Physik der Kondensierten Materie 1

Rudolf Gross

WS 2020/2021

Teil 11

Vorlesungsstunde: 08.12.2020

Zusammenfassung: Teil 10, 03.12.2020/1

- ***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***

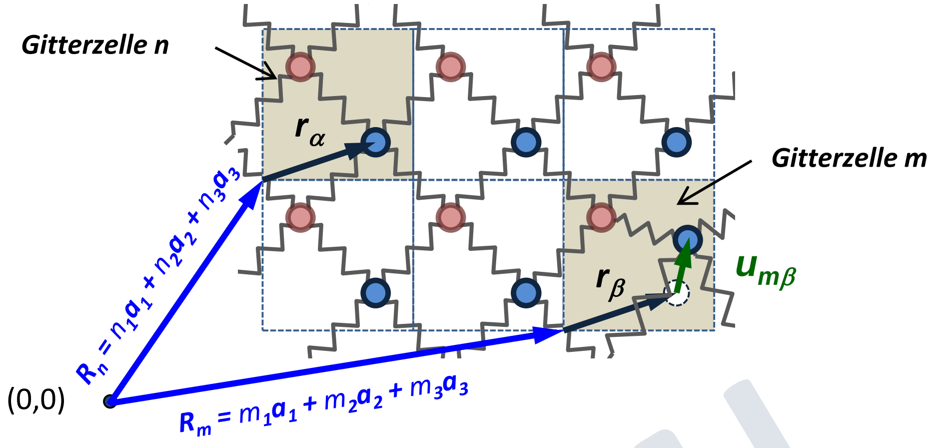
$$F_{n\alpha i} = -C_{n\alpha i}^{m\beta j}\; u_{m\beta j}$$

Kopplungskonstanten

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

$$C_{n\alpha i}^{m\beta j} = C_{\alpha i}^{(m-n)\beta j}$$

hängen wegen Translationsinvarianz von FK nur von $m-n$ ab !!



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

Trägheitskraft

Rückstellkräfte durch WW mit allen anderen Atomen

$3r'N$ gekoppelte DGLn
N: Zahl der Gitterzellen
r': Zahl der Basisatome

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

Reduktion auf homogenes Gleichungssystem der Ordnung $3r'$

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

- 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* → $1 \cdot r' = 1,\ \alpha = \beta = 1,\ m - n = p$

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

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

Ansatz: $u_n = A\,\mathrm{e}^{i(q\ pa\ -\omega t)}$ $\quad R_p = pa$

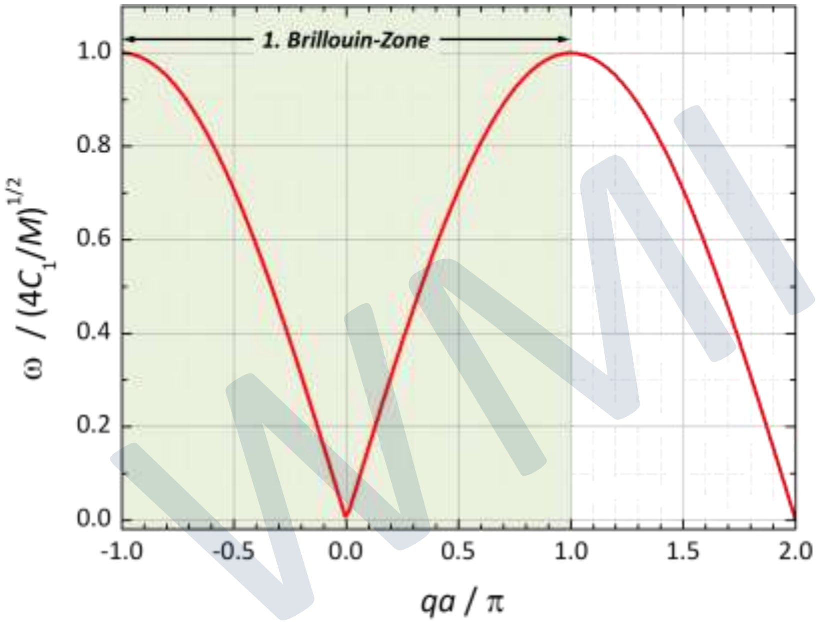
Lösung: $\omega^2 = \frac{2}{M}\sum_{p=1}^{\infty} C_p[1 - \cos(qpa)]$ ***Dispersionsrelation***

nur NN-WW: $\boldsymbol{m - n = p = 1}$ $\quad \omega^2 = \frac{2C_1}{M}[1 - \cos(qa)] = \frac{4C_1}{M}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$

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)



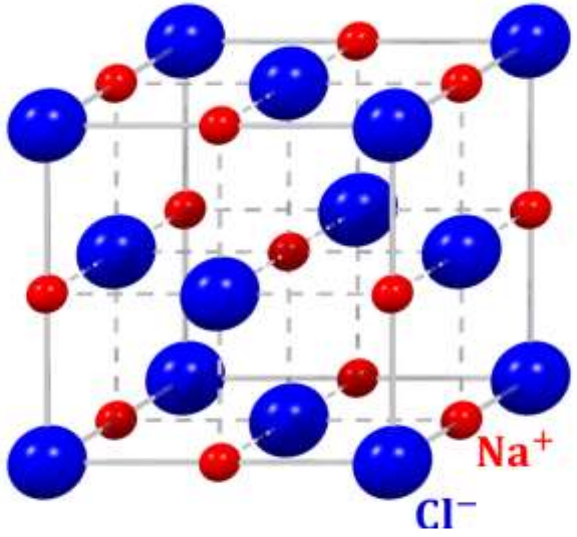
- ***1. Brillouin-Zone:*** $\omega(\mathbf{q}) = \omega(\mathbf{q} + \mathbf{G})$ $\qquad \omega(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$

  es ist ausreichend, ***nur den Bereich der 1. BZ*** zu betrachten: $-\pi/a \leq q \leq +\pi/a$

- ***transversale Schwingungen:***

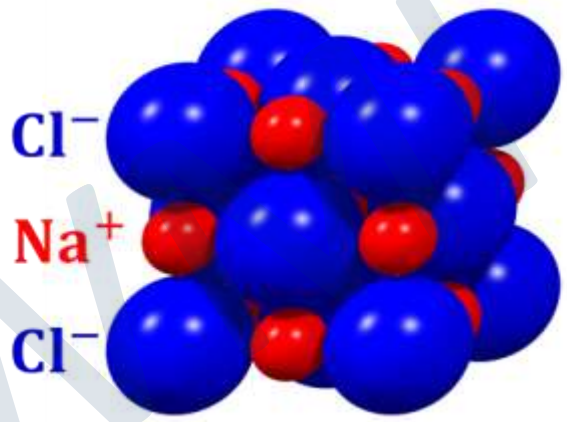
  äquivalentes Ergebnis zu longitudinalen Wellen: $\omega^2 = \frac{4C_1}{M}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$ mit anderem C_1

5.2.3 Kristallgitter mit zweiatomiger Basis



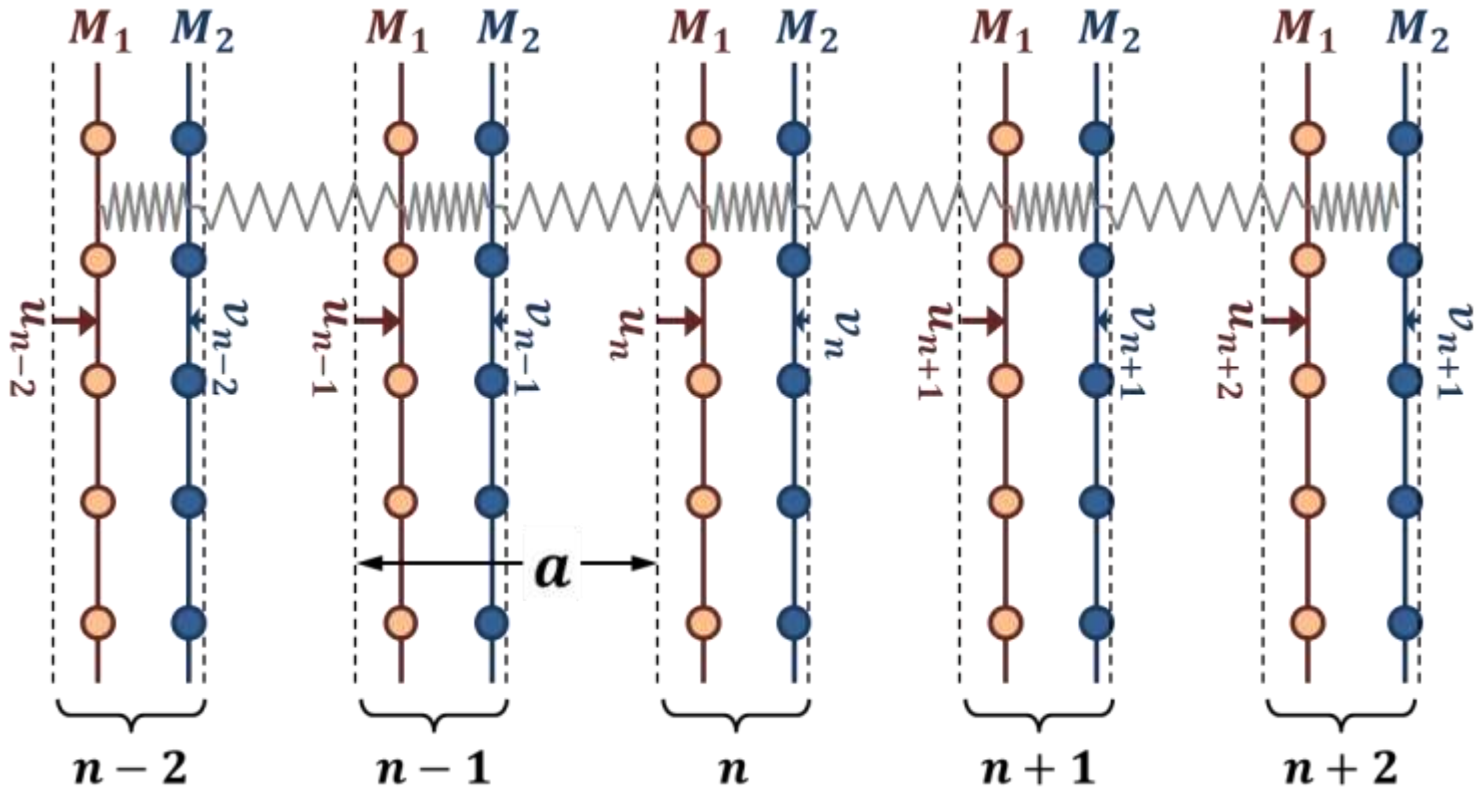
- Kristallgitter mit zwei Atomen mit Masse M_1 und M_2 in Einheitszelle
  - ➔ Atome in Einheitszelle können in Phase oder gegenphasig schwingen: neue Moden

