Kap. 10:

Zweiatomige lineare Kette

(Gitterschwingungen in 1D)

10. Zweiatomige lineare Kette (1)

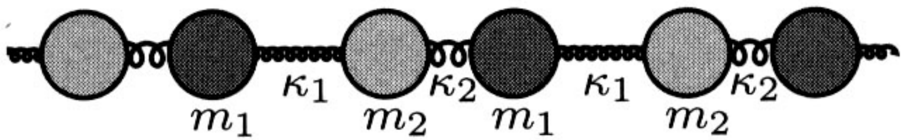
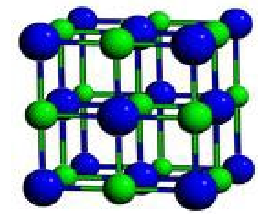


Fig. 10.1 A general diatomic chain with two different types of atoms (i.e., two different masses) and two different types of springs.



- Periodische Fortsetzung einer größeren Einheitszelle
- Innerhalb einer Einheitszelle i.a. unterschiedliche Atome & unterschiedliche Bindungen (→ modelliert durch verschiedene Federkonstanten)
- Sonderfälle: gleiche Atome, verschiedene Federkonstanten
  verschiedene Atome, gleiche Federkonstanten

10. Zweiatomige lineare Kette (2)

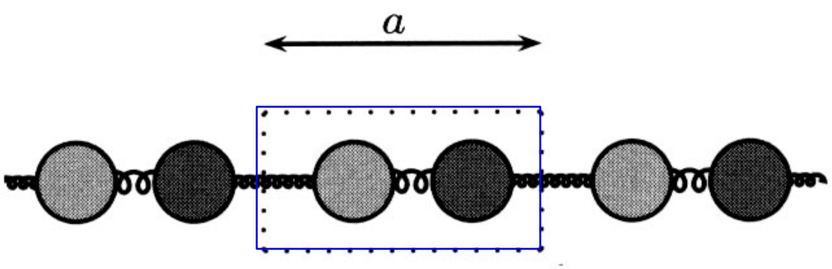


Fig. 10.2 A unit cell for the diatomic chain.

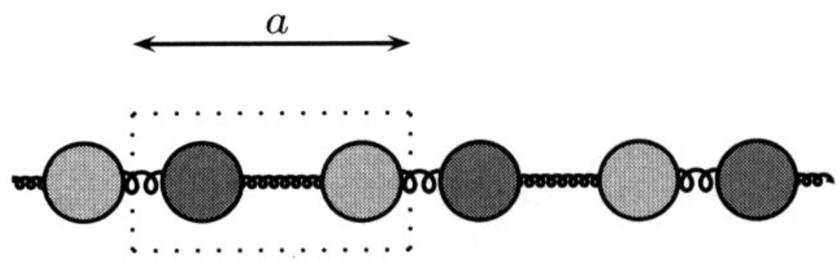


Fig. 10.3 Another possible unit cell for the diatomic chain.

Wahl der periodisch wiederholten Einheitszelle ist beliebig!

10. Zweiatomige lineare Kette (3)

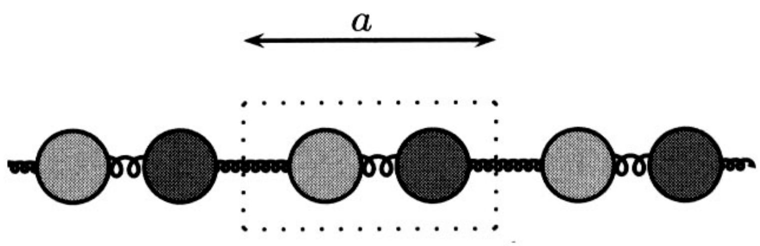


Fig. 10.2 A unit cell for the diatomic chain.

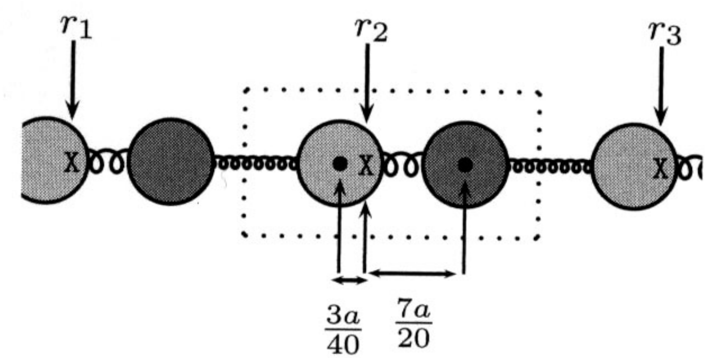


Fig. 10.4 The *basis* describes the objects in the crystal with respect to the positions of the reference lattice points. Here the reference point (at position r_n) is marked with an X.

Beispiel:

1. Schritt: willkürliche Wahl einer Einheitszelle

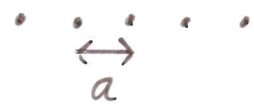
2. Schritt: willkürliche Wahl eines Referenzpunktes in jeder Zelle zur Adressierung (alle Referenzpunkte sind äquivalent: “Gitter”)

3. Schritt: relative Beschreibung der Atompositionen bezüglich des Referenzpunkes (“Basis”)

Zusammenfassung:
Strukturbeschreibung zweiatomige Kette

Zweiatomige lineare Kette

(3) → bisher: Periodizitätslänge = Abstand der Atome



jetzt: Verallgemeinerung auf Systeme mit unterschiedlichen Atomen

$\underbrace{\text{nicht-äquivalente}}$ Gitterplätze → größere Einheitszelle (≡ periodisch wdh. Gebiet)

- unterschiedliche Atome
- " „Federn"

