

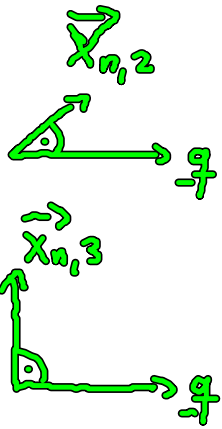
3.3. Schwingungen in 3-dimensionalen Kristallen

3 Polarisationsrichtungen (kart. Koord. $i=1,2,3$)

$\vec{X}_{n,1}, \vec{q}$

longitudinale Schwingung
 $\underline{X} \parallel \underline{q}$

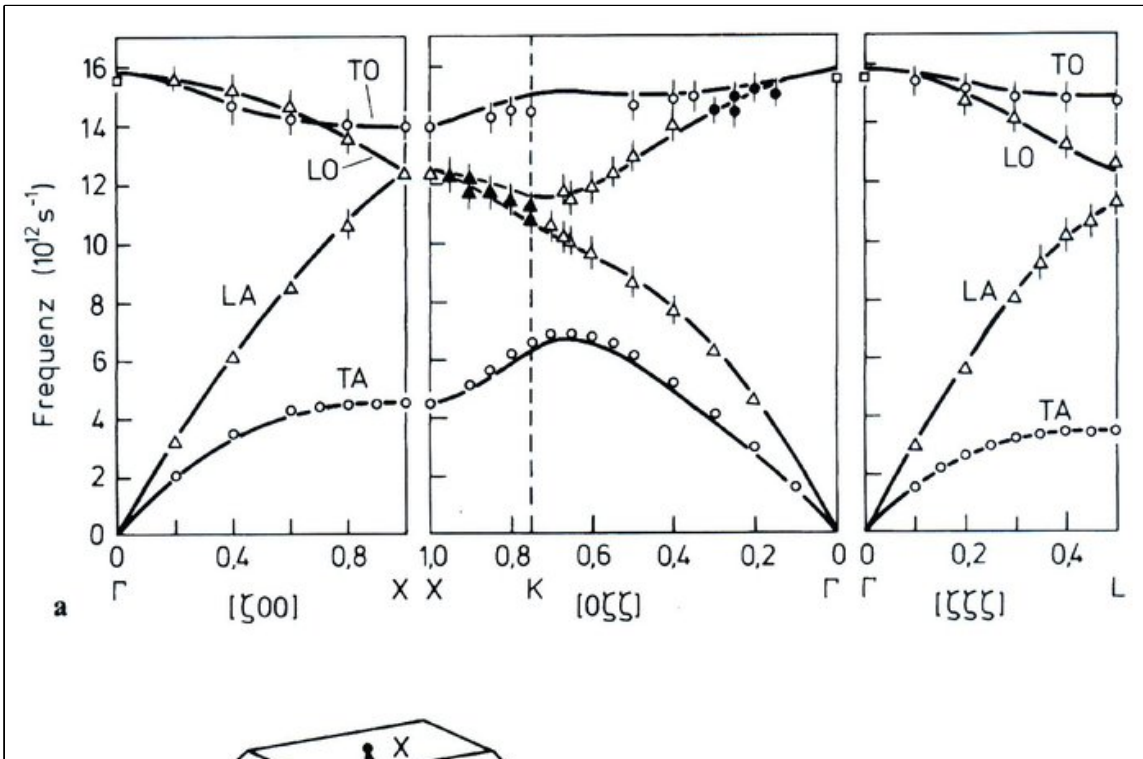
$\nabla \times \underline{X} = 0$



transversal
 $\underline{X} \perp \underline{q}$

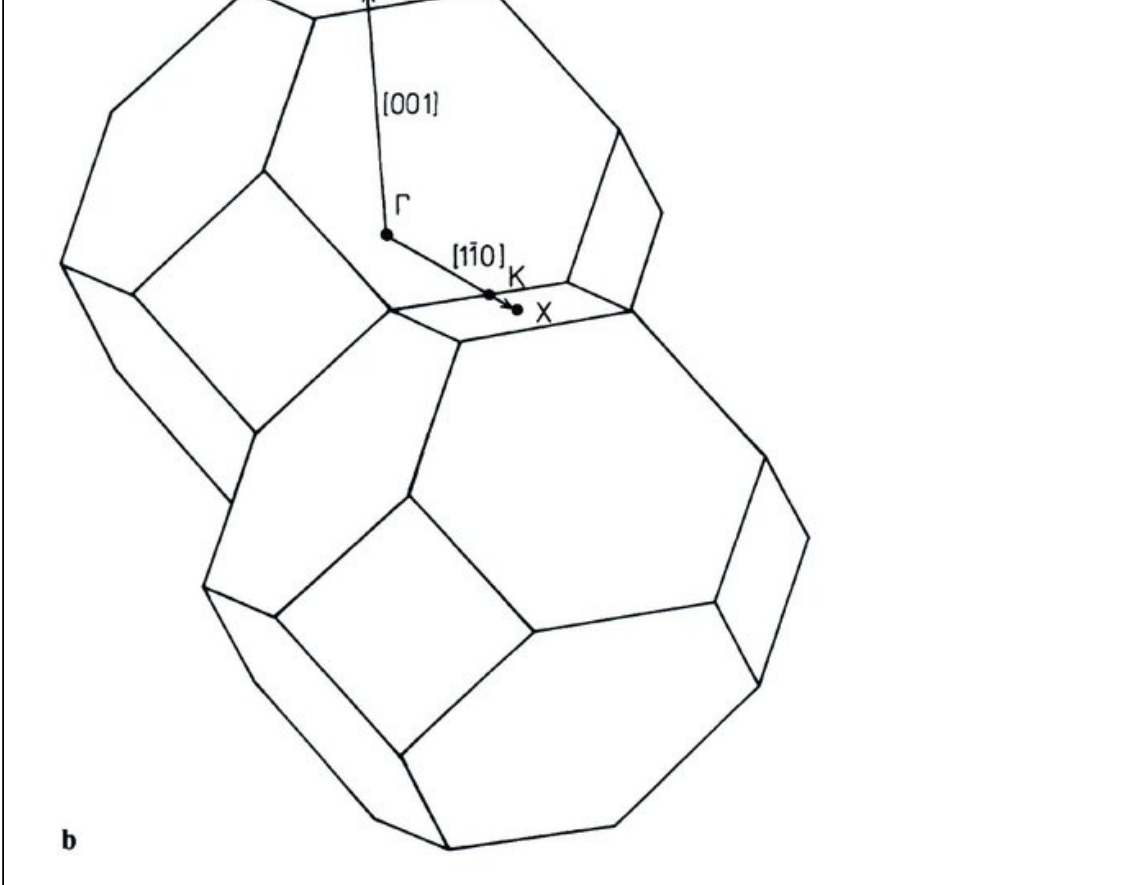
$\nabla \cdot \underline{X} = 0$

\Rightarrow 3 akust. Zweige (LA, 2xTA)
3(s-1) opt. Zweige (LO, 2xTO)



Dispersionsrelation von Si

aus Handb. Luth S.60



Bemerkungen

- (i) Die verschiedenen Zweige können entartet sein
 (in Punkten oder Linien hoher Symmetrie der Brillouin-Zone
 z.B. Γ -Punkt im kub. Kristall sind ZTA-Moden entlang
 (111) und (001) Richtung entartet)
- (ii) Optischer Zweig müssen nicht immer optisch aktiv sein
 (alle Zweige mit $\alpha(q=0) \neq 0$
 laifem opt.)
- z.B. Diamantgitter : bei $q=0$ schwingen 2 relative
 Untergitter gegeneinander
 (Si, Ge) \rightarrow kein el. Dipolmoment
- aber Zinkblendgitter : beide Untergitter von mechan. Atomsorten
 besteht \rightarrow Dipolmoment \rightarrow opt. aktiv

