

- Dispersionsrelation für 1D - Kette

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{c}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

- $k \in 1. \mathbb{BZ}$   $\lambda \neq 2a$

- Zouengrenze:  $\frac{d\omega}{dk} = 0 \Rightarrow$  stehende Welle

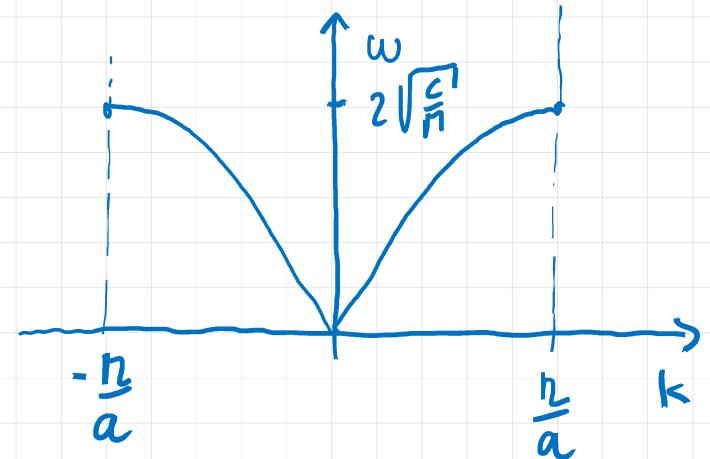
- kleine  $k$ :  $\frac{d\omega}{dk} = \text{koust.} = \text{Schallgeschwindigkeit } v_s$

- 1D  $\leftrightarrow$  3D:

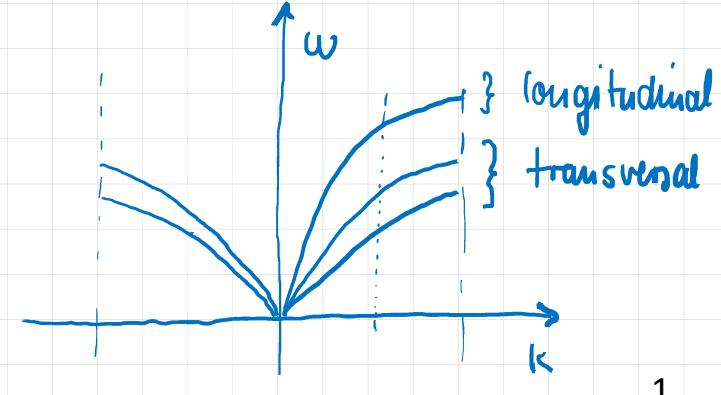
Vibrations von Nebelschalen in Hochsymmetrienrichtungen

/ \

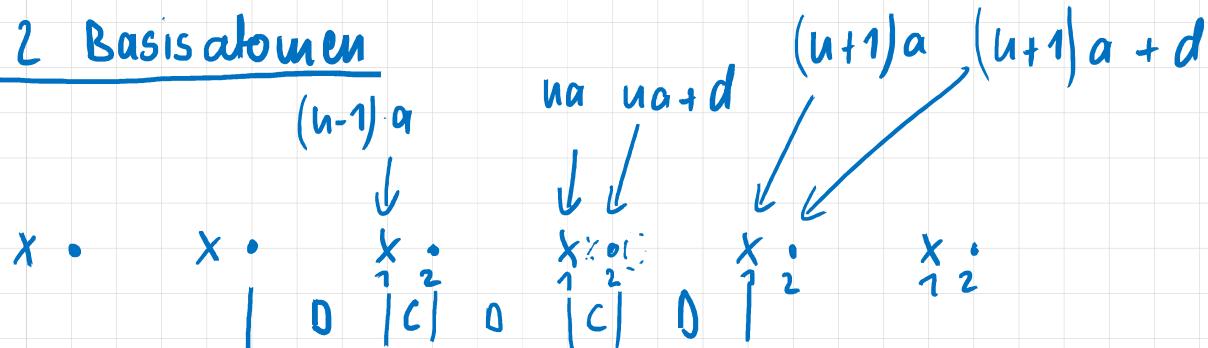
1 longitudinal Mode    2 transversal Modes