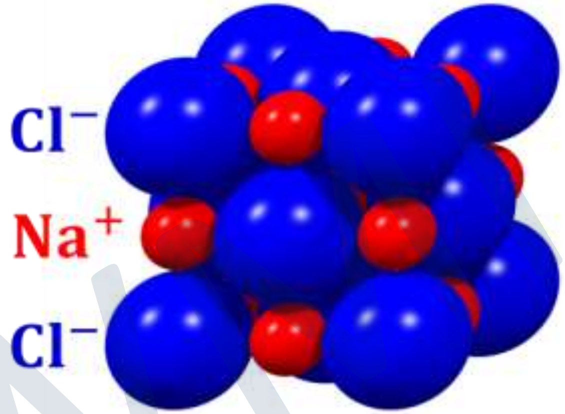
  - ➢ wir betrachten longitudinale Welle und verwenden eindimensionales Modell
    - ➔ trifft z.B. auf NaCl für Schwingung in [111]-Richtung zu



5.2.3 Kristallgitter mit zweiatomiger Basis

- Netzebenenabstand: a
- Auslenkung der beiden Gitterebenen n sei u_n und v_n für die beiden Atomsorten
- wir betrachten nur WW mit den benachbarten Netzebenen: $m - n = p = 1$
- die Kopplungskonstanten zwischen benachbarten Ebenen werden als gleich angenommen
- wir benutzen für Kopplungskonstante die Bezeichnung f („Federkonstante“)





5.2.3 Kristallgitter mit zweiatomiger Basis

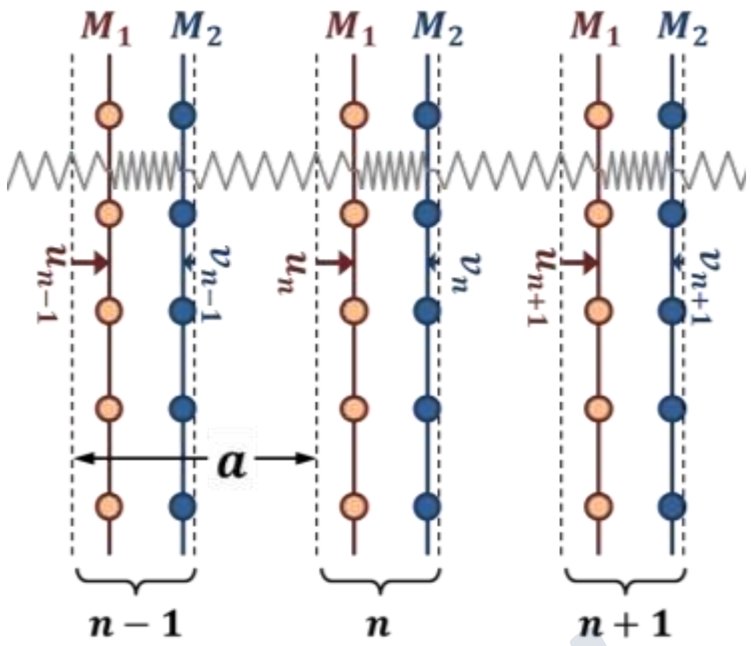
- **Bewegungsgleichungen** (nur NN-Wechselwirkung)

$$M_1 \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = f\,(v_n - u_n) + f\,(v_{n-1} - u_n)$$

$$M_2 \frac{\partial^2 v_n}{\partial t^2} = f\,(u_n - v_n) + f\,(u_{n+1} - v_n)$$

➢ die Differenzterme der Auslenkungen geben die relative gegenseitige Auslenkung benachbarter Ebenen an

➢ sind u_n und v_n gleich, so wird die Feder zwischen benachbarten Ebenen nicht gedehnt oder gestaucht ➔ Kraftterm verschwindet



– Zusammenfassung der Terme:

$$M_1 \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} + f\,(2u_n - v_n - v_{n-1}) = 0$$

$$M_2 \frac{\partial^2 v_n}{\partial t^2} + f\,(2v_n - u_n - u_{n+1}) = 0$$

– **Lösungsansatz**:

$$u_n(q) = \frac{1}{\sqrt{M_1}} A_1(q)\, \mathrm{e}^{i(q\,na - \omega t)}$$

$$v_n(q) = \frac{1}{\sqrt{M_2}} A_2(q)\, \mathrm{e}^{i(q\,na - \omega t)}$$

Wellen, die nur an den Gitterpunkten $R_n = na$ definiert sind

5.2.3 Kristallgitter mit zweiatomiger Basis

- **Einsetzen des Lösungsansatzes in DGLs ergibt (ohne Rechnung)**

$$\left(\frac{2f}{M_1}-\omega^2\right)A_1 - f\,\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}\left(1+\mathrm{e}^{-iqa}\right)A_2 = 0$$

$$-f\,\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}\left(1+\mathrm{e}^{+iqa}\right)A_1 + \left(\frac{2f}{M_2}-\omega^2\right)A_2 = 0$$

$$-\omega^2\begin{pmatrix}A_1\\A_2\end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix}\frac{2f}{M_1} & -f\,\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}\left(1+\mathrm{e}^{-iqa}\right)\\ -f\,\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}\left(1+\mathrm{e}^{+iqa}\right) & \frac{2f}{M_2}\end{pmatrix}}_{\textit{dynamische Matrix } D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q})}\begin{pmatrix}A_1\\A_2\end{pmatrix} = 0$$

– homogenes, lineares Gleichungssystem besitzt Lösungen, wenn

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

$$M_1\frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} + f\,(2u_n - v_n - v_{n-1})$$

$$M_2\frac{\partial^2 v_n}{\partial t^2} + f\,(2v_n - u_n - u_{n+1})$$

$$u_n(q) = \frac{1}{\sqrt{M_1}}A_1(q)\,\mathrm{e}^{i(q\,na-\omega t)}$$

$$v_n(q) = \frac{1}{\sqrt{M_2}}A_2(q)\,\mathrm{e}^{i(q\,na-\omega t)}$$

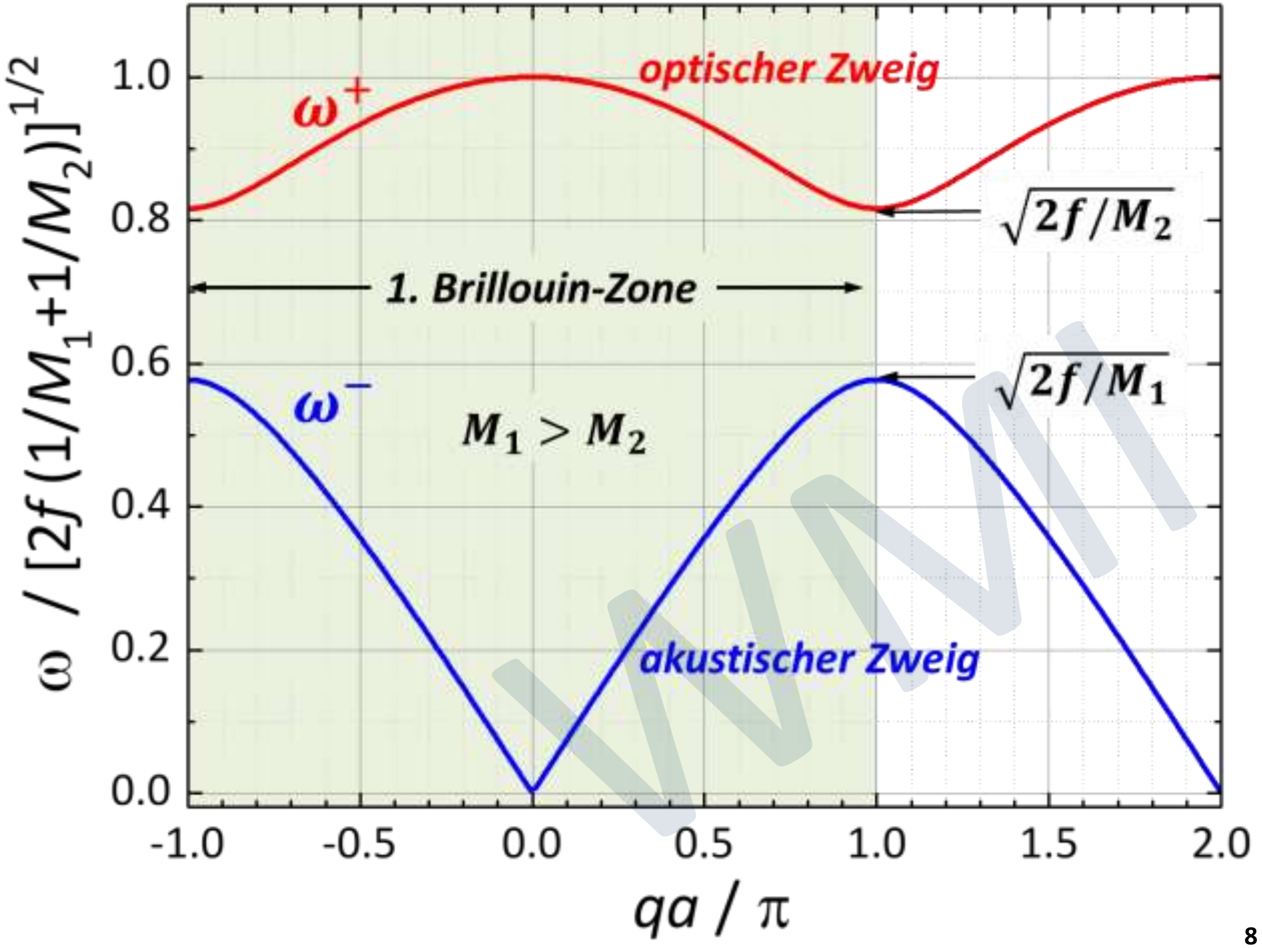
$$-\omega^2 A_{\alpha i}(\mathbf{q}) + \sum_{\beta,j} D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q})\,A_{\beta j}(\mathbf{q}) = 0$$

zweiatomige Basis $(r' = 2)$
(1D-Fall), nur NN-WW)
$i,j = 1, m-n = 1, \alpha,\beta = 1,2$

wir erwarten
$r = 1\cdot r' = 2$ **Lösungszweige**

- **Nullsetzen der Determinante ergibt die Dispersionrelation**

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm \left[\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]^{1/2}$$



