3.6.2. Elastische Theorie – Elastostatik

Erinnerung: $\underline{u}(\underline{r},t)$ Auslenkung der Gitterpunkte als kont. Verschiebungsfeld

- $\underline{u}$ langsam veränderlich auf Längenskalen des Gitters

- Bewegungsgleichung

$$\rho \ddot{u}_i = \sum_{jkl} C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_j}{\partial r_k r_l}$$

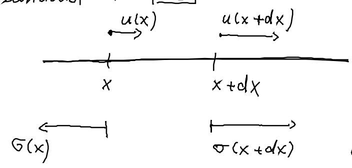
Massendichte

Elastizitätstensor

$\hat{=}$ Wellengleichung

Lösungen sind ebene Wellen
$\underline{u}(\underline{r},t) = \underline{u}_0 \, e^{i(\underline{q}\underline{r} - \omega t)}$

Einführung des Dehnungstensors: Idee zunächst in $\boxed{1D}$



äußere Kräfte

Dehnung: $\varepsilon(x) = \frac{u(x+dx) - u(x)}{dx} = u'(x)$

$\varepsilon = 0$ falls $\sigma = 0$

ε größer je größer σ

$\longrightarrow$ Hook'sches Gesetz

$$\sigma(x) = C \cdot \varepsilon(x) = C \cdot u'(x)$$

(lineare Näherung)

in $\boxed{3D}$

- Lineare Abhängigkeit $\quad u_i = \sum_j v_{ij} \, r_j \quad (\underline{u} = \underline{\underline{v}} \cdot \underline{r})$

mit $v_{ij} = \partial_{r_j} u_i$

Zerlegung der Änderungen $\underline{\underline{v}}$ in symmetrischen und anti-symmetrischen Anteil

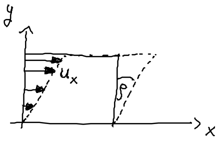
$$v_{ij} = \underbrace{\frac{1}{2}(v_{ij} + v_{ji})}_{\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}} + \underbrace{\frac{1}{2}(v_{ij} - v_{ji})}_{\omega_{ij} = -\omega_{ji}}$$

reine Verformung "Dehnung"

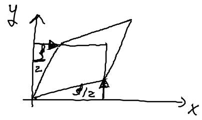
reine Drehung

Bsp.

$$\underline{\underline{V}} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

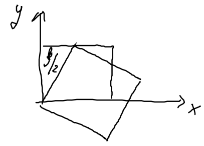


wird zerlegt in $\underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma/2 & 0 \\ \gamma/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$



Scherung

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



Drehung

=> Definition des Dehnungstensors : $\varepsilon_{ij}(r) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i}\right)$

Definition des Spannungstensor $\sigma_{ik} = \sum_{jl} C_{ijkl}\, \varepsilon_{jl}$ Hook'sches Gesetz der Elastomechanik

Tangentialkraft in i-Richtung auf Fläche mit Normale in k-Richtung.

$\rho = \frac{M}{V_{EZ}}$ (M: Masse der Atome pro EZ)

-> Bewegungsgleichung $\boxed{\rho \ddot{u}_i = \sum_k \frac{\partial}{\partial r_k} \sigma_{ik}}$

3.6.3 Analogie zwischen Elastostatik und Elektrostatik

Elektrostatik	Elastostatik
Potenzial $\phi(\underline{r})$	Verschiebungsfeld $u_i(\underline{r})$
elektrisches Feld $E_i(\underline{r}) = -\frac{\partial \phi}{\partial x_i}$	Dehnungstensor $\varepsilon_{ij}(\underline{r}) = \frac{1}{2}\left\{\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$
Quellen sind Ladungen $\rho(\underline{r})$	Kräfte (Kraftdichte) $k_i(\underline{r})$
dielektrische Verschiebung $D_i(\underline{r})$	Spannungstensor $\sigma_{ij}(\underline{r})$
Materialgleichung $D_i = \sum_j \varepsilon_{ij} E_j$	Hook'sches Gesetz $\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl}\, \varepsilon_{kl}$
Maxwell Gl.: $\mathrm{div}\, \underline{D} = \rho$, $\sum_i \partial_{x_i} D_i(\underline{r}) = \rho(\underline{r})$	$\sum_j \partial_{x_j} \sigma_{ij}(\underline{r}) + k_i(\underline{r}) = 0$

• anisotroper Fall

3 unabhängige Komponenten

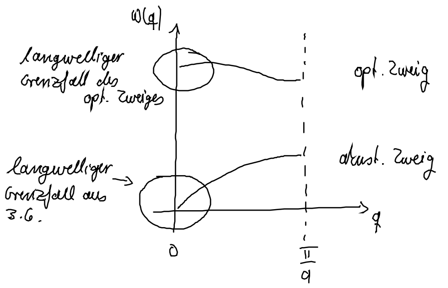
• isotrop z.B. eine für kubische Symmetrie

