

5 Dynamik des Kristallgitters

A5.1 Lineare Kette aus gleichen Atomen



Gegeben sei eine lineare, quasi-elastische Kette aus Atomen der Masse $M = 200$ u. Der Abstand zwischen benachbarten Atomen sei $a = 4 \text{ \AA}$. Wechselwirkung herrsche nur zwischen den nächsten Nachbarn.

- (a) Die Schallgeschwindigkeit sei $v_s = 4000 \text{ m/s}$. Wie groß ist die Kopplungskonstante C zwischen benachbarten Atomen? Benutzen Sie hierzu die Dispersionsrelation

$$\omega^2(q) = \frac{4C}{M} \sin^2 \frac{qa}{2} \leftrightarrow \omega(q) = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|. \quad (\text{A5.1.1})$$

- (b) Wie groß ist die maximale Frequenz einer ungedämpften Welle?
 (c) Skizzieren Sie die Auslenkung einiger Atome für eine Welle mit $q = \frac{\pi}{a}$ und für eine Welle mit $q = \frac{\pi}{2a}$, jeweils für $\omega t = 0$ und $\omega t = \frac{\pi}{2}$.

Lösung

- (a) Wir gehen von der Dispersionsrelation (siehe hierzu Aufgabe A5.2)

$$\omega^2(q) = \frac{4C}{M} \sin^2 \frac{qa}{2} \leftrightarrow \omega(q) = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad (\text{A5.1.2})$$

für eine eindimensionale Kette von Atomen aus. Die Schallgeschwindigkeit ist

$$v_s = \left. \frac{\partial \omega(q)}{\partial q} \right|_{q \rightarrow 0} = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \frac{a}{2} \cos \frac{qa}{2} \bigg|_{q \rightarrow 0} = a\sqrt{\frac{C}{M}} \quad (\text{A5.1.3})$$

Auflösen nach C ergibt

$$C = \frac{M v_s^2}{a^2}. \quad (\text{A5.1.4})$$

Einsetzen der angegebenen Werte für die Atommasse ($M = 200 \cdot 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg} = 3.32 \times 10^{-25} \text{ kg}$) und die Schallgeschwindigkeit ($v_s = 4000 \text{ m/s}$) liefert $C \approx 33.2 \text{ kg/s}^2$ (N/m).

- (b) In der Dispersionsrelation

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \leq \omega_{\max} = 2\frac{v_s}{a} \quad (\text{A5.1.5})$$

kann der Sinus höchstens 1 werden. Der Zahlenwert für die maximale Schwingungsfrequenz ist $\omega_{\max} \simeq 2 \times 10^{13}$ 1/s ($\omega_{\max}/2\pi \simeq 3$ THz).

- (c) Die Lösungen der Bewegungsgleichungen für die eindimensionale Kette sind von der Form

$$u_n(t) = u_0 e^{i(nqa - \omega t)}, \quad (\text{A5.1.6})$$

wobei a der Abstand benachbarter Atome und n eine ganze Zahl ist.

Am Rand der Brillouin-Zone ($q = \pi/a$) gilt (siehe Abb. 5.1):

$$u_n(\pi/a, t) = (-1)^n u_0 e^{-i\omega t} \quad (\text{A5.1.7})$$

und somit für $\omega t = 0$ und $\omega t = \pi/2$

$$\begin{aligned} (1) \quad u_n(\pi/a, 0) &= (-1)^n u_0 \\ (2) \quad u_n(\pi/a, \pi/2) &= (-1)^n u_0(-i) \end{aligned} \quad (\text{A5.1.8})$$

Am Rand der Brillouin-Zone geht die Steigung der Dispersionsrelation und somit die Gruppengeschwindigkeit ($v_{\text{gr}} = \partial\omega/\partial q$) gegen Null. Es bildet sich eine stehende Welle aus, in der die Atome gegenphasig schwingen.

In der Mitte zwischen Rand und Zentrum der Brillouin-Zone ($q = \pi/2a$) gilt (siehe Abb. 5.1):

$$u_n(\pi/2a, t) = (i)^n u_0 e^{-i\omega t} \quad (\text{A5.1.9})$$

und somit für $\omega t = 0$ und $\omega t = \pi/2$

$$\begin{aligned} (3) \quad u_n(\pi/2a, 0) &= (i)^n u_0 \\ (4) \quad u_n(\pi/2a, \pi/2) &= (i)^n u_0(-i) \end{aligned} \quad (\text{A5.1.10})$$

Bei $q = \pi/2a$ schwingen die übernächsten Atome gegenphasig. Im Zentrum der Brillouin-Zone ($q = 0$) haben alle die gleiche Phasenlage.

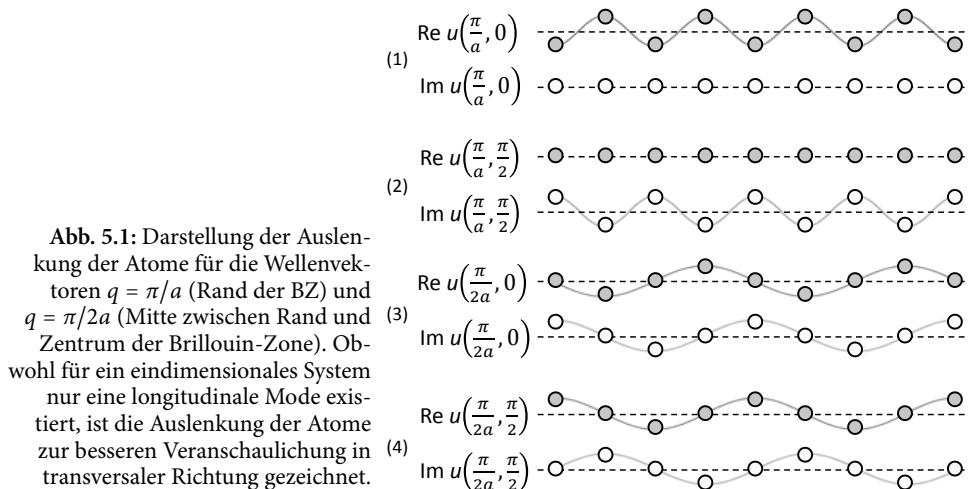


Abb. 5.1: Darstellung der Auslenkung der Atome für die Wellenvektoren $q = \pi/a$ (Rand der BZ) und $q = \pi/2a$ (Mitte zwischen Rand und Zentrum der Brillouin-Zone). Obwohl für ein eindimensionales System nur eine longitudinale Mode existiert, ist die Auslenkung der Atome zur besseren Veranschaulichung in transversaler Richtung gezeichnet.

A5.2 Wellengleichung im Kontinuum



Betrachten Sie eine lineare monoatomare Kette aus äquidistanten Atomen der Masse M im Abstand a , die um ihre Gleichgewichtslage kleine Schwingungen ausführen können (longitudinale Polarisierung, harmonische Näherung). Eine Wechselwirkung bestehe ausschließlich zwischen nächsten Nachbarn und sei durch die Federkonstante C charakterisiert. Die Position des n -ten Atoms sei durch $x_n(t) = na + u_n(t)$ beschrieben.

- (a) Zeigen Sie, dass die Auslenkung $u_n(t)$ des n -ten Atoms der Differentialgleichung

$$M \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} = -C [2u_n(t) - u_{n+1}(t) - u_{n-1}(t)]$$

genügt.

- (b) Lösen Sie diese Gleichung mit dem Ansatz $u_n(t) = u_0(t)e^{iqna}$ und leiten Sie eine Dispersionsrelation zwischen Frequenz ω und der Wellenzahl q ab.
 (c) Diskutieren Sie den langwelligigen Limes $qa \ll 1$ und zeigen Sie insbesondere, dass sich aus der obigen Differentialgleichung die Schall-Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} - v_s^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = 0$$

ergibt, wenn man zur Kontinuumsbeschreibung $u_{n\pm 1}(t) = u(x \pm a, t)$ übergeht.

Lösung

- (a) Wir gehen bei unseren Rechnungen von der Position der Atome (siehe Abb. 5.2)

$$x_n(t) = na + u_n(t) \quad (\text{A5.2.1})$$

aus, bei der $u_n(t)$ eine kleine Auslenkung aus der Gleichgewichtslage na des n -ten Atoms bedeutet. Die Parameter dieser Beschreibung sind (i) die Masse M der Atome

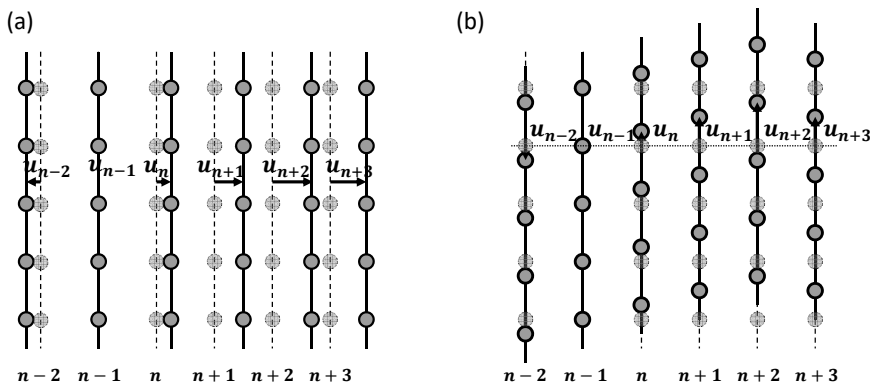


Abb. 5.2: Schematische Darstellung der Auslenkung u_n der Netzebenen bei einer (a) longitudinalen und (b) transversalen Gitterschwingung.

und (ii) die Kraftkonstanten C_p , die die Hookesche Kraft F_n zwischen dem n -ten und dem $(n + p)$ -ten Atom beschreibt

$$F_n = - \sum_{p \neq 0} C_p [u_n(t) - u_{n+p}(t)] . \quad (\text{A5.2.2})$$

Die Newtonsche Bewegungsgleichung lautet dann für die Kette

$$M \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} = F_n = \sum_{p \neq 0} C_p [u_{n+p}(t) - u_n(t)] . \quad (\text{A5.2.3})$$