$$\omega_e > \omega_t, E > G$$



## 1D-Kette mit 2 Basisatomen



Gleichgewichtspositionen  $ua$  und  $ua + d$  für die beiden Basisatome

$$v_1(ua) \stackrel{?}{=} \text{Auslenkung des Atoms in Position } ua \quad \left| \begin{array}{l} 0 < c_i \\ \pi_1 = \pi_2 \end{array} \right.$$

$$v_2(ua) \stackrel{?}{=} u \quad u \quad u \quad u \quad u \quad u \quad ua+d$$

$$\ddot{\pi} v_1(ua) = -c [v_1(ua) - v_2(ua)] - d [v_1(ua) - v_2((n-1)a)]$$

$$\ddot{\pi} v_2(ua) = -c [v_2(ua) - v_1(ua)] - d [v_2(ua) - v_1((n+1)a)]$$

Hausatz:

$$u_1(u_a, t) = A_1 e^{i(ku_a - \omega t)}$$
$$u_2(u_a, t) = A_2 e^{i(ku_a - \omega t)}$$

$A_1$  und  $A_2$  sind Konstanten, die die Amplituden und Phasenkoeffizienten enthalten.

d.h. laufende Wellen die auf  $u_a$  und  $u_a + d$  definiert sind, aber unterschiedliche Phasen und Amplituden an den Basisatomen besitzen.

Einsetzen liefert

$$\left. \begin{aligned} [\pi\omega^2 - (C + D)] A_1 + [C + D e^{-ika}] A_2 &= 0 \\ [C + D e^{ika}] A_1 + [\pi\omega^2 - (C + D)] A_2 &= 0 \end{aligned} \right\} (*)$$

Dies ist ein Eigenwertproblem mit  $\pi\omega^2$  als Eigenwert und  $A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$  als Eigenvektor

$$[\pi\omega^2(E) - (\text{Koeff})] \cdot A = 0$$

$(E)$  = Einheitsmatrix

$(\text{Koeff})$  = Koeffizientenmatrix

Eigenwerte aus  $\det [\eta \omega^2(E) - (\text{Koeff})] = 0$

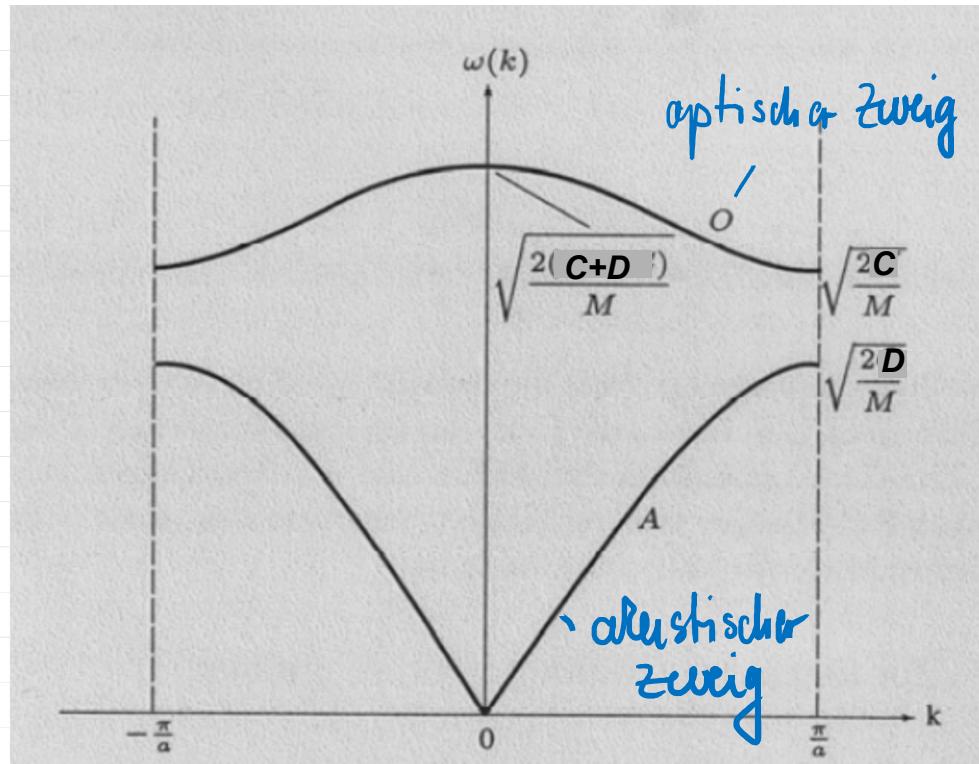
$$[\eta \omega^2 - (C+D)]^2 = (C + D e^{ika}) \cdot (C + D e^{-ika}) = \\ C^2 + D^2 + 2CD \left( \frac{1}{2} e^{ika} + \frac{1}{2} e^{-ika} \right) = \\ C^2 + D^2 + 2CD \cos(ka)$$