$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_0 \delta_{ij}$

• anisotroper Fall

C_{ijkl} : 21 unabhängige Komponenten

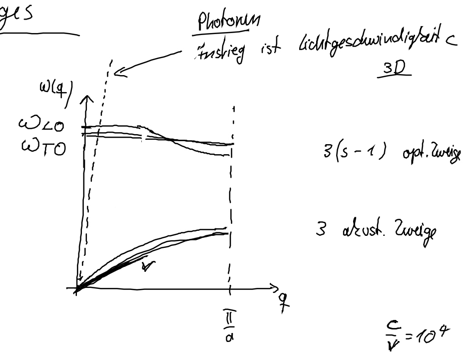
• isotrop: z.B. kubische Symmetrie 3 unabhängige Komponenten



3.7. Langwelliger Grenzfall des opt. Zweiges

(s=2)

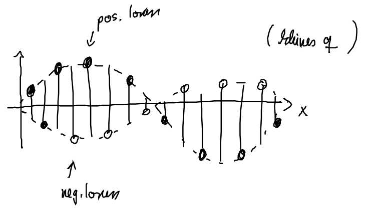
• 2 Ionen pro Elementarzelle mit verschiedener Ladung → optisch aktive Phononen



• TO : transversal optisch $\underline{X} \perp \underline{q}$

LO : longitudinal optisch $\underline{X} \parallel \underline{q}$

TO



• ganze Teilgitter schwingen gegeneinander → makroskopisches EM Feld

• LO : Feld wirkt der Bewegung entgegen → größere Kraftkonstante

• TO : • Feld ⊥ Schwingung → kleinere Schwingungsenergie

• hat ein Dipolmoment, das an Licht koppeln kann

Wechselwirkung mit Licht

• wieder im Kontinuumslimit da Photonen und TO-Phononen Dispersionskurven sich nahe bei $q=0$ schneiden.

Bewegungsgleichung (in semi-klassischer Näherung)

(I) $\ddot{\underline{u}} = -\omega_0^2 \underline{u} + e^* \underline{E}$

↑ Frequenz des TO-Phonons

2 Beiträge zur Polarisation

$$\underline{P} = \beta \underline{u} + \gamma \underline{E}$$

$\beta \underline{u}$: Polarisation durch Gitterschwingungen

$\gamma \underline{E}$: direkte Ladungsverschiebung

Ansatz ebener Wellen:

$$\underline{E} = \underline{E}_0 \, e^{i(\underline{q}\underline{r} - \omega t)}$$
$$\underline{P} = \underline{P}_0 \, e^{i(\underline{q}\underline{r} - \omega t)}$$
$$\underline{u} = \underline{u}_0 \, e^{i(\underline{q}\underline{r} - \omega t)}$$

Ansatz in (I) einsetzen:

$$\underline{u} = \frac{e^*}{\omega_0^2 - \omega^2} \underline{E}$$

$$\underline{P} = \left(\frac{\beta e^*}{\omega_0^2 - \omega^2} + \gamma \right) \underline{E} = \chi(\omega) \underline{E} = (\varepsilon(\omega) - 1) \underline{E}$$

falls $\varepsilon(0) = \varepsilon_0$ und $\varepsilon(\omega \to \infty) = \varepsilon_\infty$ bekannt

$$\varepsilon(0) = \frac{\beta e^*}{\omega_0^2} + \gamma + 1$$

$$\varepsilon(\omega \to \infty) = \gamma + 1$$

$$\Rightarrow \quad \underline{\underline{\varepsilon(\omega) = \frac{\omega_0^2 \varepsilon_0 - \omega^2 \varepsilon_\infty}{\omega_0^2 - \omega^2}}}$$

Ausbreitung des Lichtes im Festkörper mit angeregten Schwingungen:

1) EM-Wellen sind transversal **außer** für $\varepsilon(\omega) = 0$ (ω_{LO})

dann gilt $\underline{\underline{\omega_{LO}^2 = \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty} \omega_0^2}}$

Lyddane – Sachs – Teller Relation

[aus $\omega_{LO} > \omega_{TO}$ folgt, dass $\varepsilon_0 > \varepsilon_\infty$]

2) falls $\varepsilon(\omega) \neq 0$ → EM-Wellen sind transversal

aus Maxwell-Gleichungen berechnen wir:

$$\nabla \times (\nabla \times \underline{E}) = \ldots$$

$$\nabla \times \underline{E} = -\dot{\underline{B}}$$
$$\nabla \times \underline{H} = \underline{j} + \dot{\underline{D}}$$

ebene Wellen

$$\underline{q} \times (\underline{q} \times \underline{E}) = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon(\omega) \underline{E}$$

$$\underline{D} = \varepsilon(\omega) \underline{E}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \frac{\omega_0^2 \varepsilon_0 - \omega^2 \varepsilon_\infty}{\omega_0^2 - \omega^2} = q^2$$

Lösungen

$$\hookrightarrow \omega_{1,2}(q)^2 = \frac{1}{2\varepsilon_\infty} \left(c^2 q^2 + \omega_0^2 \varepsilon_0 \pm \sqrt{(c^2 q^2 + \omega_0^2 \varepsilon_0)^2 - 4 c^2 q^2 \omega_0^2 \varepsilon_\infty} \right)$$

Dispersionsrelation der
gekoppelten Anregung von Phononen und Photonen $\hat{=}$ Polaritonen ← [Quasiteilchen, das WW schon beinhaltet]

"Photon-artiges" Verhalten

"Mischzustand" aus Photon und Phonon