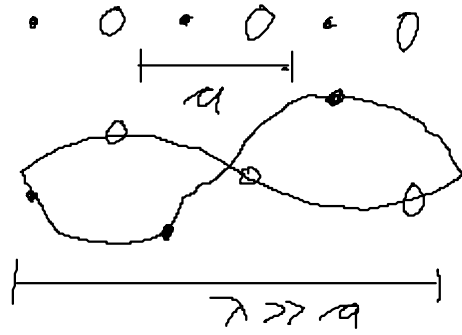


Dispersions 2 Atomige lineare Kette

1. $ka \ll 1$

(a) $\omega_+ : \frac{U_0}{V_0} \approx -\frac{m}{M}$

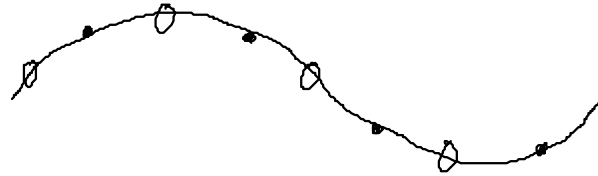


"optischer Zweig"

falls m, M unterschiedl. Ladung: Kopplung an El mag. Wellen

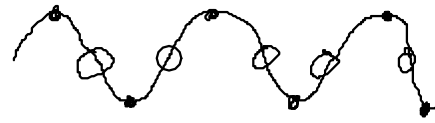
(b) $U_0 \approx V_0$

akustischer Zweig



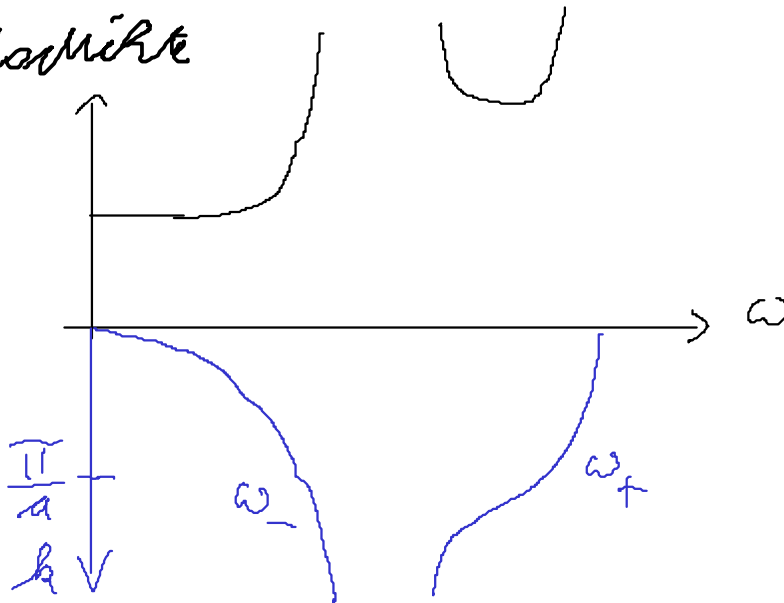
2. $k = \frac{\pi}{a}$

$\omega_+ = \sqrt{\frac{2f}{m}} \quad U_0 = 0$



$\omega_- = \sqrt{\frac{2f}{M}} \quad V_0 = 0$

Zustandsdichte

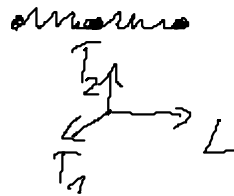


$g(\omega) d\omega = \frac{1}{\pi} \frac{1}{d\omega/dk} d\omega$

4.5 Schwingung des 3D-Gitters

Übergang zum 3 dim. Kristall qualitativ

1. Es gibt Dispersionsflächen $\omega_{\vec{k}} = \omega(\vec{k})$ statt Dispersionskurven
2. Es gibt longitudinal und transversale Schwingungen

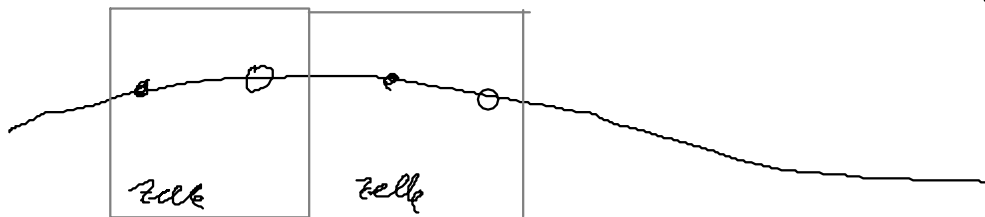


Polarisierung $T \quad \vec{E} \perp \vec{k}$
 $L \quad \vec{E} \parallel \vec{k}$

Wenn die Unterscheidung rein T oder rein L nur in Richtung hoher Symmetrie oder isotropes Medium ($\bar{n}, A, \vec{E} \perp \vec{k}$ oder $\vec{E} \parallel \vec{k}$)

3. $k = 0$ (lange Wellen $\lambda \gg a$) alle Elementarzellen schwingen gleichphasig