  – wir erhalten 2 Lösungszweige:
    i. **optischer Zweig $\omega^+(q)$**
    ii. **akustischer Zweig $\omega^-(q)$**

5.2.3 Kristallgitter mit zweiatomiger Basis

- **Wieso sprechen wir von einem akustischen und optischen Dispersionszweig?**

$$\left(\frac{2f}{M_1} - \omega^2\right) A_1 - f \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + \mathrm{e}^{-iqa}) A_2 = 0 \qquad u_n(q) = \frac{1}{\sqrt{M_1}} A_1(q)\, \mathrm{e}^{i(q\,na - \omega t)}$$

$$-f \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + \mathrm{e}^{+iqa}) A_1 + \left(\frac{2f}{M_2} - \omega^2\right) A_2 = 0 \qquad v_n(q) = \frac{1}{\sqrt{M_2}} A_2(q)\, \mathrm{e}^{i(q\,na - \omega t)}$$

– wir betrachten Amplitudenverhältnis für $q = 0$:

$$\omega_+^2(0) = 2f\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \qquad \omega_-^2(0) = 0$$

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \pm \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^2 - \underbrace{\frac{4}{M_1 M_2} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}_{= 0 \text{ für } q = 0}\right]^{1/2}$$

– Einsetzen in obige Gleichungen

$$\frac{A_1(0)/\sqrt{M_1}}{A_2(0)/\sqrt{M_2}} = -\frac{M_2}{M_1}$$ für ω_+ ➔ gegenphasiges Schwingen: *optischer Dispersionszweig*

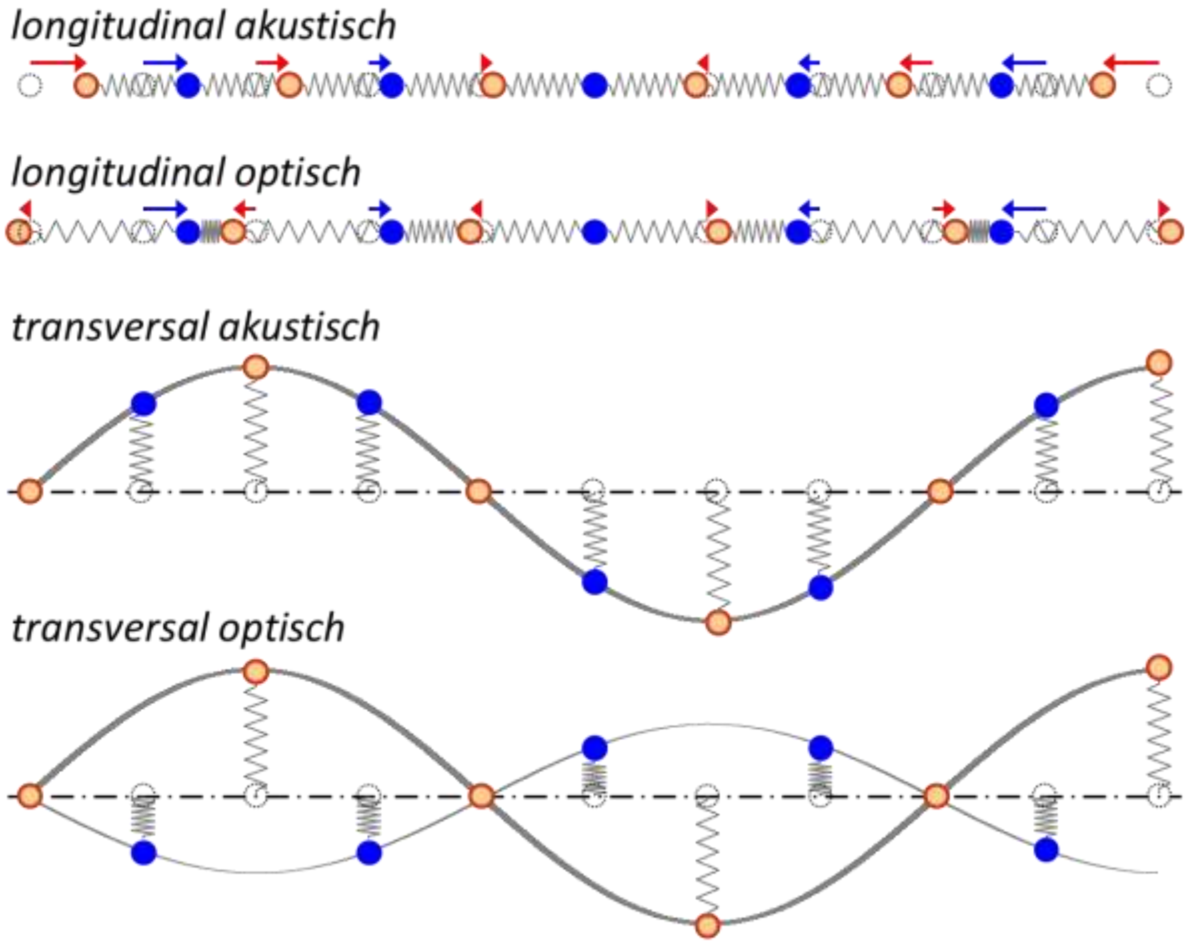
(gegenphasige Auslenkung von entgegengesetzt geladenen Ionen durch em-Welle)

$$\frac{A_1(0)/\sqrt{M_1}}{A_2(0)/\sqrt{M_2}} = 1$$ für ω_- ➔ Schwingen in-Phase: *akustischer Dispersionszweig*

(entspricht langwelligem Grenzfall: Schallausbreitung)

5.2.3 Kristallgitter mit zweiatomiger Basis

- **akustische und optische Schwingungen (longitudinal und transversal)**



- **akustischer Zweig** für $q \to 0$:
  - ➔ beschreibt Ausbreitung von Schallwellen
- **optischer Zweig** für $q \to 0$:
  in Ionenkristallen treten bei gegenphasiger Schwingung starke Dipolmomente auf
  - ➔ Einfluss auf optisches Verhalten
  - ➔ Anregung durch Licht
- **longitudinale Schwingungen**:
  - ➔ Auslenkung parallel zu Ausbreitungsrichtung
- **transversale Schwingungen**:
  - ➔ Auslenkung senkrecht zu Ausbreitungsrichtung

5.2.3 Kristallgitter mit zweiatomiger Basis

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm \left[\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]^{1/2}$$

- **Grenzfälle**

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

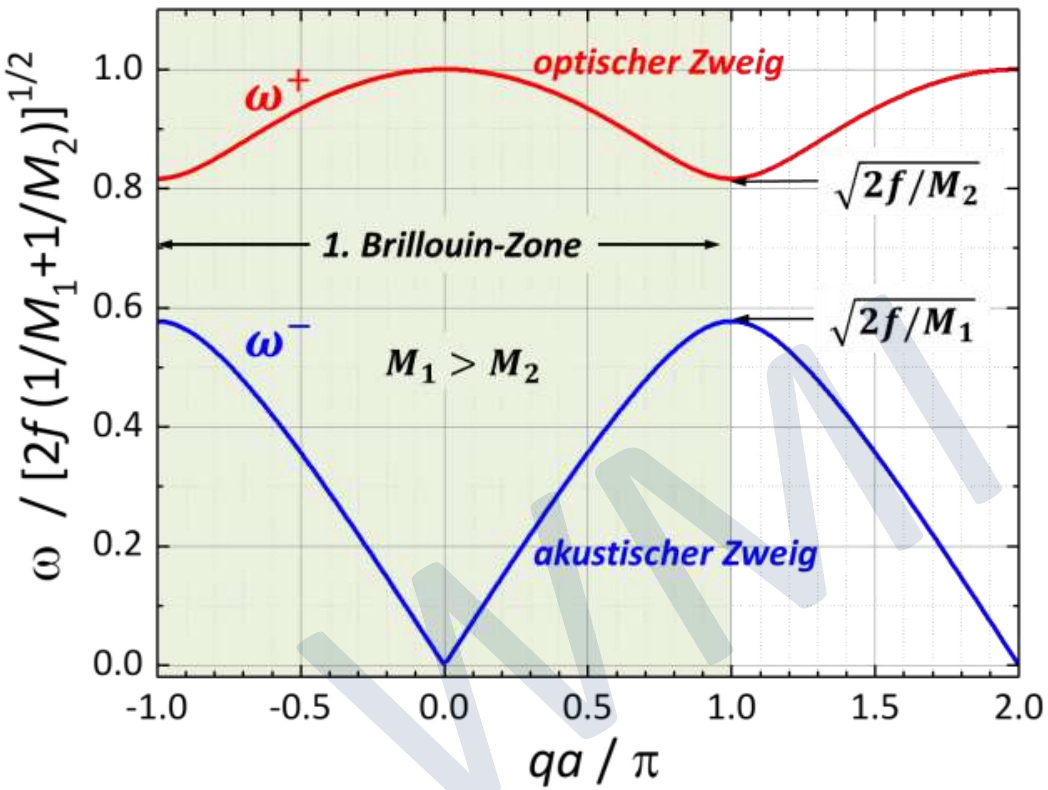
- $\sin\left(\frac{qa}{2}\right) \simeq \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1 \Rightarrow \sqrt{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2\frac{qa}{2}} \simeq \sqrt{\left(\frac{1}{M_1}-\frac{1}{M_2}\right)^2} = \frac{1}{M_1}-\frac{1}{M_2}$
- $v_g \to 0$ → stehende Wellen
- maximale bzw. minimale Schwingungsfrequenz für $M_1 > M_2$

$$\omega_-\left(\frac{\pi}{q}\right) = \sqrt{2f/M_1} \qquad \omega_+\left(\frac{\pi}{q}\right) = \sqrt{2f/M_2}$$

- Frequenzlücke, umso größer je größer M_1/M_2
- Frequenzband von ω_+ wird schmaler mit zunehmendem M_1/M_2

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

- langwelliger Grenzfall: $\lambda = 2\pi/q \gg a$
- $\sin x \simeq x$ und $\sqrt{1-x} \simeq 1 - x/2$
- $\omega_+^2(q) \simeq 2f\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) - 2\frac{a^2 f}{2(M_1+M_2)}\, q^2$
- $\omega_-^2(q) \simeq \underbrace{\frac{a^2 f}{2(M_1+M_2)}}_{\text{Schallgeschwindigkeit}^2}\, q^2 = v_s^2\, q^2$



