

8.2.2. Einführung kollektiver Moden

bisher: $m u_n \ddot{u}_n^\alpha = - \sum_{\beta \neq n} \phi_{\alpha\beta}^{un} u_\beta^\beta$

Bewegung des Ions in Zelle n in Richtung α
unter Kraftkonstanten ϕ bei Bewegung von $u_m^\beta \neq 0$

periodische Struktur bzgl. u_n^α, u_n^β , daher Fourieransatz:

$$u_n^\alpha = \underbrace{A^\alpha(q)}_{\text{Fourieramplitude}} e^{i(\underbrace{\vec{q} \cdot \vec{a}_n}_{\text{wellenartige Ausbreitung}} - \underbrace{\omega_q t}_{\text{Normierung}})}$$

$\omega = \omega_{\vec{q}} \equiv \omega_q$ ist die zu best. ω und \vec{q} Dispersionsrelation

m_n : Masse des Ions in n -te Zelle

N : Zahl der Elementarzellen

$A^\alpha(q)$: unbek. Amplitude

Aussetz f. u_n^α führt ebenfalls zu $m_n \ddot{u}_n^\alpha = - \sum_{\beta \neq n} \phi_{\alpha\beta}^{un} u_\beta^\beta$

$$\omega_q^2 A^\alpha(q) = \sum_{\beta, m} \phi_{\alpha\beta}^{um} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{a}_m - \vec{a}_n)} A^\beta(q) \left(\frac{m_n}{m_m} \right)^{1/2}$$

$$\omega_q^2 A^{\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{\beta, u} C_{\alpha\beta}^{u u}(\mathbf{q}) A^{\beta}(\mathbf{q})$$

$$C_{\alpha\beta}^{u u}(\mathbf{q}) = \phi_{\alpha\beta}^{u u} e^{i\vec{q}(\vec{r}_u - \vec{r}_\alpha)} \frac{1}{\sqrt{m_u m_u}}$$

Problem stellt Matrix gleich dar, Matrix $C_{\alpha\beta}^{u u}(\mathbf{q})$ für Eigenwert ω_q^2 und die Eigenvektoren $A^{\alpha}(\mathbf{q})$.

filter mit Basis: $u \rightarrow u, s'$
 $v \rightarrow v, s$ (s' bzw. in u-to-Zellen)

$$\omega_q^2 A_s^{\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{\beta, s'} \sum_u \underbrace{\phi_{\alpha\beta}^{u-m}}_{\text{hängt nur von Abstand } u-m \text{ ab!}} \frac{1}{\sqrt{m_s m_s'}} e^{i\vec{q}(\vec{r}_u - \vec{r}_\alpha)} A_{s'}^{\beta}(\mathbf{q})$$

$$\omega_q^2 A_s^{\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{\beta, s'} C_{\alpha\beta}^{s s'}(\mathbf{q}) A_{s'}^{\beta}(\mathbf{q})$$

(Vektor = Matrix Vektor $\hat{=}$ Skalar)

Bemerkungen:

a) Matrix $C_{\alpha\beta}^{s s'}$ mit α : Blatrisische Komponenten (1-3)
 s : p Ionen pro Zelle (1-p)

Dimensionen: $3p \times 3p \Rightarrow$ Vereinfachung

b) $C_{\alpha\beta}^{ss'}$ hermitisch: $(C_{\beta\alpha}^{s's})^*$

c) nullen Eigenwert werden durch $\| C_{\alpha\beta}^{ss} - \omega_q^2 \delta_{\alpha\beta}^{ss'} \| = 0$

(Determinante) $\Rightarrow \omega = \omega(q)$

dannach sind Eigenvektoren bestimmbar.

d) ω_q^2 muß reell sein! sind im allgemeinen $3p$ Stücke

$\omega_q^2 \lesseqgtr 0 \} \underbrace{e^{\pm i\omega_q t}}_{\text{physikalisch relevant}} \quad \text{oder} \quad \underbrace{e^{\pm \omega_q t}}_{\text{physikalisch i.a. nicht ungl.}}$ als Lösungen

e) Eigenwert nummerieren: $\omega_q \rightarrow \omega_j(q), j: 1 \dots 3p$

q nummerieren: fortschrittlich von 0 bis $\frac{2\pi}{L_x}$ mit $\Delta q = \frac{2\pi}{L}$.

es existieren $3Np$ Schwingungsmoden: Wellenlänge lösungen wenn q quantisiert wird auf der 1. Brillouinzone