Unter der Annahme, dass $C_{-p} = C_p$ können wir die Summe über den Index p wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} M \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} &= \sum_{p>0} C_p [u_{n+p} - u_n] - \underbrace{\sum_{p<0} C_p [u_{n+p} - u_n]}_{= \sum_{p>0} C_{-p} [u_{n-p} - u_n]} \\ &= - \sum_{p>0} C_p [2u_n - u_{n+p} - u_{n-p}] . \end{aligned} \quad (\text{A5.2.4})$$

Für den Spezialfall nur nächster Nachbarnwechselwirkung ($C_1 = C_{-1} = C$ und $C_p = C_{-p} = 0$ für $p > 1$) ergibt sich

$$\begin{aligned} M \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} &= -C [u_n(t) - u_{n+1}(t)] - C [u_n(t) - u_{n-1}(t)] \\ &= -C [2u_n(t) - u_{n+1}(t) - u_{n-1}(t)] . \end{aligned} \quad (\text{A5.2.5})$$

- (b) Zur Lösung dieser Differentialgleichung verwenden wir nun den folgenden Lösungsansatz

$$u_n(t) = u_0 e^{i(qna - \omega t)} . \quad (\text{A5.2.6})$$

Dies liefert mit Gleichung (A5.2.4)

$$\begin{aligned} -\omega^2 M &= - \sum_{p>0} C_p [2 - e^{iqpa} - e^{-iqpa}] \\ &= -2 \sum_{p>0} C_p [1 - \cos(qpa)] \\ &= -4 \sum_{p>0} C_p \sin^2 \left(\frac{qpa}{2} \right) \end{aligned} \quad (\text{A5.2.7})$$

und damit die Dispersionsrelation $\omega(q)$:

$$\omega^2(q) = \frac{4}{M} \sum_{p>0} C_p \sin^2 \left(\frac{qpa}{2} \right) = \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p [1 - \cos(qpa)] . \quad (\text{A5.2.8})$$

Im Spezialfall nur nächster Nachbarwechselwirkung erhalten wir dann mit $C_1 = C_{-1} = C$

$$\omega^2(q) = \frac{4C}{M} \sin^2 \left(\frac{qa}{2} \right) = \frac{2C}{M} [1 - \cos(qa)] . \quad (\text{A5.2.9})$$

Wir erhalten folgende Eigenschaften von $\omega(q)$:

- Periodizität:

$$\omega(q) = \omega\left(q + n \frac{2\pi}{a}\right) \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{A5.2.10})$$

Das bedeutet, dass die Dispersionsrelation $\omega(q)$ periodisch mit einer Periode $q = \frac{2\pi}{a}$ ist. Die Periodenlänge entspricht demzufolge der minimalen Länge eines reziproken Gittervektors. Es gilt deshalb ganz allgemein: $\omega(\mathbf{q}) = \omega(\mathbf{q} + \mathbf{G})$. Das heißt, dass die Betrachtung der Dispersionsrelation im Bereich eines reziproken Gittervektors völlig ausreicht. Im Allgemeinen wird hierfür die 1. Brillouin-Zone verwendet ($-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}$, siehe Abb. 5.3).

- Parität bezüglich $q \rightarrow -q$:

$$\omega(q) = \omega(-q) \quad (\text{A5.2.11})$$

Die Parität zeigt, dass es sogar völlig ausreichend ist, die Dispersionsrelation nur in einem Oktanten der 1. Brillouin-Zone anzugeben.

- Maximum von $\omega(q)$:

$$\omega_{\max} = \max\{\omega(q)\} = \sqrt{\frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p [1 - (-1)]} \underset{\text{n.N.}}{=} 2\sqrt{\frac{C}{M}} \quad (\text{A5.2.12})$$

Das Maximum von $\omega(q)$ ist genau am Rand der 1. Brillouin-Zone bei $q = \pm \frac{\pi}{a}$ gegeben. Hier verschwindet die Gruppengeschwindigkeit und es bildet sich eine stehende Welle aus.

- (c) Verhalten im langwelligen Limes $qa \rightarrow 0$ ($\lambda \gg a$):

In diesem Limes spielen sich räumliche Veränderungen auf Längenskalen ab, die groß gegen die Gitterkonstante a sind. Als Folge davon ist eine Kontinuumsbeschreibung

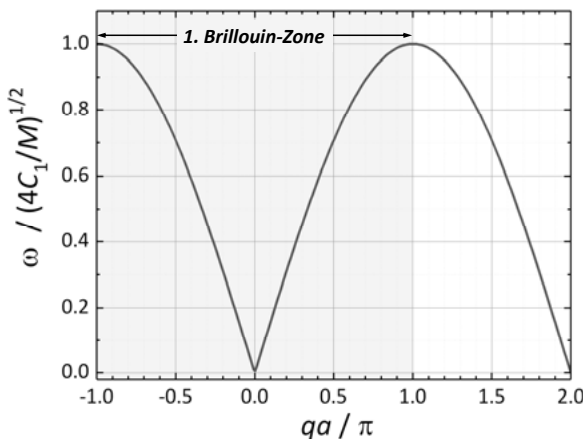


Abb. 5.3: Dispersionsrelation $\omega(q)$ der Gitterschwingungen einer monoatomaren Kette aus äquidistanten Atomen in harmonischer Näherung. Diese ist gleichbedeutend mit der Dispersionsrelation der Gitterschwingungen für ein Kristallgitter mit einatomiger Basis.

möglich. Die Dispersion lautet in diesem Limes (wir benutzen $\cos x \simeq 1 - \frac{1}{2}x^2$)

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 0} \omega(q) &= \sqrt{\frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p \left[1 - \left(1 - \frac{(qpa)^2}{2} \right) \right]} \\ &= a \underbrace{\sqrt{\frac{1}{M} \sum_{p>0} C_p p^2}}_{=v_s} \cdot q = v_s \cdot q. \end{aligned} \quad (\text{A5.2.13})$$

In diesem Grenzfall sind Phasen- ($v_{\text{ph}} = \omega/q$) und Gruppengeschwindigkeit ($v_{\text{gr}} = \partial\omega/\partial q$) identisch. Das bedeutet, dass die Wellenausbreitung dispersionsfrei ist. Im Spezialfall nur nächster Nachbarwechselwirkung ($C_1 = C_{-1} = C$ und $C_p = C_{-p} = 0$ für $p > 1$) erhalten wir dann

$$v_s = a \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{p>0} C_p p^2} = \sqrt{\frac{Ca^2}{M}}. \quad (\text{A5.2.14})$$

Zur Ableitung einer Schallwellengleichung im langwelligen Limes kann $u_n(t)$ als kontinuierliche Funktion von einer reellen Variablen x aufgefasst werden:

$$u_n(t) \rightarrow u(x, t), \quad u_{n \pm p} \rightarrow u(x \pm pa, t). \quad (\text{A5.2.15})$$

Wir entwickeln den Ausdruck für die Auslenkung der Atome aus ihrer Ruhelage in eine Taylor-Reihe um die Gleichgewichtsposition

$$\begin{aligned} u_{n \pm p}(t) &= u(x \pm pa, t) \\ &= u(x, t) \pm \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} pa + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} (pa)^2 \pm \dots \end{aligned} \quad (\text{A5.2.16})$$

Diese Taylor-Entwicklung können wir nun in den Ausdruck für die Hookesche Kraft einsetzen und erhalten

$$\begin{aligned} F_n &= - \sum_{p>0} C_p [2u_n(t) - u_{n+p}(t) - u_{n-p}(t)] \\ &= - \sum_{p>0} C_p [2u(x, t) - u(x + pa, t) - u(x - pa, t)] \\ &= - \sum_{p>0} C_p \left[- \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} pa - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} (pa)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} pa - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} (pa)^2 + \dots \right] \\ &= M \underbrace{\frac{a^2}{M} \sum_{p>0} C_p p^2}_{=v_s^2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = M v_s^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}. \end{aligned} \quad (\text{A5.2.17})$$

Wir haben somit im langwelligen Limes (Kontinuumsnäherung) die eindimensionale Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = v_s^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (\text{A5.2.18})$$

für die lineare monoatomare Kette abgeleitet.

A5.3 Lineare Kette aus zweiatomigen Molekülen



Untersuchen Sie die Grundschrwingungen einer linearen Kette aus zweiatomigen Molekülen, die aus gleichen Atomen der Masse M bestehen. Der Abstand der Atome im Molekül und der Abstand zwischen den Molekülen soll gleich sein und $a/2$ betragen (siehe Abb. 5.4). Die Kraftkonstanten zwischen den Atomen desselben Moleküls soll $C_1 = 10 \cdot C$ und zwischen Atomen zweier benachbarter Moleküle $C_2 = C$ betragen. Die Kopplung mit übernächsten Nachbarn soll vernachlässigt werden. Wir erhalten so eine lineare Kette aus Atomen mit Masse M und Abstand $a/2$, bei der die Federkonstante zwischen den einzelnen Atomen abwechselnd groß und klein ist. Diese Anordnung stellt ein einfaches Modell für einen Kristall aus zweiatomigen Molekülen wie z. B. H_2 dar.

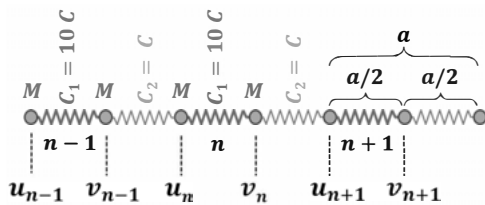


Abb. 5.4: Lineare Kette aus zweiatomigen Molekülen.

Bestimmen Sie $\omega(q)$ bei $q = 0$ und $q = \frac{\pi}{a}$. Fertigen Sie eine Skizze für die Dispersionsrelation an und diskutieren Sie diese.

