Diskussion zweiatomige lineare Kette

u: schwere Atome

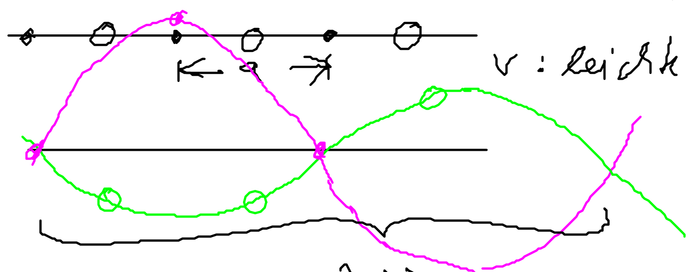
v: leichte Atome

1. $ka \ll 1$:

(a) ω_+ : $\frac{u_0}{v_0} \approx -\frac{m}{M}$

„optischer Zweig"

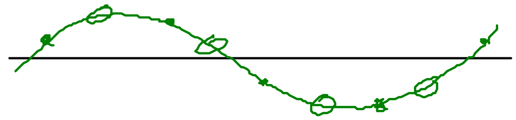
falls m, M unterschiedl.



$\lambda \gg a$

Ladung: Kopplung an elektromagnet. Wellen

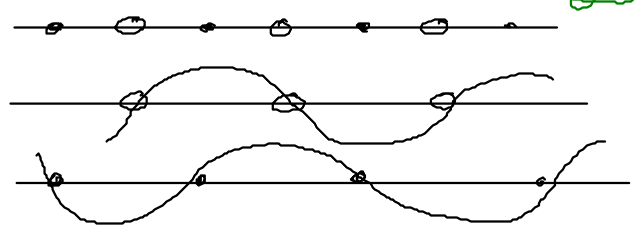
(b) ω_- : $u_0 \approx v_0$ „akustischer Zweig"



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

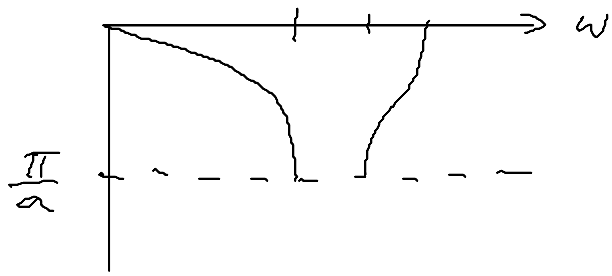
$\omega_+ \approx \sqrt{\frac{2f}{m}}$ $\quad u_0 = 0$

$\omega_- = \sqrt{\frac{2f}{M}}$ $\quad v_0 = 0$



Zustandsdichte

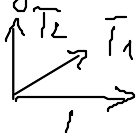
$$Z(\omega)\,d\omega = \frac{1}{\pi}\frac{1}{\frac{d\omega}{dk}}\,d\omega$$



4.5 Schwingungen des dreidimensionalen Gitters

Übergang zum 3-dim Kristall qualitativ

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



Polarisationsvektor $\vec{\varepsilon}$: $T \quad \vec{\varepsilon} \perp \vec{k}$

$L \quad \vec{\varepsilon} \parallel \vec{k}$

Bem Unterscheidung von T oder L nur in Richtung der Symmetrie (oder für isotropes Medium). im Allg. $\vec{\varepsilon} \not\perp \vec{k}$ und $\vec{\varepsilon} \not\parallel \vec{k}$

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

- $\omega_-(\vec k=0)$ Untergitter in Phase: akustischer Zweig
- $\omega_+(\vec k=0)$ Untergitter in geg. Phase: optischer Zweig

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

Für p Atome in der Elementarzelle: $3(p-1)$ optische Zweige

$(p-1)$ LO, $2(p-1)$ TO

insgesamt: $3p$ unabhängige Schwingungen für jedes erlaubte $\vec k$

$\hat{=}$ 3 unabhängige Schwingungen pro Atom.