$\omega_-(\vec{k}=0)$ Untergrenze in Phase: akust. Zweig
 $\omega_+(\vec{k}=0)$ " " gegenphasig: optischer Zweig



in Phase, beide Zellen ähnlich

4. Es gibt 3 akustische Zweige 1LA, 2TA

Für p Atome in der Elementarzelle gibt es $3(p-1)$

optische Zweige: $1(p-1) L_0$, $2(p-1) T$

Insgesamt also $3p$ unabhängige Schwingungen
für jede erlaubte \vec{k}

Entspricht 3 unabh. Schwingungen pro Atom

5) Verbindung zur klas. Elastizitätstheorie

dort: Gitterdeformation ändert sich nur sehr langsam
im Vgl. zur Reichweite der atomaren Kräfte

u^{klas} eindeutig bestimmt durch $\vec{u}(\vec{r})$, genau durch $\nabla \vec{u}$

$$\vec{u}_i - \vec{u}_j \rightarrow (\vec{R}_i - \vec{R}_j) \cdot \nabla \vec{u}(\vec{r})$$

$$u^{\text{harm}} = \frac{1}{2V} \sum_{\mu\nu} \int d\vec{r} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} u_\mu(\vec{r}) \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_\beta} u_\nu(\vec{r}) \right) E_{\mu\nu\alpha\beta}$$

↑
Elastizitätstensor

$$E_{\mu\nu\alpha\beta} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{R}} R_\alpha D^{\mu\nu}(\vec{R}) R_\beta$$

i. A. 21 versch. elast. Konstanten

reduziert sich mit steigender Symmetrie

Kubisch: 3 unabh. elast. Konst.

6) Zustandsdichte

gegeben $\omega_{\vec{k}}$, wie groß $Z(\omega)$ für den entsprechenden
Zweig

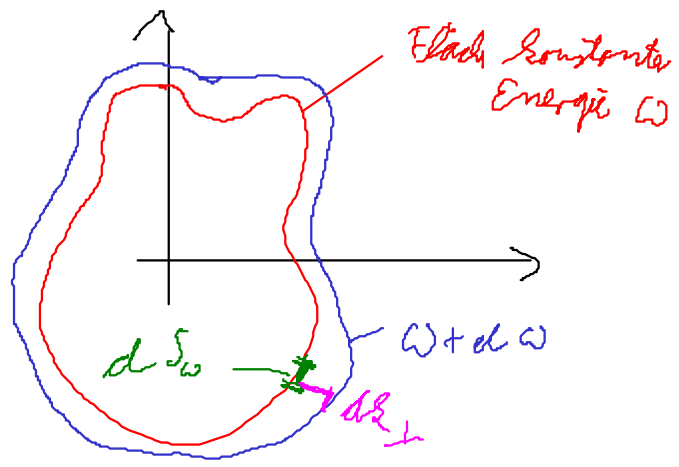
Volumen eines erlaubten \vec{k} -Zustands $\frac{(2\pi)^3}{V}$

\Rightarrow Zustandsdichte im \vec{k} Raum: $\frac{V}{(2\pi)^3}$

$$Z(\omega) d\omega$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{Schale}} d^3k$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{Schale}} dS_\omega dk_\perp$$



wegen $\nabla_k \omega \perp S_\omega$ gibt $|\nabla_k \omega| dk_\perp = d\omega$

S_ω Fläche konstante Energie

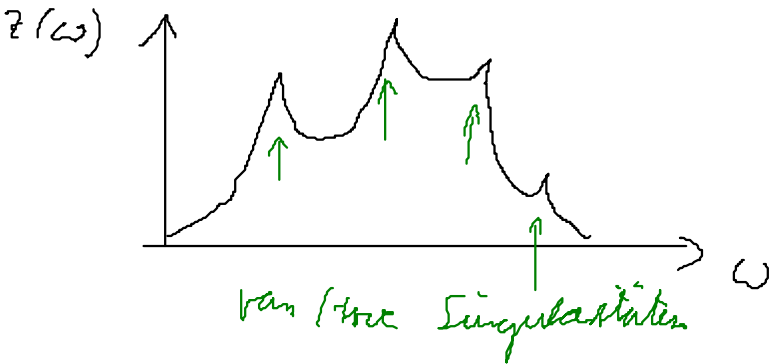
$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{Schale}} dS_\omega \frac{1}{|\nabla_k \omega|} d\omega$$

Für einen Zweig S

$$|\nabla_k \omega| = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_k = v_g \quad \text{Gruppengeschwindigkeit.}$$

van Hove - Singularitäten wenn $\nabla_k d\omega = 0$

in 3 dim. keine echten Singularitäten $Z(\omega) \rightarrow \infty$
sondern minima, maxima und Sattelpunkte



angewandt für einen Kristall

$$Z(\omega) = \sum_S \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{dS_\omega}{|\nabla_k \omega|}$$

Dispersionrelationen und Zustandsdichten exp.

