repetition

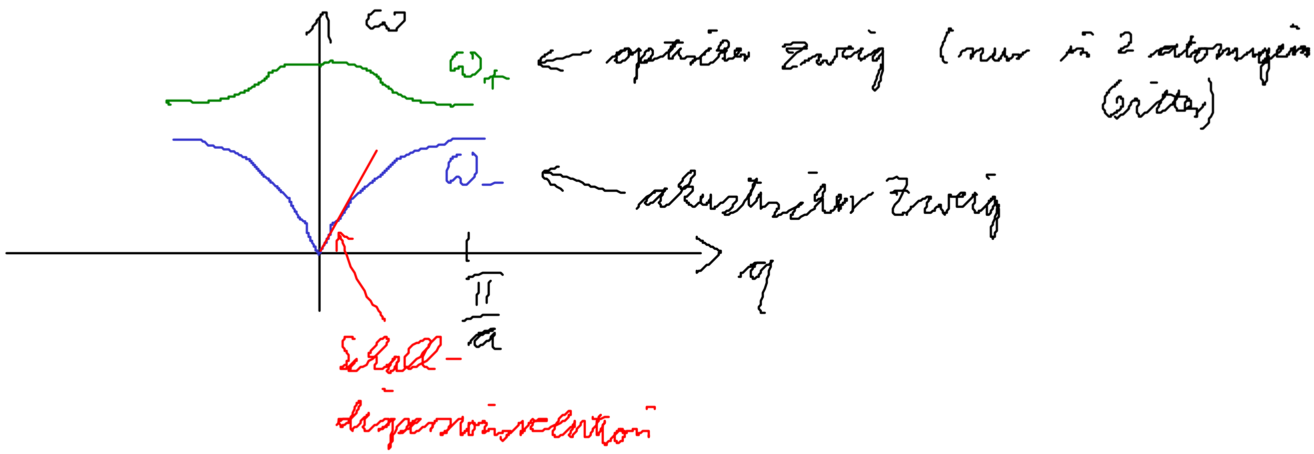
1D lattice concept

→ lattice vibrations

Thermische Eigenschaften — Zustandsdichte Phononen

zweiatomige Basis (1D - Kette)

$$\omega_\pm^2 = \frac{\omega_0^2}{2}\left[1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}\right]$$



optischer Zweig: bei 2-atomigen Kristallen Dipolmomente, die optisch anregbar sind (z.B. NaCl)

bei 1-atomigen Kristallen erwartet man kaum opt. Eigenschaften (IR-Absorption)

ω_+ bei $q = 0$ $\quad \frac{u}{v} = -\frac{M_2}{M_1}$ $\quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}$

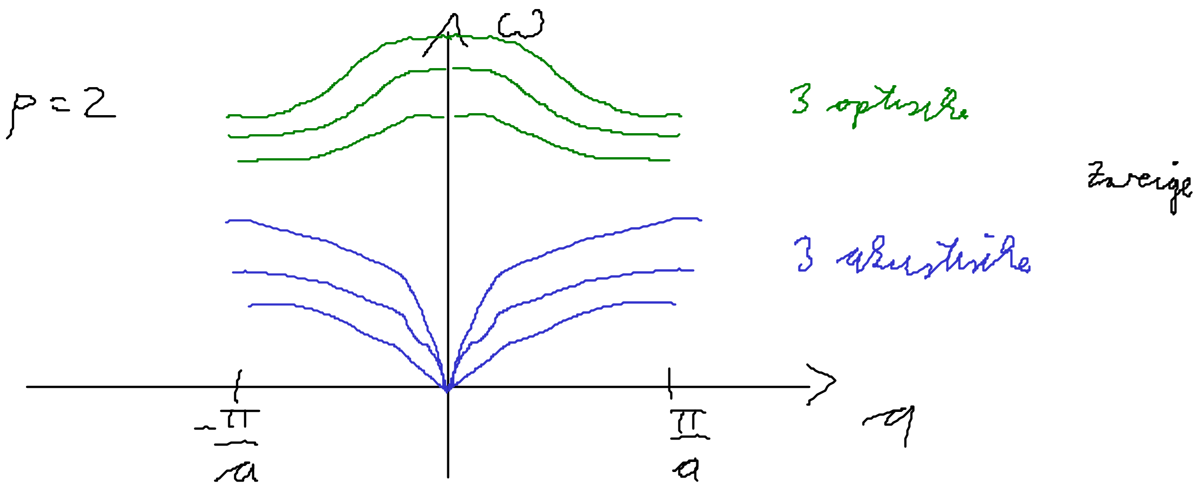
$\omega_0^2 = \frac{2C}{\mu}$, $C = C' = C''$ (Kopplung zw. Atomen)

