G^{(1)}(\dots b_k \dots; r). \end{aligned} \quad (6)$$

Im Unterschied zu Gl. (2) ist hier ein Übergang zu unendlich kleinen Größen nicht möglich. Man kann somit nicht schließen, daß die mit  $\hbar$  multiplizierte „Gesamtwellenzahl“ oder der *Gesamtpseudoimpuls*

$$\Pi_G = \Pi + p \quad (7)$$

mit  $H_G$  vertauschbar ist, sondern nur, daß

$$[H_G, \exp(ia \Pi_G/\hbar)] = 0 \quad (8)$$

ist. (Beim Elektron muß also der „Pseudoimpuls“ dem Impuls  $p$  gleichgesetzt werden.) Subtrahiert man von  $\Pi_G$  die damit vertauschbare Konstante  $P_G$ , so geht Gl. (8) in den alten Erhaltungssatz (I, 44) über. Wir diskutieren nun die verschiedenen Näherungsfälle, vgl. Tab. 1.

In der *klassischen Näherung*, in der  $\hbar/a$  und  $\hbar\omega$  gegen die hier vorkommenden Impuls- bzw. Energiegrößen vernachlässigt werden können, verliert der

Erhaltungssatz (8) bzw. (I, 44) wegen der großen imaginären Exponenten all seine Bedeutung. Aus diskreten Symmetrien folgen in der klassischen Theorie bekanntlich keine Erhaltungssätze.

	Quantenmechanik	Klassische Mechanik
Gittertheorie (elastische Näherung)	$\Pi_G = \text{const mod } \frac{\hbar}{a}$  $(\Pi_G \text{ fast immer const})$	$\Pi_G$ in beliebiger Weise veränderlich
Kontinuums- theorie	Die Theorie ist wegen der unendlichen Nullpunktsbewegung nicht konsistent	$\Pi_G = \text{const.}$

Tab. 1. Die Zeitabhängigkeit des Pseudoimpulses  $\Pi_G$  bei festgehaltenem Gesamtimpuls  $P_G$ .

Für die *elastische Näherung* dagegen haben wir ein sehr nützliches Resultat gewonnen. Sie ist durch die Bedingung

$$|ak| \ll 2\pi \quad (I, 29)$$

für die  $\psi$ -Funktion oder durch die damit nahezu gleichwertige Bedingung (I, 28) für den Störoperator  $H_G^{(1)}$  definiert. Diese Forderung wiederum bedeutet wegen Gl. (2), daß das Elektron durch die diskrete Gitterstruktur nur wenig beeinflusst werden darf, d. h. die  $(R-r)$ -Abhängigkeit des Störoperators (mit ihrer Periode  $a$ , falls sämtliche  $|b_k|^2$  verschwinden) soll sehr schwach sein:

$$\left| \frac{\partial H_G^{(1)}}{\partial r} \right| \ll \frac{|H_G^{(1)}|}{a}. \quad (9)$$

Fast alle vorkommenden bzw. wirksamen Perioden sollen viel größer als die Gitterkonstante  $a$  sein. Dann kann aus Gl. (6) geschlossen werden, daß<sup>4</sup>

$$\sum_k' \left( -ik b_k \frac{\partial H_G^{(1)}}{\partial b_k} + ik b_k^* \frac{\partial H_G^{(1)}}{\partial b_k^*} \right) + \frac{\partial H_G^{(1)}}{\partial r} \approx 0 \quad (10)$$

ist. Folglich ist die Gesamtwellenzahl annähernd zeitlich konstant:

$$[H_G, \Pi_G] \approx 0. \quad (11)$$

<sup>4</sup> Statt die Realteile und die Imaginärteile der  $b_k$  als die voneinander unabhängigen Variablen aufzufassen, ist es bekanntlich ebensogut möglich, die  $b_k$  und  $b_k^*$  formal unab-

hängig voneinander zu variieren bzw. zu differenzieren. Der Strich an der  $k$ -Summe erinnert daran, daß  $k \neq 0$  ist; vgl. (I, 9).