$$(=) \boxed{\omega^2 = \frac{C+D}{\eta} \pm \frac{1}{\eta} \sqrt{C^2 + D^2 + 2CD \cos(ka)}}$$

Einsetzen in (x)  
liefert  $H_1$  und  $H_2$

- 2 Atome in der Basis  $\Rightarrow$  2 Zweige in Dispersionssrelation
  - akustische
  - + optische
- Wiederum: Beschränkung auf 1. BE

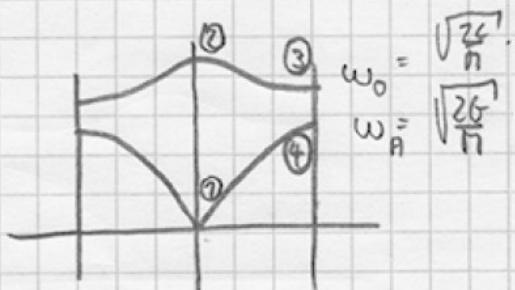
- akustischer Zweig:  $\omega \rightarrow 0$  für  $k \rightarrow 0$   
für kleine  $k$   $\omega \sim k$ ,  $\frac{d\omega}{dk} = 0$  bei  $\frac{\pi}{a}$
- optischer Zweig:  $\omega_0 = \sqrt{\frac{2(C+D)}{M}}$  bei  $k=0$   
fällt nur Zonengrenze auf  $\sqrt{\frac{2C}{M}}$  ab.
- für kleine  $k$  (großes  $\lambda$ ) entsteht, wenn die Basisatome Ionen sind, ein elektrisches Dipolwechselfeld, mit dem elektromagnetische Strahlung wechselwirken kann. Siehe nächste Seite.
- Experimentieren mit Gitterwellen: <https://ph2.uni-koeln.de/lehre/applets-solid-state-physics/phonons>
- Ähnliche Analyse für  $n_1 \neq n_2$