Für $q \to \frac{\pi}{a}$ $\quad \omega_+^2 = \frac{2C}{M_1} \longrightarrow \frac{v}{u} = 0$ nur leichte Atome schwingen

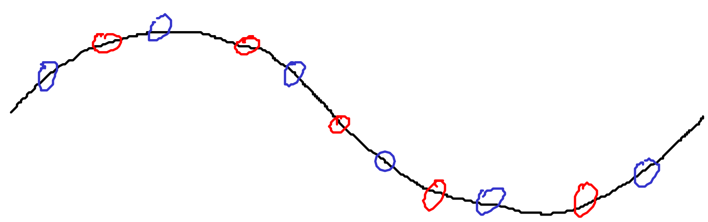
$(M_1 < M_2)$ $\quad \omega_-^2 = \frac{2C}{M_2} \longrightarrow \frac{u}{v} = 0$ " schwere " "

In der Lücke zw. den beiden Frequenzen wird nicht absorbiert, solche Schwingungen sind nicht erlaubt.

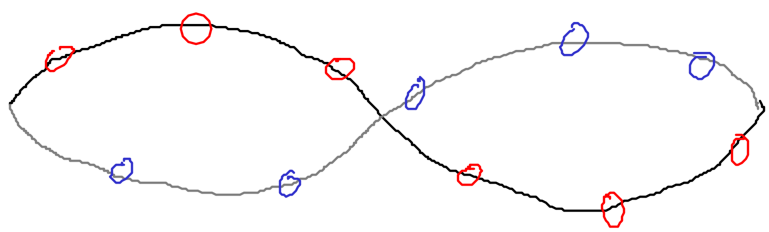
Bei (realem) 3D-Kristall sieht das Bild etwas komplizierter aus, es gibt max.
3 akustische Zweige und $(3p-3)$ optische Zweige
mit p Atomen pro Elementarzelle.



akustische Schwingung



optischer Zweig



6.2 Quantisierung elastischer Wellen = Phononen

Licht (E-M Feld)		Schall (elast. Feld)
$\downarrow$		$\downarrow$
Photonen		Phononen (nur mit Gitter)
$\downarrow$		$\downarrow$
Teilchen & Wellen		Quasiteilchen
Impuls	$\hbar \vec{q}$	Quasiimpuls
Energie	$\hbar \omega_q$	Energie

Normalschwingungen / Eigenfrequenzen

harmonische Oszillator

$$E_{\vec q} = \left(n_{\vec q} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\vec q}$$

(Energie eines Phonons

$n_{\vec q}$ Anregungszustand)

$\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right.$ = Nullpunktsenergie)

Energieverlust

klassisch

Komplexe ω, k

(= Dämpfung)

quantenmech.

Erzeugung + Vernichtung von Phononen

(keine Teilchenzahlerhaltung)

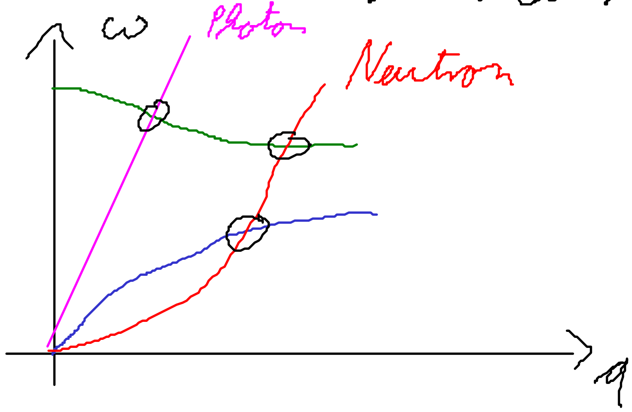
Inelastische Streuung durch Phononen

~Impuls $\vec k_0 + \vec G = \vec k \pm \vec q$

- $\vec k_0$: Photon oder Neutron
- $\vec G$: Gittervektor im rez. Gitter
- $\vec k$: gestreutes Photon/Neutron
- $\vec q$: Quasiimpuls Phonon

