

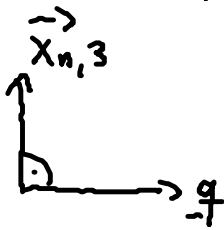
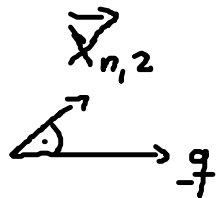
3.3. Schwingungen in 3-dimensionalen Kristallen

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

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

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

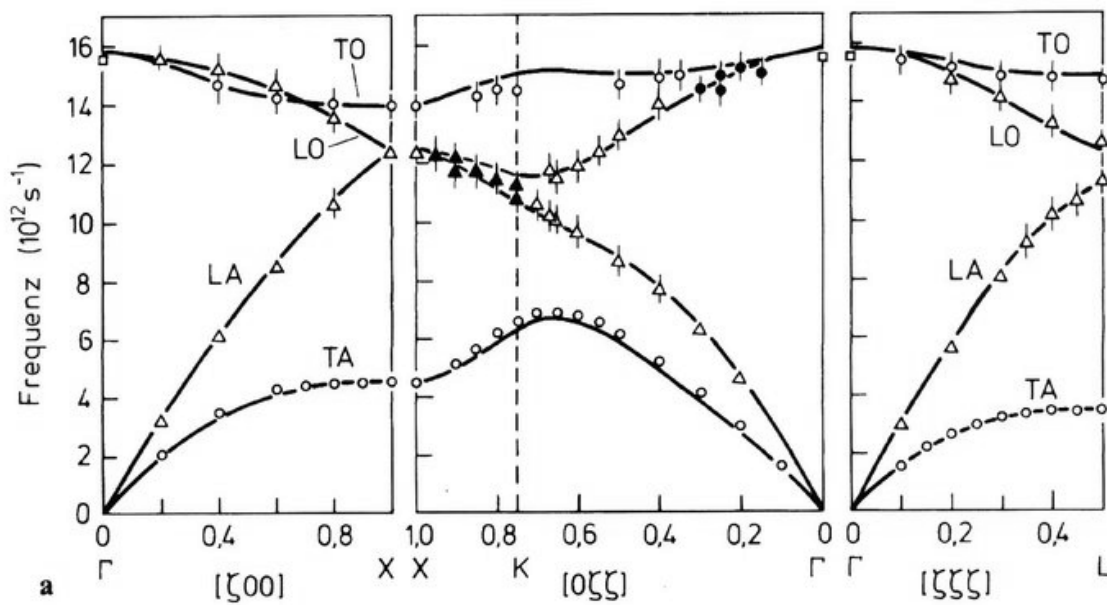
$$\nabla \times \underline{X} = 0$$



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

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

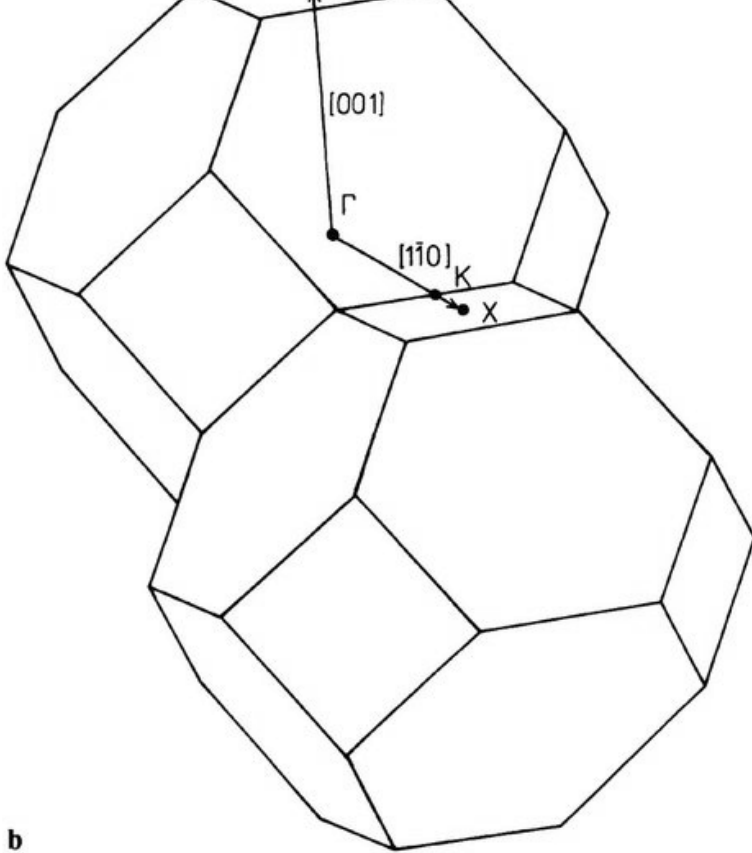
\Rightarrow 3 akust. Zweige (LA, 2xTA)
 3(s-1) opt. Zweige (LO, 2xTO)



