



Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 10**

Vorlesungsstunde: 03.12.2020

Zusammenfassung: Teil 9, 01.12.2020/1

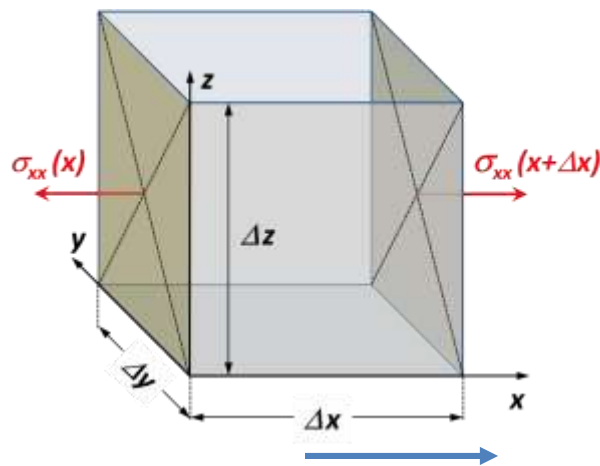
- epitaxiale Verspannung in Dünnschichtheterostrukturen

- technische Größen:
 - (i) Elastizitätsmodul oder **Young-Modul E**: $\sigma = E \frac{\Delta \ell}{\ell}$
 - (ii) **Poissonzahl v** oder **Querzahl μ**: $\nu = \frac{1}{\mu} = \frac{-\Delta d/d}{\Delta \ell/\ell}$
 - (iii) **Kompressionsmodul B**: $p = -\sigma = -B \frac{\Delta V}{V}$
 - (iv) **Schub-, Scher- oder Gleitmodul G**: $\sigma = G \tan \alpha \approx G \alpha$

– Wichtig: nur zwei der 4 Größen sind unabhängig voneinander $\rightarrow \frac{1}{B} = \frac{3}{E} (1 - 2\nu) \quad G = \frac{E}{2(1 + \nu)}$

– kubisches Kristallsystem: $E = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{C_{11} + C_{12}}, \quad \mu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}, \quad G = C_{44}, \quad B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$

- **elastische Wellen (1D):**



$$\Delta F_x = [\sigma_{xx}(x + \Delta x) - \sigma_{xx}(x)] \Delta y \Delta z = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \quad \Rightarrow$$

$$\rho \frac{\partial^2 s_x}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \quad (1D\text{-Fall})$$

mit $\sigma_{xx} = C_{11} e_{xx} = C_{11} \frac{\partial s_x}{\partial x}$

$$\frac{\partial^2 s_x}{\partial t^2} = \frac{C_{11}}{\rho} \frac{\partial^2 s_x}{\partial x^2} \quad (\text{Wellengleichung})$$

- **anisotropes Medium (3D-Fall)** $\frac{\partial^2 s_i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho} \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial j} = \frac{1}{\rho} \sum_{j,k,l} C_{ijkl} \frac{\partial^2 s_l}{\partial j \partial k} \quad (3D\text{-Fall}) \quad i, j, k, l = x, y, z$

Verschiebung s_x des Würfels durch Nettokraft ΔF_x

Zusammenfassung: Teil 9, 01.12.2020/2

- **elastische Wellen in kubischen Kristallen:** $\frac{\partial^2 s_i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho} \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial j} = \frac{1}{\rho} \sum_{j,k,l} C_{ijkl} \frac{\partial^2 s_l}{\partial j \partial k}$ $i, j, k, l = x, y, z$ $s_x = u, s_y = v, s_z = w$

in Voigt-Notation

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz} + C_{14}e_{yz} + C_{15}e_{xz} + C_{16}e_{xy} \\ \sigma_{yy} &= C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz} + C_{24}e_{yz} + C_{25}e_{xz} + C_{26}e_{xy} \\ \sigma_{zz} &= C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz} + C_{34}e_{yz} + C_{35}e_{xz} + C_{36}e_{xy} \\ \sigma_{yz} &= C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz} + C_{44}e_{yz} + C_{45}e_{xz} + C_{46}e_{xy} \\ \sigma_{zx} &= C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz} + C_{54}e_{yz} + C_{55}e_{xz} + C_{56}e_{xy} \\ \sigma_{xy} &= C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} + C_{64}e_{yz} + C_{65}e_{xz} + C_{66}e_{xy} \end{aligned}$$

Beschreibung mit nur 3 Elastizitätsmoduln: C_{11}, C_{12}, C_{44}

- (i) in **[100] Richtung, longitudinal:** Ansatz: $u(x, t) = u_0 \exp(i(kx - \omega t))$ $\omega^2 \rho = C_{11} k^2 \Rightarrow v_{\text{long}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega}{2\pi} \lambda = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}$
- (ii) in **[100] Richtung, transversal:** Ansatz: $v(x, t) = v_0 \exp(i(kx - \omega t))$ $\omega^2 \rho = C_{44} k^2 \Rightarrow v_{\text{trans}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega}{2\pi} \lambda = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$

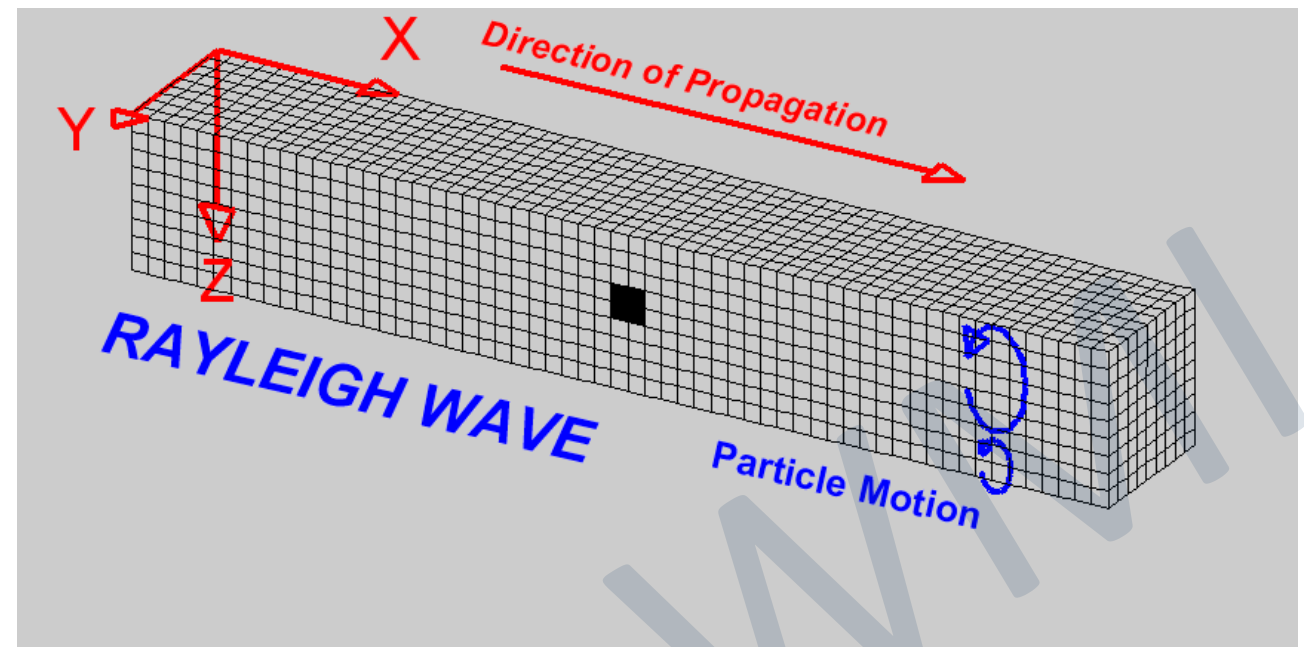
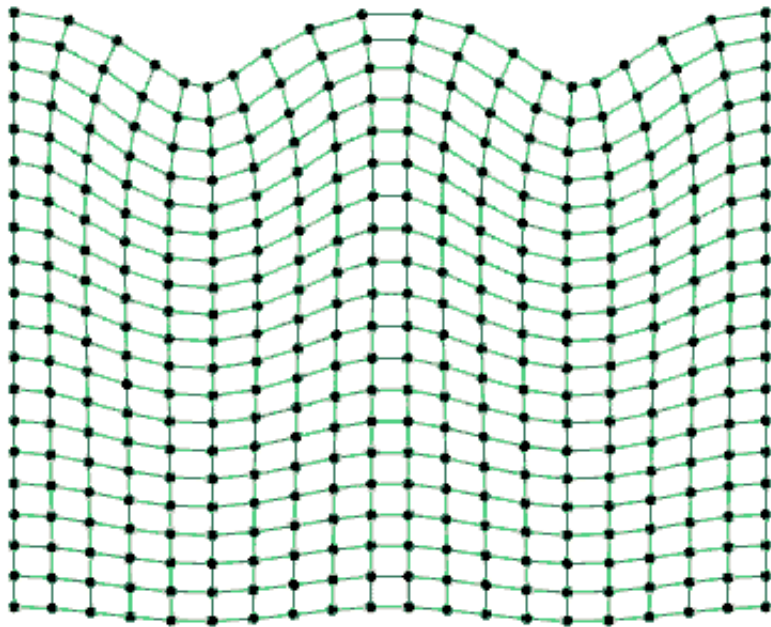
richtungsabhängige effektive „Elastizitätsmodul C_{eff} “