Gitter: Gesamtheit aller äquivalenten Punkte $r_n = n \cdot a \quad n \in \mathbb{Z}$

Periodizitätslänge $= a = \Delta r_n$

Basis: Position der Atome i relativ zum Gitterpunkt in jeder Zelle

$$x_n^{eq,i} = r_n + \Delta x^{eq,i}$$

10. Zweiatomige lineare Kette (4)

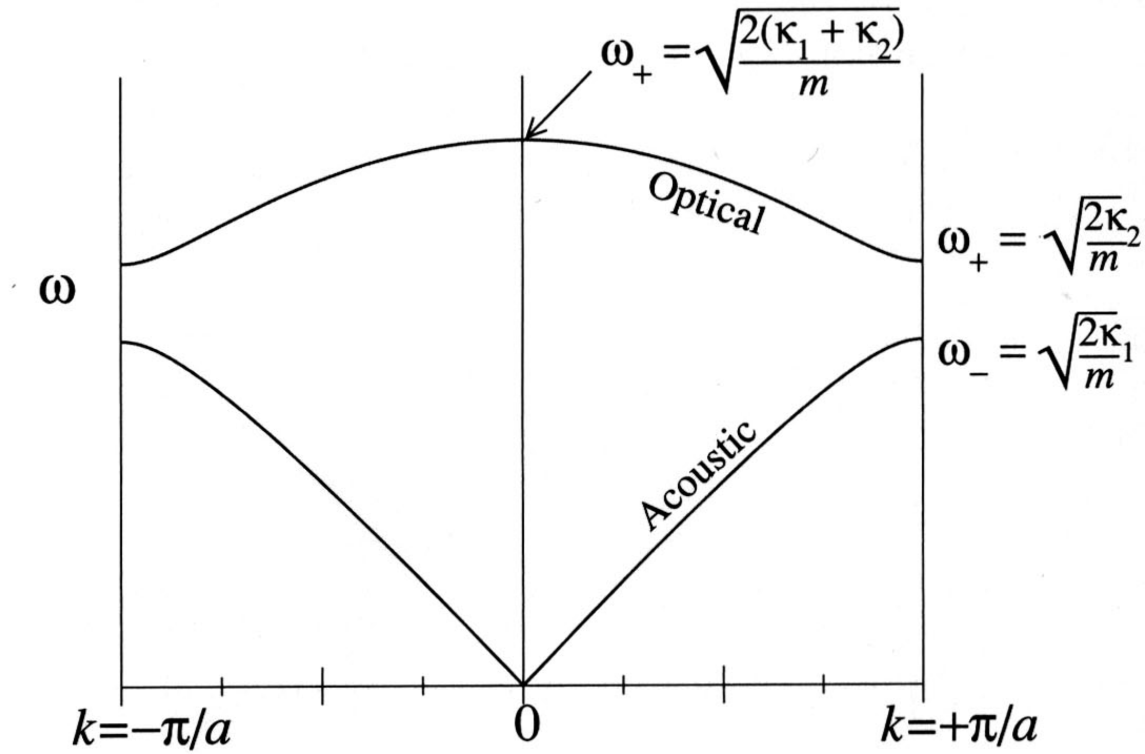


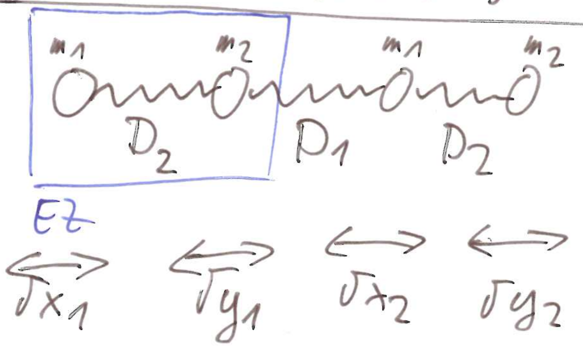
Fig. 10.6 Dispersion relation for vibrations of the one-dimensional diatomic chain. The dispersion is periodic in $k \to k + 2\pi/a$. Here the dispersion is shown for the case of $\kappa_2 = 1.5\kappa_1$. This scheme of plotting dispersions, putting all normal modes within the first Brillouin zone, is the *reduced zone scheme*. Compare this to Fig. 10.8.

Dispersionskurve der linearen Kette
(2 nichtäquivalente Plätze in Einheitszelle)

Rechnung:
- **Herleitung Dispersionskurve**
- **Übersicht Verallgemeinerung f. M-atomige Kette**

Normalmoden in zweiatomiger Kette

Zwei Sorten Atome



Vereinfachung: $m_1 = m_2 = m$

$\delta x_n = x_n(t) - x_n^{eq}$ $\qquad$ $x, y \mathrel{\hat{=}}$ Basis

$\delta y_n = \dots$ $\qquad$ $1, 2, 3, \dots \mathrel{\hat{=}}$ Nr. Einheitszelle

Kraftgl.: $m\, \delta\ddot{x}_n = F_n^x = D_2(\delta y_n - \delta x_n) + D_1(\delta y_{n-1} - \delta x_n)$ $\qquad$ (1)

$m\, \delta\ddot{y}_n = F_n^y = D_1(\delta x_{n+1} - \delta y_n) + D_2(\delta x_n - \delta y_n)$ $\qquad$ (2)

Ansätze: $\delta x_n = A_x e^{i(\omega t - kna)}$

$\delta y_n = A_y e^{i(\omega t - kna)}$

(1) $\rightarrow$ $-\omega^2 m A_x e^{i(\omega t - kna)} = e^{i\omega t} \cdot e^{-ikna}\left[D_2 A_y - D_2 A_x + D_1 e^{-ik(-1)a} - D_1 A_x\right]$

