4.2 Das Potential, harmonische Näherung

Pot. Energie des Gesamtkristalls

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \qquad \text{schreibe } \phi = \phi_{ij}$$

$$= \frac{1}{2} \sum \phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j + \vec{u}_i - \vec{u}_j)$$

r_i : momentane Position des Atom i mit Gleichgewichts-lage R_i . $\vec{r}_i = \vec{R}_i + \vec{u}_i$

$$U = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{ij} \phi(R_i - R_j)}_{U_0 \text{ statische Gitterenergie}} + \frac{1}{2} \sum (\vec{u}_i - \vec{u}_j) \nabla \phi(R_i - R_j)$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{ij} \left[(\vec{u}_i - \vec{u}_j) \nabla \right]^2 \phi(R_i - R_j) + O(u^3)$$

Linearer Term: Koeffizient von $\vec{u}_i$

$$\sum_{i \neq j} \nabla \phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = -\sum \text{Kräfte auf Atom} = 0$$

da Atom in Gleichgewichtslage

Terme $O(u^3)$ anharmonische Terme

- verantwortlich für Therm. Ausdehnung
- endl. Wärmeleitfähigkeit

$\Rightarrow$ später

$O(u^3)$ wird zunächst vernachlässigt

Übrig bleibt der harmonische Term 2. Ordnung, in Komponentenschreibweise

$$U^{harm} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{ij \\ \mu,\nu = x,y,z}} (\vec{u}_{i\mu} - \vec{u}_{j\nu}) \phi_{\mu\nu}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)(\vec{u}_{i\nu} - \vec{u}_{j\nu})$$

$$\phi_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial r_\mu \partial r_\nu}$$

Mit Def.

$$D^{ij}_{\mu\nu} = \delta_{ij} \sum_k \phi_{\mu\nu}(\vec{R}_i - \vec{R}_k) - \phi_{\mu\nu}(R_i - R_j)$$

$$\Longrightarrow \quad U^{harm} = \sum_{\substack{ij \\ \mu\nu}} u_{i\mu} D^{ij}_{\mu\nu} u_{j\nu}$$

$\Rightarrow$ Bew. Gl. $\quad M \ddot{u}_{i\mu} = -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_{i\mu}} = -\sum_{j i \nu} D^{ij}_{\mu\nu} u_{j\nu}$

$$M \ddot{\vec{u}}_i = -\sum_j \mathbb{D}^{ij} \vec{u}_j$$

Matrix $\mathbb{D}^{ij}$ beschreibt: "Zupfe" am Atom j in Richtung ν $\Rightarrow$ ergibt Beitrag zur Beschleunigung des Atoms i in Richtung μ

Lösungsansatz $\quad \vec{u}_i(R_{ij}, t) = \vec{\varepsilon}\, e^{i(\vec{k}\vec{R} - \omega t)}$

mit $\mathbb{D}(\vec{k}) = \sum_i \mathbb{D}^{ij} \exp(-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j))$

$$\Longrightarrow \quad M\omega^2 \vec{\varepsilon} = \mathbb{D}(\vec{k})\, \vec{\varepsilon}$$

$\vec{\varepsilon}$ Polarisationsvektor

$\mathbb{D}(\vec{k})$ Dynamische Matrix

Bem (1) $\mathbb{D}(k)$ hängt nicht von i und j ab

(2) Bew.gl. entkoppelt, für jedes $\vec{k}$ nur noch 3 Gl.

(für Kristall mit Basis aus einem Atom wie hier vorausgesetzt)

Beispiel

4.3 Lineare, einatomige Kette

einfaches Modell

Gleichgew. lage

Gittervektoren	$R =$	$(n-1)a$	na	$(n+1)a$
Auslenkung		u_{n-1}	u_n	u_{n+1}

$$\phi_{\mu\nu}(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \longrightarrow \left.\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2}\right|_{x=na} = \begin{cases} f & |n-l| = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$U^{harm} = \frac{1}{2} f \sum_{n=1}^{N} (u_{n+1} - u_n)^2$$

Bew. Gl.