Richtung		[100]	[110]	[111]
longitudinal (Kompressionswelle)	L	C_{11}	$\frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})$	$\frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})$
transversal (Torsionswelle)	T ₁	C_{44}	C_{44}	$\frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44})$
	T ₂	C_{44}	$\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$	$\frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44})$

- **Anwendung: Ultraschallanalyse von Materialien, z.B. Rissbildung**

5 Dynamik des Kristallgitters

- **Bisher:** Betrachtung von Festkörper als elastisches Kontinuum, beschrieben durch elastische Konstanten
- **Jetzt:** Berücksichtigung der diskreten atomaren Struktur des Kristallgitters
- **Beispiel:**
akustische Oberflächenwelle



5 Dynamik des Kristallgitters

- **Frage:** Wie werden Atome durch äußere Kraft aus ihrer Ruhelage ausgelenkt?
- Beantwortung ist im Allgemeinen ein schwieriges Problem:
 - quantenmechanische Beschreibung von Vielteilchenproblem** → Verwendung von Näherungen
 - i. **adiabatische Näherung**
 - Entkopplung der Dynamik von Kernen und Elektronen
 - Elektronen können Kernbewegung beliebig schnell folgen, **Born** und **Oppenheimer** (1927)
 - ii. **harmonische Näherung**
 - Wechselwirkungspotenzial $U(R)$ wird durch Parabel angenähert
- **dynamische Eigenschaften des Kristallgitters beschreiben:**
 - i. spezifische Wärme
 - ii. T -Abhängigkeit des spezifischen elektrischen Widerstands und der Wärmeleitfähigkeit
 - iii. Supraleitung in Metallen
 - iv. dielektrische Eigenschaften von Ionenkristallen
 - v. inelastische Lichtstreuung





Max Born (1882 - 1970)

Nobelpreis für Physik 1954: *"for his fundamental research in quantum mechanics, especially for his statistical interpretation of the wavefunction"*

5.1.1 Die adiabatische Näherung

- Quintessenz: Die sehr leichten Elektronen können der Bewegung der viel schwereren Kerne instantan folgen
 → wir können die statische Potenzialkurve $U(R)$ für die unterschiedlichen Kernabstände verwenden
- Hamilton-Operator ist bekannt

$$\mathcal{H} = \sum_k \frac{\mathbf{p}_k^2}{2M} + \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{k < l} \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_l|} - \sum_{i,k} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k|} +$$

↑

Kerne

↑

Elektronen

↑

El. – El. – WW

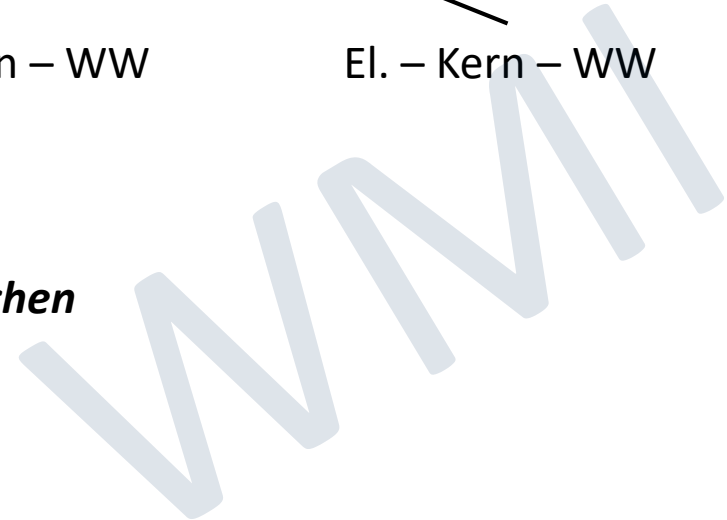
↑

Kern – Kern – WW

↑

El. – Kern – WW

Schwierigkeit: **Summen laufen über eine sehr hohe Zahl von Teilchen**



5.1.1 Die adiabatische Näherung

- Übergang zu normierten, dimensionslosen Größen:

$$\tilde{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{a_B}, \tilde{\mathbf{R}} = \frac{\mathbf{R}}{a_B} \quad \text{mit Bohrschem Radius } a_B = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2 = 0.529 \text{ \AA}$$

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{H}}{2E_H} \quad \text{mit Rydberg-Energie } 2E_H = me^4/(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2 = 27.2 \text{ eV}$$

- normierter Hamilton-Operator:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_k \frac{m}{M} \nabla_k^2}_{\mathcal{J}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_i \nabla_k^2 + \sum_{i<j} \frac{1}{|\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j|} + \sum_{k<l} \frac{Z^2}{|\tilde{\mathbf{R}}_k - \tilde{\mathbf{R}}_l|} - \sum_{i,k} \frac{Z}{|\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{R}}_k|}}_{\mathcal{H}_a} = \mathcal{J} + \mathcal{H}_a$$

kinetische Energie der Kerne

adiabatischer Hamilton-Operator

entscheidend: Massenverhältnis m/M ist sehr klein (typischerweise zwischen 1/1836 und 1/500 000)

→ wir können den Term $\frac{1}{2} \sum_k \frac{m}{M} \nabla_k^2$ als Störung betrachten

Annahme: die schnellen Elektronen können sich der langsamen Bewegung der Kerne zu jedem Zeitpunkt adiabatisch anpassen, so dass sie immer in dem mit \mathcal{H}_a bestimmten Gleichgewichtszustand bleiben

5.1.1 Die adiabatische Näherung

- Konsequenzen der adiabatischen Näherung:
 - i. die Bewegungen der Elektronen und Kerne werden entkoppelt
 - ii. Gesamtenergie

$$E_{\text{tot}} = U_{\text{el}} + T_{\text{ion}}$$

- iii. potentielle Energie der Elektronen kann für jede Konfiguration der Ionen im Verlauf der Ionenbewegung berechnet werden, sie entspricht der jeweils statischen potentiellen Energie $U_{\text{el}}(R)$

