

### III Elektronisches Teilsystem $\rightarrow$ Marten 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.

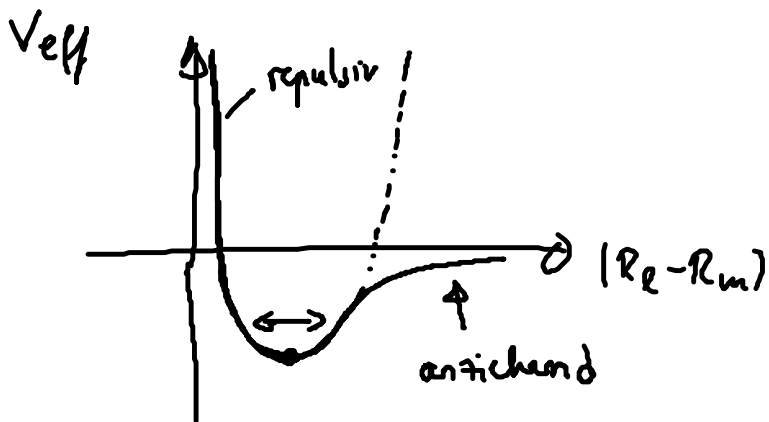
Aufgrund der starken Ion-Ion- $\omega\omega$  wird die Auslenkung eines einzelnen Ions schnell auf das gesamte Gitter übertragen

$\rightarrow$  kollektive Anregung  $\rightarrow$  Quantisierung der Gitterschwingungen (Phononen)

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

Summe von Zweiteilchenpotentialen

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

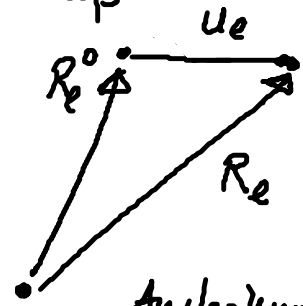


Für kleine Auslenkungen aus dem GG kann das Potential bis zur 2. Ordnung um die GG-Orte Taylor entwickelt werden (harmonische Näherung)

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

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

Die Auslenkungen  $u_e$  betragen i. R.  $< 5\%$  des Gitterabstands  $\rightarrow$  höhere anharmonische Terme vernachlässigbar



Auslenkung  $u_e$   
GG Lage  $R_1^{(0)}$   
Lage des Ions  $R_e$

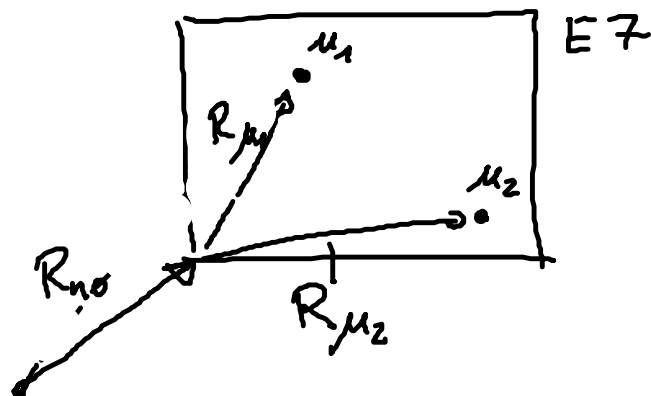
Die zweiten Ableitungen bilden eine  $3N \times 3N$  Matrix der atomaren Kraftkonstanten

$$\underbrace{\phi_{lm}^{\alpha\beta}}_{\substack{\text{Richtungen} \\ \text{Ionen}}} = \frac{\partial^2 V}{\partial R_{l\alpha} \partial R_{m\beta}} \Big|_{R^{(0)}}$$

$\phi_{lm}^{\alpha\beta} u_{l\alpha} \triangleq$  Kraft in  $\beta$  Richtung, die auf das  $m$  Atom ausgeübt wird, wenn das  $l$ -Atom in  $\alpha$  Richtung um  $u_{l\alpha}$  ausgelenkt wird und alle anderen Teilchen fest bleiben

Verallgemeinerung: Einheitszelle beinhaltet mehr als ein Atom

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



## 2. Klassische Theorie der Gitterschwingungen

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

$\circ \otimes$  Richtung  
 $\circ \otimes$   
 $\circ \otimes$   
 $\in \mathbb{Z}$  Atom

[Hamilton-Formalismus

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Ausatz für die Lösung der Bewegungsgleichung:

$$u_{n\mu}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}}} A_{\mu}^{\alpha}(q) e^{iq \cdot R_{n0} - i\omega q t}$$

Normierung  $\nearrow$  ebene Welle durch Medium mit Dispersionsrelation  $\omega q$

Einsetzen in die Bewegungsgleichung

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

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

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

mit  $N d p$  Eigenwerte  
 $\nearrow$  Zahl der Dimension  $\nearrow$  Zahl der Atome pro Einheitszelle

EZ

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 
$$\phi_{\mu\mu'}^{\alpha\alpha'}(q) = \frac{1}{\sqrt{m_\mu m_{\mu'}}} \sum_n \phi_{\mu\mu'}^{\alpha\alpha'}(R_n) e^{-iqR_n}$$
  
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  $\rightarrow$  Dimension des Eigenwert-Problems  
Übergang zu  $\phi(q)$

Eigenvektoren  $A_{\mu\alpha}^j$

wird in  $p$   $d$ -dimensionale Vektoren  $\vec{A}_\mu^j$  in

Richtung der Auslenkung des  $\mu$ -ten Atoms zerlegt

(Polarisationsvektor)

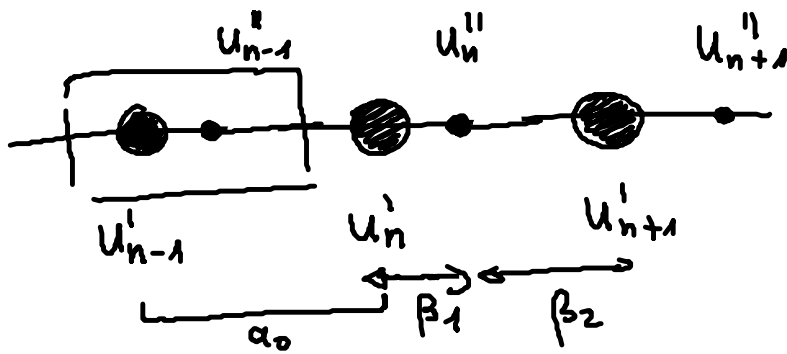
reduziert sich von  $N \cdot d \cdot p$  auf  $d \cdot p$

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:

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

WW der nächsten Nachbarn

Analysis für  $u_n''$

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

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

$\gamma$  Gitterkonstante

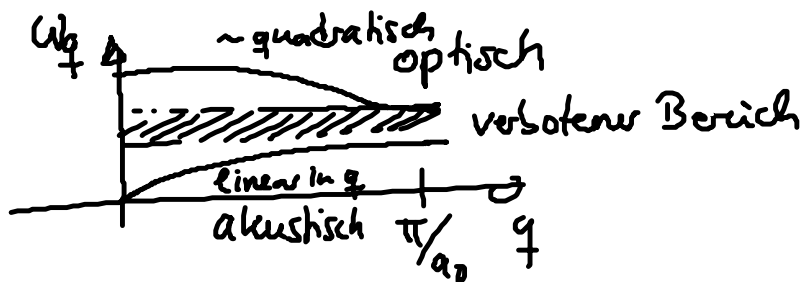
1dim, d.h.  $d=1$

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

$\rightarrow$  Übungsaufg.

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

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



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:  $d \cdot p$  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