+ = Erzeugung

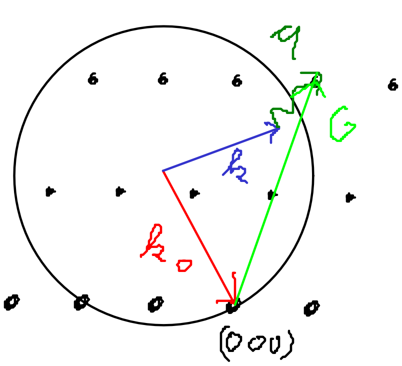
− = Vernichtung



Photonen $E \sim 10$ keV

Neutronen $E \sim 0{,}1$ eV

Streuung von Neutronen / Ewald-Kugel



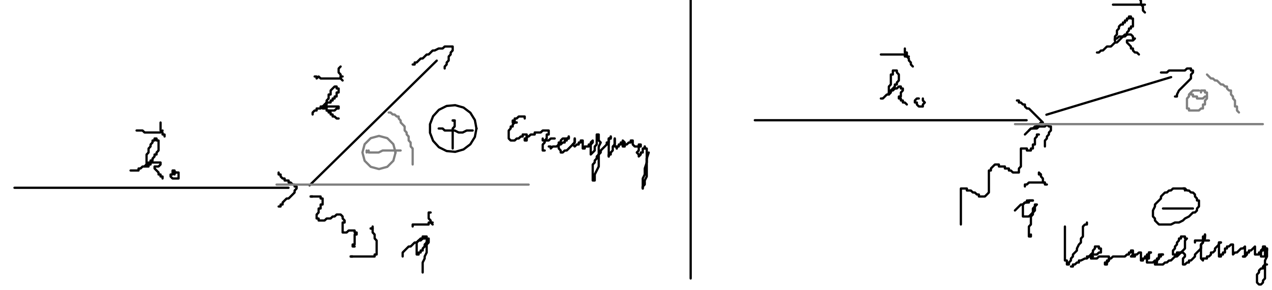
(Bild zum Aufbau)

Lichtstreuung (sichtbares Licht)

$$\lambda_{Photon} \gg a \iff |\vec{k}_0| \ll |\vec{G}| \sim \frac{\pi}{a}$$

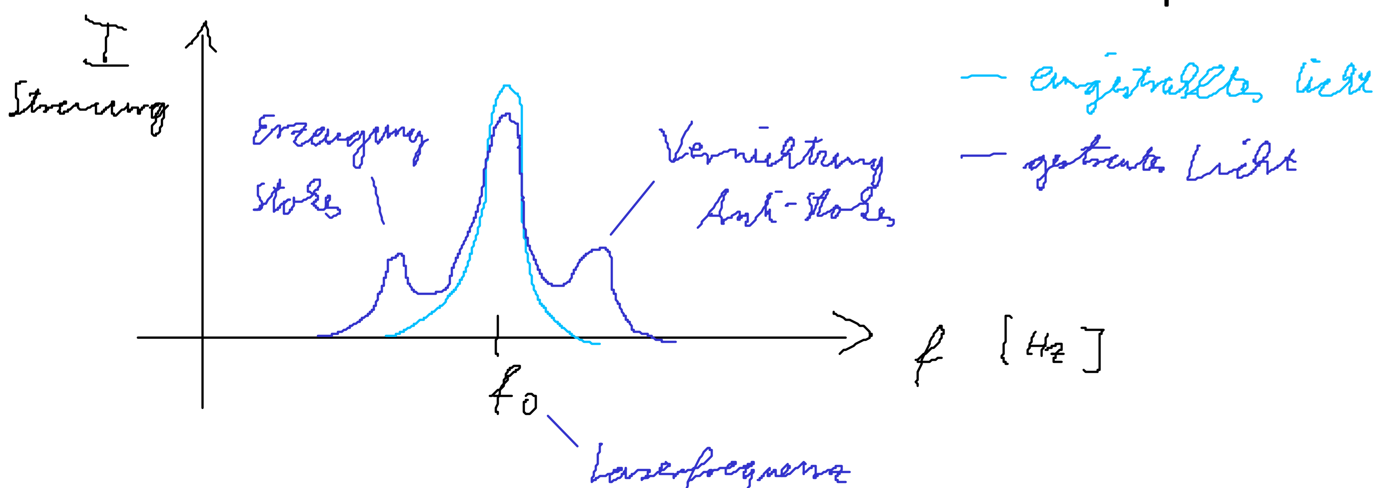
nur 1. Brillouin-Zone $\quad \vec{k}_0 = \vec{k} \pm q$