Lösung

Wir betrachten eine Kette mit zwei unterschiedlichen Atomen, die allerdings gleiche Masse M haben sollen. Dabei sei u_n die Verschiebung des n -ten Atoms der einen Sorte und v_n die Verschiebung des n -ten Atoms der anderen Sorte. Die Bewegungsgleichung können wir dann wie folgt angeben:

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = C_1 (v_n - u_n) + C_2 (v_{n-1} - u_n) \quad (\text{A5.3.1})$$

$$M \frac{d^2 v_n}{dt^2} = C_1 (u_n - v_n) + C_2 (u_{n+1} - v_n) . \quad (\text{A5.3.2})$$

Zur Lösung dieses Differentialgleichungssystems machen wir den Ansatz

$$u_n(t) = u_0 e^{i(qna - \omega t)} \quad (\text{A5.3.3})$$

$$v_n(t) = v_0 e^{i(qna - \omega t)} . \quad (\text{A5.3.4})$$

Einsetzen ergibt das folgende algebraische Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} 0 &= C_1(v_0 - u_0) + C_2(v_0 e^{-iqa} - u_0) + M\omega^2 u_0 \\ 0 &= C_1(u_0 - v_0) + C_2(u_0 e^{+iqa} - v_0) + M\omega^2 v_0. \end{aligned} \quad (\text{A5.3.5})$$

Dies ist ein homogenes, lineares Gleichungssystem, für das eine nicht triviale Lösung existiert, wenn die Koeffizienten-Determinante verschwindet, also

$$\begin{vmatrix} (C_1 + C_2) - M\omega^2 & -(C_1 + C_2 e^{-iqa}) \\ -(C_1 + C_2 e^{iqa}) & (C_1 + C_2) - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (\text{A5.3.6})$$

Dies können wir ausmultiplizieren und erhalten

$$\begin{aligned} [M\omega^2 - (C_1 + C_2)]^2 &= (C_1 + C_2 e^{-iqa})(C_1 + C_2 e^{iqa}) = C_1^2 + C_2^2 + 2C_1 C_2 \cos qa \\ &= C_1^2 + C_2^2 + 2C_1 C_2 - 2C_1 C_2 (1 - \cos qa) \\ &= C_1^2 + C_2^2 - 4C_1 C_2 \sin^2 \frac{qa}{2}. \end{aligned} \quad (\text{A5.3.7})$$

Die beiden Lösungen dieser quadratischen Gleichung lauten:

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2 &= \frac{C_1 + C_2}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1 C_2 \cos qa} \\ &= \frac{C_1 + C_2}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{(C_1 + C_2)^2 - 4C_1 C_2 \sin^2 \frac{qa}{2}}. \end{aligned} \quad (\text{A5.3.8})$$

1. Wir untersuchen zunächst den langwelligten Limes $q \rightarrow 0$. In diesem Fall können wir eine Taylor-Entwicklung für die Wurzelfunktion¹ und die Sinus-Funktion² durchführen

$$\begin{aligned} \sqrt{(C_1 + C_2)^2 - 4C_1 C_2 \sin^2 \frac{qa}{2}} &= (C_1 + C_2) \sqrt{1 - 4 \frac{C_1 C_2}{(C_1 + C_2)^2} \sin^2 \frac{qa}{2}} \\ &\simeq (C_1 + C_2) \left[1 - \frac{q^2 a^2}{2} \frac{C_1 C_2}{(C_1 + C_2)^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A5.3.9})$$

und erhalten die beiden Lösungen

$$\omega_+^2 = 2 \frac{C_1 + C_2}{M} - \frac{q^2 a^2}{2M} \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2} \quad (\text{optischer Zweig}) \quad (\text{A5.3.10})$$

$$\omega_-^2 = \frac{q^2 a^2}{2M} \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2} \quad (\text{akustischer Zweig}) \quad (\text{A5.3.11})$$

und damit für $q \rightarrow 0$ ($C_1 = 10C$, $C_2 = C$)

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2(C_1 + C_2)}{M}} = \sqrt{\frac{22C}{M}} \quad (\text{optischer Zweig}) \quad (\text{A5.3.12})$$

$$\omega_- = \sqrt{\frac{C_1 C_2 a^2}{2M(C_1 + C_2)}} q = \sqrt{\frac{10Ca^2}{22M}} q \quad (\text{akustischer Zweig}) \quad (\text{A5.3.13})$$

¹ Es gilt: $\sqrt{1-x} \simeq 1 - \frac{1}{2}x$

² Es gilt: $\sin^2 \frac{qa}{2} \simeq \frac{q^2 a^2}{4}$

2. Im Fall $q = \pi/a$ gilt $\sin^2(qa/2) = 1$ und wir erhalten

$$\sqrt{(C_1 + C_2)^2 - 4C_1C_2 \sin^2 \frac{qa}{2}} = \sqrt{(C_1 + C_2)^2 - 4C_1C_2} = C_1 - C_2$$

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{C_1 + C_2}{M} \pm \frac{C_1 - C_2}{M} \quad (\text{A5.3.14})$$

und somit

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2C_1}{M}} = \sqrt{\frac{20C}{M}} \quad (\text{optischer Zweig}) \quad (\text{A5.3.15})$$

$$\omega_- = \sqrt{\frac{2C_2}{M}} = \sqrt{\frac{2C}{M}} \quad (\text{akustischer Zweig}) \quad (\text{A5.3.16})$$

In Abb. 5.5 ist der ungefähre Verlauf der Dispersionsrelation dargestellt. Für die eindimensionale Anordnung gibt es genau einen optischen und einen akustischen Zweig, zwischen denen eine Frequenzlücke bei $q = \pm \frac{\pi}{a}$ existiert. Die Bezeichnungen „akustisch“ und „optisch“ kommen daher, dass bei akustischen Schwingungen großer Wellenlänge auch alle Atome in Phase mitschwingen. Bei der optischen Schwingung ist die Auslenkung der beiden Atome dagegen gegenphasig, wobei der Schwerpunkt sich nicht bewegt. Bei Ionenkristallen (z. B. NaCl) koppeln optische Moden gut an elektromagnetische Wellen an, weshalb man sie optisch gut anregen kann.

Im allgemeinen dreidimensionalen Fall erhalten wir in einem Kristall mit r' -atomiger Basis 3 akustische Zweige (2 transversale und 1 longitudinaler Zweig) und $3r' - 3$ optische Zweige.

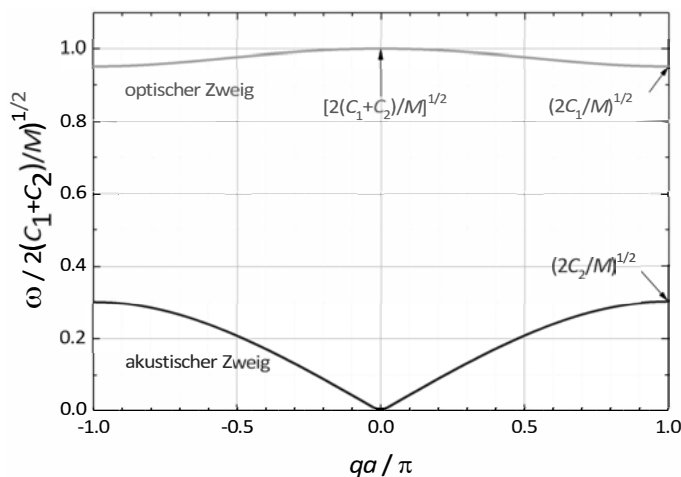


Abb. 5.5: Dispersionsrelation der akustischen und optischen Schwingungen für eine lineare Kette aus zwei-atomigen Molekülen, die aus Atomen gleicher Masse M bestehen. Die Kraftkonstanten zwischen den Atomen sind $C_1 = 10C$ und $C_2 = C$.

A5.4 Lineare Kette mit übernächster Nachbarwechselwirkung

Betrachten Sie eine lineare Kette aus identischen Atomen bei den Positionen $x_p = pa$, $p = 1, 2, \dots$. Die Wechselwirkung sei quasi-harmonisch. Die Kopplungskonstante zwischen übernächsten Nachbarn sei $1/\nu$ mal so groß wie die Kopplungskonstante zwischen den nächsten Nachbarn und zwischen weiter voneinander entfernten Atomen sei sie Null, wobei $\nu = 2, 3, \dots$

- (a) Bestimmen Sie die Dispersionsrelation $\omega(q)$ und skizzieren Sie diese.
 (b) Für welche ganzzahligen Werte ν liegt das Maximum in der Dispersionskurve bei Wellenzahlen $q < \pi/a$?
 (c) Wie groß ist die maximale Frequenz einer ungedämpften Welle? Diskutieren Sie insbesondere den Fall $\nu = 2$.
 (d) Wie groß ist die Schallgeschwindigkeit?

Lösung

Wir setzen unser Bezugsatom auf den Gitterplatz $x_n = na = 0$, die Atome mit der Federkonstanten C auf die Plätze $-a$ und $+a$ und die Atome mit der Federkonstanten C/ν auf die Plätze $-2a$ und $+2a$ usw.. Als Bewegungsgleichung ergibt sich unter Annahme eines harmonischen Potentials

$$\begin{aligned} M \frac{d^2 u_n}{dt^2} &= C[u_{n-1} - u_n] + C[u_{n+1} - u_n] + \frac{C}{\nu}[u_{n-2} - u_n] + \frac{C}{\nu}[u_{n+2} - u_n] \\ &= \frac{C}{\nu}[u_{n+2} + u_{n-2} - 2u_n] + C[u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n]. \end{aligned} \quad (\text{A5.4.1})$$

- (a) Mit dem Ansatz

$$u_n(t) = u_0 e^{i(qna - \omega t)} \quad (\text{A5.4.2})$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} -M\omega^2 &= \frac{C}{\nu}[e^{2iqa} + e^{-2iqa} - 2] + C[e^{iqa} + e^{-iqa} - 2] \\ M\omega^2 &= \frac{2C}{\nu}[1 - \cos 2qa] + 2C[1 - \cos qa] \\ \omega^2 &= \frac{4C}{\nu M} \sin^2 qa + \frac{4C}{M} \sin^2 \frac{qa}{2}, \end{aligned} \quad (\text{A5.4.3})$$

wobei wir die Identität $1 - \cos z = 2 \sin^2 z/2$ benutzt haben. Die gesuchte Dispersionsrelation lautet somit

$$\omega^2(q) = \frac{4C}{M} \left[\sin^2 \frac{qa}{2} + \frac{1}{\nu} \sin^2 qa \right]. \quad (\text{A5.4.4})$$