Dispersionsrelation für 1D-Kette mit zweiatomiger Basis

## Vierstrahlrichtung: zentrale Basis, transversaler Zweig

unten unten unten unten  
C G C G C



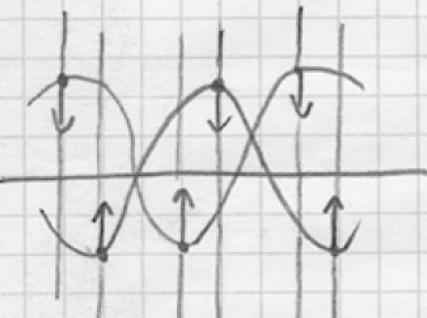
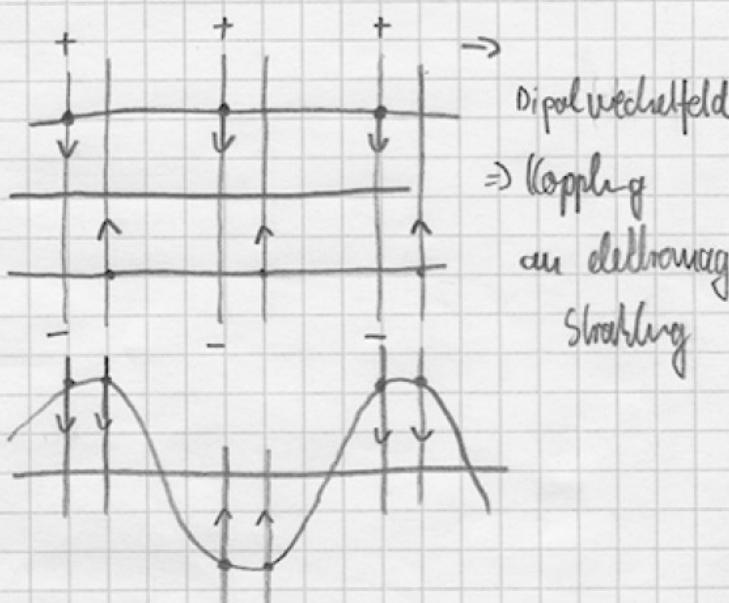
$$\omega_0 = \sqrt{\frac{2G}{n}}$$

$$\omega_A = \sqrt{\frac{2G}{n}}$$



A

②



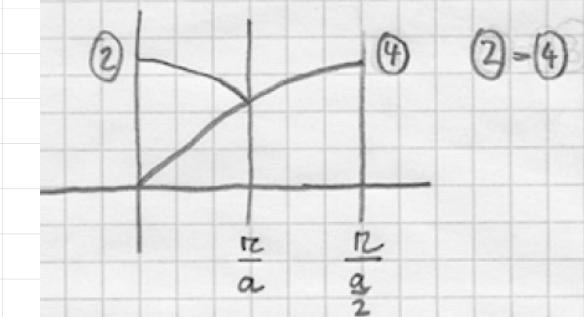
④

Was ist bei  $C = G$  und  $d = \frac{a}{2}$ ?