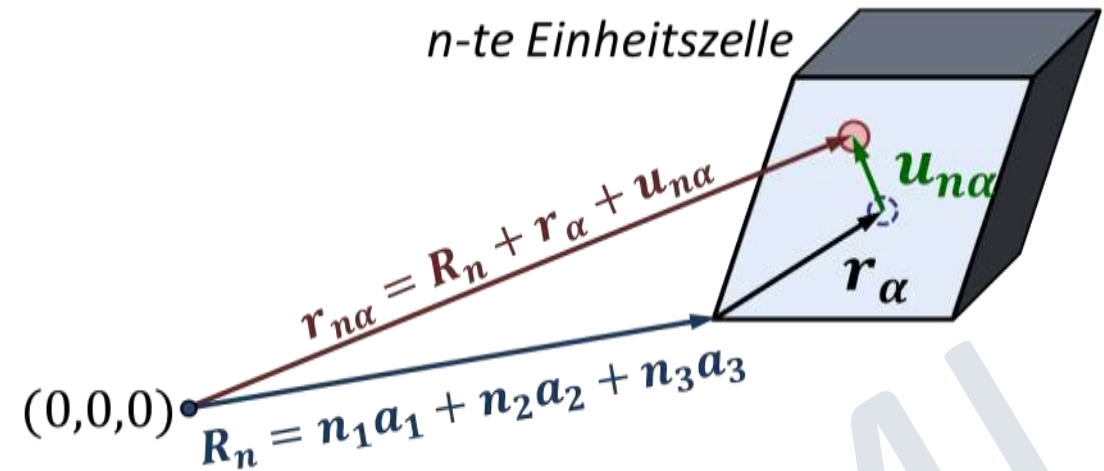
WMI

5.1.2 Die harmonische Näherung

- gesamte potentielle Energie des Elektronensystems: Aufsummieren über alle Paar-Wechselwirkungen

$$U_{\text{el}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m,\alpha,\beta \\ n\alpha \neq m\beta}} \phi_{\text{el}}(\mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta}) \quad \phi_{\text{el}}: \text{Paarwechselwirkungsenergie}$$

$$U_{\text{el}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m,\alpha,\beta \\ n\alpha \neq m\beta}} \phi_{\text{el}}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m + \mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta + \mathbf{u}_{n\alpha} - \mathbf{u}_{m\beta})$$



R_n : Position des n -ten Punkts in Bravais-Gitter

r_α : Gleichgewichtsposition des α -ten Atoms in der Gitterzelle

$r_{n\alpha}$: Position des α -ten Atoms in n -ter Gitterzelle

$u_{n\alpha}$: Auslenkung des α -ten Atoms in n -ter Gitterzelle aus seiner Gleichgewichtsposition

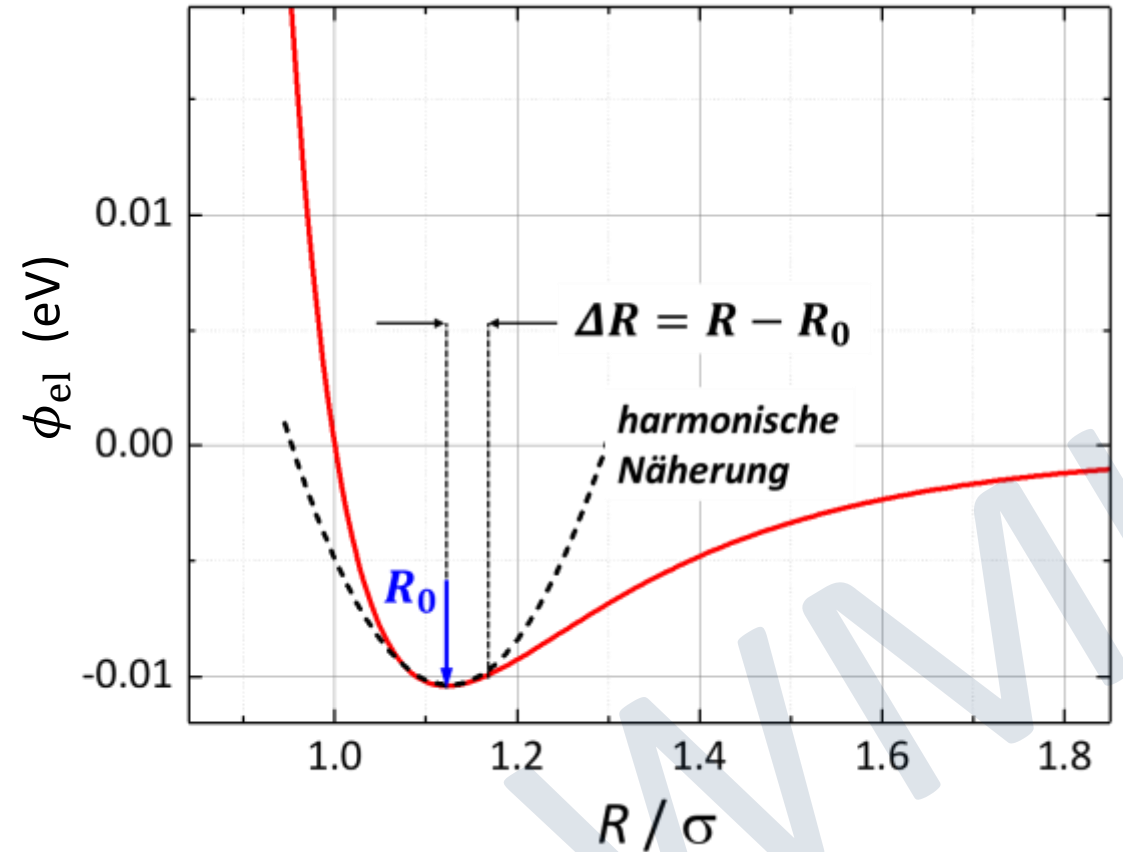
5.1.2 Die harmonische Näherung

- **Harmonische Näherung:**

Annäherung des oft komplizierten Verlaufs des Paarwechselwirkungspotenzials $\phi_{el}(R)$ durch ein harmonisches Potenzial um Ruhelage $R = R_0$

$$\phi_{el}(R) \propto (R - R_0)^2$$

- Näherung ist nur für kleine Abweichungen $\Delta R = R - R_0$



- Abweichungen von harmonischer Näherung:

- ➔ **anharmonische Effekte**

- ➔ haben große Bedeutung, führen z.B. zur thermischen Ausdehnung von FK

5.1.2 Die harmonische Näherung

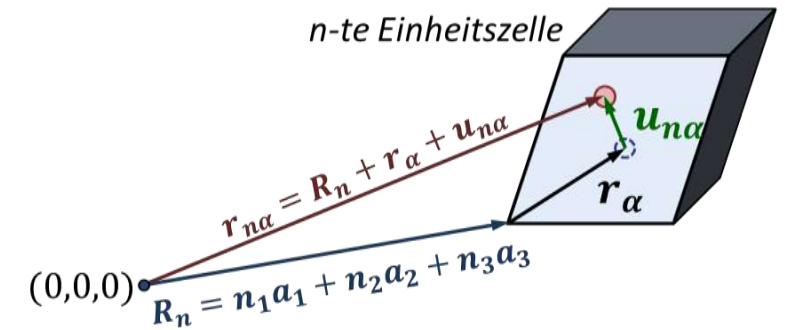
- Taylor-Entwicklung von $\phi_{el}(R)$ um $R = R_0$:

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = f(\mathbf{r}) + \mathbf{a} \nabla f(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} (\nabla \cdot \mathbf{a})^2 f(\mathbf{r}) + \dots$$

$$U_{el} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m,\alpha,\beta \\ n\alpha \neq m\beta}} \phi_{el}(\mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta})$$

$$U_{el} = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m,\alpha,\beta \\ n\alpha \neq m\beta}} \phi_{el}(\mathbf{r}_{n\alpha}^0 - \mathbf{r}_{m\beta}^0)}_{U_0} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{n,m,\alpha,\beta} (\mathbf{u}_{n\alpha} - \mathbf{u}_{m\beta}) \nabla \phi_{el}(\mathbf{r}_{n\alpha}^0 - \mathbf{r}_{m\beta}^0)}_{= 0, \text{ da Summe aller Kräfte auf ein Atom im Gleichgewichtszustand verschwinden muss}} + \frac{1}{4} \sum_{n,m,\alpha,\beta} [(\mathbf{u}_{n\alpha} - \mathbf{u}_{m\beta}) \nabla]^2 \phi_{el}(\mathbf{r}_{n\alpha}^0 - \mathbf{r}_{m\beta}^0)$$

$$\Rightarrow U_{el}^{harm} = U_0 + \frac{1}{4} \sum_{n,m,\alpha,\beta} [(\mathbf{u}_{n\alpha} - \mathbf{u}_{m\beta}) \nabla]^2 \phi_{el}(\mathbf{r}_{n\alpha}^0 - \mathbf{r}_{m\beta}^0)$$



potentielle Energie in harmonischer Näherung
 (U_0 kann als konstanter Term weggelassen werden)

5.1.2 Die harmonische Näherung

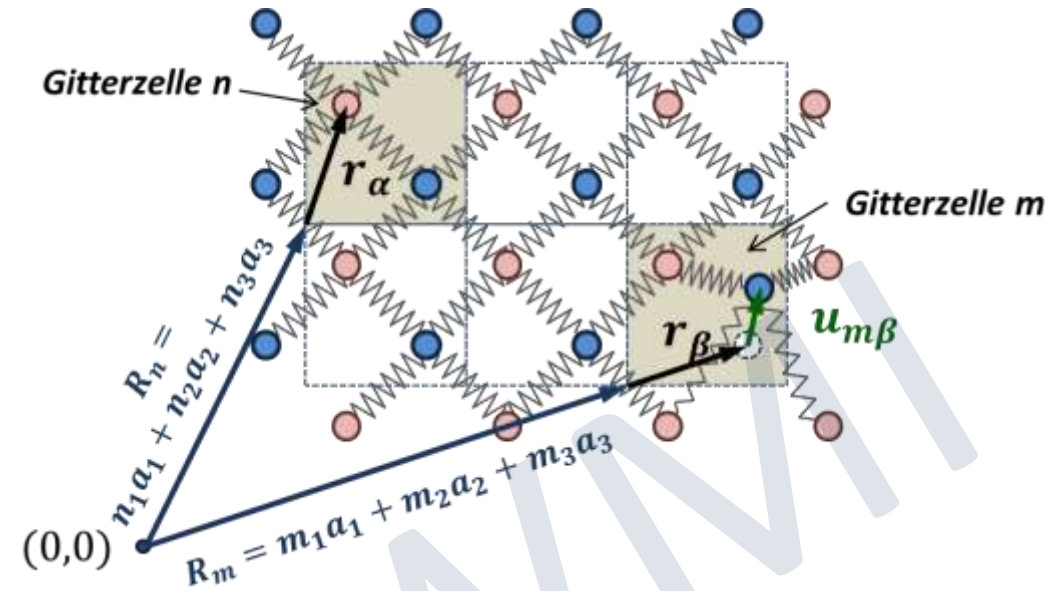
- verallgemeinerte Federkonstanten als 2. Ableitungen der potentiellen Energie an den Gleichgewichtspositionen

➔
$$C_{nai}^{m\beta j} = \frac{\partial^2 \phi_{el}(\mathbf{r}_{n\alpha}^0 - \mathbf{r}_{m\beta}^0)}{\partial r_{nai} \partial r_{m\beta j}} \quad i, j = x, y, z$$

Kopplungskonstanten

➔
$$F_{nai} = -C_{nai}^{m\beta j} u_{m\beta j} \quad \text{Kräfte auf Atome}$$

Kraft auf Atom α in Gitterzelle n in Richtung i durch Auslenkung von Atom β in Zelle m in Richtung j



- aus Translationsinvarianz des Kristallgitters folgt:

$$C_{nai}^{m\beta j} = C_{ai}^{(m-n)\beta j}$$

Kopplungskonstante zwischen Atomen, die gleichen Abstand haben, ist gleich

➔ Kopplungskonstante hängt nicht von absoluten Werten von n und m , sondern nur von ihrer Differenz ($m - n$) ab

5.2 Klassische Theorie

- **Diskussion der Schwingungen des Gitters mit den Gesetzen der klassischen Mechanik**

quantenmechanische Diskussion: siehe R. Gross, A. Marx: Festkörperphysik (3. Auflage, Anhang A)

- **Ziel:**

Ableiten des Zusammenhangs zwischen Schwingungsfrequenz ω und Wellenvektor \mathbf{q}

$$\omega(q) \quad \text{Dispersionsrelation}$$

klassische und quantenmechanische Diskussion liefern gleiches Ergebnis für Dispersionsrelation

- **Erwartung:**

Dispersionsrelation $\omega(q)$ für $q \rightarrow 0$ (langwelliger Grenzfall) sollte mit dem Ergebnis der Kontinuumsbeschreibung übereinstimmen

WMI

5.2.1 Bewegungsgleichungen

- Newtonsche Mechanik: Summe der Kopplungskräfte = Summe der Trägheitskräfte

$$M_\alpha \frac{\partial^2 u_{n\alpha i}}{\partial t^2} + \sum_{m,\beta,j} C_{n\alpha i}^{m\beta j} u_{m\beta j} = 0$$

Auslenkung $u_{n\alpha i}$ eines Atoms α in Gitterzelle n in Richtung i ergibt sich aus Gleichgewicht zwischen Kopplungskräften und Trägheitskräften

Problem: wir haben Festkörper mit N Einheitszellen und r' Atomen pro Einheitszelle

→ System aus $r = 3N' = 3r'N$ **gekoppelten Differentialgleichungen**

Lösung: wir nutzen periodische Struktur des Festkörpers aus

→ geeigneter Ansatz, der zu **Entkopplung der Differentialgleichungen** führt

- Ansatz: wir schreiben Auslenkungen $u_{n\alpha i}$ als ebene Wellen hinsichtlich der Zellkoordinaten

$$u_{n\alpha i} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} A_{\alpha i}(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n - \omega t)}$$

Welle, die nur an den Gitterpunkten \mathbf{R}_n definiert ist

5.2.1 Bewegungsgleichungen

- Einsetzen des Lösungsansatzes $u_{nai} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} A_{\alpha i}(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n - \omega t)}$ in DGL $M_\alpha \frac{\partial^2 u_{nai}}{\partial t^2} + \sum_{m, \beta, j} C_{nai}^{m\beta j} u_{m\beta j} = 0$ liefert

$$-\omega^2 \sqrt{M_\alpha} A_{\alpha i}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} + \sum_{\beta, j} \sum_m \frac{1}{\sqrt{M_\beta}} C_{nai}^{m\beta j} A_{\beta j}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} = 0$$

$$-\omega^2 A_{\alpha i}(\mathbf{q}) + \underbrace{\sum_{\beta, j} \sum_m \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} C_{nai}^{m\beta j} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} A_{\beta j}(\mathbf{q})}_{\text{dynamische Matrix } D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q})} = 0$$