Entsprechendes gilt natürlich auch für die Differenz

$$D = \Pi_G - P_G = \Pi - P$$

der beiden Impulsgrößen. — Im Limes der *Kontinuumstheorie* ( $a=0$ ) gehen (10) und (11) in exakte Gleichungen über. Die Verstellungen eines Kontinuums können von den entsprechenden Verschiebungen in bezug auf die Kraftwirkungen gar nicht unterschieden werden. Diese beiden zu Gl. (2) bzw. Gl. (10) führenden Transformationen unterscheiden sich in der LAGRANGESCHEN Darstellung der Hydrodynamik lediglich durch eine Vertauschung der Ruheorte. Infolgedessen ist es erlaubt,  $P_G$  mit  $\Pi_G$  zu verwechseln, denn

$$\frac{dD}{dt} = 0. \quad (12)$$

In den praktisch meist vorkommenden Fällen, z. B. wenn zu Beginn alles in Ruhe war, ist  $D=0$ . — Wir möchten hier nochmals betonen, daß es eine Quantenmechanik des elastischen Kontinuums nicht gibt, vgl. I, S. 7. (Dasselbe gilt — wie man seit BOLZMANN weiß — auch für die klassische Thermodynamik des Kontinuums.)

Im allgemeinen Fall genügt jedoch die Gesamtwellenzahl im Unterschied zum Gesamtimpuls nicht einem vollständigen Erhaltungssatz, sondern nur einer Auswahlregel. Sie ergibt sich aus der mit Gl. (6) äquivalenten Beziehung

$$\exp(i a \Pi_G / \hbar) \cdot H_G^{(1)} \cdot \exp(-i a \Pi_G / \hbar) = H_G^{(1)}.$$

Für die Matricelemente dieses Operators in der  $H_G^{(0)}$ -Darstellung folgt daraus nämlich, daß

$$(\sigma | H_G^{(1)} | \sigma') \cdot \left\{ 1 - \exp \left[ i a \left( \sum_k' k n_k + \kappa - \sum_k' k n'_k - \kappa' \right) \right] \right\} = 0$$

sein muß;  $\hbar \kappa$  ist der Eigenwert von  $p$ , und  $\sigma \equiv (K; \dots n_k \dots; \kappa)$  bezeichnet die Basisvektoren. Demnach können immer nur solche Übergänge induziert werden, für die

$$\sum_k' k n'_k - \kappa' - \sum_k' k n_k - \kappa = \frac{2\pi}{a} \Delta n \quad (13)$$

ist mit ganzzahligem  $\Delta n$ . Anders ausgedrückt: Es gibt nur Übergänge von der Art

$$\Delta(\Pi_G)_\sigma = \Delta n \cdot \hbar/a. \quad (14)$$

Dies ist in Verbindung mit Gl. (5) ein Sonderfall der allgemeinen Auswahlregel

$$\Delta \left( \sum_k' k n_k - K \right) = 2\pi \Delta n / a; \quad (\text{I, 46})$$

denn der genannte Erhaltungssatz ist gleichbedeutend mit der „identischen Auswahlregel“

$$\Delta(K + \kappa) = 0 \quad \text{bzw.} \quad K + \kappa \rightarrow K + \kappa.$$

Für sehr lange Wellen geht Gl. (14) in den Erhaltungssatz

$$\Pi_G \rightarrow \Pi_G$$

über, denn Übergänge mit  $\Delta n \neq 0$  werden sehr unwahrscheinlich.

Eine besonders einfache Weise, die Forderung (6) zu erfüllen, liegt vor, wenn  $H_G^{(1)}$  von den  $b_k$  und  $r$  nur mittels der Kombination  $b_k e^{-ikr}$  abhängt. Beachtet man noch Gl. (2) oder (3), so heißt das:

$$H_G^{(1)} = H_G^{(1)} (\dots b_k e^{-ik(r-R)} \dots). \quad (15)$$

Dann kann man differenzieren und erhält (10) und (11) als genaue Gleichungen, d. h. die Gesamtwellenzahl ist in Strenge eine Konstante. Wegen ihrer Einfachheit wird die Form (15) durch die meisten praktisch benutzten Wechselwirkungsansätze erfüllt. Man erhält diese Ansätze nämlich meist durch eine recht starke Vereinfachung der wirklichen Verhältnisse; und da die Forderungen (6) und (2) erfüllt sein müssen, bleibt dabei für  $H_G^{(1)}$  schließlich kaum etwas anderes übrig als eine Funktion der Gestalt (15). Doch gibt es, falls kompliziertere Ansätze zugelassen werden, im Rahmen von (6), (2) immer noch eine große Mannigfaltigkeit von Möglichkeiten. Eine der nächst einfachen ist von der Art

$$H_G^{(1)} = H_G^{(1)} (\dots b_k e^{ik(r-R) + c_k a k \sin 2\pi a^{-1}(r-R)} \dots). \quad (16)$$

Sie enthält (15) als Spezialfall (sämtliche  $c_k = 0$ ). Sind nicht alle  $c_k$  gleich Null, so gilt nur noch Gl. (8), nicht aber  $[H_G, \Pi_G] = 0$ . Falls alle  $c_k \ll 1$  sind, bestehen jedoch wenigstens die Näherungsgleichungen (10) und (11), wie bei den langen Wellen. Man erkennt daran, daß die Beschränkung auf lange Wellen aber nicht notwendig (aber hinreichend) für die Gültigkeit von (11) ist.

## 2. Die offene Kette

Der Übergang von der geschlossenen zur offenen Kette vollzieht sich in zwei Schritten. Im ersten wird die Kette zwischen den Atomen  $-a\nu$  und  $+a\nu$  geöffnet und zur Geraden gestreckt. Die Kraftwirkungen zwischen den Atomen bleiben dabei dieselben wie bei der geschlossenen Kette; es ist aber nicht

mehr möglich, die Atome über  $|x| = \nu a$  hinaus weiterzuzählen, vgl. (I, 2). Die Wechselwirkung zwischen den beiden Endatomen des Modells kann man sich elektrisch übertragen denken; die dadurch eintretende Verzögerung ist für eine nicht zu lange Kette ( $A\omega \ll c$ ) vernachlässigbar. Im zweiten Schritt wird die Kette auch bezüglich der Kraftwirkungen geöffnet, so daß die Enden dann keine Fernwirkungen mehr aufeinander ausüben.

Durch den ersten Schritt erfahren die bisherigen Überlegungen nur folgende Modifikation. Die Verschiebung  $\mathcal{T}_a$  um eine Gitterkonstante kann durch die entsprechende Verstellung  $\mathcal{U}_a$  am Kettenrand nicht genau nachgeahmt werden, denn bei der Verstellung bleiben die Atome im Mittel an ihrem Ort. Um eine genaue Nachahmung zu bekommen, muß außerdem eines der beiden Randatome von einem Ende der Kette zum anderen befördert werden. An die Stelle der bisherigen Beziehung  $\mathcal{U}_a = \mathcal{P}_a \mathcal{T}_a$ , vgl. (I, 42), tritt nun die kompliziertere Gleichung

$$\tau \mathcal{U}_a = \mathcal{P}_a \mathcal{T}_a, \quad (17)$$

in der  $\tau$  derjenige Operator ist, der das linke Randatom an das rechte Kettenende bringt. In Formeln:

$$\tau = \exp(iA p \xi / \hbar), \quad (18)$$

wobei  $\xi$  die Nummer des linken Randatoms, also durch

$$r_\xi \leq r_x \quad \text{für alle } x \quad (19)$$

definiert ist ( $|x| \leq \nu a$ ). Die vier Operatoren in (17) sind alle untereinander vertauschbar. — Wegen  $\tau \neq 1$  ist jetzt also

$$\exp[ia(H - P)/\hbar] = \mathcal{U}_a \mathcal{T}_a^{-1}$$

nicht mehr streng konstant, und der konstante Operator  $\mathcal{P}_a$  ist leider ein recht komplizierter Ausdruck in den Impulsgrößen. Man macht aber wegen