5. Verbindung zur klassischen Elastizitätstheorie

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

U^{harm} eindeutig bestimmt durch $\vec u(\vec r)$, genauer durch $\nabla \vec u(\vec r)$

$\vec u_i - \vec u_j \longrightarrow (\vec R_i - \vec R_j)\,\nabla \vec u(\vec r)\big|_{\vec r = \vec R_j}$ V: Volumen der Elementarzelle

$$\boxed{U^{harm} = \frac{1}{2V}\sum_{\substack{\sigma\tau\\ \mu\nu}} \int d\vec r \left(\frac{\partial}{\partial x_\sigma} u_\mu(\vec r)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_\tau} u_\nu(\vec r)\right) E_{\sigma\mu\tau\nu}}$$

$\hookrightarrow$ Elastizitätstensor

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

im Allg. 21 verschiedene elast. Konstanten, für kubische Kristalle: nur 3 unabh. elastische Konst.

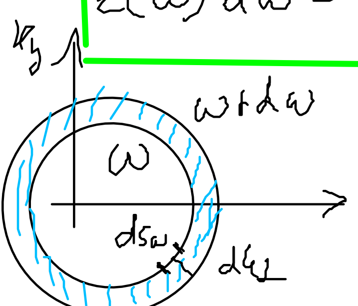
6. Zustandsdichte

geg: $\omega_{\vec k}$, wie groß ist $z(\omega)$ für den entsprechenden Zweig

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

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

$$\boxed{z(\omega)\,d\omega = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{Schale} d^3k = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{Schale} dS_\omega\, dk_\perp}$$



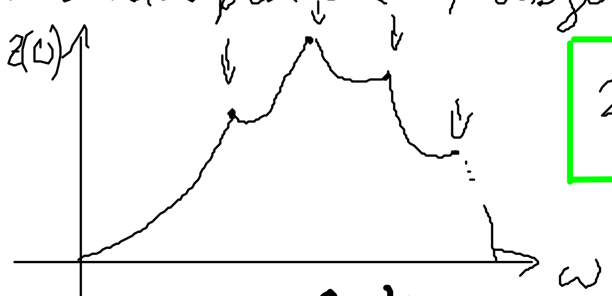
wegen $\nabla_{\vec k}\omega \perp S_\omega$ gilt $|\nabla_{\vec k}\omega|\cdot dk_\perp = d\omega$

$$\Rightarrow \boxed{z(\omega)\,d\omega = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{Schale}\frac{dS_\omega}{|\nabla_{\vec k}\omega|}\,d\omega}$$ für einen Zweig s

S_ω: Fläche konst. Frequenz ω

$$\boxed{|\nabla_{\vec k}\omega| = \frac{\partial\omega}{\partial k}\Big|_{\vec k} = v_g}$$ Gruppengeschwindigkeit

„van Hove-Singularitäten", wenn $\nabla_k \omega = 0$, in 3-dim keine echten Singularitäten, $Z(\omega) \to \infty$ sondern Minima, Maxima und Sattelpunkte, insgesamt für einen Kristall



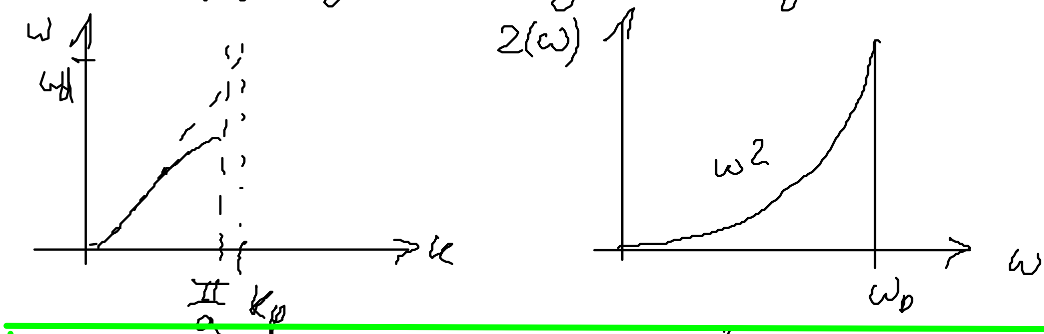
$$\boxed{Z(\omega) = \frac{1}{s(2\pi)^3} \int \frac{dS_\omega}{|\nabla_k \omega|}}$$

Dispersionsrelationen und Zustandsdichten

- experimentell meist aus Neutronenstreuung, auch Röntgenstreuung (Synchrotronstrahlung)

