

III Elektronisches Teilsystem → Markus Richter

Gitterionen als unbeweglich angenommen und Elektronenbewegung im starren Ionenlattice betrachtet

IV Teilsystem der Ionen

Gitterschwingungen (Phononen)

1. Harmonische Näherung

Im Fokus: Anregung der Ionen in einem homogenen Elektronensee.

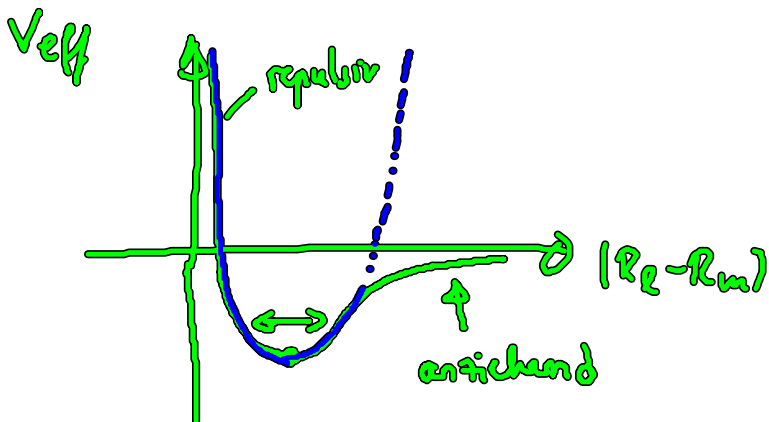
Aufgrund der starken Ion-Ion- ω wird die Auslenkung eines einzelnen Ions schnell auf das gesamte Gitter übertragen

→ kollektive Anregung → Quantisierung der Gitterschwingungen (Phononen)

Effektives Potential für N miteinander $\omega\omega$ Ionen

Summe von Zweiteilchenpotentialen

$$V_{\text{eff}}(R_1, \dots, R_N) = \frac{1}{2} \sum_{\ell, m} V(|R_\ell - R_m|)$$

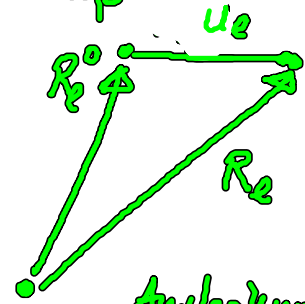


Für kleine Auslenkungen aus dem GG kann das Potential bis zur 2. Ordnung um die GG-Orte Taylor entwickelt werden (harmonische Näherung)

$$V_{\text{eff}} = V(R^{(0)}) + \underbrace{\sum_{\alpha} \frac{\partial V}{\partial R_{2\alpha}} \Big|_{R^{(0)}}}_{=0, \text{ da } V_{\text{eff}} \text{ minimal bei } R^{(0)}} u_{2\alpha} \quad R^{(0)} = (R_1^{(0)}, R_2^{(0)}, \dots, R_n^{(0)})$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{\partial^2 V}{\partial R_{2\alpha} \partial R_{2\beta}} \Big|_{R^{(0)}} u_{2\alpha} u_{2\beta}$$

Die Auslenkungen u_2 betragen i.R. $< 5\%$ des Gitterabstands \rightarrow höherer harmonische Terme vernachlässigbar



Auslenkung u_2
GG Lage $R_1^{(0)}$
Lage des Ions R_2

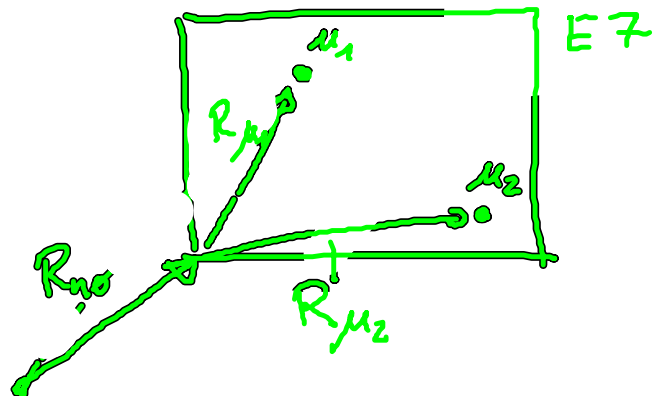
Die zweiten Ableitungen bilden eine $3N \times 3N$ Matrix der atomaren Kraftkonstanten

$$\underbrace{\text{Richtungen}}_{\substack{\alpha\beta \\ \mu\nu \\ \text{Innen}}} \Phi_{\mu\nu}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 V}{\partial R_{2\alpha} \partial R_{2\beta}} \Big|_{R^{(0)}}$$

$\Phi_{\mu\nu}^{\alpha\beta} u_{2\alpha} \triangleq$ Kraft in β Richtung, die auf das ν Atom ausgeübt wird, wenn das μ -Atom in α Richtung um $u_{2\alpha}$ ausgelenkt wird und alle anderen Teilchen fest bleiben