Dispersionsrelation von Si

aus Ibada Lüthi





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) Optische Zweig müssen nicht immer optisch aktiv sein
 (alle Zweige mit $\alpha(q=0) \neq 0$ laufen opt.)
- z.B. Diamantgitter: bei $q=0$ schwingen 2 identische
 Untergitter gegeneinander
 (Si, Ge) \rightarrow kein el. Dipolmoment
- aber Zinblendgitter: beide Untergitter von verschied. Atomsorten
 besteht \rightarrow Dipolmoment \rightarrow opt. aktiv

(iii) Nur in Punkten oder Linien oder 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

→ Übergang zur Kontinuumsbeschreibung

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

→ Bravaisgitter ($\alpha=1$)

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

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

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

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

(i) Vertauschen der Differenziation: $W_{ndi, m\beta_j} = W_{m\beta_j, ndi}$

(ii) Translationssymm.

$$W_{ndi, m\beta_j} = W_{odi, m-n\beta_j}$$

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

$$\sum_n W_{odi, n\beta_j} = 0$$

(iv) Inversionssymm $W_{odi, n\beta_j} = W_{odi, -n\beta_j}$

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

$$\boxed{M \ddot{s}_i(0) = \sum_j \left(\underbrace{\sum_m W_{oi, mj}}_0 s_j(0) - \sum_{jkl} \sum_m W_{oi, mj} R_{mk} \left(\frac{\partial s_j}{\partial r_k} \right)_0 \right)}$$

wegen (iii)

$$0 = \sum_{m>0} \left(W_{oi, mj} R_{mk} + \underbrace{W_{oi, -mj}}_{W_{oi, mj}} R_{mk} \right)$$

wegen (iv)

$$\boxed{-\frac{1}{2} \sum_{mjkl} W_{oi, mj} R_{mk} R_{nl} \left(\frac{\partial^2 s_j}{\partial r_k \partial r_l} \right)_0}$$

Def.: $c_{ijkl} = -\frac{1}{2V} \sum_m W_{oi, mj} R_{mk} R_{nl}$

Symmetrie

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

$$= C_{kl \underbrace{ij}}$$

$$= C_{ilkj}$$

↗
falls Zentralkräfte

$$W_{oi, mj} \stackrel{(i)}{=} W_{mj, oi}$$

$$\stackrel{(ii)}{=} W_{oj, -mi}$$

• kubische Symmetrie

Voigt-Schreibweise : Umnummerierung

- 11 → 1
 - 22 → 2
 - 33 → 3
 - 23 → 4
 - 13 → 5
 - 12 → 6
- \underbrace{ij} \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

DBL:

$$\sigma_{ii}(0) = \sum_{jkl} C_{ijke} \frac{\partial^2 s_j(0)}{\partial r_k \partial r_e}$$

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

Spezialfall innerer Zentralkräfte

$$s_{ii}(0) = \sum_k \sum_{j \neq l} c_{ikjl} \frac{\partial}{\partial r_k} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial s_j}{\partial r_l} + \frac{\partial s_l}{\partial r_j} \right)$$