unten unten unten unten  
C G C G

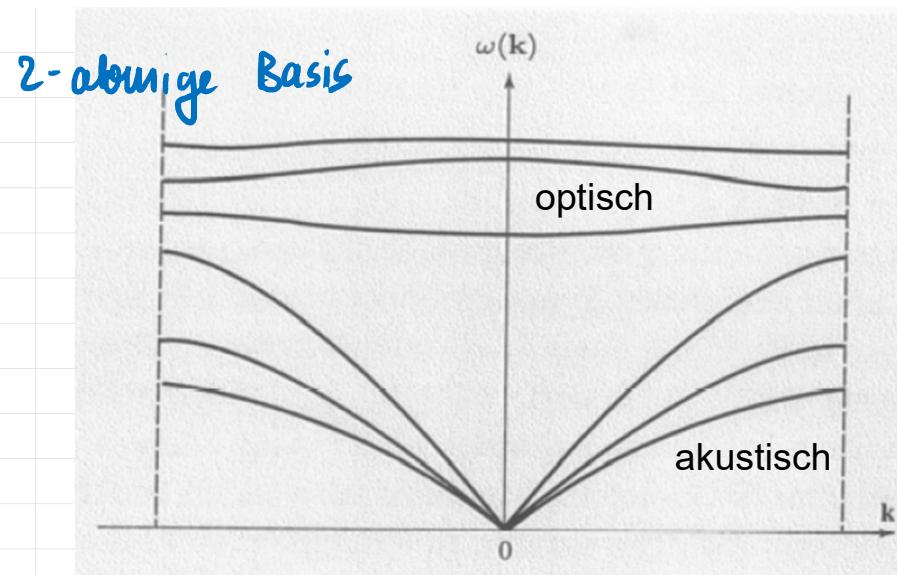
$$|\frac{a}{2}|$$

$$|a|$$



### 5.3 Klassische Theorie 3D - Fall

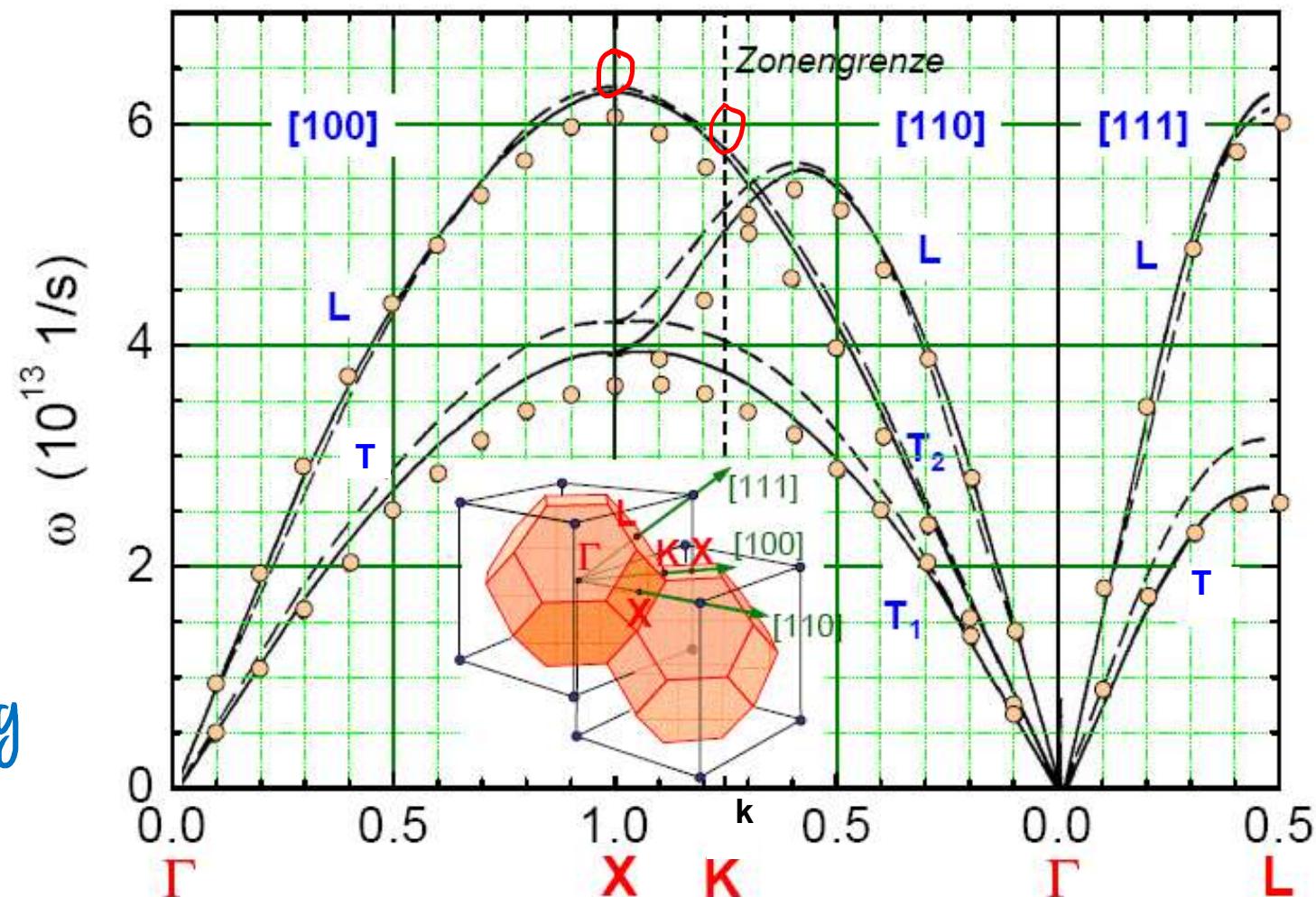
1. Für jede Welle in  $\vec{k}$  hat man  
3 Schwingungsformen, einen longitudinalen  
und 2 transversale Zweige
2. Für eine Basis mit  $j$ -Atomen hat man  
3 akustische Zweige  
3j-3 optische Zweige
3. Frequenz der longitudinalen Mode höher als der transversalen Mode, da  
 $E$ -Modul größer als Schermodul  $G$ .
4. In hochsymmetrischen Kristallrichtungen (z.B. [100] im kubischen System)  
sind transversale Moden entartet