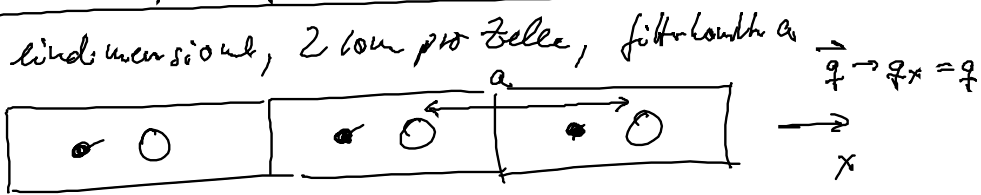
f) Modenklassifizierung f. $q \rightarrow 0$

$\omega_j(q) \xrightarrow{q \rightarrow 0} \begin{cases} = 0 & \text{akustische Moden / Phononen} \\ \neq 0 & \text{optische Moden / Phononen} \end{cases}$

g) diagonalisierte Anregungen d. Ionen gitters: „Phononen“

8.2.3. Das lineare, 2-atomige Gitter:

ein Beispiel f. akustische/optische Phononen



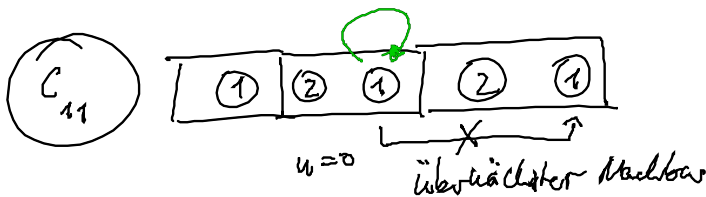
$$\alpha, \beta \rightarrow x, \{s, s'\} = \{1, 2\}, \text{ } 2 \times 2 \text{ Matrix f. } \underline{C}$$

$$C_{ss'}^{\alpha\beta} \rightarrow C_{ss'}^{\alpha x} \rightarrow C_{ss'} = \sum_m \underbrace{\phi_{ss'}^m e^{i q m a}}_{\substack{-i q (a_n - a_m) \\ n=0}} \frac{1}{\sqrt{m_s m_{s'}}}$$

- beim summieren über m nur die nächst Nachbarer mit nehmen $\hat{=}$ Näherung

- Bestimmung der Dispersionsrelation:

$$\det \begin{pmatrix} C_{11} - \omega^2 & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} - \omega^2 \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$



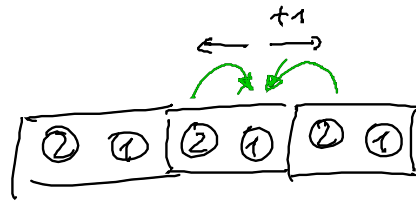
$$C_{11} = \frac{1}{m_1} \sum_{\substack{m= \\ 0, 1, 2, \dots}} \phi_{11}^m e^{i q a m} = \frac{\phi_{11}^0}{m_1}$$

↑
Nächstes Nachbar $m=0$

$$C_{22}$$

$$C_{22} = \frac{\phi_{22}^0}{m_2}$$

$$C_{12}$$



wie wirkt 2. auf 1. Teil

$$C_{12} = \frac{1}{\sqrt{m_1 m_2}} \sum_m \phi_{12}^m e^{i q a m} = \frac{1}{\sqrt{m_1 m_2}} \left(\phi_{12}^0 + \phi_{12}^{+1} e^{i q a} \right)$$

Nachbarn: $m=0, +1$

so viele Koeffizienten? $\phi_{12}^0, \phi_{12}^1, \phi_{11}^0, \phi_{22}^0$

sind aber nicht unabhängig & sind Eigenschaften ϕ 's

$$\sum_{m \in S} \phi_{s1}^m = 0 \quad \downarrow \quad s=1 \quad \downarrow \quad 0 = \underbrace{\phi_{12}^0 + \phi_{12}^{+1}}_{\text{Näherung } \phi_{12}^0 = \phi_{12}^{+1}} + \phi_{11}^0$$

$$\rightarrow \phi_{12}^{+1} = -\frac{\phi_{11}^0}{2} = -\frac{\phi}{2}, \quad \phi_{22} = \phi_{11} = \phi \quad (\text{Näherung})$$