Verallgemeinerung: Einheitszelle beinhaltet mehr als ein Atom

$$R_{\mu\nu} = \underbrace{R_{n0}}_{\text{GG-Position des } \mu\text{-Atoms in der } n\text{-ten EZ}} + R_{\mu} + U_{\mu\nu}$$



2. Klassische Theorie der Gitterschwingungen

$$\dot{p}_{n\mu}^\alpha = m_\mu \ddot{u}_{n\mu}^\alpha \stackrel{\text{Richtung}}{=} - \frac{\partial H}{\partial u_{n\mu}^\alpha} = - \frac{\partial V_{\text{eff}}}{\partial u_{n\mu}^\alpha}$$

↙ ↘
Atom

[Hamilton-Formalismus

$$\dot{p} = - \frac{\partial H}{\partial q} \quad ; \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad]$$

$$m_\mu \ddot{u}_{n\mu}^\alpha = - \sum_{\alpha'\mu'n'} \Phi_{n\mu n'\mu'}^{\alpha\alpha'} u_{n'\mu'}^{\alpha'}$$

$$V_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\mu n} \sum_{\alpha'\mu'n'} \underbrace{\frac{\partial^2 V}{\partial R_{n\mu}^\alpha \partial R_{n'\mu'}^{\alpha'}}}_{\Phi_{n\mu n'\mu'}^{\alpha\alpha'}} u_{n\mu}^\alpha u_{n'\mu'}^{\alpha'}$$

Bewegungsgleichung für die α -Komponente der Auslenkung des μ -ten Ions in der n -ten Einheitszelle. Die Kraft wird durch die Kraftkonstante $\Phi_{n\mu n'\mu'}^{\alpha\alpha'}$ und die Auslenkungen anderer Ionen bestimmt.

Eigenschaften von $\Phi_{n\mu n'\mu'}^{\alpha\alpha'}$:

i) Kraftkonstanten sind symmetrisch, d.h. $\Phi_{n\mu n'\mu'}^{\alpha\alpha'} = \Phi_{n'\mu'n\mu}^{\alpha'\alpha}$
(Vertauschen der partiellen Ableitungen)

ii) Kraftkonstanten hängen nur vom dem Relativabstand $R_{n0} - R_{n'0}$ ab (Translationsinvariant)

$$\Phi_{n\mu n'\mu'}^{\alpha\alpha'} = \Phi_{n\mu n'\mu'}^{\alpha\alpha'} (R_{n0} - R_{n'0})$$

iii) $\sum_{n\mu} \phi_{n\mu\alpha'\mu}^{\alpha\alpha'} = 0$ bei gleichmäßiger Ankerkung aller Atome um den gleichen Verschiebungsvektor wird der ganze Kristall verschoben, ohne dass Kraft zwischen ihnen untereinander hervorgerufen wird

Ausatz für die Lösung der Bewegungsgleichung:

$$u_{n\mu}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}}} \underbrace{A_{\mu}^{\alpha}(q)}_{\text{ebene Welle durch Medium mit Dispersionsrelation } \omega_q} e^{iq \cdot R_{n0} - i\omega_q t}$$

Normierung

ebene Welle durch Medium mit Dispersionsrelation ω_q

Einsetzen in die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} m_{\mu} \ddot{u}_{n\mu} &= -m_{\mu} \omega_q^2 \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}}} A_{\mu}^{\alpha}(q) e^{iq \cdot R_{n0} - i\omega_q t} \\ &= - \sum_{\alpha'\mu'n'} \phi_{n\mu\alpha'\mu}^{\alpha\alpha'} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{m_{\mu'}}} A_{\mu'}^{\alpha'}(q) e^{iq \cdot R_{n'0} - i\omega_q t}}_{u_{n'\mu'}^{\alpha'}} \end{aligned}$$

$$\omega_q^2 A_{\mu}^{\alpha}(q) = \sum_{\substack{\alpha'\mu'n' \\ d=1 \dots N}} \phi_{n\mu\alpha'\mu}^{\alpha\alpha'} \frac{1}{\sqrt{m_{\mu'}}} e^{iq \cdot (R_{n0} - R_{n'0})} A_{\mu'}^{\alpha'}(q)$$

Eigenwertgleichung für die dynamische Matrix $\phi_{n\mu\alpha'\mu}^{\alpha\alpha'}$

mit $N \leq p$ Eigenwerte
 Zahl der Dimensionen Zahl der Atome pro Einheitszelle

E7

Translationsinvarianz

\Rightarrow

dynamische Matrix

hängt nur von
Differenzvektor R_n

ab

$$\omega_q^2 A_{\mu}^{\alpha} (q) = \sum_{\mu' \alpha'} \phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'} (q) A_{\mu'}^{\alpha'} (q)$$

mit $\phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'} (q) = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu} m_{\mu'}}} \sum_n \phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'} (R_n) e^{-iq R_n}$
 Fouriertransformierte der dynamischen Matrix

\Rightarrow

Eigenwertgleichung für die

Fourier-Transformierte der dynamischen Matrix $\phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'} (q)$