\rightarrow nur abhängig von $n - m$, da $C_{nai}^{m\beta j} = C_{\alpha i}^{(m-n)\beta j}$

$$-\omega^2 A_{\alpha i}(\mathbf{q}) + \sum_{\beta, j} D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) A_{\beta j}(\mathbf{q}) = 0$$

Reduktion auf homogenes Gleichungssystem der Ordnung $3r'$

- Beispiel:** einatomige Basis, $r' = 1 \rightarrow$ System aus nur $3r' = 3$ gekoppelten Differentialgleichungen
 \rightarrow Vereinfachung durch Translationsinvarianz des Gitters ist riesig !!
- Mathematik:** (ein homogenes, lineares Gleichungssystem besitzt nur dann nicht-triviale Lösungen, wenn die Koeffizientendeterminante verschwindet)

$$\det \{ D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) - \omega^2 \mathbf{1} \} = 0$$

- wir erhalten $r = 3r'$ Lösungen $\omega(\mathbf{q})$ für jeden Wellenvektor \mathbf{q}
- $\omega(\mathbf{q})$ nennen wir **Dispersionsrelation**
- die $r = 3r'$ Lösungen bezeichnen wir als **Zweige der Dispersionsrelation**

5.2.2 Kristallgitter mit einatomiger Basis

i. Longitudinale Gitterschwingungen:

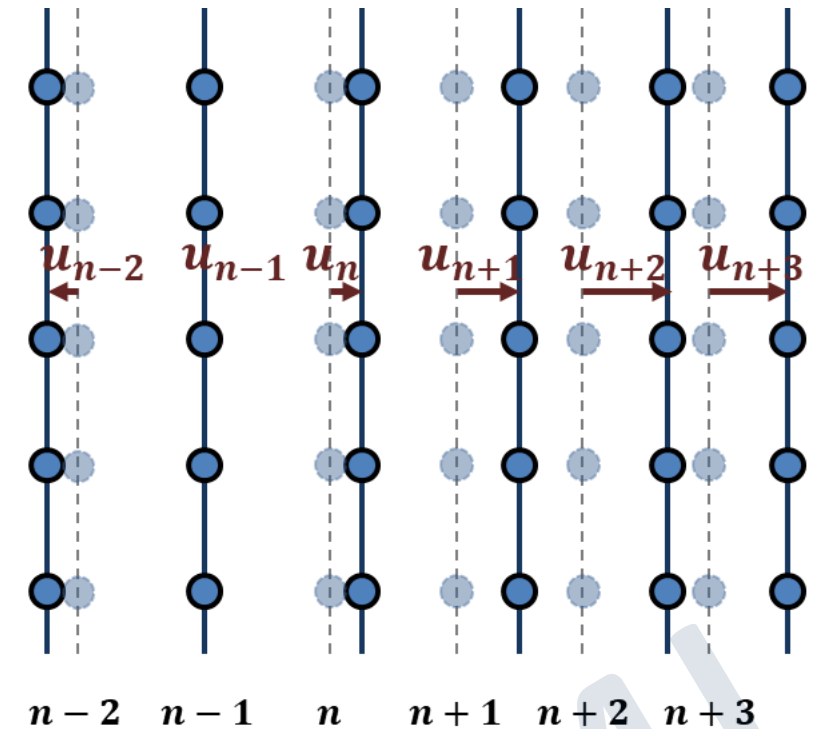
- Netzebenen des Kristalls schwingen in Richtung ihrer Normalen parallel zu Wellenvektor \mathbf{q}
 - Auslenkung der Netzebene n ist u_n
 - vertikalen Kraftkomponenten kompensieren sich:
1D- Problem
- Kraft auf ein Atom der Netzebene n durch Netzebene $m = n + p$ ist in harmonischer Näherung $\propto (u_{n+p} - u_n)$
 - Gesamtkraft auf ein Atom der Netzebene n

$$F_n = \sum_p C_p (u_{n+p} - u_n)$$

i, j : fallen weg wegen 1D-Problem
 $\alpha, \beta = 1$: ein Atom pro Zelle

allgemein gilt: $F_{n\alpha i} = -C_{n\alpha i}^{m\beta j} u_{m\beta j}$

Kopplungskonstante C_n^m zwischen Netzebenen n und m wird durch C_p mit $p = m - n$ ersetzt
 ➔ möglich, da Kopplung nur vom Abstand der Netzebenen abhängt



5.2.2 Kristallgitter mit einatomiger Basis

- Differentialgleichung

- Gleichsetzen von Kopplungskräften und Trägheitskräften:

$$M \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} - \sum_p C_p (u_{n+p} - u_n) = 0$$

$$M_\alpha \frac{\partial^2 u_{nai}}{\partial t^2} + \sum_{m,\beta,j} C_{nai}^{m\beta j} u_{m\beta j} = 0$$

- Lösungsansatz:

$$u_n = A e^{i(q pa - \omega t)} \quad R_p = pa \text{ mit } a = \text{Netzebeneabstand}$$

- Einsetzen ergibt:

$$-\omega^2 M A e^{-i\omega t} - \sum_p C_p (A e^{iqpa} e^{-i\omega t} - A e^{-i\omega t}) = 0$$

$$-\omega^2 M - \sum_p C_p (e^{iqpa} - 1) = 0$$

- aus Symmetriegründen ist $C_p = C_{-p}$:

$$-\omega^2 M = \sum_{p=1}^{\infty} C_p (e^{iqpa} + e^{-iqpa} - 2) = 2 \sum_{p=1}^{\infty} C_p [\cos(qpa) - 1]$$



5.2.2 Kristallgitter mit einatomiger Basis

- Dispersionsrelation

- Umschreiben von $-\omega^2 M = 2 \sum_{p=1}^{\infty} C_p [\cos(qpa) - 1]$ ergibt:

$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{p=1}^{\infty} C_p [1 - \cos(qpa)]$$

Dispersionsrelation für longitudinale Wellen

- oft kann in guter Näherung nur die NN-Kopplung C_1 berücksichtigt werden

$$\omega^2 = \frac{2C_1}{M} [1 - \cos(qa)] = \frac{4C_1}{M} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$