- **Gitterschwingungen – dreidimensionaler Fall**

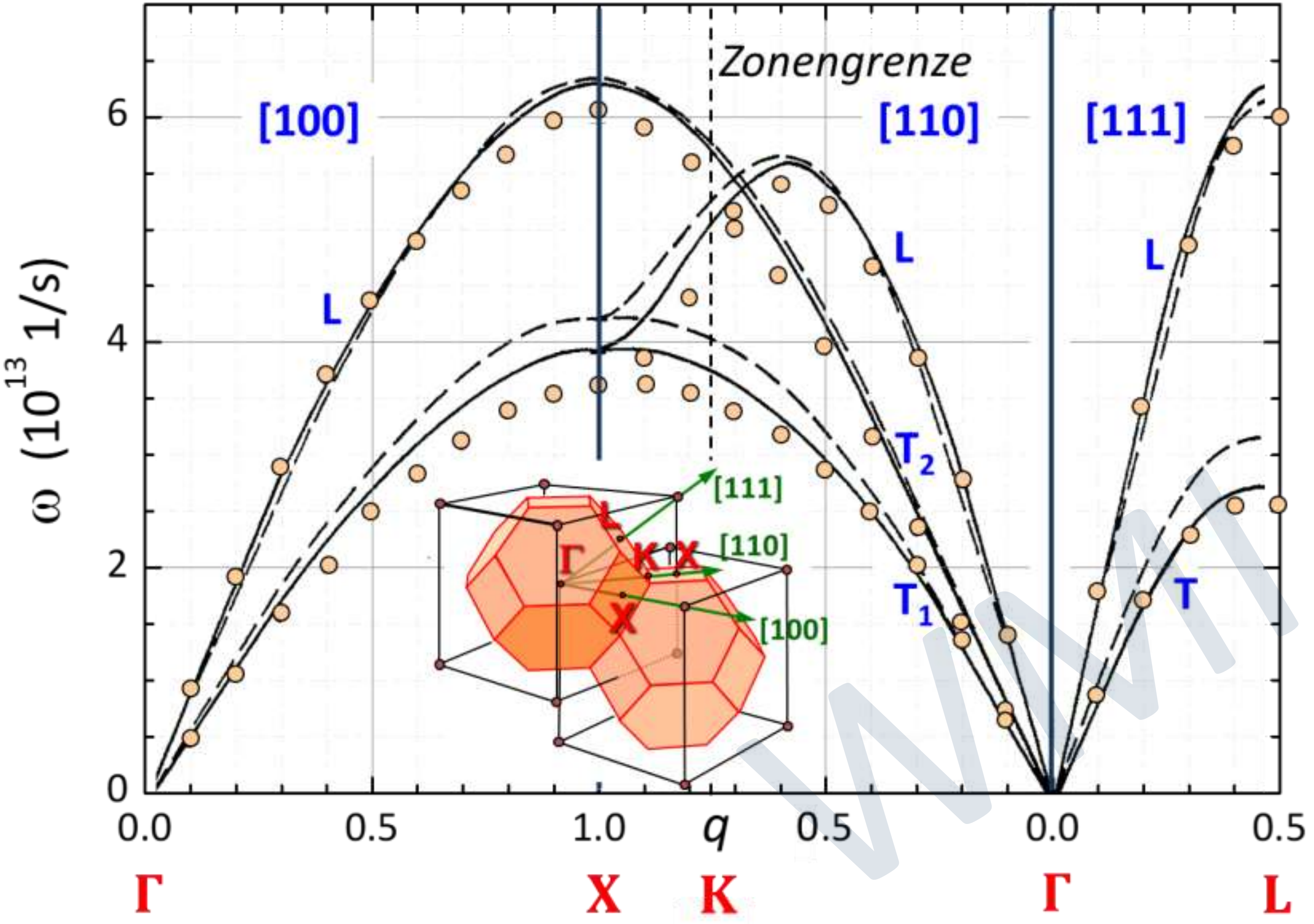
homogenes Gleichungssystem der Ordnung: $\boldsymbol{Dimension \cdot r'}$

D = Dimension, r' = Zahl der Atome in Basis

	einatomige Basis		**r'-atomige Basis**	
akustische Phononen	1 longitudinaler Zweig: $\mathbf{u} \parallel \mathbf{q}$ 2 transversale Zweige: $\mathbf{u} \perp \mathbf{q}$	**3**	1 LA Zweig 2 TA Zweige	**3**
optische Phononen	(keine)	**0**	$(r'-1)$ LO Zweige $2(r'-1)$ TO Zweige	$\boldsymbol{3r'-3}$
Beipiele	Al, fcc-Gitter, $r' = 1$ 3 akustische Dispersionszweige		Si, Diamantstruktur, $r' = 2$ 3 akustische und 3 optische Dispersionszweige	

- **Aluminium (einatomige Basis)**

Angabe von $\omega(q)$ in bestimmte Richtungen im q-Raum
➔ ***keine optischen Zweige***



- ➢ üblicherweise ist $v_{\text{long}} > v_{\text{trans}}$
- ➢ Dispersionsrelation ist periodisch:
$$\omega(\mathbf{q}) = \omega(\mathbf{q} + \mathbf{G})$$
- ➢ Zeitumkehrsymmetrie:
$$\omega(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$$

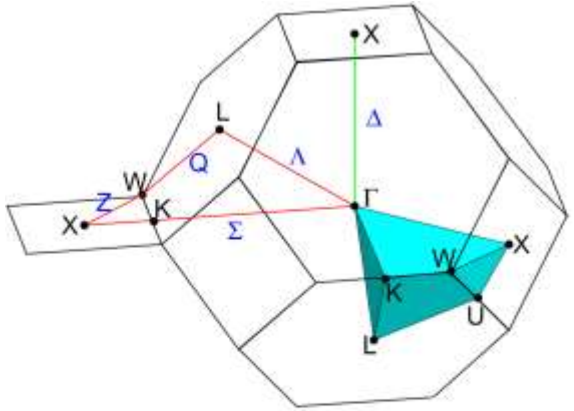
➔ **Beschränkung auf einen Oktanden der 1. Brillouin-Zone möglich**

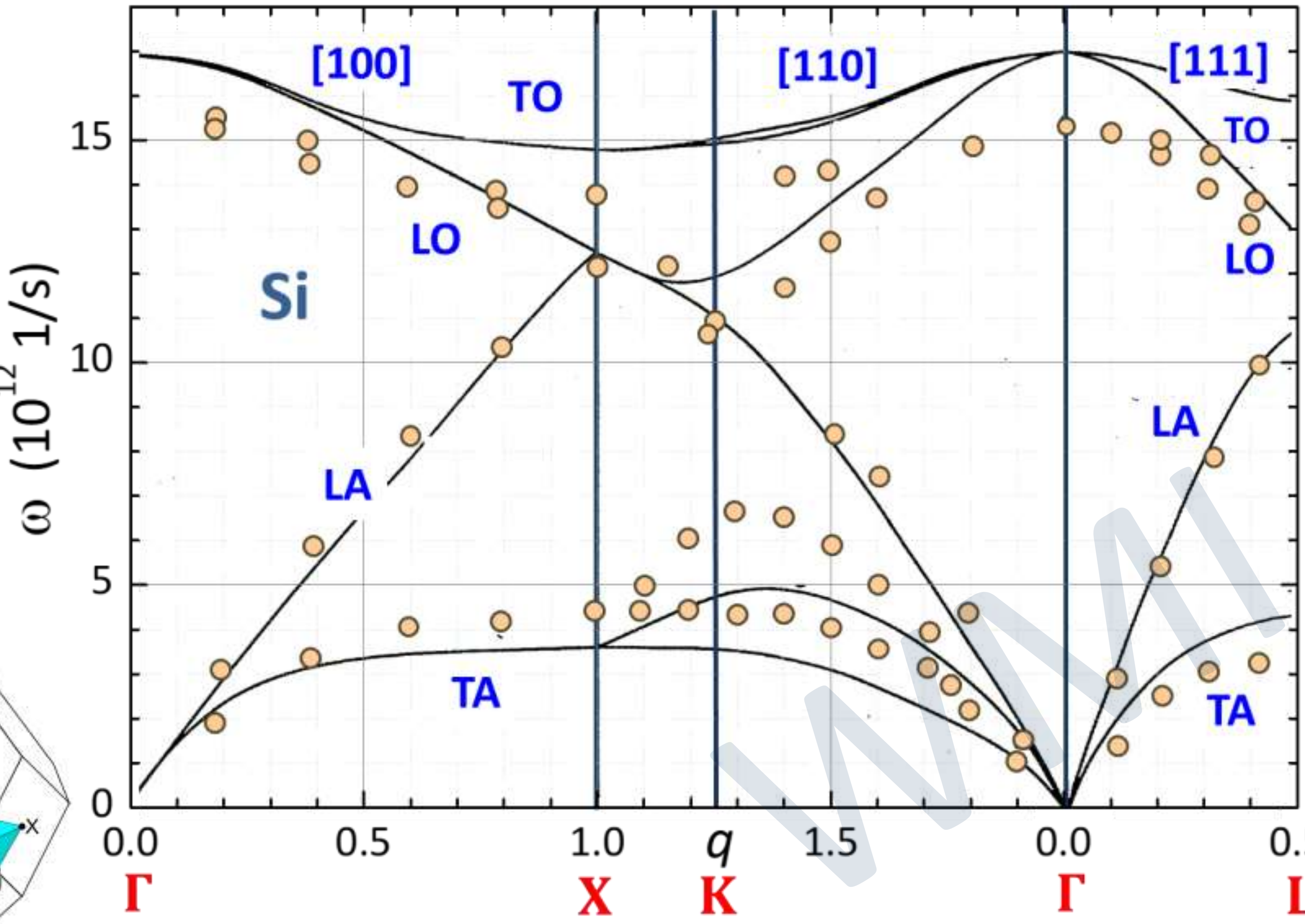
- **Silizium (zweiatomige Basis)**

  – Si besitzt Diamantstruktur mit zweiatomiger Basis

  – wir erwarten **3 akustische** und **3 optische Dispersionszweige**

  – Zweige $\omega_r(q)$ können entartet sein:
    ➔ in [100] und [111] Richtung nur 4 Zweige





P.E. Van Camp et al., Phys. Rev. B31, 4089 (1985).