$$N \gg 2 \quad (20)$$

einen im allgemeinen nur sehr kleinen Fehler, wenn man in dem einfachen Operator  $\exp(iaD/\hbar)$  festhält und ihn als konstant ansieht. Die zwei Atome am Rande fallen gegenüber den vielen anderen nicht ins Gewicht. Die einzige Ausnahme liegt vor, wenn äußere homogene Felder vorhanden sind, denn dann macht sich die relative Länge der Kette bemerkbar ( $A \gg a = A/N$ ). Wir beschränken uns daher, wie schon bei der geschlossenen Kette im Fall langer Wellen, auf Potentiale, deren Schwerpunktsabhängigkeit zusammen mit den Auslenkungen verschwindet.

Der zweite Schritt ist gleichbedeutend damit, daß die  $N$  Glieder des Operators  $H^{(0)}$  von Gl. (I, 18) um ein weiteres von derselben Größenordnung vermehrt werden. Die Folge davon ist, daß die zu den fortlaufenden Wellen ( $k$ ) gehörenden Schallquanten keine stationären Bewegungszustände mehr ergeben. Geht man trotzdem von ihnen aus, so kann man etwa DIRACsche Störungsrechnung treiben. Danach ist für alle Vorgänge, die sich auf das Innere der Kette lokalisieren lassen, auch dieser Randeffect vernachlässigbar klein. Ein typisches Beispiel dafür ist ein Elektron, das sich als Wellenpaket durch die Kette bewegt und sie dabei in seiner Umgebung deformiert.

### 3. Die polare Kette

Auf Grund des Additionstheorems der Exponentialfunktion kann man die kurzen Wellen auch als Gegentaktschwingungen mit großer Wellenlänge auffassen (und umgekehrt: die langen Wellen als Gegentaktschwingungen kurzer Wellenlänge). Dies ist besonders dann von Bedeutung, wenn die Atome abwechselnd entgegengesetzt gleiche Ladung tragen, weil die Polarisation einer solchen Kette ein direktes Maß für die „optischen Wellenamplituden“ ist. Natürlich sind in diesem Fall nicht mehr alle Atome einander gleich. Um wieder Gitterperiodizität zu erhalten, faßt man dann je zwei benachbarte Atome zu einer „Zelle“ zusammen,  $\tilde{a} = 2a$ , d. h. die Gitterkonstante der „polaren Kette“ ist doppelt so groß wie die der bisher betrachteten unpolaren. Die ungerade Zahl  $\tilde{N}$  hat jetzt die Bedeutung der Zahl der Zellen; die Zahl der Atome ist  $N = 2\tilde{N}$  und die Länge der Kette  $A = Na = \tilde{N}\tilde{a}$ . Entsprechend muß in (I, 3) und in (I, 9) die Zahl der Parameter verdoppelt werden; in (I, 9) muß außerdem noch die unendlich lange optische Welle ( $k = 2\pi/\tilde{a}$ ) hinzugefügt werden. Die unendlich lange akustische Welle ( $k = 0$ ) wird nach wie vor am besten durch  $R$  und  $P$  beschrieben. Die anderen (eigentlichen) Schwingungen jedoch lassen sich ebenso gut „optisch“ beschreiben. Die „optische Wellenlänge“ hängt mit der bisherigen „akustischen“ folgendermaßen zusammen:

$$\tilde{k} = k - \text{sgn } k \cdot 2\pi/\tilde{a}, \quad k = \tilde{k} - \text{sgn } \tilde{k} \cdot 2\pi/\tilde{a}. \quad (21)$$

Mit den Amplituden  $\tilde{b}_{\tilde{k}} = b_k$  hat man somit als neuen Pseudoimpuls den Operator

$$\tilde{H} = \hbar \sum_{\tilde{k}}' \tilde{k} \tilde{b}_{\tilde{k}}^* \tilde{b}_{\tilde{k}} = H - \frac{2\pi}{a} \sum_{\tilde{k}}' \text{sgn } \tilde{k} \cdot b_{\tilde{k}}^* b_{\tilde{k}}. \quad (22)$$