Schließlich verwenden wir noch $\sin z = 2 \sin \frac{z}{2} \cos \frac{z}{2}$ und erhalten die Dispersionsrelation zu

$$\begin{aligned} \omega^2(q) &= \frac{4C}{M} \sin^2 \frac{qa}{2} \left[1 + \frac{4}{\nu} \cos^2 \frac{qa}{2} \right] \\ \omega(q) &= 2 \sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \sqrt{1 + \frac{4}{\nu} \cos^2 \frac{qa}{2}}. \end{aligned} \quad (\text{A5.4.5})$$

Diese Dispersionsrelation ist in Abb. 5.6 für verschiedene Werte von ν dargestellt. Im Spezialfall nur nächster Nachbarwechselwirkung ($\nu \rightarrow \infty$) erhalten wir das bekannte Ergebnis

$$\omega(q) \stackrel{\nu \rightarrow \infty}{=} 2 \sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|. \quad (\text{A5.4.6})$$

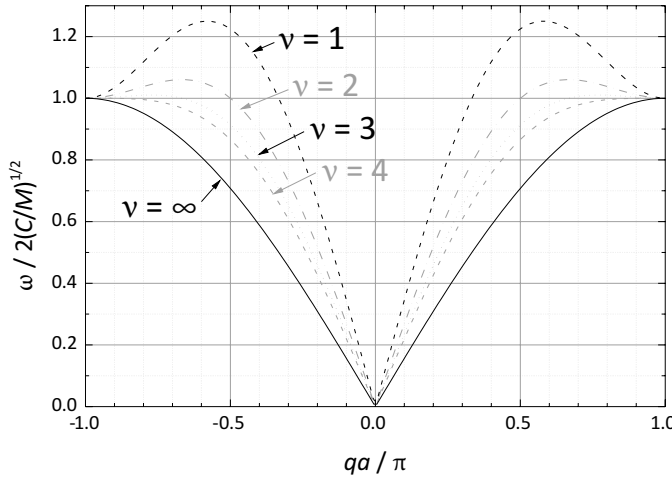


Abb. 5.6: Dispersionsrelation einer linearen Kette aus identischen Atomen mit endlicher Kopplung C/v ($v = 1, 2, 3, 4$) zwischen übernächsten Nachbarn. $v \rightarrow \infty$ stellt den Spezialfall nur nächster Nachbarwechselwirkung dar.

- (b) Das Maximum von $\omega(q)$ folgt aus (A5.4.5). Mit $x = qa/2$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \sin^2 x \left[1 + \frac{4}{v} \cos^2 x \right] \\
 f'(x) &= 2 \sin x \cos x \left[1 + \frac{4}{v} \cos^2 x \right] - \sin^2 x \frac{4}{v} 2 \sin x \cos x \\
 &= 2 \sin x \cos x \left[1 + \frac{4}{v} \cos^2 x - \frac{4}{v} \sin^2 x \right] \\
 &= 2 \sin x \cos x \left[1 + \frac{4}{v} (1 - 2 \sin^2 x) \right] = 0 .
 \end{aligned} \tag{A5.4.7}$$

Daraus folgt sofort

$$\sin^2 x = \frac{v}{8} \left(1 + \frac{4}{v} \right) = \frac{4+v}{8} . \tag{A5.4.8}$$

Man beachte, dass die obigen Gleichungen eine Schlussfolgerung über die Existenz eines Maximums in der Dispersionskurve $\omega(q)$ für $q < \pi/a$ zulassen: aus $\max\{\sin^2 x\} = 1$ folgt nämlich, dass v nur die Werte $v = 1, 2, 3, 4$ annehmen kann. Für $v = 5$ liegt das Maximum bei $q = \pi/a$, wie im Fall $v \rightarrow \infty$.

- (c) Für die maximale Frequenz erhalten wir das Resultat³

$$\omega_{\max}^2 = \max\{\omega^2(q)\} = \frac{4C}{M} \frac{4+v}{8} \left[1 + \frac{4}{v} \frac{4-v}{8} \right] = 4 \frac{C}{M} \frac{(4+v)^2}{16v} . \tag{A5.4.9}$$

Wir erkennen, dass $\omega_{\max} > \omega(\pi/a) = 2\sqrt{C/M}$ für die Fälle $v = 1, 2, 3$, da der Faktor $(4+v)^2/16v > 1$ ist. Das heißt, das Maximum der Dispersionskurve liegt bei Wellenzahlen $q < \pi/a$. Im Spezialfall $v = 2$ ergibt sich

$$\omega_{\max} = \frac{3}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{C}{M}} . \tag{A5.4.10}$$

³ Es gilt: $\max\{\cos^2 x\} = \max\{1 - \sin^2 x\} = (4-v)/8$.

- (d) Die Schallgeschwindigkeit erhalten wir als Steigung der Dispersionskurve für $q \rightarrow 0$:

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \sqrt{\left[1 + \frac{4}{\nu} \cos^2 \frac{qa}{2} \right]}$$

$$v_s = \left. \frac{\partial \omega(q)}{\partial q} \right|_{q \rightarrow 0} . \quad (\text{A5.4.11})$$

Für $qa \ll 1$ können wir den Sinus durch sein Argument und den Kosinus durch 1 ersetzen:

$$\sin \frac{qa}{2} \simeq \frac{qa}{2}, \quad \cos \frac{qa}{2} \simeq 1 . \quad (\text{A5.4.12})$$

Wir erhalten damit

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \frac{qa}{2} \sqrt{1 + \frac{4}{\nu}} = \sqrt{\frac{4+\nu}{\nu}} \sqrt{\frac{Ca^2}{M}} q$$

$$v_s = \sqrt{\frac{4+\nu}{\nu}} \sqrt{\frac{Ca^2}{M}} \stackrel{\nu=2}{=} \sqrt{3 \frac{Ca^2}{M}} . \quad (\text{A5.4.13})$$

Wir sehen, dass die Schallgeschwindigkeit mit wachsender Federkonstante C zunimmt und mit wachsender Masse der Atome abnimmt. Mit größer werdendem ν , das heißt mit abnehmender Kopplung an die übernächsten Nachbarn, nimmt die Schallgeschwindigkeit ab. Dies können wir dadurch verstehen, dass die effektive Kopplungskonstante $C(4+\nu)/\nu$ mit zunehmendem ν kleiner wird.



A5.5 Ultraschallexperiment

In einem Ultraschallexperiment wird ein piezoelektrisches Element (Übertrager) mit einer der Grenzflächen eines quaderförmigen Kristalls in Kontakt gebracht (siehe Abb. 5.7). Ein Hochfrequenzimpuls am Übertrager erzeugt über den piezoelektrischen Effekt eine oszillierende Verformung, also einen Schallimpuls, der sich über den Kristall ausbreitet und an der dem Übertrager gegenüberliegenden Fläche reflektiert wird. Kehrt die Schallwelle zum Übertrager zurück, erzeugt sie, aufgrund des inversen piezoelektrischen Effekts, ein Spannungssignal, dessen Zeitverschiebung gegenüber dem Anregungsimpuls aufgezeichnet wird. Der Kristall habe eine kubische Struktur und sei parallel zu den (100)-Achsen geschnitten. In Ausbreitungsrichtung sei die Probe 1 cm lang. Es werde ein Impuls mit einer Frequenz von 100 MHz und 0.5 μ s Dauer erzeugt. Die Reflexe treffen im Abstand von 16 μ s am Übertrager ein.

- Berechnen Sie die Schallgeschwindigkeit v_s in der Probe.
- Welche Art von Phononen regt man in diesem Experiment an?
- Ist eine Frequenz von 100 MHz groß oder klein für eine Phononenenergie in einen Festkörper? Wie lautet der Zusammenhang zwischen der Anregungsfrequenz ω , Wellenzahl q und Schallgeschwindigkeit v_s bei sehr kleinen Frequenzen?
- Welchem Gesetz $\omega(q)$ folgt die Dispersion in der ersten Brillouin-Zone zwischen $q = (0, 0, 0)$ und $(\pi/a, 0, 0)$ in harmonischer Näherung, wenn man nur die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn berücksichtigt?

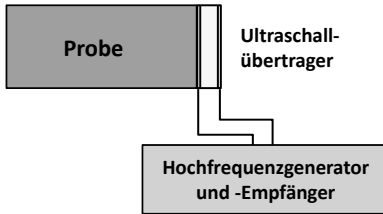


Abb. 5.7: Experimenteller Aufbau bei einem Ultraschall-experiment.

- (e) Berechnen Sie die Energie dieses Phononenzweiges am Rand der Brillouin-Zone mit den angegebenen Parametern und der Gitterkonstante $a = 5 \text{ \AA}$.