5.3 Zustandsdichte im q- und ω-Raum

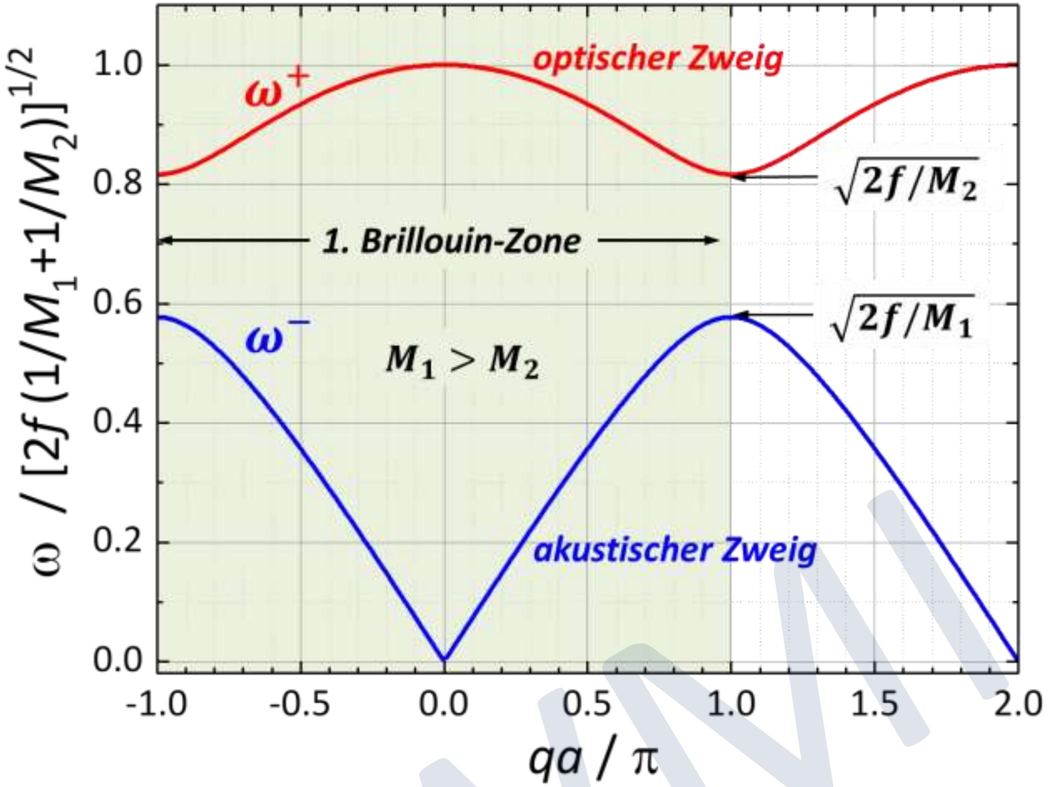
- **Frage:** **Sind alle Wellenzahlen q in der Dispersionsrelation $\omega(q)$ erlaubt?**

- **Antwort:** **Nein!**
  da FK endliche Ausdehnung hat, sind wegen Randbedingungen nur bestimmt q-Werte möglich

  (nur für unendlich ausgedehnten FK liegen q-Werte dicht)

- **Frage:** **Wie viele mögliche q-Werte gibt es pro Intervall im q- und ω-Raum?**

  ➔ **Zustandsdichten $Z(q)$ und $D(\omega)$**

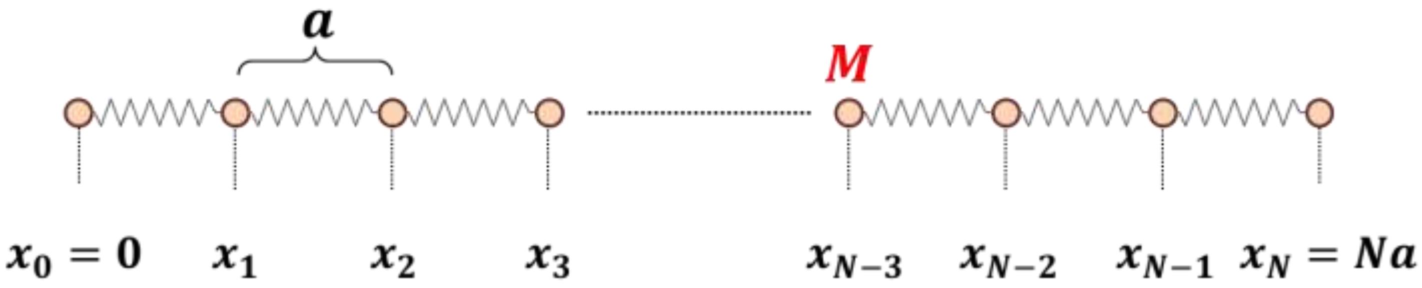


Wichtig: Endliche Abmessung L eines FK führt zu endlicher Zahl von möglichen Wellenzahlen q

Analog zu klassischer Mechanik: ***System aus N schwingenden Massen besitzt nur 3N Eigenfrequenzen***

5.3.1 Randbedingungen

i. eindimensionaler Fall, periodische Randbedingungen



eindimensionale Kette mit N Atomen
(kann zu Kreis geschlossen werden
➔ periodische Randbedingungen)

Klassische Mechanik: für 1D-System aus N schwingenden Massen erwarten wir N Schwingungsmoden

- **periodischen Randbedingungen**: $u_n = u_{n+N}$ $\quad$ u_n = Auslenkung des n-ten Atoms aus seiner Ruhelage
- **Lösungsansatz** für Gitterschwingung: $u_n = A e^{i(qna-\omega t)} = A e^{i(qR_n-\omega t)}$ $\quad$ (Gittervektoren $R_n = na$)

Randbedingung: $u_n = A\mathrm{e}^{i(qR_n-\omega t)} = u_{n+N} = A\mathrm{e}^{i(qR_n-\omega t)}\, e^{iqNa}$

$\rightarrow$ $\mathrm{e}^{iqNa} = 1$

$\rightarrow$ $\underbrace{Na}_{\text{Gittervektor}}\, q = p \cdot 2\pi$ mit p = ganze Zahl $\rightarrow$ $\boxed{q = p \cdot \dfrac{2\pi}{Na} = p \cdot \dfrac{2\pi}{L}}$

Gittervektor $\qquad$ reziproker Gittervektor

5.3.1 Randbedingungen

$$q = p \cdot \frac{2\pi}{Na} = p \cdot \frac{2\pi}{L}$$

- **Beschränkung auf 1. BZ:**

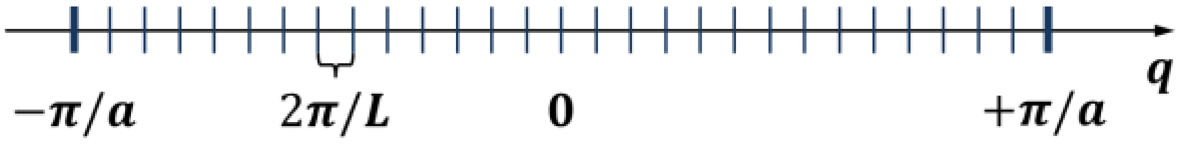
$$-\frac{\pi}{a} < q \leq +\frac{\pi}{a} \quad \text{oder} \quad -\frac{\pi}{a} < p \cdot \frac{2\pi}{Na} \leq +\frac{\pi}{a} \quad \text{oder} \quad -\frac{N}{2} < p \leq +\frac{N}{2}$$

(erlaubte q-Werte in 1. BZ)

➔ **N mögliche Wellenzahlen bzw. Schwingungsmoden bei N schwingenden Atomen**

Hinweis: Das $\leq$ Zeichen taucht auf, da wir am Zonenrand für $q = \pm\pi/a$ stehende Wellen erhalten, so dass die Lösungen für $q = \pm\pi/a$ identisch sind. Für alle anderen Werte von q sind $\pm q$ anhand der Ausbreitungsrichtung unterscheidbar.

- **Zustandsdichte (1D):**



Zahl der Schwingungsmoden pro Volumen im 1D q-Raum

$$Z(q) = \frac{\text{Zahl der Zustände}}{\text{Volumen im } q - \text{Raum}} = \frac{N}{2\pi/a} = \frac{Na}{2\pi} = \frac{L}{2\pi}$$

➔ **jeder Zustand nimmt im 1D q-Raum das Volumen $\frac{2\pi}{L}$ ein**

ii. dreidimensionaler Fall, einatomige Basis, periodische Randbedingungen

- **Annahmen**:
  - Kristall mit Seitenlängen $N_1 a_1, N_2 a_2, N_3 a_3$ $\quad$ ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ = primitive Gittervektoren)
  - Zahl der Gitterpunkte: $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 = N$ (= Zahl der Atome bei einatomiger Basis)
  - einatomige Basis (Atompositionen = Gitterpunkte)

– **periodische Randbedingungen**: $\mathbf{u}(\mathbf{R}) = \mathbf{u}(\mathbf{R} + N_i\, \mathbf{a}_i) \qquad i = 1,2,3$

– **Lösungsansatz** für Gitterschwingung: $\mathbf{u}_n = \mathbf{A}\mathrm{e}^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{R} - \omega t)}$ (Gittervektoren $\mathbf{R}$)

– Einsetzen ergibt: $\mathbf{u}(\mathbf{R} + N_i\, \mathbf{a}_i) = \mathbf{A}\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}\, \mathrm{e}^{i\cdot\mathbf{q}\cdot\mathbf{a_i}\, N_i}\, \mathrm{e}^{-i\omega t} = \mathbf{u}(\mathbf{R})\, \mathrm{e}^{i\cdot\mathbf{q}\cdot\mathbf{a_i}\, N_i}$

$\rightarrow \mathrm{e}^{i\cdot\mathbf{q}\cdot\mathbf{a_i}\, N_i} = 1$

$\rightarrow \mathbf{q}\cdot\mathbf{a_i}\, N_i = p_i \cdot 2\pi$ mit $i = 1,2,3$ und p_i = ganzzahlig

da $N_i \mathbf{a}_i$ ein Gittervektor ist, muss $\mathbf{q}$ ein reziproker Gittervektor sein

➔ $\mathbf{q} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + \ell\mathbf{b}_3 \quad$ mit b_1, b_2, b_3 = primitive reziproke Gittervektoren

– es gilt: $\mathbf{q} \cdot \mathbf{a_i}\, N_i = p_i \cdot 2\pi$ $\quad \mathbf{q} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + \ell\mathbf{b}_3$ $\quad \mathbf{a_i} \cdot \mathbf{b_i} = 2\pi\delta_{ij}$

$$\Rightarrow \quad h = \frac{p_1}{N_1}, \qquad k = \frac{p_2}{N_2} \qquad \ell = \frac{p_3}{N_3}$$

– für die erlaubten Wellenvektoren erhalten wir damit: $\mathbf{q} = \frac{p_1}{N_1}\mathbf{b}_1 + \frac{p_2}{N_2}\mathbf{b}_2 + \frac{p_3}{N_3}\mathbf{b}_3$

- **Beschränkung auf 1. BZ**:

$$-\frac{|\mathbf{b}_i|}{2} < |\mathbf{q}| \leq +\frac{|\mathbf{b}_i|}{2} \quad \text{oder} \quad -\frac{|\mathbf{b}_i|}{2} < \frac{p_1}{N_1}|\mathbf{b}_i| \leq +\frac{|\mathbf{b}_i|}{2} \quad \text{oder} \quad -\frac{N_i}{2} < p_i \leq +\frac{N_i}{2}$$

➔ **$N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ mögliche Wellenzahlen bzw. Schwingungsmoden bei $N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ schwingenden Atomen**

- **dreidimensionales Gitter mit r'-atomiger Basis:**

In einem dreidimensionalen Gitter mit einer aus r' Atomen bestehenden Basis sind $3r' \cdot N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 = 3r' \cdot N$ Schwingungsmoden möglich. Dies entspricht genau $r = 3r'$ Dispersionszweigen mit N Schwingungsmoden pro Dispersionszweig.

