4.2 Das Potential, harmonische Näherung

$\phi_{ij} \sim u^2 \quad u = r - r_0$

für kleine Auslenkungen

r_{ij} „harmonische Näherung“

$\vec{R}_i$: Gleichgewichtslage des Atoms i

schreibe $\phi_{ij} = \phi$ $\quad$ $\vec{r}_i$: momentane Pos. des Atoms i

$$\boxed{U = \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\ i\neq j}} \phi_{ij}(r_i - r_j) = \frac{1}{2}\sum \phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j + \vec{u}_i - \vec{u}_j)}$$

$$U = \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{ij} \phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}_{U_0 \text{ statische Gitterenergie (Bindungsenergie)}} + \frac{1}{2}\sum_{ij}(\vec{u}_i - \vec{u}_j)\nabla\phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) + \frac{1}{4}\sum_{ij}\left[(\vec{u}_i - \vec{u}_j)\nabla\right]^2 \phi(\vec{R}_i + \vec{R}_j) + \dots$$

linearer Term: Koeffizienten von $\vec{u}_i$:

$\sum_{j\neq i} \nabla\phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = -\sum$ Kraft auf Atom $i := 0$ da $\phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$ Atom in Gg-Lage

Terme höherer Ordnung $\mathcal{O}(u^3)$: **anharmonische Terme**

verantwortlich für thermische Ausdehnung, endl. Wärmeleitfähigkeit } später, $\mathcal{O}(u^3)$ vernachlässigen

<u>übrig bleibt Term 2. Ordnung</u> (harmonischer Term) in Komponentenschreibw.

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

$$\phi_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{\partial^2 \phi(\vec{r})}{\partial r_\mu \partial r_\nu}$$

<u>Mit Def:</u> $D^{ij}_{\mu\nu} = \delta_{ij}\sum_k \phi_{\mu\nu}(\vec{R}_i - \vec{R}_k) - \phi_{\mu\nu}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$

$$\boxed{U^{harm} = \frac{1}{2}\sum_{\substack{ij\\ \mu,\nu}} u_{i\mu}\, D^{ij}_{\mu\nu}\, u_{j\nu}}$$

BGL:

$$M\ddot{u}_{i\mu} = -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_{i\mu}} = -\sum D^{ij}_{\mu\nu}\, u_{j\nu}$$

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

Matrix $\mathbb{D}^{ij}$ beschreibt „große" an Atom j in Richtung ν ⇒ Beitrag zur Beschleunigung des Atoms i in Richtung μ.

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

Mit $\mathbb{D}(k) = \sum_j \mathbb{D}^{ij} e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \Rightarrow M\omega^2 \vec{\varepsilon} = \mathbb{D}(k)\,\vec{\varepsilon}$

$\vec{\varepsilon}$: Polarisationsvektor

$\mathbb{D}(k)$: dynamische Matrix

Bem:

1. $\mathbb{D}(k)$ hängt nicht mehr von i und j ab
2. BGL entkoppelt, für jedes $\vec{k}$ nur noch drei Gl.

(Für Kristall mit Basis aus einem Atom, wie hier vorausgesetzt)

4.3 Lineare einatomige Kette

Einfaches Modell — Kopplungskonst f („Federkonst")

$\leftarrow a \rightarrow$ Masse m — N-Atome

Gleichgewichtslage			
Gittervektor R =	$(n-1)a$	na	$(n+1)a$
Auslenkungen	u_{n-1}	u	u_{n+1}

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

l : Länge der Kette

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

BGL:

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

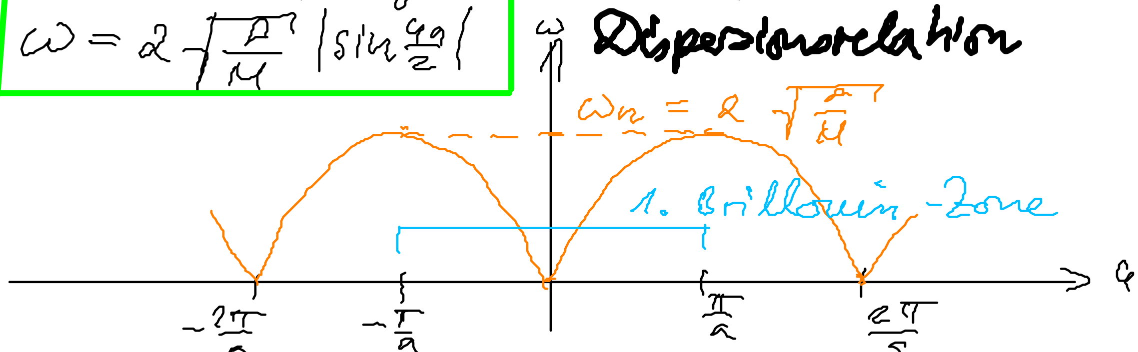
Lösungsansatz: $u_n = u_0\, e^{-i(kx - \omega t)}$ mit $x = na$, damit hier „Welle" def. ist.