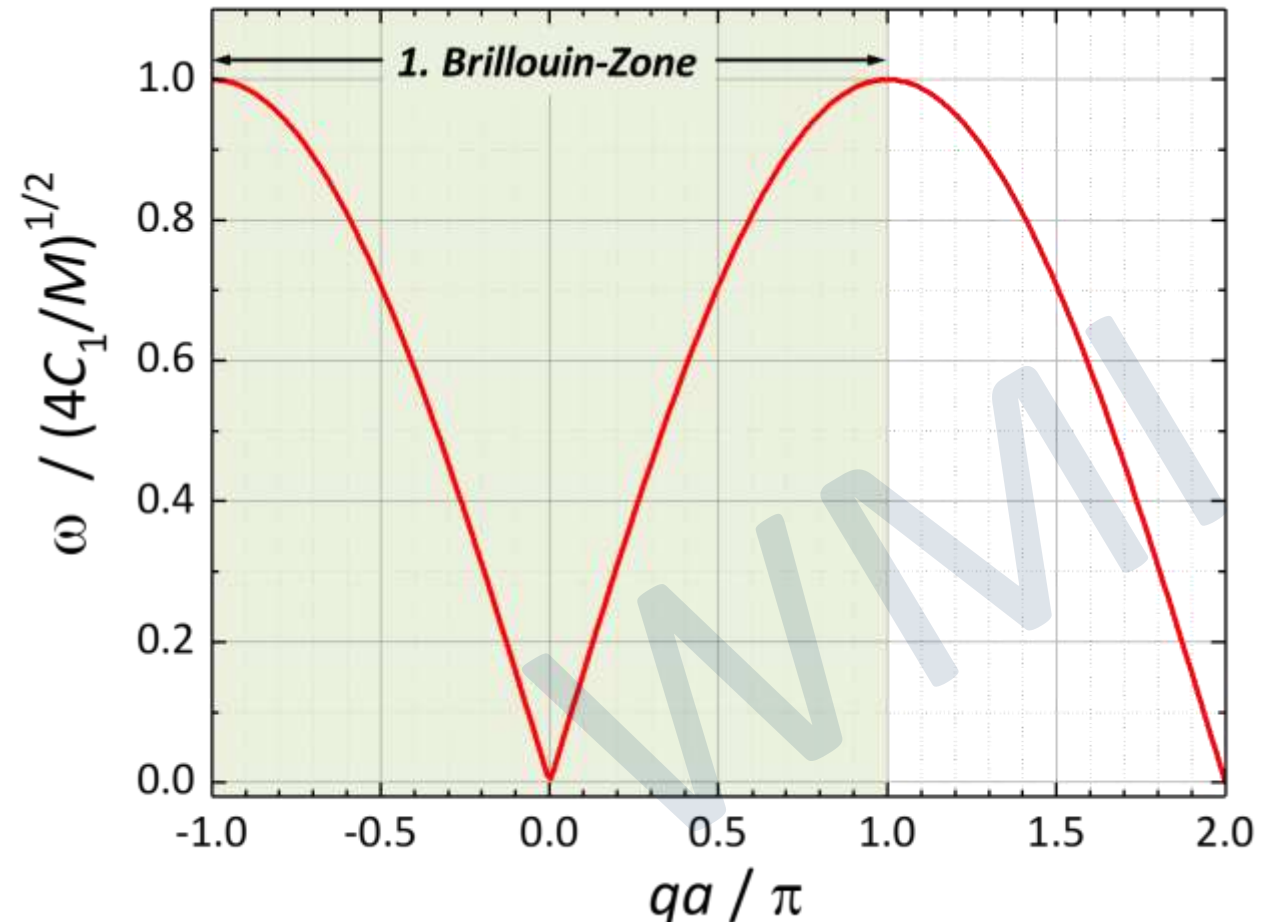
$$\sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x)$$

- Dispersionsrelation ist periodisch:

$$\omega(q) = \omega\left(q + n \cdot \frac{2\pi}{a}\right)$$

Periode entspricht der Länge des reziproken Gittervektors $G_{\min} = 2\pi/a$

- es gilt: $\omega(q) = \omega(-q)$



5.2.2 Kristallgitter mit einatomiger Basis

- Eigenschaften der Dispersionsrelation $\omega^2 = \frac{2C_1}{M} [1 - \cos(qa)] = \frac{4C_1}{M} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$

- Gruppengeschwindigkeit:**

Ausbreitungsgeschwindigkeit des Wellenpakets

$$\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q})$$

$$v_g = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{M}} \cos\left(\frac{1}{2} qa\right)$$

- Grenzfälle:**

- i. $q = \pi/a$: Rand der 1. Brillouin-Zone

- $v_g \rightarrow 0 \rightarrow$ stehende Wellen

- maximale Schwingungsfrequenz $\omega_{\max} = \sqrt{4C_1/M}$

- ii. $q \ll \pi/a$: Zentrum der 1. Brillouin-Zone

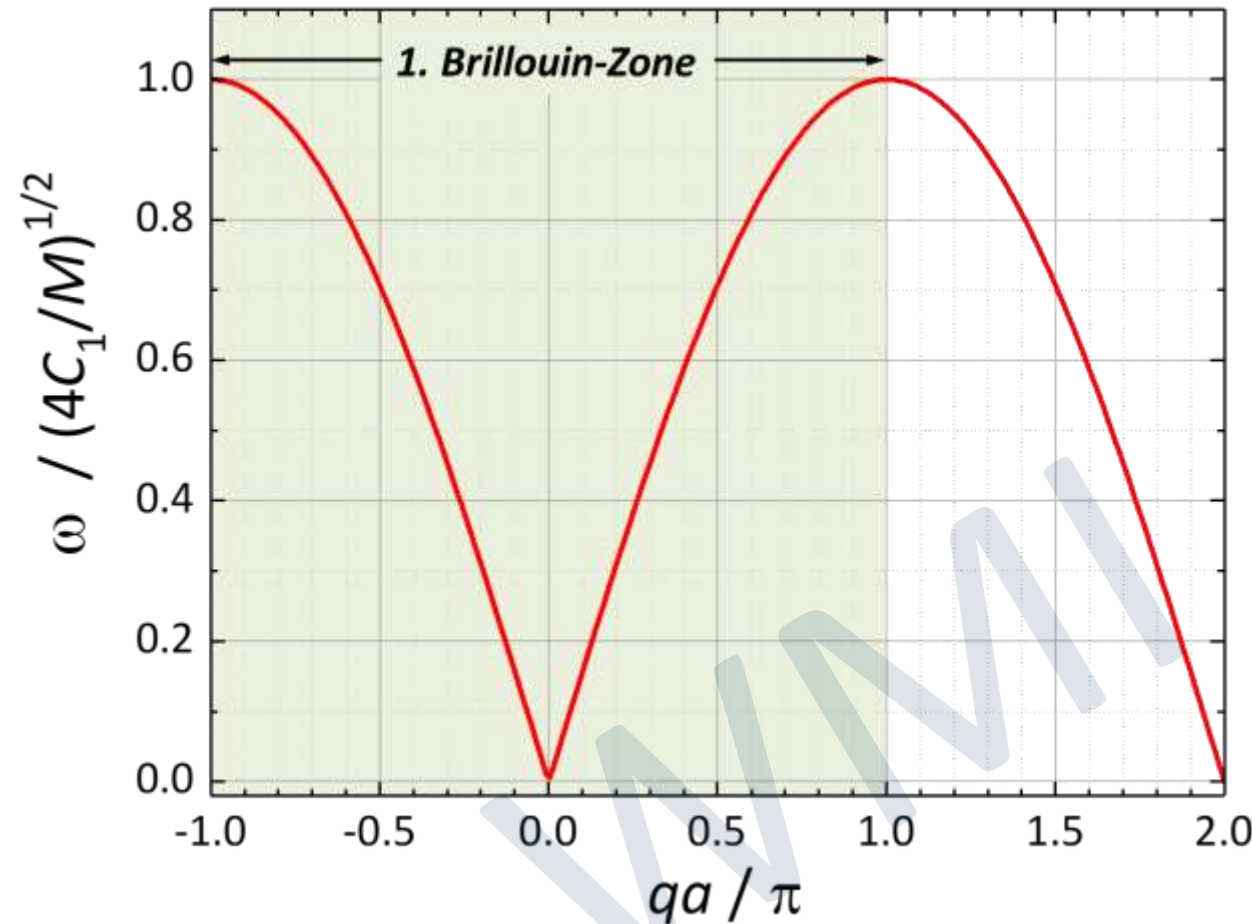
- langwelliger Grenzfall: $\lambda = 2\pi/q \gg a$

- $v_g \approx \sqrt{C_1 a^2/M} \approx \text{const.}$

- Kontinuumsbeschreibung: $v_g = \sqrt{C_{11}/\rho} \approx \text{const.}$

- Abschätzung:**

aus $v_g \approx \omega_{\max} a$ ergibt sich mit der typischen Schallgeschwindigkeit $v_g \sim 4000$ m/s und $a \approx 0.2$ nm $\omega_{\max} \approx 2 \times 10^{13}$ 1/s



5.2.2 Kristallgitter mit einatomiger Basis

- Bedeutung der 1. Brillouin-Zone

- **Fragen:** Woher kommt Periodizität von $\omega(\mathbf{q})$? Welcher Bereich der Wellenvektoren \mathbf{q} ist physikalisch sinnvoll ?