Lösung

- (a) Da das Ultraschallsignal die Probenlänge $L = 1 \text{ cm}$ zweimal durchläuft, ist die Schallgeschwindigkeit gegeben durch

$$v_s = \frac{2L}{t} = \frac{2 \cdot 0.01}{16 \times 10^{-6}} \frac{\text{m}}{\text{s}} = 1250 \frac{\text{m}}{\text{s}}. \quad (\text{A5.5.1})$$

- (b) Mit dem Ultraschallgeber werden longitudinale akustische Phononen angeregt, da der Ultraschallübertrager eine elastische Verformung in Ausbreitungsrichtung der Schallwelle erzeugt.
- (c) Eine Frequenz von 100 MHz ist sehr klein für eine Phononenfrequenz in einem Festkörper. Typischerweise liegt die maximale Frequenz von longitudinal akustischen Phononen in Festkörpern bei mehreren THz. Selbst im Fall eines sehr weichen Materials wie hier Pb liegen die Phononenfrequenzen am Rand der Brillouin-Zone bei etwa 2 THz, was einer Energie von etwa 8 meV entspricht. Die mit einer Frequenz von 100 MHz angeregten longitudinal akustischen Gitterschwingungen haben deshalb Wellenzahlen sehr nahe am Zentrum der Brillouin-Zone ($q \approx 0$). In diesem Bereich liegt eine näherungsweise lineare Dispersionsrelation $\omega(q) = v_s q$ vor, wobei die Schallgeschwindigkeit v_s vom Zweig und von der Ausbreitungsrichtung abhängt. In dem durchgeführten Experiment wird also in sehr guter Näherung die Schallgeschwindigkeit gemessen. Eine ausführliche Diskussion der Schallausbreitung im Grenzfall großer Wellenlängen (Kontinuumsfall) kann in den Aufgaben A4.3 und A4.4 gefunden werden.
- (d) Im hier vorliegenden Fall einer longitudinalen Gitterschwingung in $[100]$ -Richtung in einem kubischen Material gilt [vgl. hierzu (A5.2.9)]

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \stackrel{qa \ll 1}{\approx} \underbrace{a\sqrt{\frac{C}{M}}}_{v_s} |q|. \quad (\text{A5.5.2})$$

- (e) Nach Gleichung (A5.5.2) können wir $a\sqrt{C/M}$ durch v_s ausdrücken und erhalten

$$\omega\left(q = \frac{\pi}{a}\right) = 2\sqrt{\frac{C}{M}} = \frac{2v_s}{a}. \quad (\text{A5.5.3})$$

Mit $v_s = 1250 \text{ m/s}$ und $a = 5 \text{ \AA}$ erhalten wir

$$\omega \left(q = \frac{\pi}{a} \right) = \frac{2 \cdot 1250}{5 \times 10^{-10}} \text{ s}^{-1} = 5 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}. \quad (\text{A5.5.4})$$

Die dazugehörige Phononenenergie beträgt $\hbar\omega = 3.1 \text{ meV}$. Der Wert von $\omega/2\pi = 0.796 \text{ THz}$ liegt unter dem mit Neutronen gemessenen Wert von etwa 2 THz . Das liegt hier im Wesentlichen daran, dass bei der Ableitung der obigen Dispersionsrelation nur nächste Nachbarwechselwirkung berücksichtigt wurde und ferner auch daran, dass die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Pb sehr stark ist.



A5.6 Massendefekt in linearer Atomkette

Wir betrachten eine lineare Atomkette aus Atomen der Masse m und Gitterabstand a . Die Federkonstante zwischen allen Atomen sei gleich und betrage C . Die Kopplung der Atome soll durch nächste Nachbarwechselwirkungen beschrieben werden (siehe Abb. 5.8). Wir nehmen an, dass ein Atom an der Position $p = 0$ durch ein anderes Atom der Masse M ersetzt ist.

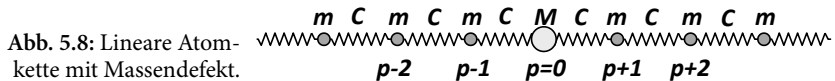


Abb. 5.8: Lineare Atomkette mit Massendefekt.

Berechnen Sie die Eigenfrequenz dieser linearen Kette und diskutieren Sie die Lösung. Gehen Sie dabei von dem Lösungsansatz

$$u_p = A e^{-q(\omega)|pa| - i\omega t}$$

für die Auslenkung u_p des p -ten Atoms aus (lokalisierte Mode). Hierbei ist p eine ganze Zahl.

Lösung

Falls die Auslenkung des p -ten Atoms u_p ist, können wir die Bewegungsgleichung der Atome mit den Platznummern $p = -1, 0, +1$ wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_{-1} &= C[u_{-2} + u_0 - 2u_{-1}] \\ M\ddot{u}_0 &= C[u_{-1} + u_1 - 2u_0] \\ m\ddot{u}_1 &= C[u_0 + u_2 - 2u_1]. \end{aligned} \quad (\text{A5.6.1})$$

Dies lässt sich für beliebige Indizes $p \neq 0$ verallgemeinern zu

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_p &= C[u_{p-1} + u_{p+1} - 2u_p] \\ M\ddot{u}_0 &= C[u_{-1} + u_1 - 2u_0]. \end{aligned} \quad (\text{A5.6.2})$$

ausdrücken. Zur Lösung dieser gekoppelten Gleichungen machen wir den Ansatz

$$u_p(t) = A e^{-q|p|a - i\omega t}, \quad (\text{A5.6.3})$$

welcher für positive Wellenzahlen $q > 0$ ein räumliches Abklingen der Amplitude mit der Entfernung vom Massendefekt antizipiert.

Für $p = 0$ erhalten wir dann

$$-M\omega^2 A = CA [e^{-qa} + e^{-qa} - 2] . \quad (\text{A5.6.4})$$

Für $p > 0$ erhalten wir

$$\begin{aligned} -m\omega^2 Ae^{-q|p|a} &= CA [e^{-q|p-1|a} + e^{-q|p+1|a} - 2e^{-q|p|a}] \\ -m\omega^2 A &= CA [e^{+qa} + e^{-qa} - 2] . \end{aligned} \quad (\text{A5.6.5})$$

Für $p < 0$ erhalten wir

$$\begin{aligned} -m\omega^2 Ae^{-q|p|a} &= CA [e^{-q|p+1|a} + e^{-q|p-1|a} - 2e^{-q|p|a}] \\ -m\omega^2 A &= CA [e^{-qa} + e^{+qa} - 2] , \end{aligned} \quad (\text{A5.6.6})$$

also das gleiche Resultat wie im Fall $p > 0$. Die verbleibende Aufgabe ist somit die Lösung der gekoppelten Gleichungen (A5.6.4) und (A5.6.5). Hierzu setzen wir $z = e^{qa}$ und können schreiben

$$-\omega^2 = \frac{C}{M} 2 \left[\frac{1}{z} - 1 \right] \quad \rightarrow \quad -\omega^2 z = 2 \frac{C}{M} [1 - z] \quad (\text{A5.6.7})$$

$$-\omega^2 = \frac{C}{m} \left[z + \frac{1}{z} - 2 \right] \quad \rightarrow \quad -\omega^2 z = \frac{C}{m} [z^2 - 2z + 1] = \frac{C}{m} (1 - z)^2 . \quad (\text{A5.6.8})$$

Division von (A5.6.8) durch (A5.6.7) ergibt dann sofort

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{2} \frac{M}{m} [1 - z] \quad \rightarrow \quad z = 1 - 2 \frac{m}{M} \\ qa &= \ln \left(1 - 2 \frac{m}{M} \right) . \end{aligned} \quad (\text{A5.6.9})$$

Dieses Resultat können wir nun in (A5.6.8) einsetzen, um die Dispersion $\omega(q)$ zu erhalten:

$$-\omega^2 = \frac{C}{m} \frac{(1 - z)^2}{z} \quad \rightarrow \quad \omega^2 = 4 \frac{C}{m} \frac{\frac{m}{M}}{2 - \frac{M}{m}} \quad (\text{A5.6.10})$$

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \sqrt{\frac{\frac{m}{M}}{2 - \frac{M}{m}}} . \quad (\text{A5.6.11})$$

Zur weiteren Diskussion der physikalischen Bedeutung dieser Dispersionsrelation definieren wir das Massenverhältnis $x = M/m$ und erhalten

$$\omega = \frac{2\sqrt{\frac{C}{m}}}{\sqrt{x(2-x)}} \quad (\text{A5.6.12})$$

$$qa = \ln \left(\frac{x-2}{x} \right) . \quad (\text{A5.6.13})$$

Abhängig vom Massenverhältnis x können wir nun eine Aufteilung in verschiedene Bereiche vornehmen:

1. $M > 2m$ oder $x > 2$:

In diesem Fall ist

$$\omega = \frac{2\sqrt{\frac{C}{m}}}{i\sqrt{x(x-2)}} = -i\Omega \quad (\text{A5.6.14})$$

$$qa = \ln\left(\frac{x-2}{x}\right) = -|q|a. \quad (\text{A5.6.15})$$

Das heißt, ω ist imaginär und q negativ und reell. Wir erhalten für die Amplitude u_p

$$u_p(t) = A e^{|qp|a - \Omega t} \quad (\text{A5.6.16})$$

mit $\Omega = \frac{2\sqrt{C/m}}{\sqrt{x(x-2)}}$. Dies bedeutet ein Anwachsen der Amplitude mit der Entfernung vom Massendefekt und ein exponentielles Abklingen mit der Zeit.

2. $m < M < 2m$ oder $1 < x < 2$:

In diesem Fall können wir schreiben

$$\omega = \frac{2\sqrt{\frac{C}{m}}}{\sqrt{x(2-x)}} \quad (\text{A5.6.17})$$

$$qa = \ln\left(-\frac{2-x}{x}\right) = i\pi + \ln\left(\frac{2-x}{x}\right) = i\pi - |Q|a. \quad (\text{A5.6.18})$$

Wir sehen, dass ω reell und q komplex ist. Für die Amplitude u_p erhalten wir damit

$$u_p(t) = A e^{-i\pi|p| + |Qp|a - i\omega t}. \quad (\text{A5.6.19})$$

Dies bedeutet erneut ein Anwachsen der Amplitude mit der Entfernung vom Massendefekt und eine harmonische Zeitabhängigkeit.