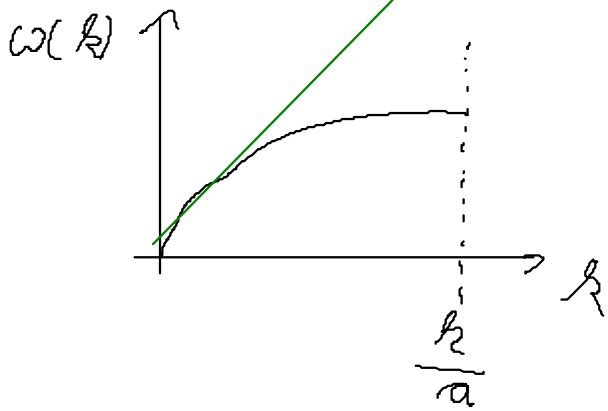
meist aus Neutronenstreuung, auch aus

Röntgenstreuung (Egyszer)

7) Debye - Modell

bei linearem $\omega(k) = c_s \cdot k$ (isotrop)

für alle Zweige ist $\omega(k)$ für jeden Zweig eine Kugelschale mit Radius $|k|$



$$Z_S(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{dS_\omega}{c_s}$$

Schallgeschwind.

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi^2 k^2}{c_s} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c_s^3}$$

für $\omega < \omega_D$

alle Zweige werden durch 3 akustische Zweige (ZTA, 1LA) beschrieben. Sehr vereinfachtes Modell, aber für kleine Freq. gute Näherung

Transversal: $\omega_-(k) \approx 2 \omega_T(k)$ für $k \rightarrow 0$

Typ. Zahlenwerte

Bsp Al: Fundamentale Rez. Gittervektor

(kubisch) $g = \frac{2\pi}{a} \approx 2 \text{ \AA}^{-1} = 2 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$

Schallgeschwind. $c_L \approx 5 \cdot 10^3 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ es gilt $c_L \approx 2 c_T$

Debyefrequenz $\omega_D \approx \frac{\pi}{a} \approx 5 c_L \approx 5 \cdot 10^{13} \frac{1}{\text{s}}$

$\nu_D \approx 10^{13} \frac{1}{\text{s}}$

Energie $\hbar \omega$ der Gitterschwingung \ll Energie der Elektronen

4.6 Quantisierung der Gitterschwingung

Bew. Gl. für lin. elast. Kette

$$M \ddot{u} = -f (2u_n - u_{n-1} - u_{n+1})$$

begl. anders schreiben

$$u_n = u_0 e^{i(ka - \omega t)} = b_k(t) e^{ikna}$$

mit $b_k(t) = u_0(k) e^{-i\omega t}$

Einsetzen in BGL:

$$b_k(t) + \omega^2(k) b_k(t) = 0$$

$$\text{mit } \omega^2(k) = 4 \frac{f}{M} \sin^2 \frac{ka}{2}$$

für jedes erlaubte $k \Rightarrow$ unabhängiger harm. Oszillator

entspr. 3 dim. Kristall mit N Atomen
3 N harm. Oszillatoren

QM sagt: HO mit $\omega_s(k)$ hat Energieniveaus

$$E_{ms} = \left(n_{ks} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_s(k)$$

Zustand des Kristalls wird vollständig beschrieben

(bzgl. der Schwingungen) durch die Angabe der
Quantenzahlen n_{ks} der einzelnen Normalschwingungen

$$E = \sum_{ks} \left(n_{ks} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_s(k)$$

statt "Normalschwingung ($\vec{k}s$) ist im n_{ks} -ten
Angeregten Zustand"

sagen wir " n_{ks} Phononen mit Wellenvektor \vec{k}
im Zweig s sind angeregt"

Analogie: Photon Energie $\hbar\omega$ Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$
 Phonon Energie $\hbar\omega_s(\vec{k})$ Quasimpuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$
 (Kristallimpuls)

Impulserhaltung nur bis auf einen Reziproben Gittervektor

(Isotropie des Raums \Rightarrow Impulserhaltung im Kristall: quantisierte Isotropie (um einen Gittervektor))

4-7 Strahlung an zeitl. veränderlichen

Strukturen

Es war $A_B \sim e^{-i\omega t} \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{r}$

1 Atom pro Zelle:

$$A_B \sim \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} f_{\alpha} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{u}_i(t)} e^{-i\omega_0 t}$$

für kleine Auslenkungen

$$A_B \sim \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} f_{\alpha} (1 - i\vec{k}\cdot\vec{u}_i(t) - \dots) e^{-i\omega_0 t}$$

wobei $u_i(t) = \vec{E} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{R}_i - \omega t)}$

verschwindet
für nicht
mehr

Neben

$$A_{\text{stat}} \sim \sum_i f_{\alpha} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}$$

tritt in elast. Strahlung - auf

$$A_B \text{ melast. } \sim \sum_i f_{\alpha} e^{-i(\vec{k} \pm \vec{k}')\cdot\vec{R}_i} \frac{1}{i\vec{k}\cdot\vec{v}} e^{-i(\omega_0 \pm \omega)t}$$