- **Tatsache:** $\omega(q)$ ist periodisch in q mit Periode $2\pi/a$

- Periodenlänge im reziproken Raum entspricht minimaler Länge $2\pi/a$ eines reziproken Gittervektors $G_{\min} = 2\pi/a$

- **dynamische Matrix:**

$$D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) = \sum_m \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} C_{n\alpha i}^{m\beta j} \underbrace{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)}}_{\text{Summe über Phasenfaktoren}}$$

da \mathbf{R}_n und \mathbf{R}_m Vektoren des Bravais-Gitters sind, ändert sich nichts, wenn wir \mathbf{q} durch $\mathbf{q} + \mathbf{G}$ ersetzen, da $\exp(i \mathbf{G} \cdot \mathbf{R}) = 1$

$$\Rightarrow D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) = D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \quad \text{und} \quad \omega(\mathbf{q}) = \omega(\mathbf{q} + \mathbf{G})$$

- **Zeitumkehrinvarianz** (da vor- und zurücklaufende Wellen durch Zeitumkehr miteinander verbunden sind, müssen Frequenzen gleich sein)

$$\Rightarrow \omega(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$$

- **Folgerung** es ist völlig ausreichend, den Bereich der **1. Brillouin-Zone** zu betrachten

$$\Rightarrow -\frac{\pi}{a} \leq q \leq +\frac{\pi}{a} \quad 2q < G_{\min} = \frac{2\pi}{a}$$

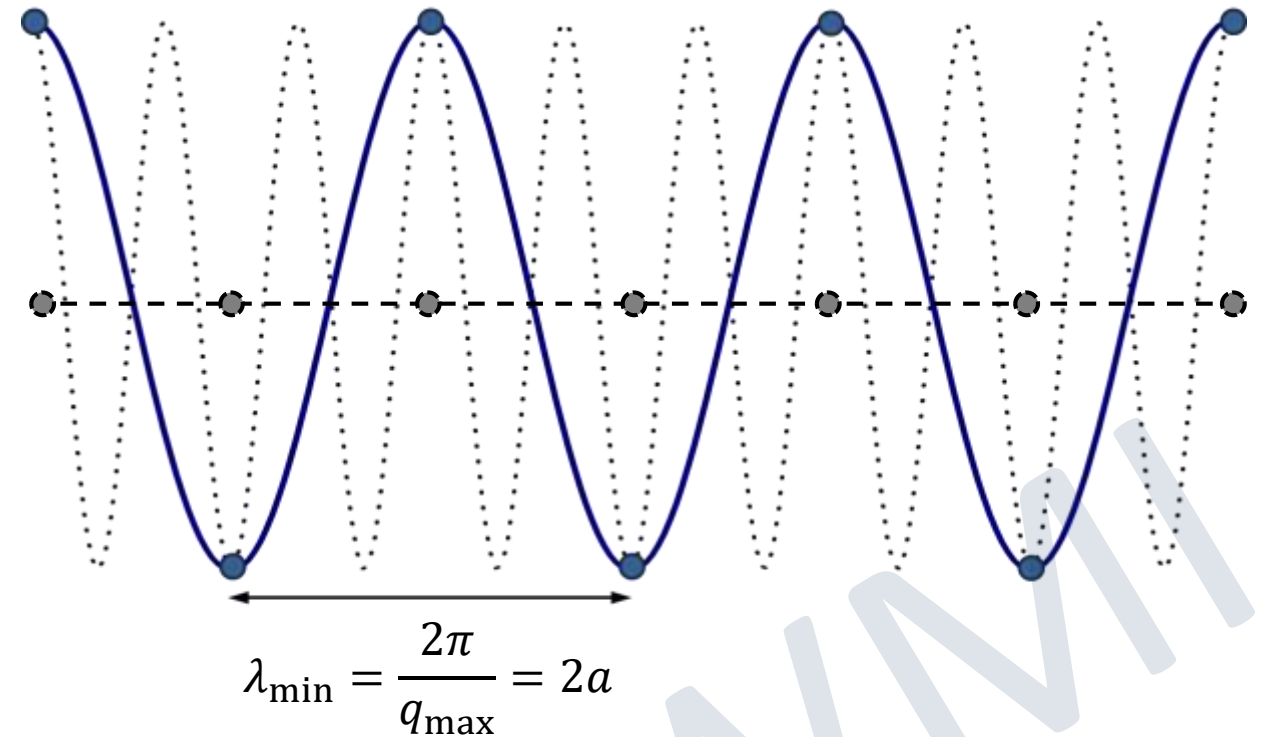
5.2.2 Kristallgitter mit einatomiger Basis

- anschauliche Erklärung dafür, dass es ausreicht, die 1. Brillouin-Zone zu betrachten

Welle mit größerem q , d.h. kleinerer Wellenlänge $\lambda = 2\pi/q$ gibt keine zusätzliche Information, da nur die Auslenkung der Gitteratome, nicht aber der Wellenverlauf zwischen den Atome interessiert

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi}{q_{\max}} = 2a$$

$$\Rightarrow q_{\max} = \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi}{a}$$



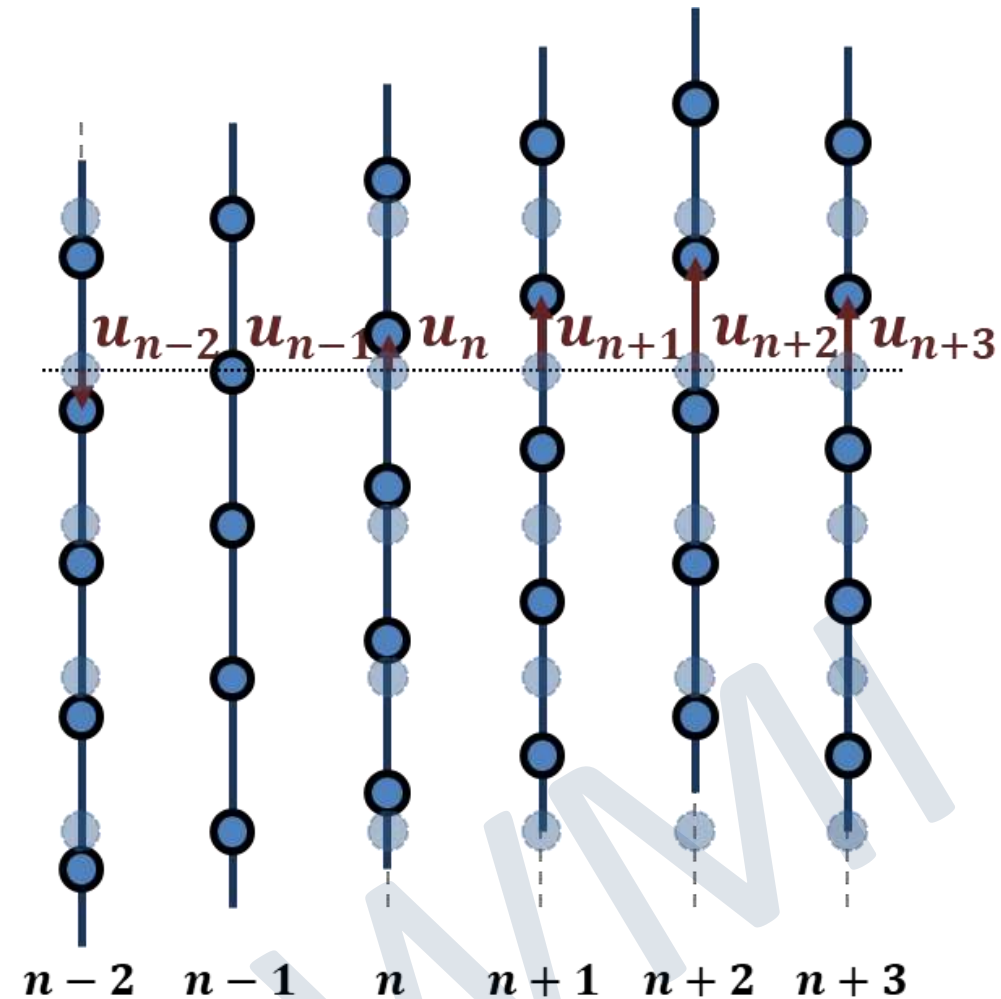
5.2.2 Kristallgitter mit einatomiger Basis