3. $0 < M < m$ oder $0 < x < 1$:

In diesem Fall gilt

$$\omega = \frac{2\sqrt{\frac{C}{m}}}{\sqrt{x(2-x)}} \quad (\text{A5.6.20})$$

$$qa = \ln\left(-\frac{2-x}{x}\right) = i\pi + \ln\left(\frac{2-x}{x}\right) = i\pi + |Q|a \quad (\text{A5.6.21})$$

und wir erhalten für die Amplitude u_p

$$u_p(t) = A e^{-i\pi|p| - |Qp|a - i\omega t}. \quad (\text{A5.6.22})$$

Wir sehen, dass unser Ansatz nur für $0 < M < m$ sinnvoll ist. Die Abhängigkeit (A5.6.20) ist in Abb. 5.9 dargestellt. Die Zeitabhängigkeit ist hierbei harmonisch und die Ortsabhän-

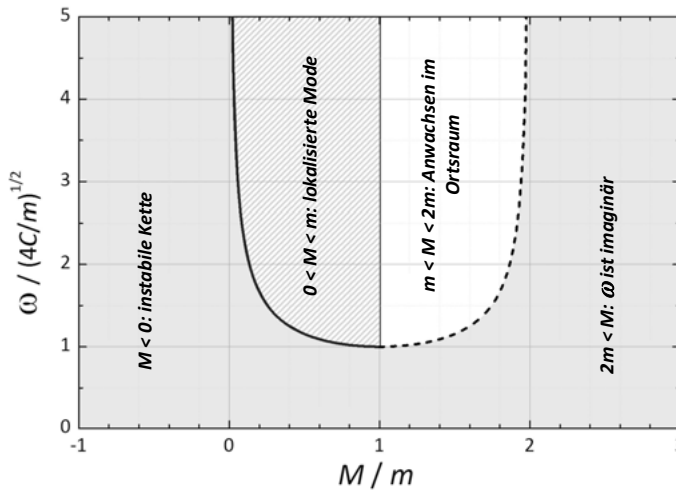


Abb. 5.9: Abhängigkeit der Eigenfrequenz einer linearen Kette von Atomen mit Masse m als Funktion der Masse M eines in die Kette eingebauten Massendefekts.

gigkeit eine abklingende Welle. Es sei darauf hingewiesen, dass die Oszillationsfrequenz $\omega \geq \sqrt{4C/m}$ ist, wohingegen für eine Kette ohne Defektatom $\omega = \sqrt{4C/m}$ gilt. Das heißt, die Oszillationsfrequenz der lokalisierten Mode liegt oberhalb der maximalen Frequenz der Schwingungsmoden des idealen Gitters. Dies ist zu erwarten, da eine kleinere Masse zu einer größeren Schwingungsfrequenz führen sollte. Anschaulich kann man sagen, dass das Gitter lokal aufgrund von $M < m$ mit einer höheren Frequenz schwingen kann, sich diese Mode aber nicht im Gitter ausbreiten kann. Somit kommt es zu einer lokalisierten Mode.

Hinweis: Um das Problem für andere Werte von M zu lösen, muss ein anderer Ansatz gewählt werden (siehe hierzu *Principles of the Theory of Solids*, J. M. Ziman, Cambridge University Press, Cambridge (1972) und *Solid State Theory*, W. A. Harrison, McGraw-Hill, New York (1970)).

A5.7 Zustandsdichte der Phononen einer eindimensionalen Kette



Unter der Voraussetzung, dass nur Kräfte zwischen direkt benachbarten Atomen wirken, lautet die Dispersionsrelation einer linearen Kette von Atomen mit Abstand a und Masse M

$$\omega = \omega_{\max} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|.$$

Hierbei ist ω_{\max} die maximale Frequenz im longitudinalen Phononenspektrum der Kette.

- Berechnen Sie die Zustandsdichte $D(\omega)$ der longitudinalen Phononen. Skizzieren Sie den Verlauf der Funktion und vergleichen Sie das Ergebnis mit der Zustandsdichtefunktion, die wir im Fall der Debyeschen Kontinuumsnäherung erhalten.
- Welcher Zusammenhang besteht zwischen der Maximalfrequenz ω_{\max} des Phononenspektrums und der oberen Grenzfrequenz ω_D , welche in der Debyeschen Kontinuumsnäherung angesetzt wird?

Lösung

Zu Beginn sei an dieser Stelle wiederholt, dass die Moden in einer eindimensionalen linearen Kette der Länge $L = Na$ (bei Annahme periodischer Randbedingungen) gegeben sind durch

$$q = \frac{n}{N} \frac{2\pi}{a}, \quad -\frac{N}{2} \leq n \leq \frac{N}{2}. \quad (\text{A5.7.1})$$

Die Zahl der Moden zwischen den Wellenzahlen q und $q + dq$ beträgt dann

$$dq = \frac{2\pi}{Na} dn = \frac{2\pi}{L} dn \rightarrow dn = \underbrace{\frac{L}{2\pi}}_{Z_1(q)} dq = Z_1(q) dq \quad (\text{A5.7.2})$$

mit der Zustandsdichte $Z_1(q)$ im eindimensionalen q -Raum. Dieser Sachverhalt kann bei der Berechnung von Summen über Wellenzahlen

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \sum_q F(q) = \sum_n F(n) \rightarrow \int_{-N/2}^{+N/2} dn F(n) \\ &= \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dq F(q) = \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dq Z_1(q) F(q) = 2 \int_0^{+\pi/a} dq Z_1(q) F(q) \end{aligned} \quad (\text{A5.7.3})$$

benutzt werden. Als Spezialfall ergibt sich

$$\langle 1 \rangle = \frac{Na}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dq = \frac{Na}{2\pi} \left[\frac{\pi}{a} - \left(-\frac{\pi}{a} \right) \right] = \frac{L}{a} = N. \quad (\text{A5.7.4})$$

Wir betrachten nun Phononen in dieser linearen Kette mit verschiedenen Dispersionsrelationen:

- Allgemeine Dispersion (vgl. Aufgabe A5.2):

$$\omega(q) = \omega_{\max} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|. \quad (\text{A5.7.5})$$

Für diese Dispersion erhalten wir im langwelligen Limes

$$\omega(q) \stackrel{q \rightarrow 0}{\approx} v_s \cdot q, \quad v_s = \frac{a}{2} \omega_{\max} \quad (\text{A5.7.6})$$

mit der Schallgeschwindigkeit v_s .

- Schalldispersion in der Debyeschen Kontinuumsnäherung:

$$\omega(q) = v_s \cdot q \Theta(\omega_D - v_s \cdot q) \quad (\text{A5.7.7})$$

mit ω_D der Debye- (Abschneide-) Frequenz und Θ der Heaviside-Sprungfunktion.

Bei gegebener Dispersionsrelation $\omega(q)$ ist es nun von Vorteil, die Wellenzahl-Summen $\langle F \rangle$ wie folgt in ein Integral über $\omega_q = \omega(q)$ umzuschreiben:

$$\begin{aligned}\langle F \rangle &= 2 \int_0^{+\pi/a} dq Z_1(q) F(q) = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega_q \underbrace{\frac{dq}{d\omega_q} 2Z_1(q)}_{=D(\omega_q)} F(\omega_q) \\ &= \int_0^{\omega_{\max}} d\omega_q D(\omega_q) F(\omega_q),\end{aligned}\quad (\text{A5.7.8})$$

wobei wir die Zustandsdichte im Frequenzraum

$$D(\omega_q) = 2Z_1(q) \frac{dq}{d\omega_q} = \frac{L}{\pi} \frac{dq}{d\omega_q}, \quad (\text{A5.7.9})$$

definiert haben.

(a) Wir berechnen im Folgenden einige Beispiele für die Zustandsdichte im Frequenzraum.

■ Allgemeine Dispersion (vgl. Aufgabe A5.2):

$$\begin{aligned}\omega_q &= \omega_{\max} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad \rightarrow q = \frac{2}{a} \arcsin \frac{\omega_q}{\omega_{\max}} \\ \frac{dq}{d\omega_q} &= \frac{2}{a} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega_q^2}} \quad \rightarrow D(\omega_q) = \frac{2L}{\pi a} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega_q^2}}.\end{aligned}\quad (\text{A5.7.10})$$

Zur Kontrolle berechnen wir für diesen Fall $[F(\omega_q) = 1]$

$$\begin{aligned}\langle 1 \rangle &= \int_0^{\omega_{\max}} d\omega_q D(\omega_q) \\ &= \frac{2L}{\pi a} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{d\omega_q}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega_q^2}} \stackrel{x=\omega/\omega_{\max}}{=} \frac{2L}{\pi a} \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{L}{\pi} = N.\end{aligned}\quad (\text{A5.7.11})$$

■ Schalldispersion in der Debyeschen Kontinuumsnäherung:

$$\begin{aligned}\omega_q &= v_s \cdot q \quad \rightarrow q = \frac{\omega_q}{v_s} \\ \frac{dq}{d\omega_q} &= \frac{1}{v_s} \quad \rightarrow D(\omega_q) = \frac{L}{\pi v_s}.\end{aligned}\quad (\text{A5.7.12})$$

Zur Kontrolle berechnen wir auch hier

$$\langle 1 \rangle = \int_0^{\omega_D} d\omega_q D(\omega_q) \quad (\text{A5.7.13})$$

$$= \frac{L\omega_D}{\pi v_s} \stackrel{v_s = \frac{q}{2}\omega_{\max}}{=} \frac{Na\omega_D}{\pi \frac{a}{2}\omega_{\max}} = N \frac{2}{\pi} \frac{\omega_D}{\omega_{\max}} = N. \quad (\text{A5.7.14})$$

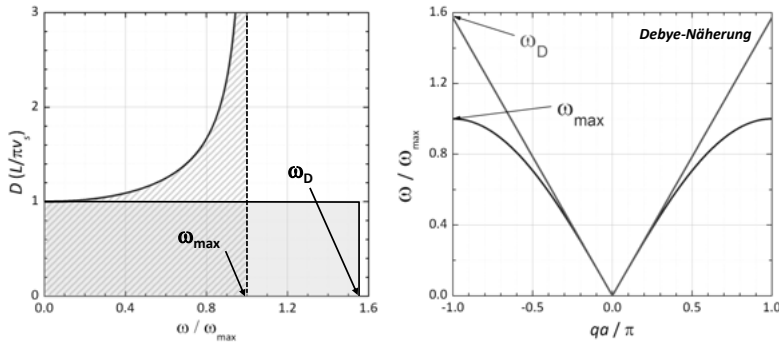


Abb. 5.10: Verlauf der Zustandsdichtefunktion $D(\omega_q)$ für die allgemeine Dispersion $\omega(q)$ (schraffiert) und die Debyesche Kontinuumsnäherung $\omega(q) = v_s q$ (grau). Rechts sind die zugehörigen Dispersionsrelationen $\omega(q)$ gezeigt.