Für jedes q gibt es $d \cdot p$ Eigenwerte $\omega_j(q)$

man spricht auch von Moden

Translationsinvarianz \rightarrow Fourier-Transformierte möglich \rightarrow Übergang zu $\phi(q)$

\rightarrow Dimension des Eigenwert-Problems

Eigenvektoren A_{μ}^j

und in p d -dimensionale Vektoren \vec{A}_{μ}^j in

Richtung der Auslenkung des μ -ten Atoms zerlegt

(Polarisationsvektor)

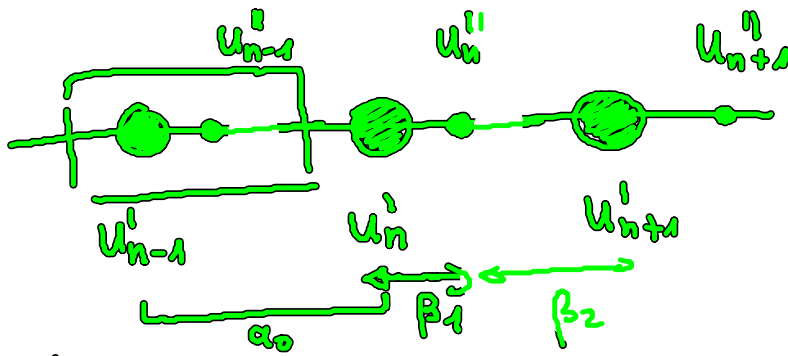
reduziert sich von $N \cdot d \cdot p$ auf $d \cdot p$

Insgesamt die Lösung für die Auslenkung $U_{n\mu}^j$

$$\vec{U}_{n\mu}^j = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}}} \vec{A}_{\mu}^j e^{i(q \cdot R_n - \omega_j(q) t)}$$

Klassifizierung der Moden am Beispiel der zweiatomigen linearen

Kette



Bewegungsgleichungen:

$$m^i \ddot{u}_n^i = -\beta_1 (u_n^i - u_n^{ii}) - \beta_2 (u_n^i - u_{n-1}^i)$$

WW der nächsten Nachbarn

Ansatz für u_n^{ii}

$$m^{ii} \ddot{u}_n^{ii} = -\beta_1 (u_n^{ii} - u_n^i) - \beta_2 (u_n^{ii} - u_{n+1}^i)$$

Lösungen: $\omega_{1,2}^2(q) = \frac{1}{2} \omega_0^2 \left[1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2\left(\frac{4q a_0}{\pi}\right)} \right]$

γ Gitterkonstante

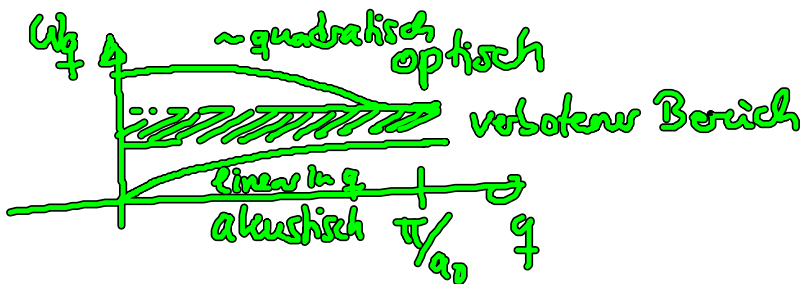
1dim, d.h. $d=1$

2 Atome pro EZ, $p=2 \Rightarrow 2$ Eigenwerte

\rightarrow Übungsaufg.

$$\omega_0^2 = (\beta_1 + \beta_2) (m^i + m^{ii}) \frac{1}{m^i m^{ii}}$$

$$\gamma^2 = 16 m^i m^{ii} \beta_1 \beta_2 \frac{1}{(\beta_1 + \beta_2)^2 (m^i + m^{ii})^2}$$



Zwei Zweige getrennt durch eine Frequenzlücke

akustischer Zweig $\omega_1(q) \approx \frac{1}{q} \omega_0 \gamma a_0 q$ linear

Taylorentwicklung um $q=0$

d.h. $\omega_1(0) = 0$

optischer Zweig

$$\omega_2(q) \approx \omega_0 \left(1 - \frac{\gamma^2 a_0^2}{32} q^2 \right)$$

quadratisch

$$\omega_2(0) \neq 0$$

akustisch: benachbarte Atome
schwingen in gleicher Phase
→ wie bei Schallwellen

optisch: entgegengesetzte Phase
→ Schwerpunkt aller Atome
in einer EZ bleibt in Ruhe
diese Gitterschwingungen können
optisch angeregt werden

Allgemein: d-p Moden

davon d akustisch \Rightarrow für einatomige EZ
d(p-1) optisch gibt es keine optischen Moden

Weitere Unterscheidung: longitudinale und transversale Zweige
[Ablenkung parallel oder senkrecht zum
Wellenvektor q]

Insgesamt: TO, LO, TA, LA Zweigen