(2) $\rightarrow$ $-\omega^2 m A_y = D_1 A_x e^{-ika} + D_2 A_x - (D_1 + D_2) A_y$

Matrixschreibweise: $m\omega^2 \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 + D_2 & -D_2 - D_1 e^{ika} \\ -D_2 - D_1 e^{-ika} & D_1 + D_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$

Eigenwert-Gl. !

$$m\omega^2 \underline{\underline{1}} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} = \underline{\underline{D}} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$$

„Dynamische Matrix"

$$\underline{\underline{0}} = \underbrace{\left(\underline{\underline{D}} - m\omega^2 \underline{\underline{1}} \right)}_{} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$$

$\det\left(\quad \right) = 0$ f. nichttriviale Lsg.

$$\det \begin{pmatrix} D_1 + D_2 - m\omega^2 & -D_2 - D_1 e^{ika} \\ -D_2 - D_1 e^{-ika} & D_1 + D_2 - m\omega^2 \end{pmatrix} \overset{!}{=} 0$$

$$|D_1 + D_2 - m\omega^2|^2 = D_2^2 + D_2 D_1 \big(\underbrace{e^{ika} + e^{-ika}}_{2\cos(ka)} \big) + D_1^2$$

$$\boxed{\omega^2 = \frac{D_1 + D_2}{m} \pm \frac{1}{m} \sqrt{D_1^2 + D_2^2 + 2 D_1 D_2 \cos(ka)}}$$

2 reelle ω-Werte f. jedes k

ω_+ : optischer Zweig

ω_- : akustischer "

einatomige Kette	zweiatomige Kette	M-atomige Kette
N Einheitszellen N Atome N Moden 1 Zweig: (1 akustischer Zweig $w = v_s k$ f. $k \to 0$)	N Einheitszellen $2N$ Atome $2N$ Moden 2 Zweige: 1 akust. Zweig (N Moden) 1 opt. " (N Moden)	N Einheitszellen $M \cdot N$ Atome $M \cdot N$ Moden M Zweige 1 akust. Zweig $M-1$ opt. Zweige

10. Zweiatomige lineare Kette (5)

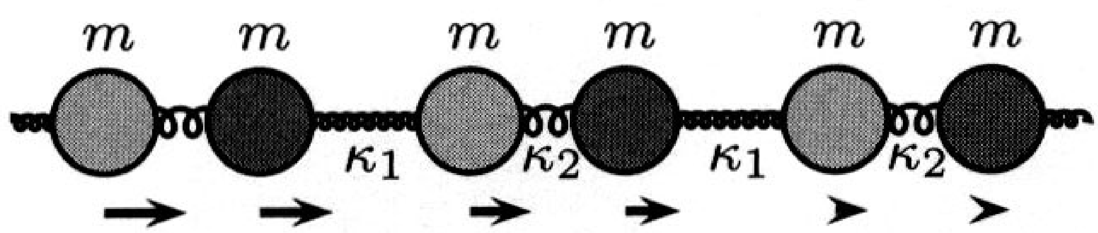


Fig. 10.7 A long wavelength acoustic mode for the alternating chain.

<u>Akustische Mode</u>
Auslenkungsmuster für große Wellenlängen ($k \rightarrow 0$):
benachbarte Atome bewegen sich gleichphasig

Namensgebung: Schwingungsmode beschreibt Schallwellen

10. Zweiatomige lineare Kette (6)

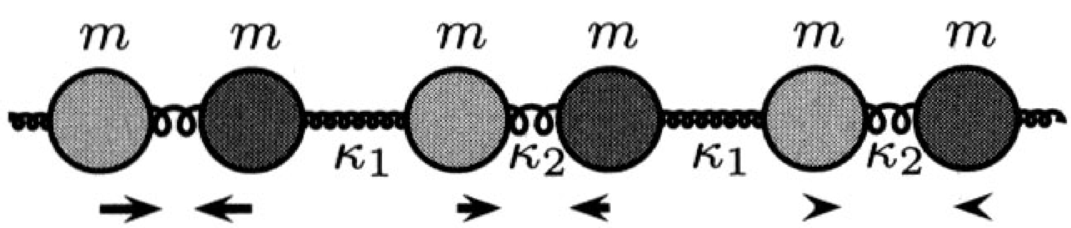


Fig. 10.9 A long-wavelength optical mode for the alternating chain.

<u>Optische Mode</u>
Auslenkungsmuster für große Wellenlängen (k → 0):
benachbarte Atome bewegen sich <u>gegenphasig</u>

Rechnung:
Auslenkungsmuster

Namensgebung: Schwingungsmode wird in Ionenkristallen durch Licht angeregt

Auslenkungsmuster der Schwingungsmoden

→ Eigenvektoren der dynamischen Matrix D

→ somit k-abhängig

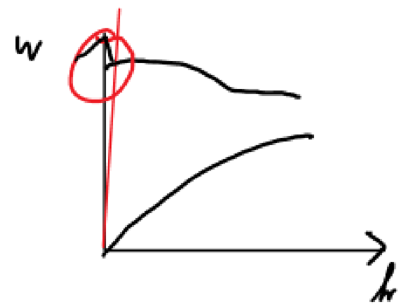
Sonderfall $k \to 0$

$$m\omega^2 \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 + D_2 & -(D_1+D_2) \\ -(D_1+D_2) & D_1 + D_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$$