Der Verlauf der Zustandsdichtefunktionen in diesen beiden Fällen ist in Abb. 5.10 skizziert. Im Grenzfall $q \rightarrow 0$ müssen natürlich beide Funktionen übereinstimmen, da die beiden zugrundeliegenden Dispersionsrelationen in diesem Grenzfall identisch sind. Während der Verlauf beider Zustandsdichtefunktionen für $\omega \ll \omega_{\max}$ gut übereinstimmt, gibt es bei $\omega \simeq \omega_{\max}$ starke Abweichungen. Insbesondere weist die exakte Zustandsdichtefunktion bei $\omega = \omega_{\max}$ eine (van Hove) Singularität auf, wodurch sie sich von der Debye-Näherung grundlegend unterscheidet.

- (b) Das Integral über die Zustandsdichtefunktion muss die Gesamtzahl N der Normalschwingungen ergeben. Deshalb müssen die schraffierte und graue Fläche in Abb. 5.10 gleich groß sein. Für die Debyeschen Kontinuumsnäherung resultiert diese Forderung nach (A5.7.14) in der Beziehung

$$N = \int_0^{\omega_D} d\omega_q D(\omega_q) = N \frac{2}{\pi} \frac{\omega_D}{\omega_{\max}} \quad (\text{A5.7.15})$$

also in

$$\omega_D = \frac{\pi}{2} \omega_{\max}. \quad (\text{A5.7.16})$$



A5.8 Singularität in der Zustandsdichte

Nehmen Sie an, dass ein optischer Phononenzweig im Dreidimensionalen nahe $q = 0$ eine Dispersionsrelation der Form $\omega(q) = \omega_0 - Aq^2$ hat. Zeigen Sie, dass dann gilt:

$$D(\omega) = \begin{cases} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{2\pi}{A^{3/2}}\right) (\omega_0 - \omega)^{1/2} & \text{für } \omega < \omega_0 \\ 0 & \text{für } \omega > \omega_0 \end{cases}.$$

Diskutieren Sie, unter welchen Bedingungen Singularitäten in der Zustandsdichte auftauchen.

Lösung

Gegeben ist eine Dispersionsrelation in $D = 3$ von der Form

$$\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 - A\mathbf{q}^2. \quad (\text{A5.8.1})$$

Auflösen nach $q = |\mathbf{q}|$ liefert

$$q = \sqrt{\frac{\omega_0 - \omega_{\mathbf{q}}}{A}} \rightarrow \left| \frac{dq}{d\omega_{\mathbf{q}}} \right| = \frac{1}{2\sqrt{A}} \frac{1}{\sqrt{\omega_0 - \omega_{\mathbf{q}}}}. \quad (\text{A5.8.2})$$

Die Dichte der Zustände $D(\omega_{\mathbf{q}})$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} D(\omega_{\mathbf{q}})d\omega_{\mathbf{q}} &= Z_3(q)d^3q = \frac{V}{(2\pi)^3}d^3q = \frac{V}{(2\pi)^3}4\pi q^2 dq \\ &= \underbrace{\frac{V}{(2\pi)^3}4\pi q^2 \left| \frac{dq}{d\omega_{\mathbf{q}}} \right|}_{D(\omega_{\mathbf{q}})} d\omega_{\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (\text{A5.8.3})$$

Nach Einsetzen von $dq/d\omega_{\mathbf{q}}$ erhalten wir die Zustandsdichte für den Fall $\omega_{\mathbf{q}} < \omega_0$ in der Form

$$D(\omega_{\mathbf{q}}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{A^{3/2}} \sqrt{\omega_0 - \omega_{\mathbf{q}}}. \quad (\text{A5.8.4})$$

Für den umgekehrten Fall $\omega_{\mathbf{q}} > \omega_0$ verschwindet $D(\omega)$ für alle ω . Dann ist die Zustandsdichte nämlich rein imaginär. Wir erhalten somit einen Sprung in der Zustandsdichte bei $\omega = \omega_0$. An der Stelle $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0$ ist $d\omega_{\mathbf{q}}/dq = 0$, wodurch an dieser Stelle eine Singularität in $D(\omega_{\mathbf{q}})$ entsteht.

$D(\omega_{\mathbf{q}})$ gibt die Anzahl der Schwingungszustände pro Frequenzintervall an. Für genügend große N sind die Zustände im q -Raum dicht gepackt, so dass wir von einer quasi-kontinuierlichen Verteilung ausgehen können. Wir können dann die Zahl der Zustände in einem Frequenzintervall $d\omega$ dadurch bestimmen, dass wir über das Volumen des \mathbf{q} -Raumes, das von den beiden Flächen $\omega(\mathbf{q})$ und $\omega(\mathbf{q}) + \Delta\omega(\mathbf{q})$ begrenzt wird, integrieren und mit der Zustandsdichte $Z_3(\mathbf{q})$ des q -Raumes multiplizieren. Wir erhalten

$$\int_{\omega(\mathbf{q})}^{\omega(\mathbf{q})+\Delta\omega(\mathbf{q})} D(\omega)d\omega \simeq D(\omega)\Delta\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{q}(\omega)}^{\mathbf{q}(\omega+\Delta\omega)} d^3q. \quad (\text{A5.8.5})$$

Die genaue Form der Fläche $\omega(\mathbf{q}) = \text{const}$ wird dabei durch die Dispersion $\omega(\mathbf{q})$ bestimmt. Im einfachsten Fall einer linearen Dispersion $\omega(\mathbf{q}) = v_s|\mathbf{q}|$ erhalten wir eine Kugeloberfläche.

Zur Ausführung der Integration in (A5.8.5) setzen wir $d^3q = dS_q dq_{\perp}$, wobei dS_q ein Flächenelement der Fläche $\omega(\mathbf{q}) = \text{const}$ und dq_{\perp} der jeweilige Abstand der Fläche $\omega(\mathbf{q}) + \Delta\omega(\mathbf{q}) = \text{const}$ von der Fläche $\omega(\mathbf{q}) = \text{const}$ ist (siehe Abb. 5.11). Mit $\Delta\omega = |\nabla_{\mathbf{q}}\omega(\mathbf{q})|dq_{\perp}$ können wir d^3q schreiben als

$$d^3q = dS_q dq_{\perp} = \frac{dS_q}{|\nabla_{\mathbf{q}}\omega(\mathbf{q})|} \Delta\omega \quad (\text{A5.8.6})$$

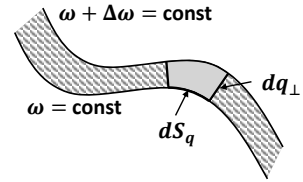


Abb. 5.11: Zur Herleitung der Zustandsdichte der Schwingungsmoden im Frequenzintervall zwischen $\omega(\mathbf{q})$ und $\omega(\mathbf{q}) + \Delta\omega(\mathbf{q})$.

und erhalten damit die Zustandsdichte

$$D(\omega_{\mathbf{q}}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega=\text{const}} \frac{dS_{\mathbf{q}}}{|\nabla_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}|}. \quad (\text{A5.8.7})$$

Der Gradient $|\nabla_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}|$ gibt die Änderung von ω senkrecht zur Fläche $\omega_{\mathbf{q}} = \text{const}$ an. Wir sehen, dass $D(\omega_{\mathbf{q}})$ immer dann singularär wird, wenn die Dispersionsrelation $\omega_{\mathbf{q}} = \omega(\mathbf{q})$ eine waagerechte Tangente besitzt, also gerade dann, wenn die Gruppengeschwindigkeit $d\omega_{\mathbf{q}}/dq$ Null ist.



A5.9 Kohn-Anomalie

Wir nehmen an, dass die interplanare Kraftkonstante C_p zwischen zwei benachbarten Gitterebenen die Form

$$C_p = A_1 \frac{\sin Q p a}{p}$$

hat. Hierbei sind A_1 eine (Feder-) Konstante, Q eine konstante Wellenzahl und p durchläuft alle ganzen Zahlen. Eine solche Form erwarten wir für Metalle. Verwenden Sie die Dispersionsrelation

$$\omega_q^2 = \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p (1 - \cos q p a),$$

um einen Ausdruck für ω_q^2 und $\partial\omega_q^2/\partial q$ zu finden. Beweisen Sie, dass für $q = Q$ der Ausdruck $\partial\omega_q^2/\partial q$ unendlich wird. Trägt man ω_q^2 oder ω gegen q auf, so ergibt sich bei Q eine vertikale Tangente: In der Phononendispersionsrelation $\omega(q)$ tritt bei Q ein Knick auf. Ein damit zusammenhängender Effekt wurde von W. Kohn vorhergesagt.

Lösung

Die Kohn-Anomalie [W. Kohn, *Image of the Fermi surface in the vibration spectrum of a metal*, Phys. Rev. Lett 2, 393 (1959)] ist eine Diskontinuität in der Ableitung der Dispersionsrelation $\omega(q)$ der Phononen in Metallen, die an bestimmten Punkten hoher Symmetrie in der 1. Brillouin-Zone auftritt. Sie entsteht durch eine abrupte Änderung der Abschirmung von Gitterschwingungen durch die Leitungselektronen. Die Annahme, dass wir die Effekte, die durch die Leitungselektronen verursacht werden, bei der Behandlung der Gitterschwingungen vernachlässigen können, ist nämlich nicht richtig. Der Grund dafür ist letztlich, dass die Elektronen dazu führen, dass die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung der Ionen durch die Abschirmung der Elektronen unterdrückt wird.

Kohn-Anomalien treten zusammen mit den so genannten Friedel-Oszillationen auf, wenn wir die Lindhard-Näherung anstelle der Thomas-Fermi-Näherung verwenden, um einen Ausdruck für die dielektrische Funktion eines homogenen Elektronengases abzuleiten. Der Ausdruck für den Realteil der dielektrischen Funktion $\epsilon(q, \omega)$ enthält im Lindhard-Modell einen logarithmischen Term, der eine Singularität für $q = 2k_F$ ergibt, wobei k_F die Fermi-Wellenzahl ist. Das Verhalten der Lindhard-Funktion für $\omega = 0$ und $q = 2k_F$ führt zu Oszillationen der Elektronendichte als Funktion des Abstands r von einer Störladung, die durch periodische Funktionen mit Argument $2k_F r$ beschrieben werden. Über die abgeschirmte Ion-Ion-Wechselwirkung wird dies in das Phononenspektrum übertragen. Das Resultat sind Knicke bei Werten von q , die den extremalen Durchmessern der Fermi-Oberfläche entsprechen ($q = 2k_F$ für ein freies Elektronengas). Dies wurde auch tatsächlich gemessen [R. Stedman, L. Almquist, G. Nilsson, and G. Raunio, Phys. Rev. **162**, 545 (1967) oder B. N. Brockhouse *et al.*, Phys. Rev. **128**, 1099 (1962)].