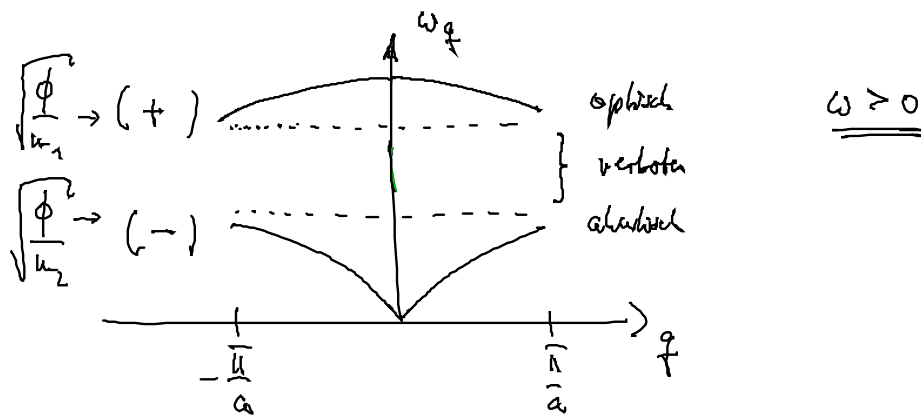
$$\begin{pmatrix} \left(\frac{\phi}{m_1} - \omega^2 \right) & \frac{-\phi}{2\sqrt{m_1 m_2}} (1 + e^{i q a}) \\ \frac{-\phi}{2\sqrt{m_1 m_2}} (1 + e^{-i q a}) & \left(\frac{\phi}{m_2} - \omega^2 \right) \end{pmatrix} = 0$$

Lösung ergibt:

$$\omega_{\pm}^2(q) = \frac{\phi}{2} \left(\frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \right) \left[1 \pm \left(1 - 2 \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (1 - \cos(qa)) \right)^{1/2} \right]$$

$f \equiv \pm \hat{=}$ 2 Lösungen ($p=2$)

Darstellung über q :



Eigenvektoren:

$$\begin{pmatrix} \left(\frac{\phi}{m_1} - \omega_{\pm}^2 \right) & -\frac{\phi}{\sqrt{m_1 m_2}} (1 + e^{iqa}) \\ -\frac{\phi}{\sqrt{m_1 m_2}} (1 + e^{-iqa}) & \left(\frac{\phi}{m_2} - \omega_{\pm}^2 \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^{\pm}(q) \\ A_2^{\pm}(q) \end{pmatrix} = 0$$

$$q \rightarrow 0$$

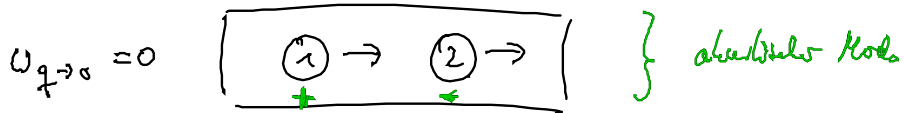
1. Zeile:

$$\frac{A_1^\dagger(q)}{A_2^\dagger(q)} \stackrel{q \rightarrow 0}{=} \frac{\phi / \sqrt{m_1 m_2}}{\frac{\phi}{m_1} - \omega_\pm(0)} = \begin{cases} \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} & \text{für } \omega_- = 0 \\ -\sqrt{\frac{m_2}{m_1}} & \text{für } \omega_+ = 0 \end{cases}$$

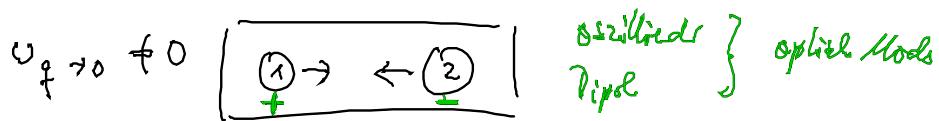
Limes gehen

$\omega_-(0) = 0$ $\omega_+(0) = \phi \left(\frac{m_1 + m_2}{m_1 \cdot m_2} \right)$