(iii) Nur in Punkten oder Linien der Symmetrie sind Gitterschwingungen streng transversal oder longitudinal

(iv) Translations-Freiheitsgrade $\hat{=}$ 3 akust. Zweige

Schwingungs-Freiheitsgrade eines s -atomigen Molekül $\hat{=}$ $3(s-1)$ opt. Zweige

Langwelliger Grenzfall des akustischen Zweiges

Wellenlänge $\lambda \rightarrow \infty$: Schwingungsamplitude ändert sich wenig von Elementarzelle zu Elementarzelle

\rightarrow Übergang zur Kontinuumsbeschreibung

oBd.A: Gesamtmasse M der Atome der Basis in Schwerpunkt

\rightarrow Bravaisgitter ($\alpha=1$)

$$M \ddot{X}_{ni} = - \sum_{mj} W_{ni,mj} X_{mj} \quad (1)$$

Def.: Verschiebungsfeld $\underline{\xi}(\underline{r}, t)$, so dass an Gitterpunkten

$$s_i(\underline{r} = \underline{R}_n, t) = X_{ni}(t)$$

Symmetrien der Wechselwirkungsmatrix $W_{nai, m\beta j} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial R_{nai} \partial R_{m\beta j}} \right)_0$

(i) Vertauschen der Differenziation: $W_{n_{ai}, n_j \beta_j} = W_{n_j \beta_j, n_{ai}}$

(ii) Translationssymm.

$$W_{n_{ai}, n_j \beta_j} = W_{0_{ai}, n-n \beta_j}$$

(iii) Pot. Energie $\frac{1}{2} \sum_{\substack{n_{ai} \\ n_j \beta_j}} W_{n_{ai}, n_j \beta_j} R_{n_{ai}} R_{n_j \beta_j}$ invariant gegenüber Translation

$$\sum_n W_{0_{ai}, n_j \beta_j} = 0$$

(iv) Inversionssymm $W_{0_{ai}, n_j \beta_j} = W_{0_{ai}, -n_j \beta_j}$

Taylor entw. der R.S. von (1) um Fixpunkt $R_n = 0$

$$M \ddot{s}_i(0) = \sum_j \underbrace{\left(\sum_m W_{0_{ai}, m_j} \right)}_{\text{wegen (iii)}} s_j(0) - \sum_{j,k} \underbrace{\sum_m W_{0_{ai}, m_j} R_{m_k}}_{\text{wegen (iv)}} \left(\frac{\partial s_j}{\partial r_k} \right)_0$$

$$0 = \sum_{m \neq 0} \left(W_{0_{ai}, m_j} R_{m_k} + W_{0_{ai}, -m_j} R_{m_k} \right)$$

W_{0_{ai}, m_j}
wegen (iv)

$$- \frac{1}{2} \sum_{m_j k l} W_{0_{ai}, m_j} R_{m_k} R_{m_l} \left(\frac{\partial^2 s_j}{\partial r_k \partial r_l} \right)_0$$

Def.: $C_{ijkl} = - \frac{1}{2V} \sum_m W_{0_{ai}, m_j} R_{m_k} R_{m_l}$

Symmetrie

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk}$$

$$= C_{kl\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ra}}}ij}$$

$$= C_{ilkj}$$

↗
falls Zentralkräfte

$$W_{oi,mj} = W_{mj,oi} \quad (i)$$
$$= W_{oj,-mi} \quad (ii)$$

o kubische Symmetrie

Voigt-Schreibweise : Umnummerierung

$$11 \rightarrow 1$$

$$22 \rightarrow 2$$

$$33 \rightarrow 3$$

$$23 \rightarrow 4$$

$$13 \rightarrow 5$$

$$12 \rightarrow 6$$

$$\underbrace{ij} \quad \underbrace{a}$$

$$C_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & & & \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & & & \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & & & \\ & & & C_{44} & & \\ & & & & C_{44} & \\ & & & & & C_{44} \end{pmatrix}$$