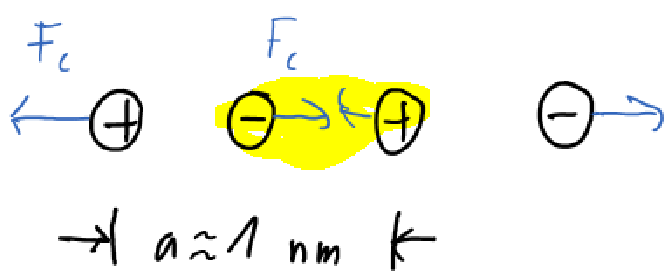
$$= (D_1 + D_2) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$$

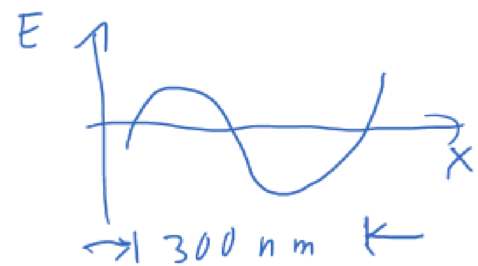
akust. Zweig: $\omega_- \to 0 \Rightarrow A_x = A_y \Rightarrow$ gleichphasige Bewegung

opt. Zweig: $\omega_+ \to \sqrt{\frac{2}{m}(D_1+D_2)} \Rightarrow A_y = -A_x \Rightarrow$ gegenphasige Bewegung



Lichtgerade: $\omega = ck$ $\quad c = \frac{c_0}{n}$

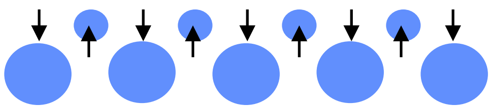




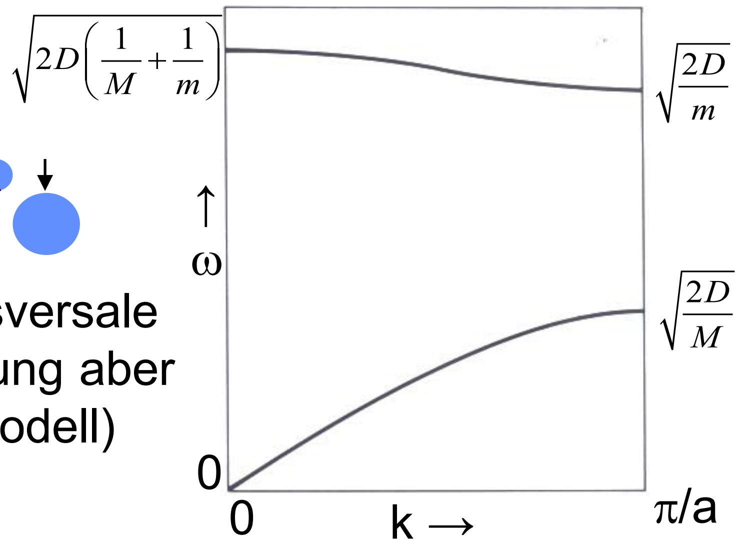
$E \approx$ const $\quad \vec{F} = q\vec{E}$

10. Zweiatomige lineare Kette: verschiedene Massen (7)

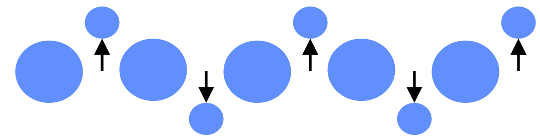
• Bsp. für M/m = 5,

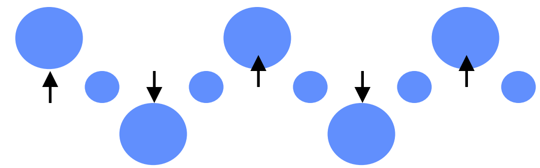


(Zeichnung für transversale Auslenkung, Bewegung aber longitudinal im 1D-Modell)



nur leichte Masse schwingt, schwere in Ruhe:

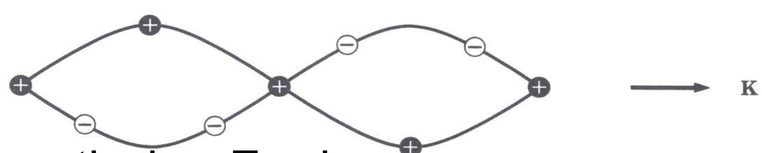




nur schwere Masse schwingt, leichte in Ruhe:

für kleine *k*, d.h. grosse λ:

Atome schwingen gegeneinander



optischer Zweig

Dipolmoment koppelt an elektrisches Wechselfeld (→ Anregung v.a. durch Infrarotstrahlung)