ii. Transversale Gitterschwingungen:

- Netzebenen des Kristalls schwingen senkrecht zu Wellenvektor \mathbf{q}
- Auslenkung der Netzebene n ist u_n
- horizontale Kraftkomponenten kompensieren sich: 1D- Problem

äquivalentes Ergebnis für Dispersionsrelation zu longitudinalen Wellen mit anderen Kopplungskonstanten C_p

- rein transversale oder longitudinale Wellen sind nur bei Ausbreitung entlang von Symmetrieachsen möglich, z.B. [100], [110] und [111] bei kubischem Kristall
- im Allgemeinen erhält man gemischte Wellen



- Dynamik des Kristallgitters:**

Beschreibung der Bewegung von einzelnen Atomen in Kristallgitter → komplex, da jedes Atom mit jedem über „Federnetzwerk“ wechselwirkt

- (i) **adiabatische Näherung** (Elektronen können Bewegungen der Kerne instantan folgen)
- (ii) **harmonische Näherung** (parabelförmiges Paar-WW-Potenzial, Rückstellkraft \propto Auslenkung)

- Auslenkung $u_{m\beta}$ von Atom β in Gitterzelle m resultiert in Kraft $F_{n\alpha}$ auf Atom α in Gitterzelle n**

$$F_{n\alpha i} = -C_{n\alpha i}^{m\beta j} u_{m\beta j}$$

Kopplungskonstanten

$$C_{n\alpha i}^{m\beta j} = \frac{\partial^2 \phi_{el}}{\partial r_{n\alpha i} \partial r_{m\beta j}} \quad i, j = x, y, z$$

$C_{n\alpha i}^{m\beta j} = C_{\alpha i}^{(m-n)\beta j}$ hängen wegen **Translationsinvarianz von FK** nur von $m - n$ ab !!

- Bewegungsgleichung** $M_{\alpha} \frac{\partial^2 u_{n\alpha i}}{\partial t^2} + \sum_{m, \beta, j} C_{n\alpha i}^{m\beta j} u_{m\beta j} = 0$

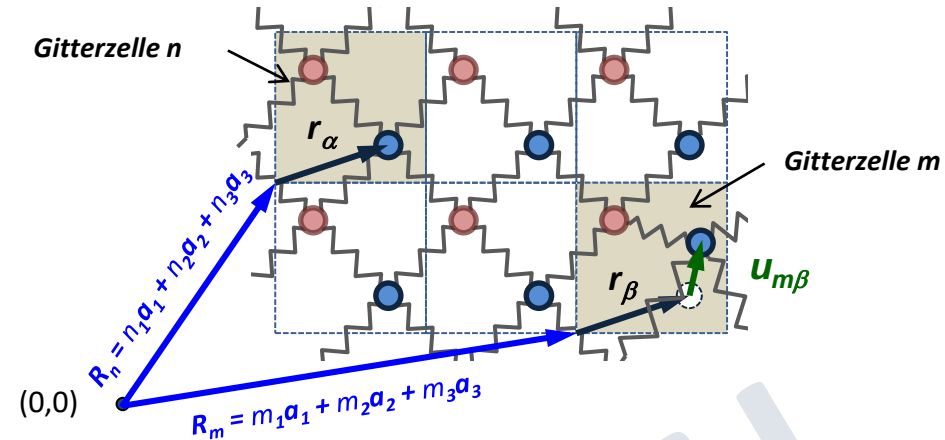
Trägheitskraft

Rückstellkräfte durch WW mit allen anderen Atomen

Lösungsansatz: $u_{n\alpha i} = \frac{1}{\sqrt{M_{\alpha}}} A_{\alpha i}(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n - \omega t)}$

Reduktion auf homogenes Gleichungssystem der Ordnung $3r'$

$$-\omega^2 A_{\alpha i}(\mathbf{q}) + \sum_{\beta, j} D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) A_{\beta j}(\mathbf{q}) = 0$$



$3r'N$ gekoppelte DGLn

N : Zahl der Gitterzellen

r' : Zahl der Basisatome

- wir erhalten $r = 3r'$ Lösungen $\omega_r(\mathbf{q})$ für jeden Wellenvektor \mathbf{q}
- $\omega_r(\mathbf{q})$ nennen wir **Dispersionsrelation**
- die $r = 3r'$ Lösungen bezeichnen wir als **Zweige der Dispersionsrelation**

- longitudinale Schwingungen:** einfachster Fall: 1D-System, einatomige Basis $\rightarrow 1 \cdot r' = 1, \alpha = \beta = 1, m - n = p$

$$F_{nai} = -C_{nai}^{m\beta j} u_{m\beta j} \quad \rightarrow \quad F_n = \sum_p C_p (u_{n+p} - u_n)$$

$$M \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} - \sum_p C_p (u_{n+p} - u_n) = 0$$

Ansatz: $u_n = A e^{i(qpa - \omega t)}$ $R_p = pa$

Lösung: $\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{p=1}^{\infty} C_p [1 - \cos(qpa)]$ **Dispersionsrelation**

nur NN-WW:
 $m - n = p = 1$

$$\omega^2 = \frac{2C_1}{M} [1 - \cos(qa)] = \frac{4C_1}{M} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$

Gruppengeschwindigkeit: $v_q = \frac{\partial \omega(q)}{\partial q} = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{M}} \cos \frac{qa}{2}$

Grenzfälle: $q \ll 1/a: \omega = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{M}} q = v_s q$ **Schallgeschwindigkeit v_s**

$q = \pi/a: \omega = \sqrt{\frac{4C_1}{M}}, v_q = 0$ (stehende Welle)

- 1. Brillouin-Zone:** $\omega(\mathbf{q}) = \omega(\mathbf{q} + \mathbf{G})$ $\omega(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$
es ist ausreichend, **nur den Bereich der 1. BZ** zu betrachten: $-\pi/a \leq q \leq +\pi/a$

- transversale Schwingungen:**

äquivalentes Ergebnis zu longitudinalen Wellen: $\omega^2 = \frac{4C_1}{M} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$ mit anderem C_1