3 unabhängige
elast. Komponenten

OGL:

$$\sigma_{ij}(0) = \sum_{jkl} C_{ijkl} \frac{\partial^2 s_j(0)}{\partial r_k \partial r_l}$$

$$\rho = \frac{M}{V}$$

Speziellfall einer Zentralkraft

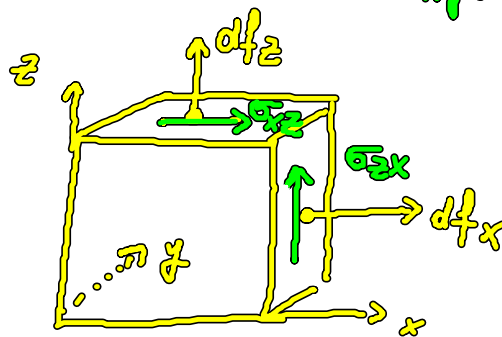
$$g_{si}(e) = \sum_k \sum_{j \neq l} c_{ikjl} \frac{\partial}{\partial r_k} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial s_j}{\partial r_l} + \frac{\partial s_l}{\partial r_j} \right)$$

E_{jl} Deformationstensor
(strain)

Hooke'sches Gesetz der Elastomechanik:

$$\sigma_{ik} = \sum_{j \neq l} c_{ikjl} E_{jl}$$

σ_{ik} : Spannungstensor
 c_{ikjl} : Elastizitätstensor



σ_{ij} : Kraft in Richtung i auf
Einheitsfläche mit Flächennormalen
in Richtung j df

σ_{xz} Tangentialkraft / Fläche

σ_{xx} Normalkraft / Fläche

einfachster Fall: hydrostatischer Druck p

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij}$$

Also hat die DGL folgende Form

$$\rho \ddot{s}_i = \sum_k \frac{\partial}{\partial r_k} \sigma_{ik}$$

Bewegungsgleichung der Kontinuumsmechanik

Damit können die Kraftkonstanten ω_{ijkl} mit den Komponenten des Elastizitätstensors verknüpft werden

Lösungen sind elastische Wellen $\underline{s}(\underline{r}, t) = \underline{s} e^{i(\underline{q}\underline{r} - \omega t)}$

→ Einsetzen in Bewegungsgleichung

isotrope Medien: $\rho \omega^2 \underline{s} = (c_{12} + c_{44}) \underline{q} (\underline{q}\underline{s}) + c_{44} \underline{q}^2 \underline{s}$

long. Wellen ($\underline{q} \parallel \underline{s}$): $\rho \omega_l^2 = (c_{12} + 2c_{44}) \underline{q}^2 = c_{44} \underline{q}^2$

transv. Wellen ($\underline{q} \perp \underline{s}$): $\rho \omega_t^2 = c_{44} \underline{q}^2$

→ lineare Dispersionsbeziehung

(Schallgeschwindigkeit $v_l = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$ $v_t = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$)

Exkurs über Elastomechanik

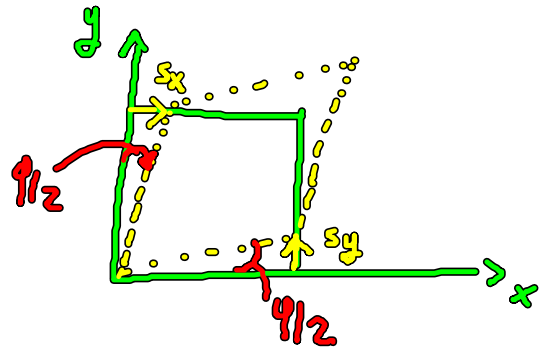
Deformationstensor

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial s_j}{\partial r_i} + \frac{\partial s_i}{\partial r_j} \right) = \epsilon_{ij}(\underline{r}) \quad \text{symm.} \rightarrow \text{reine Verformung}$$