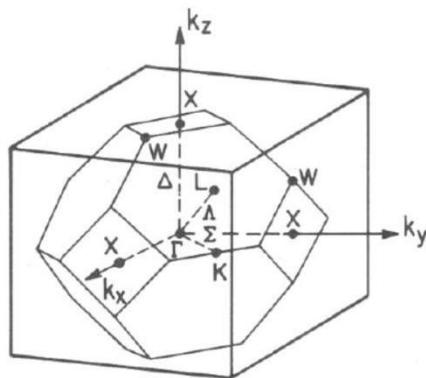
5  $\vec{v}_{qr} = \nabla_{\vec{k}} \omega(\vec{k})$  verschwindet  
 an Zonenrand längs  
 Hochsymmetriierichtung  
 6. Einschränkung auf 1. BZ

Dispersion wird üblicher-  
 weise in Richtungen hoher  
 Symmetrie geplotted.  
 Griechische Großbuchstaben  
 für Punkte hoher Symmetrie.  
 z.B.  $T'X \equiv [110]$ -Richtung  
 $T'K \equiv [100]$  - "  
 $T'L \equiv [111]$  - "

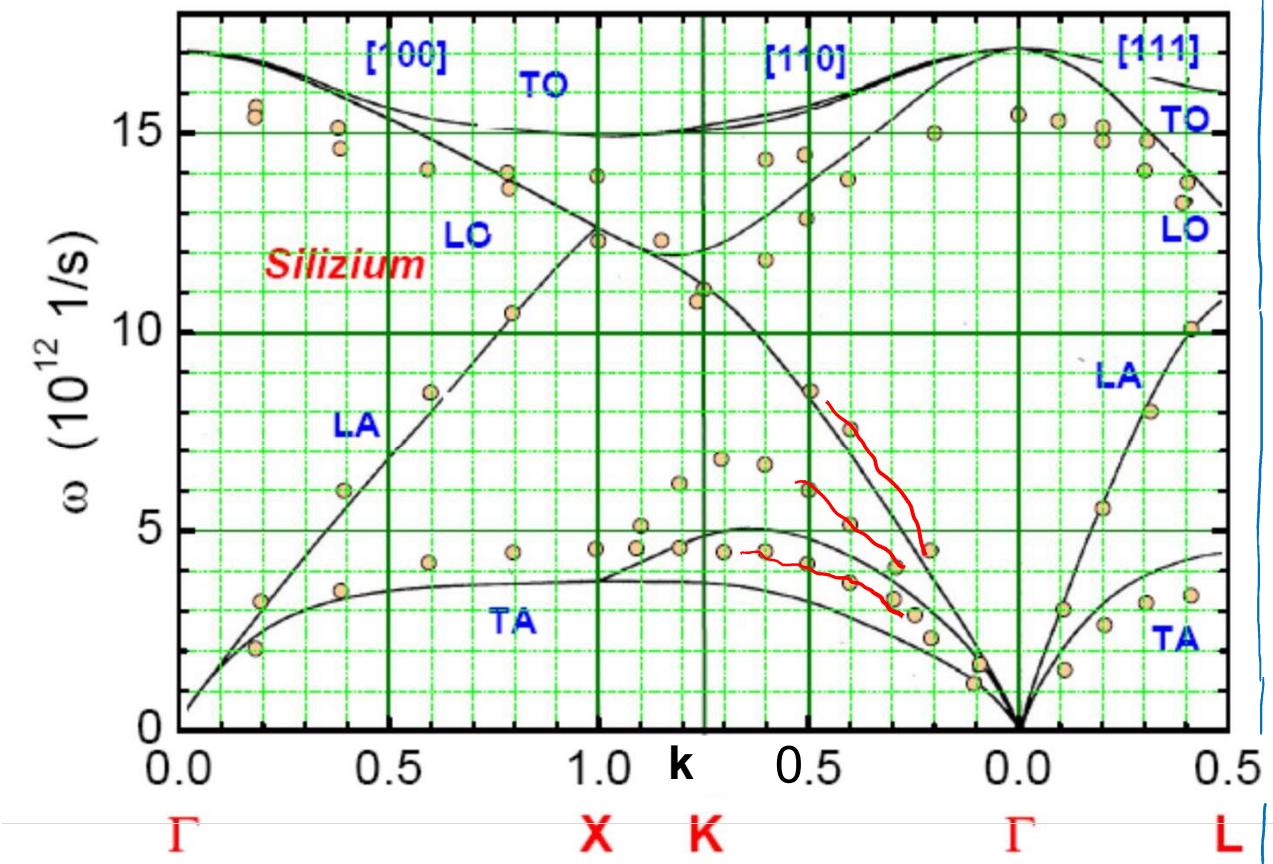
### 3D, einatomige Basis: Phononendispersion von Al