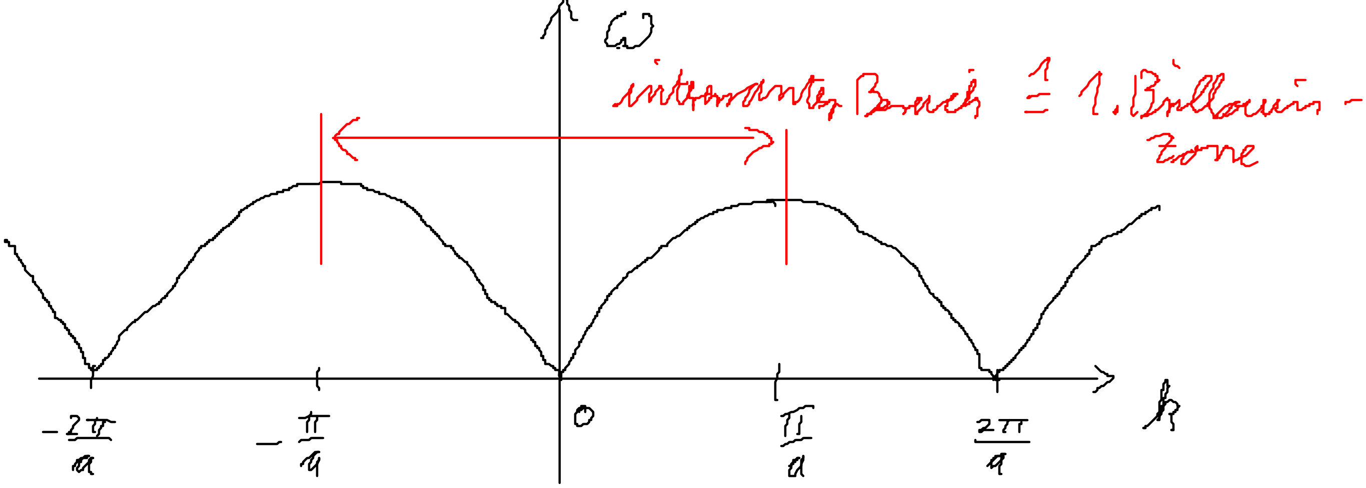
$$M \ddot{u}_n = -f(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1})$$

Lösungsansatz $\quad u_n = u_0 \exp(i(kx - \omega t))$

mit $x = na$ da nur hier "Welle" definiert ist

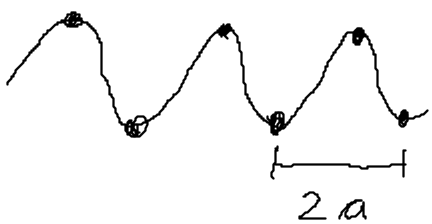
$$\Rightarrow -M\omega^2 = -f(2 - \exp(-ika) - \exp(ika))$$
$$= -f(2 - 2\cos(ka))$$
$$= -f \sin^2 \frac{ka}{2} \qquad [\hat{=}\ D(\vec{k})\ \text{dyn. Matrix}]$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{f}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$ **Dispersionsrelation**



Fkt. periodisch in k mit Periode $\pi = \frac{ka}{2}$

Beschränkung auf die 1. Brillouin Zone



$k = \frac{\pi}{a}$ / kleinere Wellenlänge ergibt keine neue Schwingungsmode

<u>Diskussion</u> 1. $k = \frac{\pi}{a} \Rightarrow \lambda = 2a$

Benachbarte Atome schwingen gegenphasig

- Stehende Welle da $\frac{d\omega}{dk} = 0$

2. $\lambda \gg a$, d.h. $k \ll \frac{2\pi}{a} \Rightarrow \left|\sin \frac{ka}{2}\right| \approx \left|\frac{ka}{2}\right|$

$\Rightarrow$ benachbarte Atome schwingen gleichphasig

$$\omega \approx \sqrt{\frac{f}{M}}\, a|k| = c_{schall}\, k$$

Atomstruktur (diskrete Punkte) können als Kontinuum aufgefasst werden.

Wieviele Schwingungsmoden gibt es zu einer geg. Energie?

Def Die Anzahl der Zustände (hier: Schwingungsmoden) pro Volumen im Frequenzintervall $[\omega, \omega + d\omega]$ ist $Z(\omega)\, d\omega$.

$Z(\omega)$ heißt **Zustandsdichte** $\left[\frac{\text{Zeit}}{\text{Volumen}} \right]$

Häufig: Energiezustandsdichte $Z(E)$ $\left[\frac{1}{\text{Energie} \cdot \text{Volumen}} \right]$ entsprechend definiert:

Randbedingungen: versch. Möglichkeiten

a) feste Randbed. $u_1 = u_N = 0$ für alle Zeiten

b) periodische Randbed. (häufig benutzt)

$$u_n = u_{n+N} \qquad N \text{ fest}$$

$$\Rightarrow \exp(ika(n+N)) = \exp(ikan)$$

$$\Rightarrow kaN = 2\pi \xi \qquad \xi \text{ ganzzahlig}$$

Erlaubte k-Werte

$$k = \frac{2\pi}{a} \frac{\nu}{N} = \frac{2\pi \nu}{L} \qquad \text{bis } \nu_{max} = \pm \frac{N}{2}$$

$$\text{damit } k = \pm \frac{\pi}{a}$$

und damit N unabhängige Schwingungsmoden

Zustände im Intervall $[k, k + dk]$

$$Z(k)\, dk = \frac{L}{2\pi}\, dk$$

$\Rightarrow$ Zustandsdichte der linearen Kette

Volumen in 1d

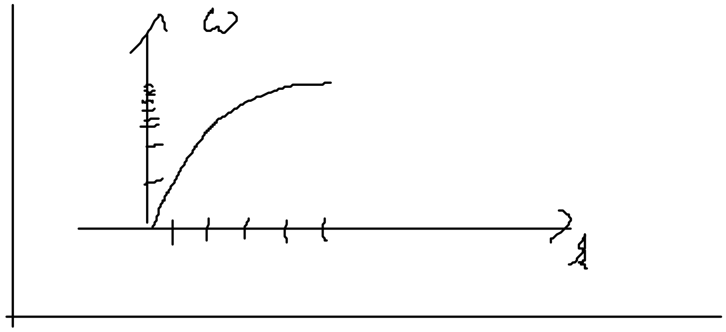
$$Z(\omega)\, d\omega = Z(k)\, dk \frac{dk}{d\omega}\, 2\, L^{-1}\, d\omega$$

wegen $\omega \sim |k|$

$$\frac{dk}{d\omega} = \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}}$$

hohe Zustandsdichte bei Dispersion (?)