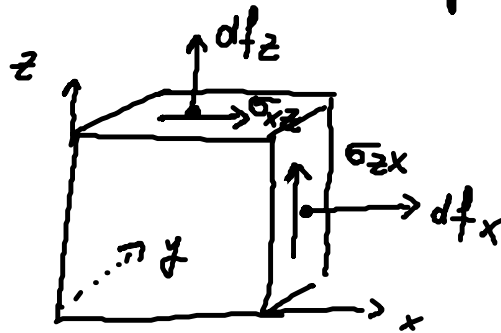
ϵ_{jl} Deformationstensor
(strain)

Hooke'sches Gesetz der Elastomechanik:

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

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 $\omega_{ij,kl}$ 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 ($\underline{q} \parallel \underline{s}$): $\rho \omega_l^2 = (c_{12} + 2c_{44}) \underline{q}^2 = c_{11} \underline{q}^2$

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

→ lineare Dispersionsbeziehung

(Schallgeschwindigkeit $v_l = \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}$ $v_t = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$)

Exkurs über Elastomechanik

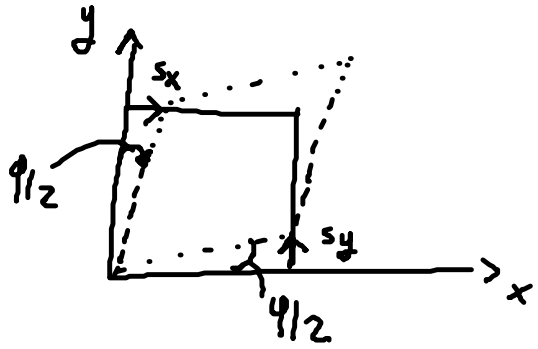
Deformationstensor

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

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

Verformung :

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & \varphi/2 & 0 \\ \varphi/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



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

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

$$s_z = 0$$

infinitesimale Verschiebung \underline{s}

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

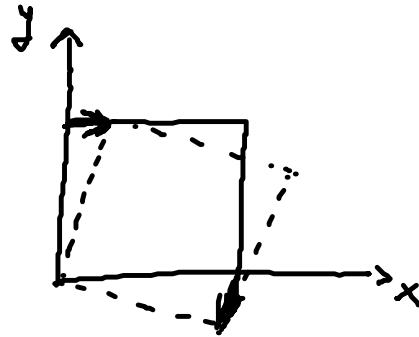
Drehung :

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

$$s_z = 0$$

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

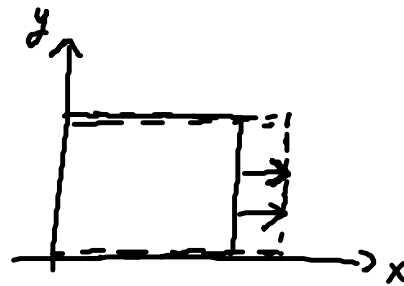
$$s_y = -\frac{\varphi}{2} x$$



anisotrische Dehnung

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

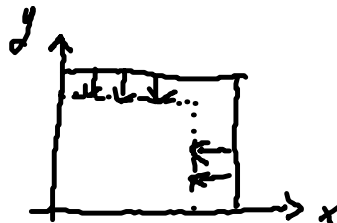
$$\underline{s} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Kompression

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

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



lokale Volumenänderung

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

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

(invariant unter Hauptachsenstrafe)

Kompression: $\epsilon_{ij} = -\epsilon \delta_{ij}$

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

Hook'sches Gesetz

$$\sigma_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^3 c_{\alpha\beta} \epsilon_{\beta} = -(c_{11} + c_{12} + c_{12}) \epsilon$$

für $\alpha = 1, 2, 3$
 $\epsilon > 0$

$$\epsilon_{ij} = -\frac{p}{c_{11} + 2c_{12}} \delta_{ij}$$

($\sigma_4 = c_{44} \epsilon$)

• infinitesimale Volumenänderung

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

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: $\mu = C_{44}$
 $\lambda = C_{12}$