– Volumen der 1. BZ: $\Omega_{\mathrm{BZ}} = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{(2\pi)^3}{V_{\mathrm{WS}}}$ $V_{\mathrm{WS}} = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ = Volumen der Wigner-Seitz-Zelle

– in der 1. BZ liegen genau **$N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ mögliche Wellenzahlen bzw. Schwingungsmoden**

- **Zustandsdichte (3D)**:

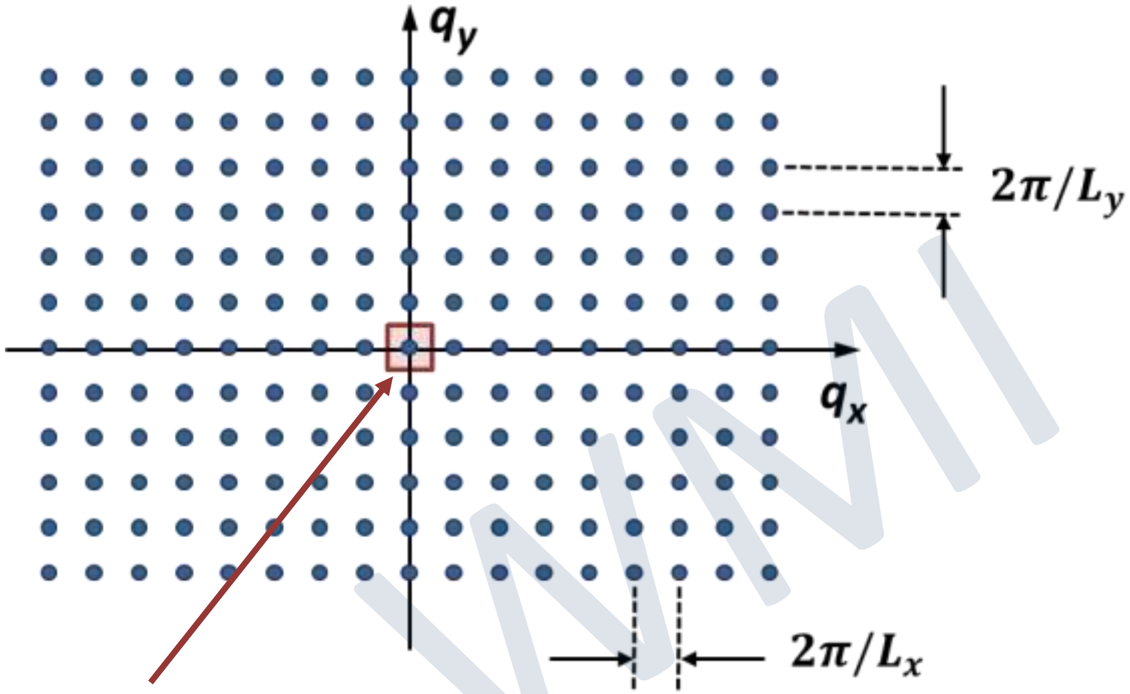
Zahl der Schwingungsmoden pro Volumen im 3D q-Raum

$$Z(q) = \frac{N}{\Omega_{\mathrm{BZ}}} = \frac{N \cdot V_{\mathrm{WS}}}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

- **Zustandsdichte (2D)**:

Zahl der Schwingungsmoden pro Volumen im 2D q-Raum

$$Z(q) = \frac{N}{\Omega_{\mathrm{BZ}}} = \frac{N \cdot A_{\mathrm{WS}}}{(2\pi)^2} = \frac{A}{(2\pi)^2}$$



Fläche eines einzelnen Zustandes

im q-Raum: $\frac{(2\pi)^2}{L_x L_y} = \frac{(2\pi)^2}{A}$

5.3.3 Zustandsdichte im ω-Raum

- **allgemeine Vorbemerkung:**
  - bei der Diskussion zahlreicher Phänomene tauchen Summen der Form $\sum_{\mathbf{q},r} F[\omega_r(\mathbf{q})]$ auf
  - mit der Zustandsdichte im q-Raum können wir die Summe über die große Zahl der N Schwingungsmoden in eine Integration über die 1. BZ überführen

$$\sum_{\mathbf{q},r} F[\omega_r(\mathbf{q})] = \sum_r \int_{1.\mathrm{BZ}} d^3q \;\; Z(\mathbf{q}) \;\; F[\omega_r(\mathbf{q})]$$

Beispiel: für $F[\omega_r(\mathbf{q})] = \hbar\omega_r(\mathbf{q})$ erhalten wir die Gesamtenergie der Gitterschwingungen

(ist immer möglich, wenn die Zustände im q-Raum dicht liegen)

  - häufig möchte man die Integration über alle $\mathbf{q}$-Zustände in eine Integration über ihre Frequenzen $\omega(\mathbf{q})$ überführen

$$\sum_{\mathbf{q},r} F[\omega_r(\mathbf{q})] = \sum_r \int_{1.\mathrm{BZ}} d^3q \;\; Z(\mathbf{q}) \;\; F[\omega_r(\mathbf{q})] = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} d\omega \; D(\omega) \;\; F(\omega)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{D(\omega) = \sum_r \int_{1.\mathrm{BZ}} d^3q \;\; Z(\mathbf{q}) \, \delta\big(\omega - \omega_r(\mathbf{q})\big)}$$

Zustandsdichte im Frequenzraum

5.3.3 Zustandsdichte im ω-Raum

- **Veranschaulichung der Bedeutung der Zustandsdichte im Frequenzraum anhand von 1D Dispersionsrelation $\omega(q)$**

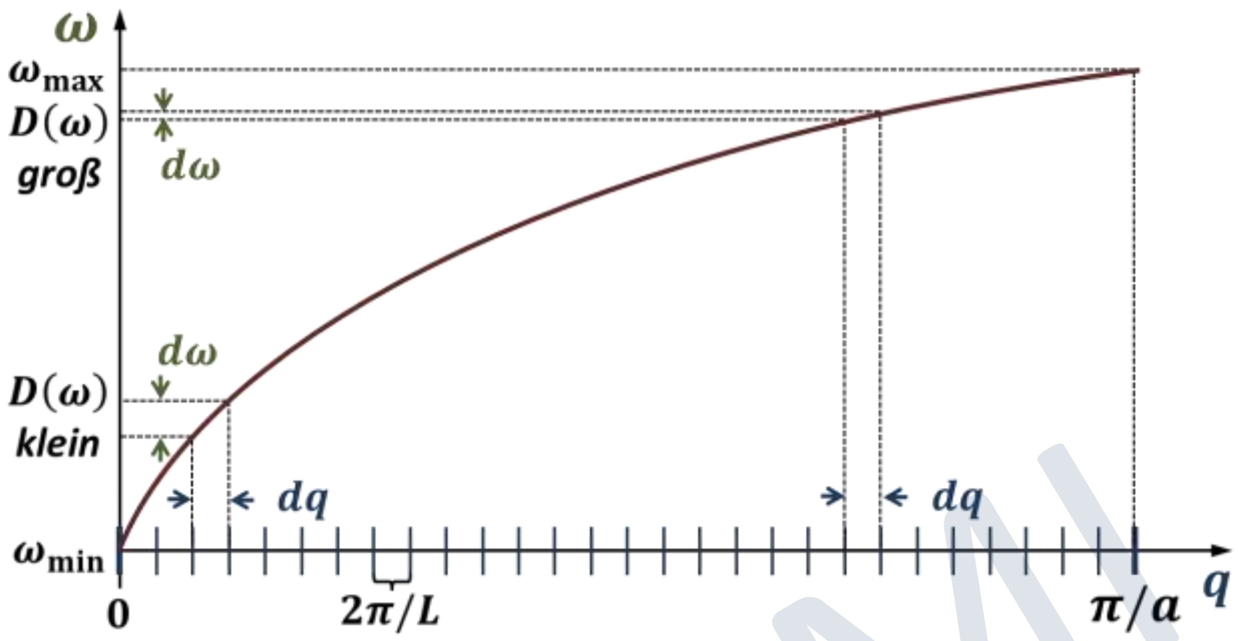
  – konstante Zustandsdichte $Z(q) = L/2\pi$ im q-Raum übersetzt sich durch nichtlineare Dispersionsrelation $\omega(q)$ in Zustandsdichte $D(\omega) \neq const.$

  $$Z(q)dq = D(\omega)d\omega$$

  Erhaltung der Zahl der Zustände

  $$N = \int_{1.BZ} d^3q \; Z(q) = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} d\omega \, D(\omega)$$

  – $D(\omega)$ ist dort groß, wo $\omega(q)$ flach verläuft und umgekehrt



5.3.3 Zustandsdichte im ω-Raum

- **Herleitung des Zusammenhangs zwischen $D(\omega)$ und $Z(\mathbf{q})$ über die Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{q})$**
  - Annahme: nur ein Dispersionszweig $\omega(\mathbf{q})$
  - Bestimmung der Zahl der Schwingungszustände in Frequenzintervall $[\omega,\ \omega + \Delta\omega]$