Stokes - Prozess | anti-Stokes-Prozess



mit optischen Phononen → Raman Streuung

" akustischen " → Brillouin Streuung



$$q^2 = k_0^2 + k^2 - 2kk_0 \cos\Theta \qquad \vec{k} \approx \vec{k}_0$$

$$\Rightarrow q^2 = 2k^2(1 - \cos\Theta)$$

$$\Rightarrow q \propto \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right)$$

Zustandsdichte der Phononen

Phononen haben Spin 0 ⇒ Bose-Einstein-Statistik

Klass. Beschreibung

3D-Kristall $\quad \vec{u}(x,y,z) = \vec{u}(x+L_x, y+L_y, z+L_z)$

Periodische Randbedingungen

Wellen $\quad \vec{u} = u_0 \exp[-i(\omega t - q_x x - q_y y - q_z z)]$

$$q_\alpha = m_\alpha \frac{2\pi}{L_\alpha} \qquad \alpha = x, y, z$$

m = Zahl der Atome zwischen x und $x + Lx$

$\Rightarrow \exp(i q L_\alpha) = 1$

Kristall mit N_α Elementarzellen

$\Rightarrow N_x \cdot N_y \cdot N_y = N$ Elementarzellen

$3N$ Lösungen für period. Randbedingungen

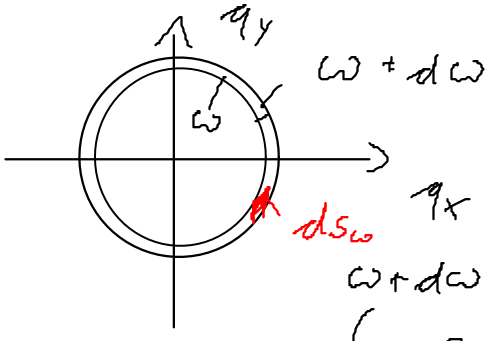
mit p Atomen je Elementarzelle $\rightarrow 3pN$ Lösungen

"Dichte" $\quad \rho_q = D(q) = \dfrac{N}{\frac{(2\pi)^3}{V_{EZ}}} = \dfrac{N V_{EZ}}{(2\pi)^3} = \dfrac{V_K}{(2\pi)^3}$

$N \cdot V_{EZ}$ = Volumen des Kristalls

$$D(q)\,dq = \frac{V}{(2\pi)^3}\,dq$$

Zustandsdichte $\quad D(\omega)$



$$D(\omega)\,d\omega = \rho_q \int_{\omega}^{\omega + d\omega} d^3q = \rho_q \int_{\omega}^{\omega+d\omega} dS_\omega \, dq_\perp$$

Gruppengeschwindigkeit $\quad V_q = \left|\dfrac{d\omega}{d\vec{q}}\right| = |\nabla_q \omega| = \dfrac{d\omega}{dq_\perp}$

$$dq_\perp = \frac{d\omega}{V_q} \qquad d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\substack{\text{Schale} \\ \omega = \text{const}}} \frac{dS_\omega}{V_q}\, d\omega$$