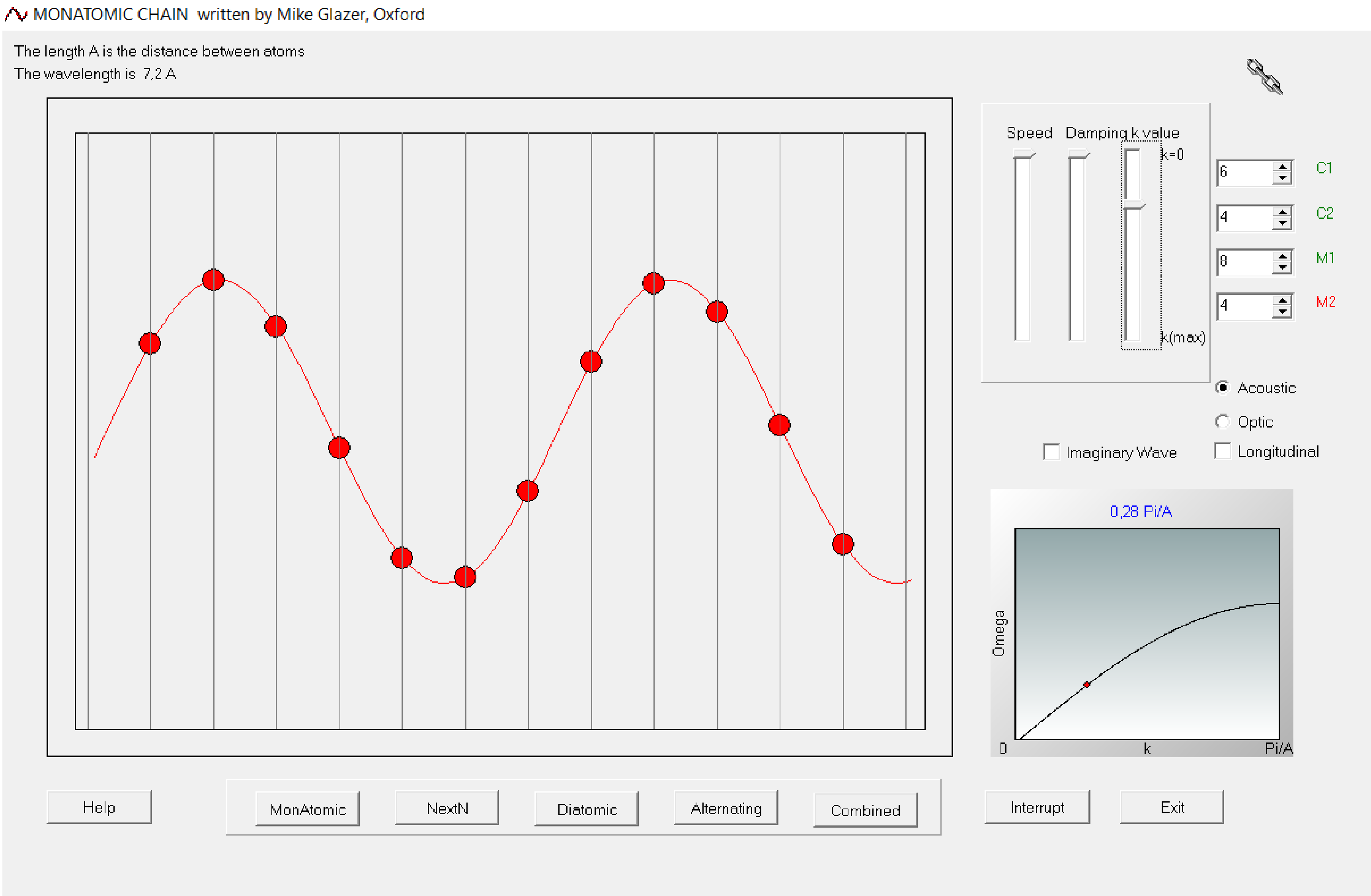
Atome schwingen miteinander

akustischer Zweig

Ankopplung an Schall

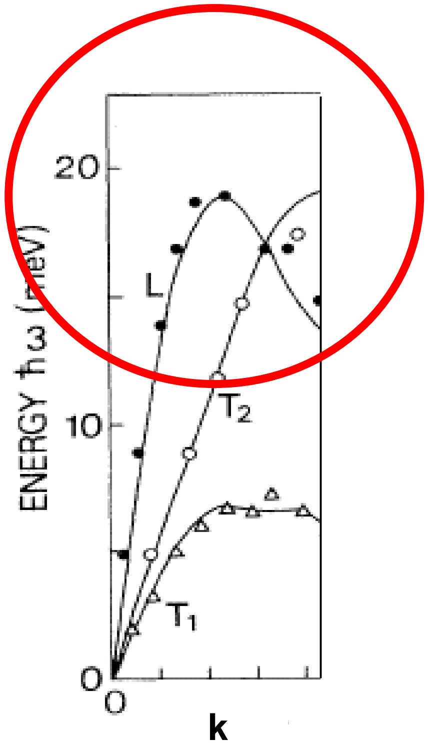
RWTH

Exkurs: Simulation Chainplot



Erinnerung: 2. Schwingungsmoden realer Festkörper (8)

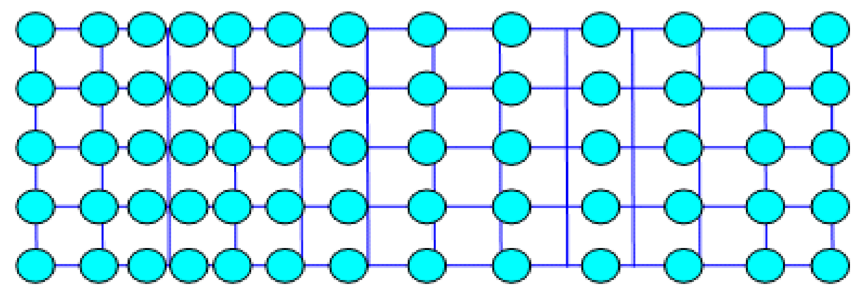
Experimentelles Beispiel: Zirconium



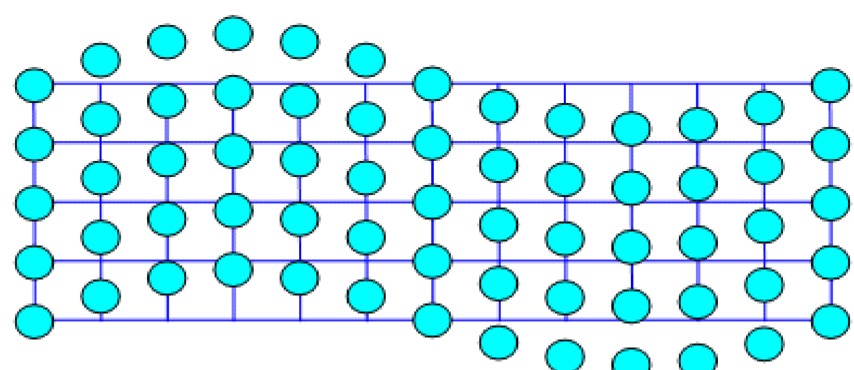
Schlussfolgerungen:

- 3 Schwingungsmoden im Festkörper
  1 x longitudinal
  2 x transversal (in 3D)

longitudinal polarisierte Welle:



transversal polarisierte Welle:



10. Zweiatomige lineare Kette (8)

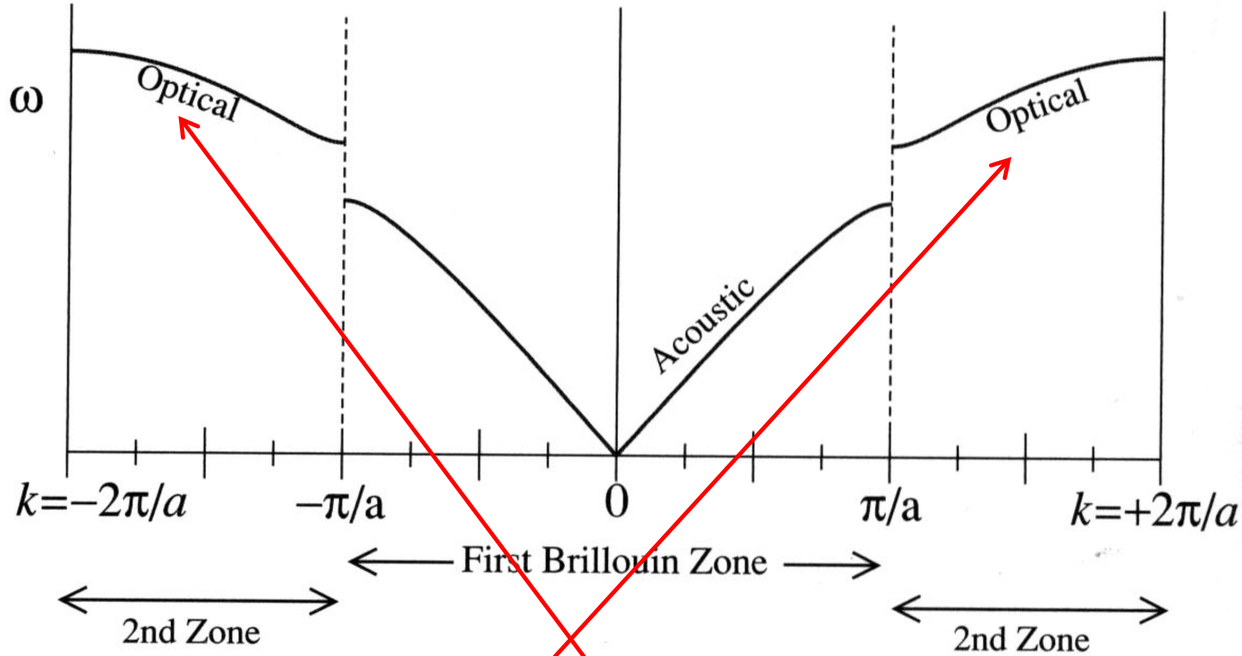


Fig. 10.8 Dispersion relation of vibrations of the one-dimensional diatomic chain in the extended zone scheme (again choosing $\kappa_2 = 1.5\kappa_1$). Compare this to Fig. 10.6. One can think of this as just unfolding the dispersion such that there is only one excitation plotted at each value of k. The first and second Brillouin zones are labeled here

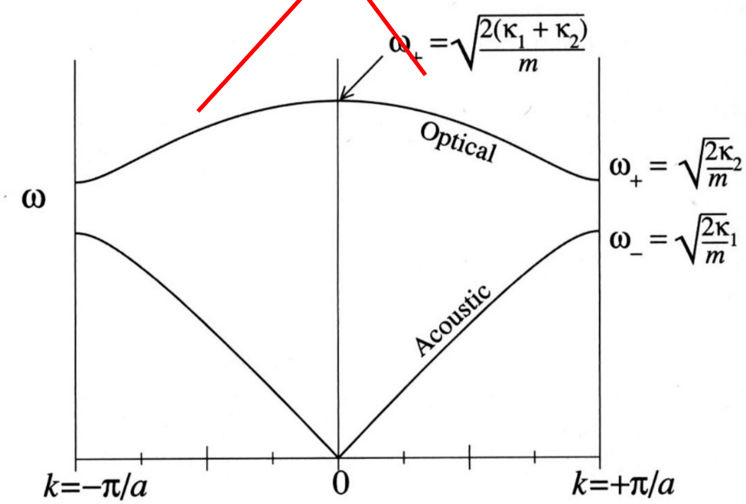


Fig. 10.6 Dispersion relation for vibrations of the one-dimensional diatomic chain. The dispersion is periodic in $k \to k + 2\pi/a$. Here the dispersion is shown for the case of $\kappa_2 = 1.5\kappa_1$. This scheme of plotting dispersions, putting all normal modes within the first Brillouin zone, is the *reduced zone scheme*. Compare this to Fig. 10.8.