Wir gehen von einer Kopplungskonstante der Form

$$C_p = C_0 \frac{\sin Qpa}{Q_0 pa} = A_1 \frac{\sin Qpa}{p}, \quad A_1 = \frac{C_0}{Q_0 a} \quad (\text{A5.9.1})$$

aus. Hier sind C_0 , Q_0 und A_1 Konstanten. Wir haben also für die Kraftkonstante ein oszillierendes Verhalten als Funktion des Abstandes pa zwischen den Atomen angenommen. Motiviert ist das dadurch, dass wir in Metallen Ionen vorliegen haben, deren Ladung zu Oszillationen der Elektronendichte als Funktion des Abstands r vom Ion führt, die durch eine periodische Funktionen der Form $\sin(Qr)/Qr$ mit $Q = 2k_F$ beschrieben werden können.

Einsetzen in die Dispersionsrelation [vgl. hierzu Aufgabe A5.2, Gleichung (A5.2.8)]

$$\omega_q^2 = \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p [1 - \cos(qpa)] \quad (\text{A5.9.2})$$

liefert

$$\begin{aligned} \omega_q^2 &= \frac{2A_1}{M} \sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p} [1 - \cos(qpa)] \\ &= \frac{4A_1}{M} \sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p} \sin^2 \frac{qpa}{2} \\ &= \begin{cases} 0 & \text{für } q \leq Q \\ \pi \frac{A_1}{M} & \text{für } q > Q \end{cases}. \end{aligned} \quad (\text{A5.9.3})$$

Dieses Ergebnis ist in Abb. 5.12 dargestellt. Differenzieren nach der Wellenzahl q ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_q^2}{\partial q} &= \frac{2A_1}{M} \sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p} pa \sin qpa = \frac{2A_1}{M} a \sum_{p>0} \sin Qpa \sin qpa \\ &= \frac{2A_1}{M} a \sum_{p>0} \frac{e^{iQpa} - e^{-iQpa}}{2i} \frac{e^{iqpa} - e^{-iqpa}}{2i} \\ &= -\frac{A_1}{2M} a \sum_{p>0} [e^{i(Q+q)pa} - e^{i(Q-q)pa} - e^{i(-Q+q)pa} + e^{-i(Q-q)pa}] \end{aligned}$$

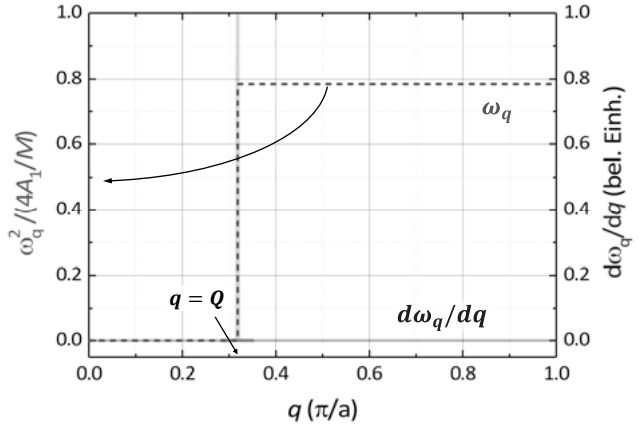


Abb. 5.12: Zur Veranschaulichung des Verlaufs der Dispersionsrelation $\omega_q = \omega(q)$ (gestrichelt) und der Divergenz von $\partial\omega_q^2/\partial q$ (durchgezogen, grau) bei $q = Q$.

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{A_1}{M} a \sum_{p>0} [\cos(Q+q)pa - \cos(Q-q)pa] \\
 &= \frac{A_1}{M} a \sum_{p>0} [\cos(Q-q)pa - \cos(Q+q)pa] .
 \end{aligned} \tag{A5.9.4}$$

Wir erkennen sofort, dass

$$\begin{aligned}
 \lim_{q \rightarrow Q} \frac{\partial\omega_q^2}{\partial q} &= \frac{A_1}{M} a \sum_{p>0} \underbrace{[1 - \cos 2Qpa]}_{2 \sin^2 Qpa} \\
 &= \frac{2A_1}{M} a \sum_{p>0} \sin^2 Qpa
 \end{aligned} \tag{A5.9.5}$$

und dass diese Summe bei $q = Q$ divergiert (siehe hierzu Abb. 5.12). Dies ist gerade die sogenannte Kohn-Anomalie.

Zusatz für besonders Interessierte: Um den obigen Sachverhalt besser verstehen zu können, betrachten wir noch den folgenden allgemeineren Ansatz für die p -Abhängigkeit der Kraftkonstanten C_p :

$$C_{pv} = C_0 \frac{\sin Qpa}{(Q_0 pa)^v} = A_v \frac{\sin Qpa}{p^v}, \quad A_1 = \frac{C_0}{(Q_0 a)^v}. \tag{A5.9.6}$$

Die obige Rechnung behandelt somit nur den exotischen langreichweitigen Grenzfall $v = 1$. Mit diesem Modell-Ansatz für die Kraftkonstante lautet die Dispersionsrelation für longitudinale Phononen

$$\begin{aligned}
 \omega^2(q) &= \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_{pv} [1 - \cos(qpa)] = 4 \frac{A_v}{M} \sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p^v} \sin^2 \frac{qpa}{2} \\
 \omega(q) &= 2 \sqrt{\frac{A_v}{M}} \sqrt{\sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p^v} \sin^2 \frac{qpa}{2}}.
 \end{aligned} \tag{A5.9.7}$$

Die Ableitung der Dispersion nach der Wellenzahl lautet

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \omega_q}{\partial q} &= 2 \sqrt{\frac{A_v}{M}} \frac{1}{2} \frac{d}{dq} \left[\sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p^v} \sin^2 \frac{qpa}{2} \right] \\
 &= \sqrt{\frac{A_v}{M}} \frac{\sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p^{v-1}} 2 \sin \frac{qpa}{2} \cos \frac{qpa}{2} \frac{qpa}{2}}{\sqrt{\sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p^v} \sin^2 \frac{qpa}{2}}} \\
 &= \frac{a}{2} \sqrt{\frac{A_v}{M}} \frac{\sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p^{v-1}} \sin qpa}{\sqrt{\sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p^v} \sin^2 \frac{qpa}{2}}}. \quad (\text{A5.9.8})
 \end{aligned}$$

Die Dispersionsrelation $\omega(q)$ und das Ergebnis (A5.9.8) sind in Abb. 5.13 für unterschiedliche Werte von ν dargestellt. Offensichtlich erhalten wir qualitative Veränderungen (ein Weichwerden) der Phonondispersion mit fallender Potenz ν . Insbesondere markiert $\nu = 3$ den Grenzfall einer konstanten Gruppengeschwindigkeit für $0 \leq q \leq Q$. Für $\nu \leq 3$ wächst die Gruppengeschwindigkeit im Bereich $0 \leq q \leq Q$ monoton an, um schließlich bei $q = Q$ eine Spitze zu entwickeln. Für $\nu = 1$ hat die Dispersion ω_q die Form einer Stufe, und die Gruppengeschwindigkeit divergiert bei $q = Q$.

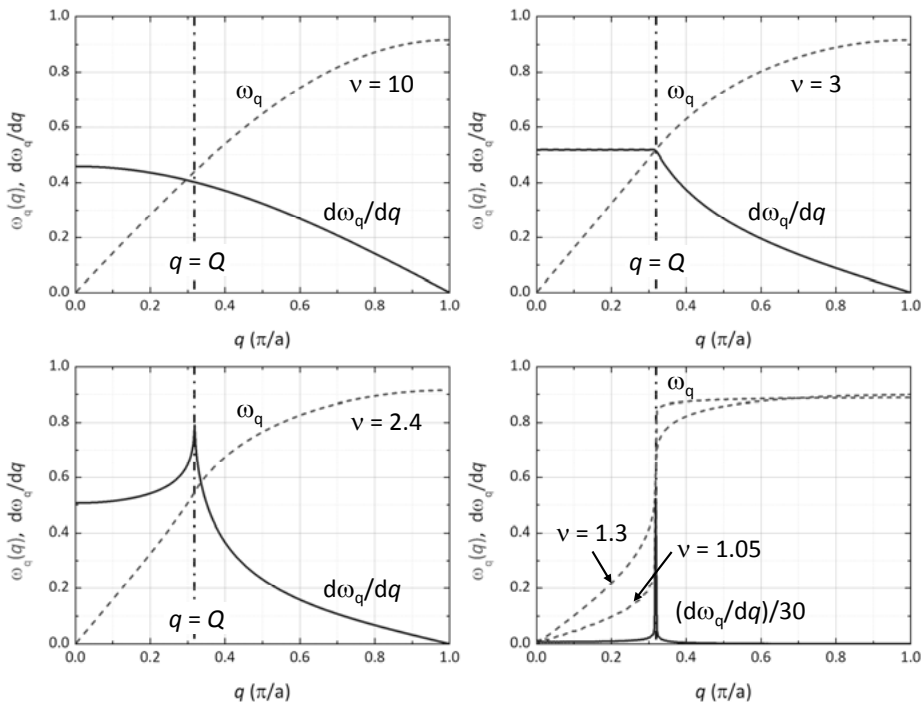


Abb. 5.13: Verlauf der Dispersionsrelation $\omega_q = \omega(q)$ (gestrichelt) und der Gruppengeschwindigkeit $d\omega_q/dq$ (durchgezogen) für verschiedene Werte des Parameters ν .