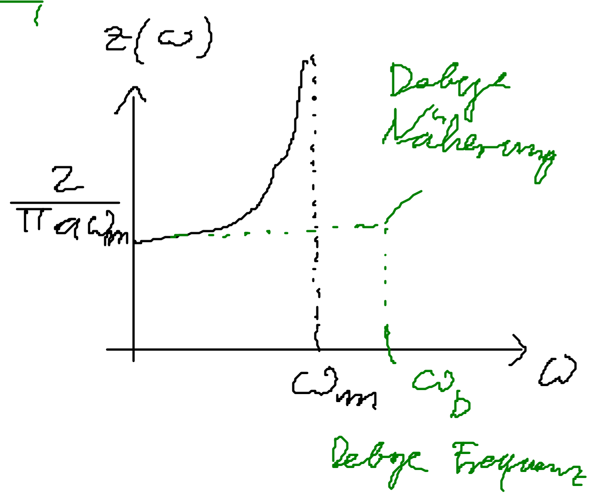
$$Z(\omega)\,d\omega = \frac{1}{\pi}\,\frac{1}{\frac{d\omega}{dk}}\,d\omega$$



mit

$$\frac{d\omega}{dk} = \omega_m \frac{a}{2}\cos\frac{ka}{2}$$

$$= \frac{a}{2}\sqrt{\underbrace{\omega_m^2 - \omega_m^2 \sin^2\frac{ka}{2}}_{=\omega^2}}$$

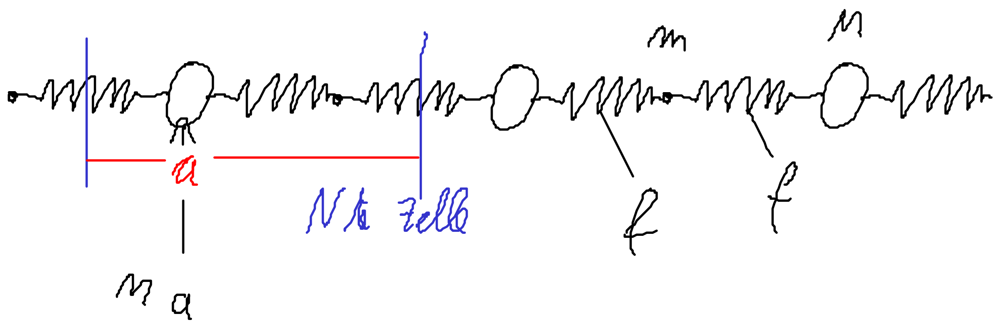


$$Z(\omega)\,d\omega = \frac{2}{\pi a}\,\frac{d\omega}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}$$

$$\frac{d\omega}{dk} = 0 \quad \text{van Hove Singularität}$$

$$\int Z(\omega)\,d\omega = \frac{N}{V}$$

4.4 Lineare 2-Atomige Kette



Gleichgewichtslage $\quad (n-\frac{1}{4})a \quad (n+\frac{1}{4})a \quad (n+\frac{3}{4})a$

Auslenkung $\quad u_n \quad v_n$

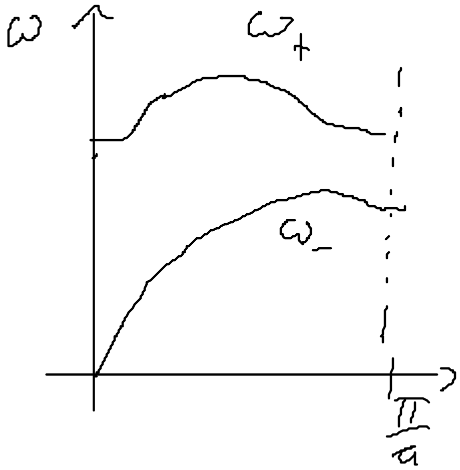
Bew.-Gl (wieder nur f mit nächsten Nachbarn)

Ansatz: $u_n = u_0 \exp(i(ka(n-\frac{1}{4}) - \omega t))$

$$v_n = v_0 \exp(i(ka(n+\tfrac{1}{4}) - \omega t)) = \exp(i\tfrac{ka}{2})\,\frac{v_0}{u_0}\,u_n$$

Einsetzen in Bew. Gl. Verschwinden der Determinante der Koeff

$\Rightarrow$ Lösung $\omega_\pm^2 = f\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \pm f\sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{mM}\sin^2\frac{ka}{2}}$



ω_+ "optischer Zweig"

ω_- "akustischer Zweig"