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial s_j}{\partial r_i} - \frac{\partial s_i}{\partial r_j} \right) = -\omega_{ji} \quad \text{antisymm.} \rightarrow \text{reine Drehung}$$

Verformung :

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 0 & \eta/2 & 0 \\ \eta/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



$$s_x = \frac{\eta}{2} y$$

$$s_y = \frac{\eta}{2} x$$

$$s_z = 0$$

infinitesimale Verschiebung \underline{s}

$$\underline{s} = \sum_j \epsilon_{ij} \underline{r}_j$$

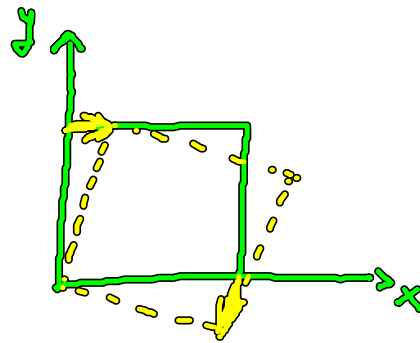
Drehung :

$$\omega = \begin{pmatrix} 0 & \eta/2 & 0 \\ -\eta/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$s_x = 0$$

$$s_y = \frac{\eta}{2} x$$

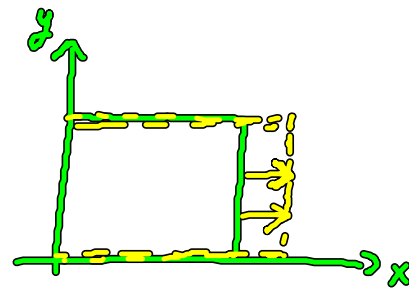
$$s_z = -\frac{\eta}{2} y$$



einachsige Dehnung

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

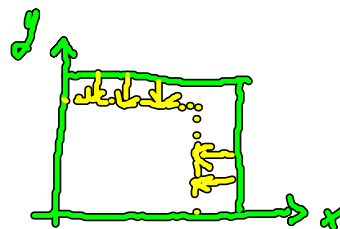
$$\underline{s} = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Kompression

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix}$$

$$\underline{s} = \begin{pmatrix} \epsilon x \\ \epsilon y \\ \epsilon z \end{pmatrix}$$



lokale Volumenänderung

$$\Delta V = (l + \varepsilon_{11} l)(l + \varepsilon_{22} l)(l + \varepsilon_{33} l) - l^3 \approx \\ \approx l^3(1 + \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) - l^3$$

$$\boxed{\frac{\Delta V}{V} = \text{Sp } \varepsilon}$$

(invariant unter Hauptachsentransf.)

Kompression: $\varepsilon_{ij} = -\varepsilon \delta_{ij}$ Hook'sches Gesetz

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} \quad \sigma_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^3 c_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta} = -(c_{11} + c_{12} + c_{12}) \varepsilon$$

für $\alpha=1,2,3$
 $\varepsilon > 0$

$$\varepsilon_{ij} = -\frac{p}{c_{11} + 2c_{12}} \delta_{ij} \quad (\sigma_4 = c_{44} \varepsilon)$$

• infinitesimale Volumenänderung

$$\frac{\Delta V}{V} = \text{Sp } \varepsilon = -\frac{3p}{c_{11} + 2c_{12}} =: -\frac{p}{B}$$

mit Kompressionsmodul $B := \frac{1}{3}(c_{11} + 2c_{12})$
 $= \kappa^{-1}$

$$\left(\text{Kompressibilität } \kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \right)$$

Analog: Scher- (Schub) Modul $G = \mu = \underline{\underline{C_{44}}}$

bei Isotropie $C_{11} - C_{12} = 2C_{44}$

Lamé - Konstanten: $\mu = C_{44}$
 $\lambda = C_{12}$