10. Zweiatomige lineare Kette (9)

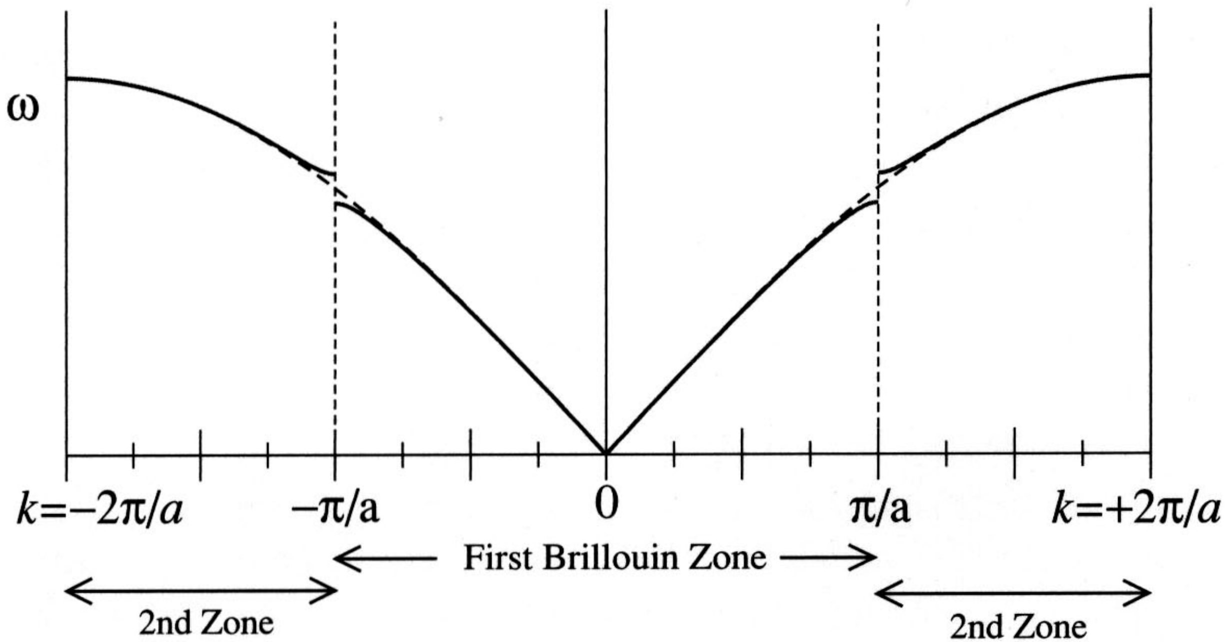
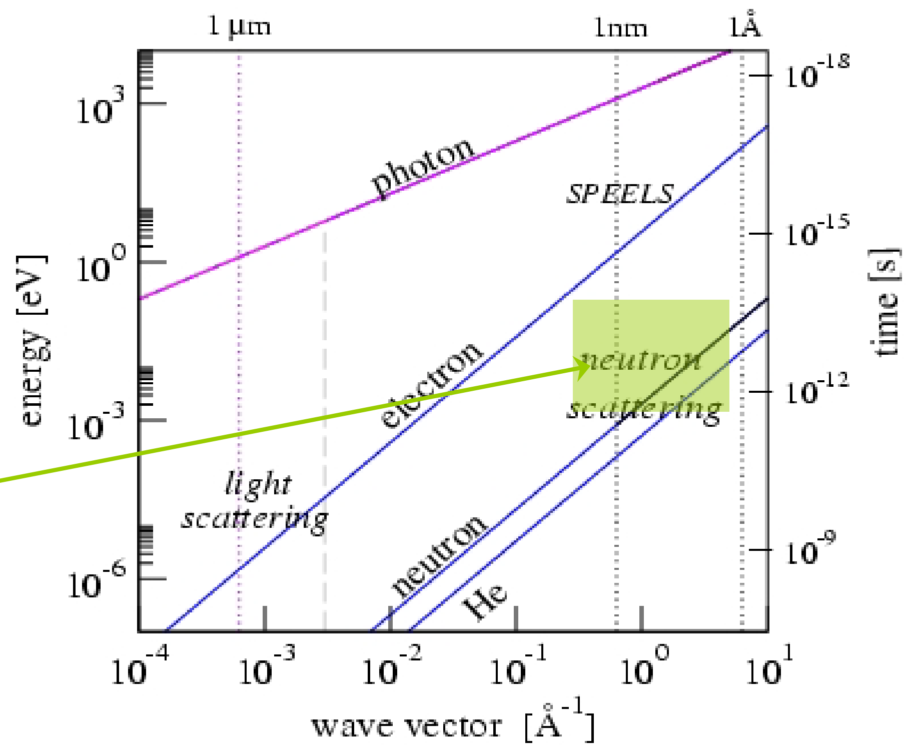


Fig. 10.10 How a diatomic dispersion becomes a monatomic dispersion when the two different atoms become the same. **Solid:** Dispersion relation of vibrations of the one-dimensional diatomic chain in the extended zone scheme with κ_2 not too different from κ_1 ($\kappa_2 = 1.25\kappa_1$ here). **Dashed:** Dispersion relation when $\kappa_2 = \kappa_1$. In this case, the two atoms become exactly the same, and we have a monatomic chain with lattice spacing $a/2$. This single band dispersion precisely matches that calculated in Chapter 9, only with the lattice constant redefined to $a/2$.