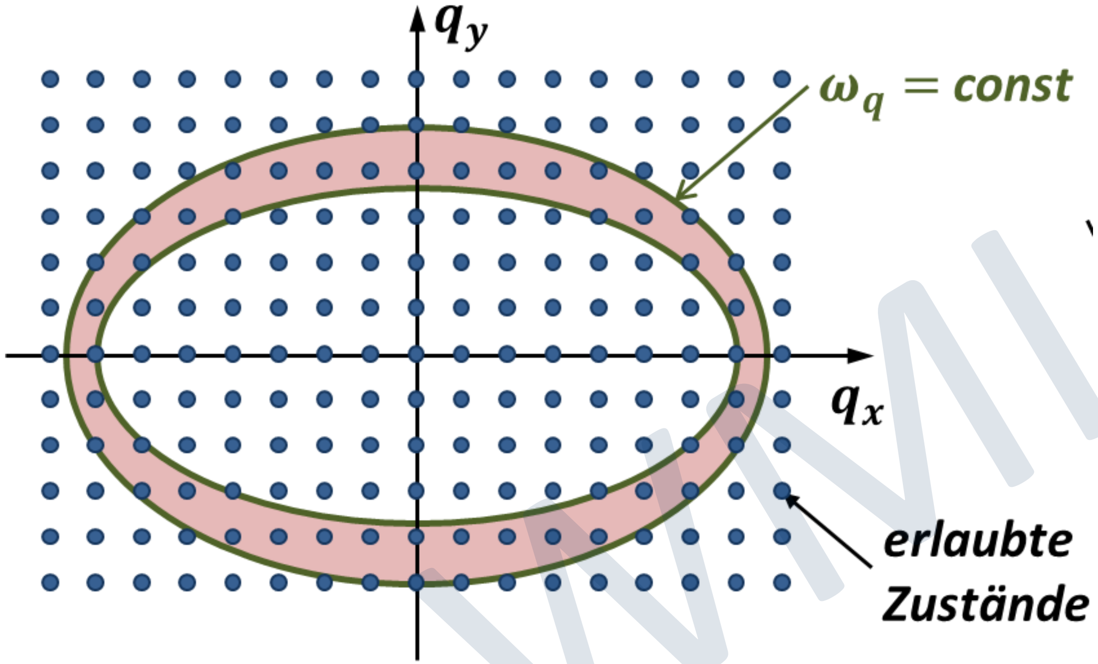
    → Integration des q-Raums zwischen Flächen gleicher Frequenz

    → Multiplikation mit Zustandsdichte $Z(\mathbf{q})$ des q-Raumes

$$\int_{\omega(\mathbf{q})}^{\omega(\mathbf{q})+\Delta\omega(\mathbf{q})} d\omega\, D(\omega) \simeq D(\omega)\Delta\omega$$

$$= \int_{\mathbf{q}(\omega)}^{\mathbf{q}(\omega+\Delta\omega)} Z(\mathbf{q})\, d^3q = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{q}(\omega)}^{\mathbf{q}(\omega+\Delta\omega)} d^3q$$

$$\Rightarrow \quad D(\omega)\Delta\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{q}(\omega)}^{\mathbf{q}(\omega+\Delta\omega)} d^3q$$

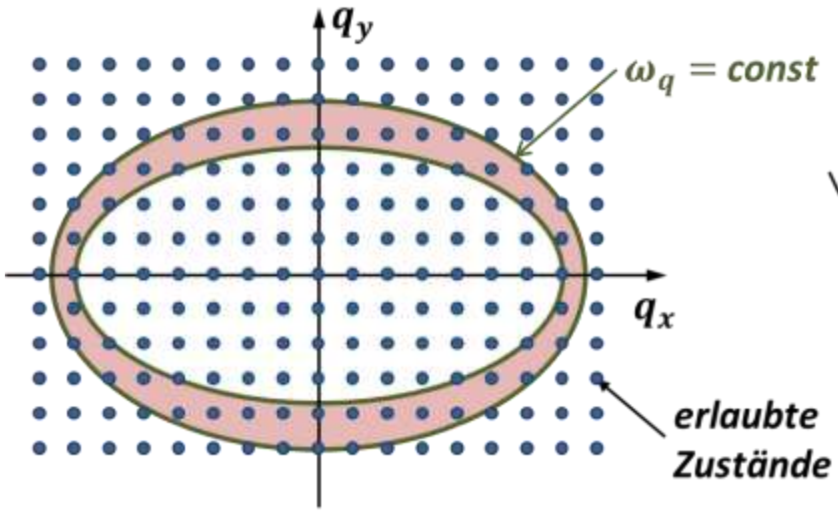


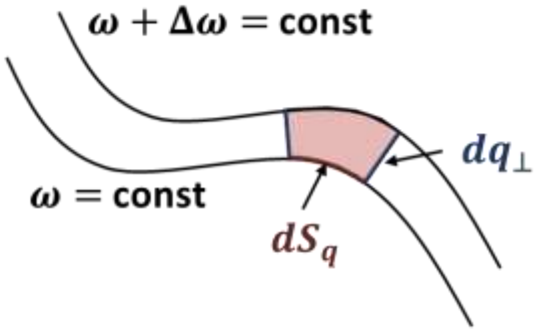
die Form der Fläche $\omega(q) = const.$ wird durch Dispersionsrelation bestimmt: einfachster Fall $\omega(\boldsymbol{q}) = v_s\,|\boldsymbol{q}|$

→ ***Kugeloberfläche***

5.3.3 Zustandsdichte im ω-Raum

$$D(\omega)\Delta\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{q}(\omega)}^{\mathbf{q}(\omega+\Delta\omega)} d^3q$$





– für die Integration benutzen wir

$$d^3q = dS_q \, dq_\perp$$

Flächenelement der Fläche $\omega(\mathbf{q}) = const.$

Abstand der Fläche $\omega(\mathbf{q}) + \Delta\omega(\mathbf{q})$ von der Fläche $\omega(\mathbf{q}) = const.$

– mit $\Delta\omega = |d\omega/dq_\perp| \, dq_\perp$ erhalten wir: $\quad d^3q = dS_q \, dq_\perp = \dfrac{dS_q}{|d\omega/dq_\perp|}\Delta\omega$

– Einsetzen ergibt **Zustandsdichte $D(\omega)$**:

$$\boxed{D(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega=const} \frac{dS_q}{|d\omega/dq_\perp|}}$$

Oberfläche der $\omega(\mathbf{q}) = const.$ Fläche

Zustandsdichte im q-Raum

gibt an, wie schnell sich ω mit q ändert
→ Gruppengeschwindigkeit
→ Breite der Fläche im q-Raum

- ➢ hohe Zustandsdichte für die Frequenzen, bei denen Gruppengeschwindigkeit $|d\omega/dq_\perp|$ klein ist
- ➢ **Van Hove Singularität**: $|d\omega/dq_\perp| = 0$ ➔ Singularität

5.3.3 Zustandsdichte im ω-Raum

$$D(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega=const} \frac{dS_q}{|d\omega/dq_\perp|}$$

- **Beispiel: 3D isotropes Medium mit einatomiger Basis**
  - drei akustische Dispersionszweige mit linearer Dispersion: $\omega_\mathrm{L} = v_\mathrm{L} q$ bzw. $\omega_\mathrm{T} = v_\mathrm{T} q$

    ➔ Fläche konstanter Frequenz ist Kugeloberfläche: Oberflächenintegral ergibt $4\pi q^2$
  - Zustandsdichte für jeden Zweig: $D_i(\omega) = \frac{V}{2\pi^2}\frac{q^2}{v_i} = \frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{v_i^3}$
  - gesamte 3D Zustandsdichte: $D^{(3\mathrm{D})}(\omega) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{1}{v_\mathrm{L}^3} + \frac{2}{v_\mathrm{T}^3}\right)\omega^2$

- **2D und 1D Systeme**

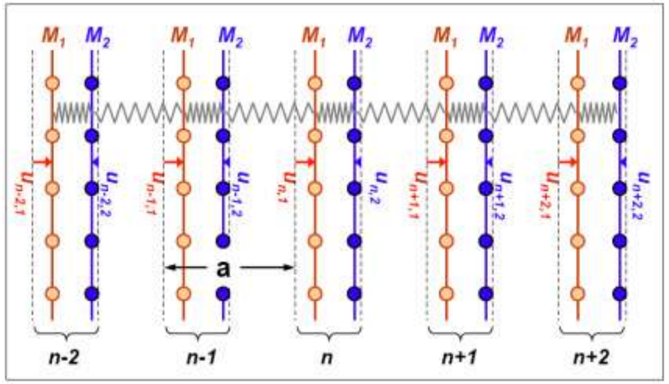
$$D^{(2\mathrm{D})}(\omega) = \frac{A}{(2\pi)^2} \int_{\omega=const} \frac{dL_q}{|d\omega/dq_\perp|} \qquad D_i^{(2\mathrm{D})}(\omega) = \frac{A}{2\pi}\frac{q}{v_i} = \frac{A}{2\pi}\frac{\omega}{v_i^2} \qquad D^{(2\mathrm{D})}(\omega) = \frac{A}{2\pi}\left(\frac{1}{v_\mathrm{L}^2} + \frac{1}{v_\mathrm{T}^2}\right)\omega^1$$

$$D^{(1\mathrm{D})}(\omega) = \frac{L}{(2\pi)^1} \int_{\omega=const} \frac{dP_q}{|d\omega/dq_\perp|} \qquad D_i^{(1\mathrm{D})}(\omega) = \frac{L}{2\pi}\frac{2}{v_i} = \frac{L}{2\pi}\frac{2}{v_i}\,\omega^0 \qquad D^{(1\mathrm{D})}(\omega) = \frac{L}{2\pi}\frac{2}{v_\mathrm{L}}\,\omega^0$$

Zusammenfassung: Teil 11, 08.12.2020/1

- ***longitudinale Schwingungen:*** <u>1D-System</u>, <u>zweiatomige Basis</u>

→ $1 \cdot r' = 2$, *nur NN-WW* $\rightarrow m - n = p = 1$



$$M_1 \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} + f\,(2u_n - v_n - v_{n-1}) = 0 \qquad M_2 \frac{\partial^2 v_n}{\partial t^2} + f\,(2v_n - u_n - u_{n+1}) = 0$$

Lösung:

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \pm \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]^{1/2}$$

Dispersionsrelation

Grenzfälle:

- Rand der Brillouin-Zone, $q = \pi/a$:

$$\omega_-\left(\frac{\pi}{a}\right) = \sqrt{\frac{2f}{M_1}}, \quad \omega_+\left(\frac{\pi}{a}\right) = \sqrt{\frac{2f}{M_2}}$$