Punkte: Messung; Kurven: Rechnungen. Der Wellenvektor  $\mathbf{k}$  ist in Einheiten von  $\pi/a$ ,  $2^{0.5}\pi/a$ ,  $3^{0.5}\pi/a$  in [100], [110] und [111] Richtung aufgetragen.



3D, zweiatomige Basis:  
Phononendispersion von Si



## 5.4 Randbedingungen

Disher:  $\infty$  großer Festkörper

Jetzt: berücksichtige endliche Größe

Theorie der kleinen Schwingungen:

$N$  gekoppelte 1D Oszillatoren



$N$  Eigenfrequenzen



endliche Anzahl  $k$ -Werte

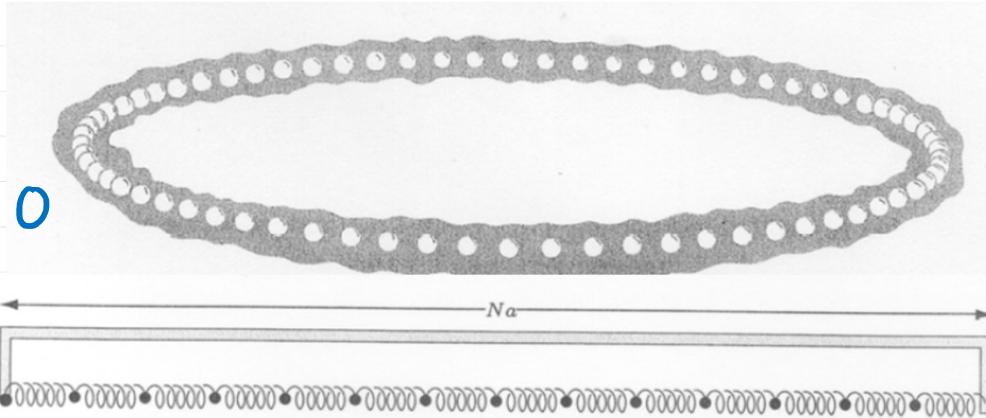
$\bullet \text{un} \bullet \text{un} \bullet \text{un} \bullet \text{un} \bullet \text{un} \bullet \text{un}$

$ua \quad (u+1)a$

fester Ende  $u(0) = u(Na) = 0$

Randbedingung

periodisch  $u(0) = u(Na)$



Physikalisch ist aufgrund der verschwindenden Zahl der Oberflächenatome die Wahl egal, mathematisch einfacher sind periodische oder Born-von Karman Randbedingungen, die auch besser zum Prinzip der Translationssymmetrie passen.