für ω_- : gleichgerichtete Bewegung der Ionen: $A_1^- \sim A_2^-$

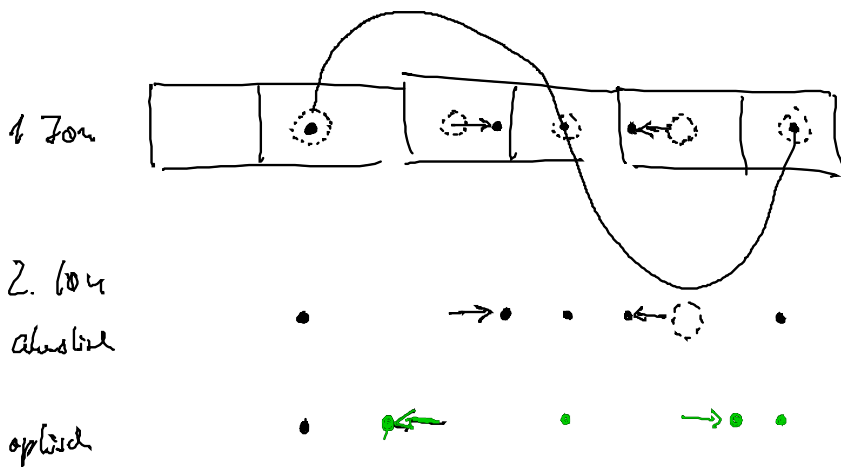


für ω_+ : gegengerichtete Bewegung d. Ionen $A_1^+ \sim -A_2^+$



Montagekammer: $t = \text{fest}$ $u_{NS}^\alpha(j) = A_S^\alpha(q) \frac{e^{i q n a}}{\sqrt{m_{NS} N}} e^{i \omega_j t}$

$\nwarrow \cos(qna)$



8-2.4. Phonon mode (\vec{j}, \vec{q}) : Klassifizierung

allgemein Fall :

$$u_{WS}^\alpha = \sum_{\vec{j}, \vec{q}} A_s^\alpha(\vec{q}, j) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{a}_s - \omega_j(\vec{q}) t)} \frac{1}{\sqrt{M_{s,N}}}$$

Anzahls- s -tr. ω -tr. Zelle in α Richtung \vec{j}, \vec{q} Rückinfo Polarisation der Wellen Phononwelle Normierung
 (Anzahl in α -Richtung: wie stark)

- es gibt insgesamt $3pN$ Moden, davon $3N$ akustische

- Klassifizierung $\left(\tilde{A}_s^\alpha = A_s^\alpha / \sqrt{M_{s,N}} \right) \quad \vec{q} = 0$

$$\sum_s M_s \omega_j^2(0) \tilde{A}_s^\alpha(0) = \sum_{\beta, s'} \sum_{\omega} \phi_{\alpha\beta}^{\omega} (s, s') \tilde{A}_{s'}^\beta(0)$$

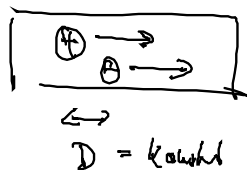
a) "akustisch Moden": wenn $\omega_j(0) = 0$

wird $\sum_{\omega, s'} \phi_{\alpha\beta}^{\omega} (s, s') = 0$ ist die Lsg

mit Annahme $\tilde{A}_{s'}^\beta(0) = A^\beta(0)$ konsistent

alle (ohne s' habe dieselbe Auslenkung)

in u_{ws} hängt die Stärke der Auslenkung weit von s ab :



kein zeitlich verändertes Dipol

b) optische Moden: wenn $\omega_j(\omega) \neq 0$

obige Gleichung über s summiert

$$\sum_S u_s \omega_j^2(\omega) \tilde{A}_S^{\omega}(\omega) = \sum_{\beta \neq j} \underbrace{\sum_{s_1} u_{s_1} \phi_{s_1 \beta}(\omega)}_{=0} \tilde{A}_{s_1 \beta}^{\omega}(\omega) = 0$$

↓ da $\omega_j^2(\omega) \neq 0$

$$\sum_S u_s \tilde{A}_S^{\omega}(\omega) = 0 \quad \text{Knoten (Schwanz) bleibt erhalten}$$

aus folgt, wenn \tilde{A}_S^{ω} unterschiedlich Vorzeichen haben

$$u_{s_1} > 0 \quad \downarrow \quad u_{s_2} < 0$$



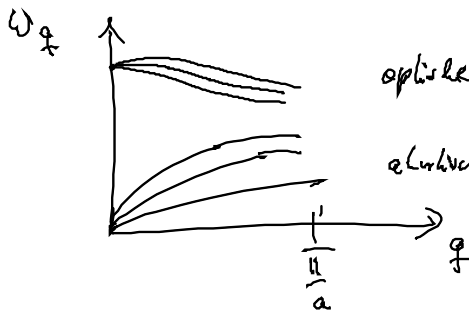
$D \neq \text{konstant}$

optische Moden können durch Knoten abgegrenzt werden

Bsp. Germanium 2 Ionen pro Zelle, höherer Index

→ Zahl der Moden $3pN = 6N$

für jedes \vec{q} gibt es 6 Moden



optische (O): 1LO, 2TO

akustische (A): 1LA, 2TA

die akust. / opt. Mode können wieder weiter unterteilt werden
nach Ausbreitungsrichtung: $\vec{q} \parallel \vec{A}$: Longitudinal (L)
 $\vec{q} \perp \vec{A}$: transversal (T)