- Zentrum der Brillouin-Zone, langwelliger Grenzfall, $q \rightarrow 0$:

$$\omega_+^2(q \rightarrow 0) \simeq 2f\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) - v_s^2 q^2$$

$$\omega_-^2(q \rightarrow 0) \simeq v_s^2 q^2, \quad v_s^2 = \frac{a^2 f}{2(M_1+M_2)}$$

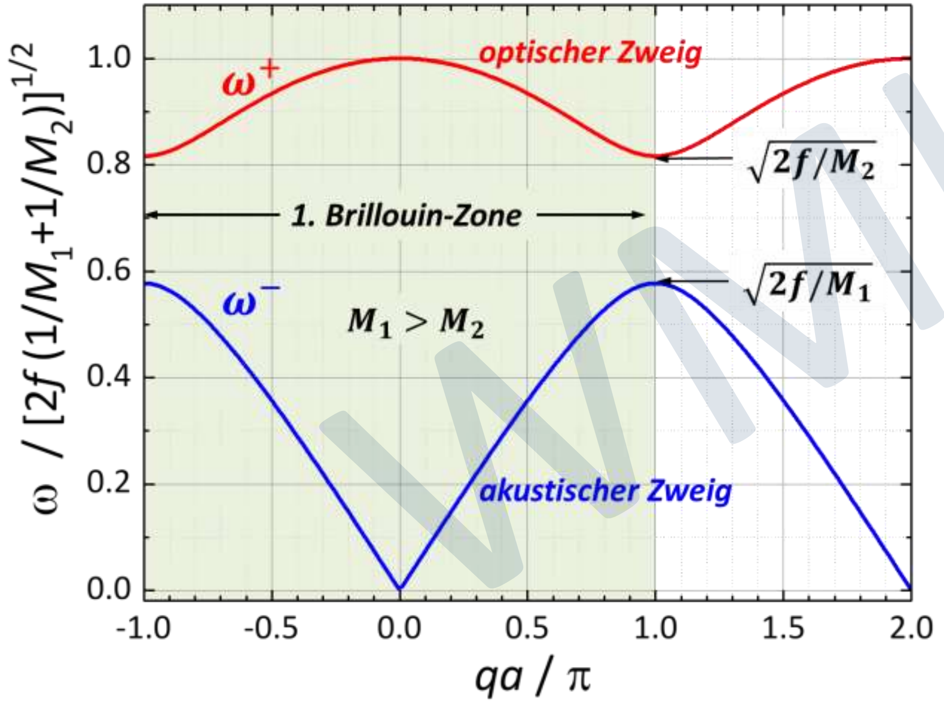
- $M_1 \gg M_2$:

$$\omega^2 \simeq \frac{f}{M_2} \pm \frac{f}{M_2}\left(1 - 4\frac{M_2}{M_1}\sin^2\frac{qa}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \simeq \frac{f}{M_2} \pm \frac{f}{M_2}\left(1 - 2\frac{M_2}{M_1}\sin^2\frac{qa}{2}\right)$$

$$\omega_+^2 \simeq \frac{2f}{M_2} - \frac{2f}{M_1}\sin^2\frac{qa}{2} \qquad \omega_-^2 \simeq \frac{2f}{M_1}\sin^2\frac{qa}{2}$$

zwei Lösungszweige ($\pm$):

(i) akustischer Zweig, (ii) optischer Zweig



Zusammenfassung: Teil 11, 08.11.2020/2

- ***Amplitudenverhältnis für $q \rightarrow 0$***

$$\frac{A_1(0)/\sqrt{M_1}}{A_2(0)/\sqrt{M_2}} = -\frac{M_2}{M_1} \quad \text{für } \omega_+$$

→ gegenphasiges Schwingen: *optischer Zweig*

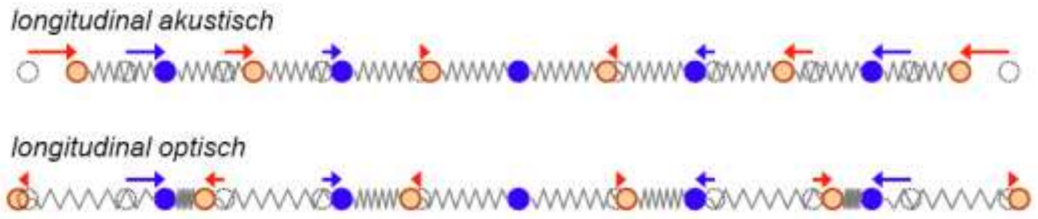
$$\frac{A_1(0)/\sqrt{M_1}}{A_2(0)/\sqrt{M_2}} = 1 \quad \text{für } \omega_-$$

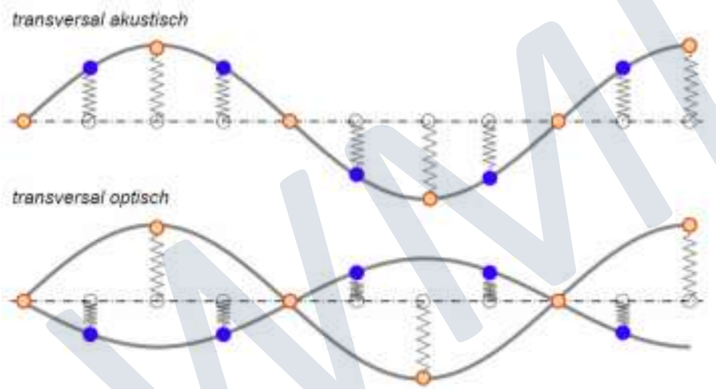
→ Schwingen in-Phase: *akustischer Zweig*

- ***Zahl r der Phononenzweige für 3D-Festkörper mit r'-atomiger Basis: $r = 3r'$***

	einatomige Basis: $r' = 1$		mehratomige Basis: $r' > 1$	
akustische Phononen	1 longitud. Zweig: $\mathbf{u} \parallel \mathbf{q}$ 2 transv. Zweige: $\mathbf{u} \perp \mathbf{q}$	**3**	1 LA Zweig 2 TA Zweige	**3**
optische Phononen	(keine)	**0**	$(r'-1)$ LO Zweige $2(r'-1)$ TO Zweige	**$3r'$-3**

- ***Schwingungstypen:***





- ***Zustandsdichte im q-Raum***

reale Festkörper haben endliche Ausdehnung L

→ Randbedingungen
→ Auswahl von bestimmten Wellenvektoren **q**
→ **insgesamt $3r'N = r \cdot N$ Schwingungsmoden**

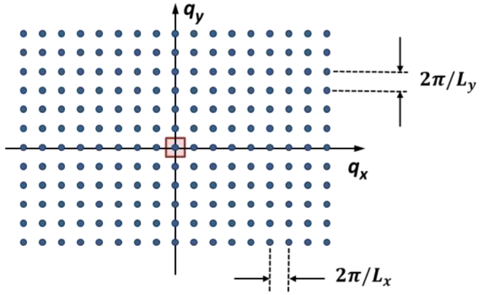
(N, r', r = Zahl der Gitterzellen, Basisatome, Phononen-Zweige)

- ***Zustandsdichte im q-Raum:***

1D-Zustandsdichte: $Z(q) = \frac{L}{(2\pi)^1}$

2D-Zustandsdichte: $Z(q) = \frac{A}{(2\pi)^2}$

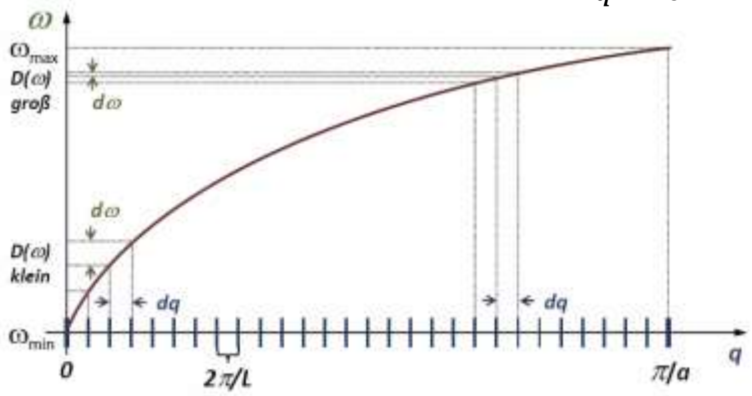
3D-Zustandsdichte: $Z(q) = \frac{V}{(2\pi)^3}$



- ***Zustandsdichte im ω - Raum***

überführen von $\sum_q \to \int d^3q \to \int d\omega$: $\sum_{r,q} F[\omega_r(\mathbf{q})] = \sum_r \int_{1.\mathrm{BZ}} d^3q\, Z(\mathbf{q}) F[\omega_r(\mathbf{q})] = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} d\omega\, F(\omega) D(\omega)$

$$\Rightarrow \quad D(\omega) = \sum_r \int_{1.\mathrm{BZ}} d^3q\, Z(\mathbf{q})\, \delta[\omega - \omega_r(\mathbf{q})]$$



konstante Zustandsdichte im $\mathbf{q}$-Raum wird durch nichtlineare $\omega(\mathbf{q})$-Relation in $D(\omega)$ übersetzt

Beispiel: nur ein Dispersionszweig ($r = 1$)

$$\int_{\omega(\mathbf{q})}^{\omega(\mathbf{q})+\Delta\omega(\mathbf{q})} D(\omega) d\omega \simeq D(\omega)\Delta\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{q}(\omega)}^{\mathbf{q}(\omega+\Delta\omega)} d^3q$$

$$d^3q = dS_q dq_\perp = dS_q \left(\frac{dq_\perp}{d\omega}\right) \Delta\omega$$

$$\boxed{D(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega=const} \frac{dS_q}{|d\omega/dq_\perp|}}$$

- ***isotropes Medium mit einatomiger Basis***

(drei akustische Zweige: 1LA + 2TA, Annahme linearer Dispersion $\omega_\mathrm{L} = v_\mathrm{L} q;\ \ \omega_\mathrm{T} = v_\mathrm{T} q$)

$$D^{(3D)}(\omega) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{1}{v_\mathrm{L}^3} + \frac{2}{v_\mathrm{T}^3}\right)\omega^2 \qquad D^{(2D)}(\omega) = \frac{A}{2\pi}\left(\frac{1}{v_\mathrm{L}^2} + \frac{1}{v_\mathrm{T}^2}\right)\omega^1 \qquad D^{(1D)}(\omega) = \frac{L}{2\pi}\frac{2}{v_\mathrm{L}}\omega^0$$