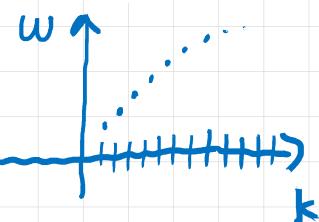
Also  $u(0) = u(Na)$  Einsetzen in  $u(ua) = A e^{ikua - i\omega t}$

$$u(0) = A e^{-i\omega t} = A e^{ikNa} \cdot \underbrace{e^{-i\omega t}}_{1 = e^{ikNa}} = u(Na)$$

$$kNa = 2\pi n \quad n \in \mathbb{Z}$$

$$\Leftrightarrow k = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{u}{N}$$

Da  $k \in 1. \text{BZ}$  mit  $-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$   $\Rightarrow -\frac{N}{2} < u \leq \frac{N}{2}$

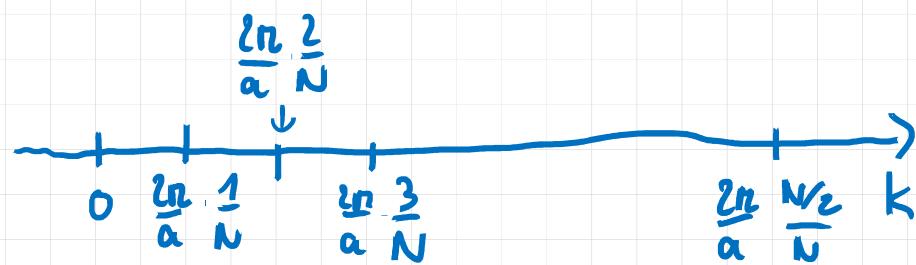


N verschiedene k-Werte mit verschiedenen Eigenfrequenzen  $\omega$  für N 10 Oszillatoren

1. Da stehende Welle bei  $\pm \frac{\pi}{a} = k \Rightarrow <-zeichen auf -Seite$

2. 1 Basisabone  $\Rightarrow 1N$  Eigenfrequenzen  $\omega$  in  $N$  k-Werten

3. Die k-Werte sind äquidistant



Die Anzahl der Zustände im k-Raum pro k-Raum Einheitslänge heißt

$$\underline{\text{Zustandsdichte}} \quad z(k) = \frac{\# \text{ Zustände}}{\text{k-Raum Intervall}} = \frac{N}{\frac{2\pi}{a}} = \frac{N \cdot a}{2\pi} = \frac{L}{2\pi} \quad L = \text{Länge Kristall}$$

Im 3D Fall erhält man  $\vec{k} = \frac{e_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{e_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{e_3}{N_3} \vec{b}_3$

$\vec{b}_i$  = primitive Translationen ver. Gitters

$N_i |\vec{a}_i| = \text{Kantenlängen } L_i \text{ des Kristalls mit } -\frac{N_i}{2} < e_i \leq \frac{N_i}{2}, e_i \in \mathbb{Z}$

Zustandsdichte für 3D ist

$$z(k) = \frac{L_1 \cdot L_2 \cdot L_3}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

# erlaubter Wellenvektoren ist  $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 = N \stackrel{!}{=} \# \text{ Elementarzellen}$

## 5.5 Quantisierung der Gitterschwingung

### Theorie der kleinen Schwingungen

$3N_1$  gekoppelte Oszillatoren  
Wellen mit diskreten  $\vec{k}$   
und Frequenz  $\omega_p(\vec{k})$

$\longrightarrow$

$3N_1$  entkoppelte Oszillatoren  
in Normalkoordinaten (nicht Auslenkungen  $\vec{u}$ )  
mit Eigenfrequenzen  $\omega_p(\vec{k})$

Quantenmechanik: diskrete Energieniveaus  $(n_{\vec{k},p} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_p(\vec{k})$   $p = 1 \dots 3j$

Der dynamische Zustand ist durch Angabe der Besetzungszahlen  $n_{\vec{k},p}$  aller Oszillatoren, bzw. der Amplituden der Gitterwellen eindeutig bestimmt.