7. Debye-Modell (des Schwingungsspektrums)

bei linearem $\omega(k) = c_s \cdot k$ (isotrop) für alle Zweige
$\Rightarrow$ $\omega(\vec{k})$ für jeden Zweig eine Kugelschale mit Radius $|\vec{k}|$



$$\boxed{Z_s(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{dS_\omega}{c_s} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi^2 k^2}{c_s} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c_s^3} \quad \text{für } \omega < \omega_D}$$

- alle Zweige werden durch 3 akustische Zweige (2 TA, 1 LA) beschrieben
- sehr vereinfachtes Modell, aber für kleine Frequenzen gute Näherung

Faustregel $\omega_L(\vec{k}) \approx 2\omega_T(\vec{k})$ für $\vec{k} \to 0$

Typische Größen (Beisp. Al)

- fundamentaler rez. Gittervektor $g = \frac{2\pi}{a} = 2Å^{-1} = 2 \cdot 10^{10}\ m^{-1}$
- Schallgeschwindigkeit $c_L \sim 5 \cdot 10^3\ \frac{m}{s}$, $c_L \approx 2 c_T$
- Debye-Frequenz $\omega_D \approx \frac{\pi}{a} \cdot c_L \sim 5 \cdot 10^{13}\ s^{-1}$, $\nu_D \sim 10^{13}\ s^{-1}$
- ν^{-1}: „typische Periode einer Gitterschwingung"

4.6 Quantisierung der Gitterschwingungen

BGL für linear einatomige Kette $\boxed{M\ddot{u} = -f(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1})}$

Lösung andersschreiben:

$$\boxed{u_n = u_0\, e^{i(kna - \omega t)} = b_k(t)\, e^{ikna} \quad \text{mit } b_k(t) = u_0(t)\, e^{-i\omega t}}$$

Einsetzen in BGL:

$$\boxed{\ddot{b}_k(t) + \omega^2(k)\, b_k(t) = 0} \quad \text{mit } \boxed{\omega^2(k) = 4\frac{f}{M}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

- für jedes erlaubte k: unabhängige harmonische Oszillatoren entspr. 3-dim Kristall mit N Atomen: $3N$ unabh. harm. Osz.
- Quantenmechanische Oszillatoren mit $\omega_s(\vec{k})$ hat Energieniveaus

$$\boxed{E_{ns} = \left(n_{\vec{k}s} + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega_s(\vec{k})}$$

- Zustand des Kristalls wird vollständig beschrieben (bezügl. Schwingungen) durch Angabe der Quantenzahlen $n_{\vec{k}s}$ der einzelnen Normalschwingungen $E = \sum_{\vec{k}s}\left(n_{\vec{k}s} + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega_s(\vec{k})$

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

„$n_{\vec{k}s}$ Phononen mit $\vec{k}$ im Zweig s sind angeregt"

<u>Analogie</u>: Photon Energie $\hbar\omega$ Impuls $p = \hbar\vec{k}$

Phonon Energie $\hbar\omega_s(\vec{k})$ Quasiimpuls $p = \hbar\vec{k}$ (Kristallimpuls)

Impulserhaltung nur bis auf rez. Gittervektor

4.7 Streuung an zeitl. veränderlichen Strukturen

<u>Etwas</u>: $A_B \sim e^{-i\omega_0 t}\int \rho(\vec{r})\, e^{-i\vec{k}\vec{r}(t)}$ $\quad \vec{r}_i(t) = \vec{R}_i + \vec{u}_i(t)$

<u>1 Atom pro Elem. Zelle</u>: $A_B \sim \sum_i e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} f_a\, e^{-\vec{k}\vec{u}_i(t)} e^{-i\omega_0 t}$

<u>für kleine Auslenkung</u>: $A_B \sim \sum_i e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} f_a\left(1 - i\vec{k}\vec{u}_i(t) - \ldots\right) e^{-i\omega_0 t}$

wieder $\vec{u}_i(t) = \sum e^{i(\vec{k}\vec{R}_i - \omega t)}$

Neben $\boxed{A_{B\,\text{elast}} \sim \sum_i f_a\, e^{-i\vec{k}\vec{R}_i}}$ tritt inelast. Streuung auf $\boxed{A_{B\,\text{inel.}} \sim \sum_i f_a\, e^{-i(\vec{k} \pm \vec{q})\vec{R}_i}\, \vec{k}\vec{e}\, e^{-i(\omega_0 \pm \omega)t}}$