10. Zweiatomige lineare Kette: Sonden f. Gitterschwingungen (10)

Sonden	Energie	Impuls
Neutron	$E_n = \dfrac{p^2}{2m_n}$	$p = mv = \hbar k$
Photon	$E_\gamma = pc$	$p = \hbar k = \hbar \dfrac{2\pi}{\lambda}$



Phononen

Laserlicht

nur $\omega(k \rightarrow 0)$

Neutron ist die klassische Sonde für Phononen

alternativ

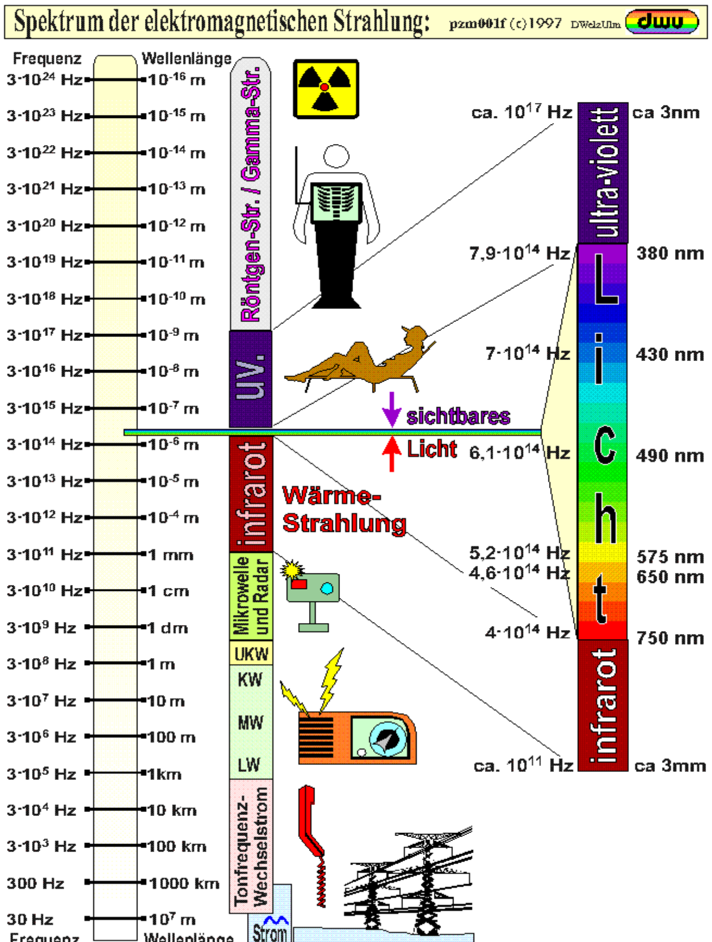
Röntgen-Synchrotronstrahlung mit extremer Auflösung

10. Zweiatomige lineare Kette (11)

Elektromagnetische Welle im Vakuum

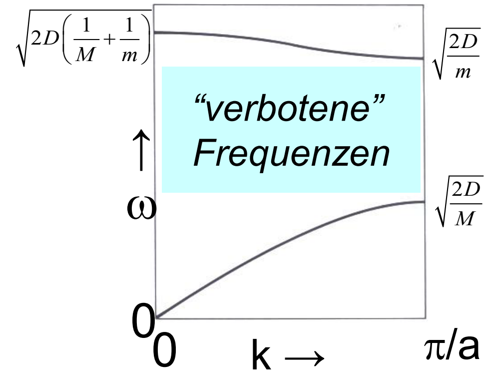
$\boxed{\omega = c \cdot k}$ oder $\boxed{\nu \cdot \lambda = c}$

linear über viele Größenordnungen,
alle Wellenvektoren erlaubt



Dispersions-
relation

Gitterschwingung



- *nur akustischer Zweig nahe k=0 hat lineare Dispersion (Schallwellen!)*
- *Am Zonenrand mündet die Dispersion mit Steigung 0 ein: Gruppengeschwindigkeit dω/dk verschwindet, stehende Wellen durch Rückreflexion*
- *es gibt eine Maximalfrequenz und einen Frequenzbereich, in dem keine Wellenausbreitung erlaubt ist.*
- *der physikalisch sinnvolle Wertebereich der Wellenvektoren ist auf die 1. BZ begrenzt*
- *aufgrund der Randbedingungen gibt es nur endlich viele Wellenvektoren, kein Kontinuum.*

Unterschiede durch diskrete, periodisch angeordnete Oszillatoren

RWTH

Anmerkungen

- periodische Dispersion? Periode im Ortsraum $\Longleftrightarrow$ Periode im k-Raum

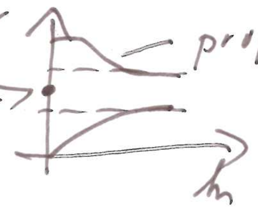
- Effekte jenseits der NN-WW?  → Maxima in der BZ 

- Effekte jenseits der harmon. Näherung? → thermische Ausdehnung (Grüneisen-Param.) $\alpha(T)$
  → WW der Phononen: Addition, Zerfall

- Störungen der Periodizität, z.B. durch Fremdatome?

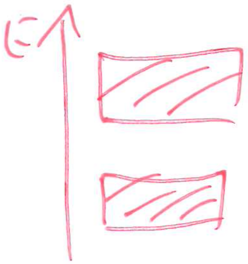
lineare Kette

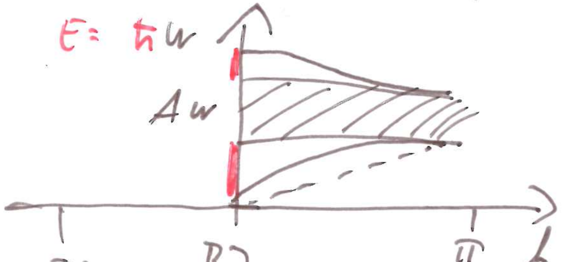
Fremdatom: lokalisierte Schwingung in Frequenzlücke



- Einbettung in $\underbrace{\text{größeren Kontext}}$?

Welle (k) eingebettet in period. Medium: — Schallwellen (Phononen)
--- Elektronen → $\Delta\omega \rightarrow \hbar\Delta\omega = \Delta E$ (Bandstruktur)





Phononen