$$\Rightarrow -M\omega^2 = -f\left(2e^{-ika} - e^{ika}\right) = -f(2 - 2\cos ka) = -4f\sin^2\frac{ka}{2}$$

[$\hat{=}$ $\mathbb{D}(k)$ dynamische Matrix] (hier aber Skalar da 1 dim)

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

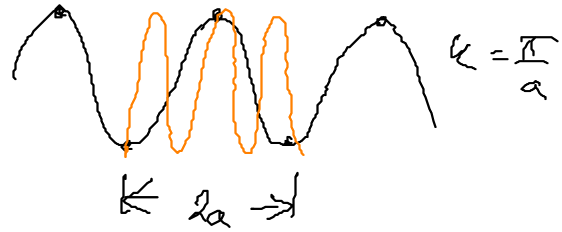
Dispersionsrelation



Lösung: periodisch in k mit $\pi = \frac{ka}{2}$

Beschränkung auf die 1. B.Z

höhere k Wert ergibt keine zusätzliche Schwingungsmode



Diskussion:

① $k = \frac{\pi}{a}$, $\lambda = 2a$ benachbarte Atome schwingen gegenphasig
stehende Welle $\frac{d\omega}{dk} = 0$

② $\lambda \gg a$, d.h. $k \ll \frac{2\pi}{a}$, $\left|\sin\frac{ka}{2}\right| \approx \left|\frac{ka}{2}\right|$ benachbarte Atome schwingen gleichphasig $\omega \approx \sqrt{\frac{f}{M}} \cdot a|k| = c_{Schall} \cdot k$

$\Rightarrow$ für langwellige Schallwellen atomistische Struktur unwichtig

Wieviele Schwingungsmoden gibt es zu geg. Energie?

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

Häufig: (Energie) Zustandsdichte **$Z(E)$** (Einheit: $(\text{Energie}\cdot\text{Volumen})^{-1}$) entsprechend definiert

Randbedingungen: resultierende Möglichkeiten

a) feste Randbedingungen $u_1 = u_N = 0$ für alle Zeiten

b) periodische Randbedingung (häufig benutzt) $u_n = u_{n+N}$

$\Rightarrow e^{ika(n+N)} = e^{ikan} \rightarrow kaN = 2\pi\nu$ ν ganzzahlig

erlaubte k-Werte $k = \frac{2\pi}{a}\frac{\nu}{N} = \frac{2\pi\nu}{L}$ L = Länge der Kette

bei $\nu_{max} = \pm\frac{N}{2}$ dann $k = \pm\frac{\pi}{a}$

damit: N unabhängige Schwingungsmoden

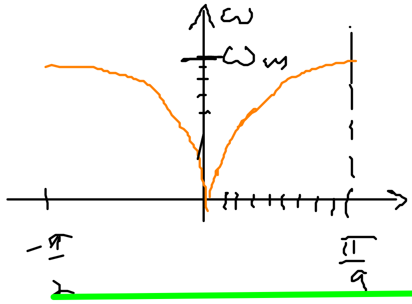
Zustände im Intervall $[k, k+dk]$ (im k-Raum):

$\boxed{Z(k)\,dk \quad \frac{L}{\pi}\,dk}$

wegen $-k$ und $+k$-Richtung

Zustandsdichte der linearen Kette $\boxed{Z(\omega)\,d\omega = Z(k)\,dk\,\frac{dk}{d\omega}\,2L^{-1}\,d\omega}$

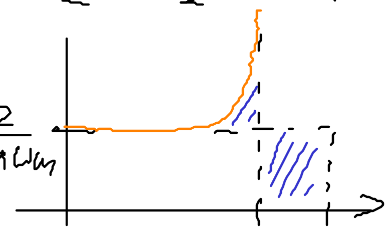
$\boxed{\frac{dk}{d\omega} = \frac{\quad}{d}}$: hohe Zustandsdichte bei Dispersion



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

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

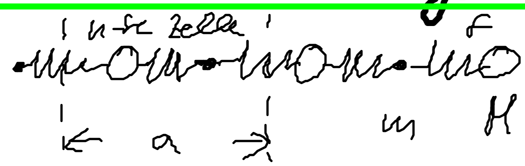
$$\boxed{Z(\omega)\,d\omega = \frac{2}{\pi a}\,\frac{d\omega}{\sqrt{\omega_m^2-\omega^2}}}$$



$\frac{d\omega}{dk} = 0$: van Hove-Singularität

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

4.9 Lineare zweiatomige Kette



Gg.-Lagen $(n-\frac{1}{4})a$ $\quad(n+\frac{1}{4})a$ $\quad(n+\frac{3}{4})a$

Ausl. u_n $\quad v_n$

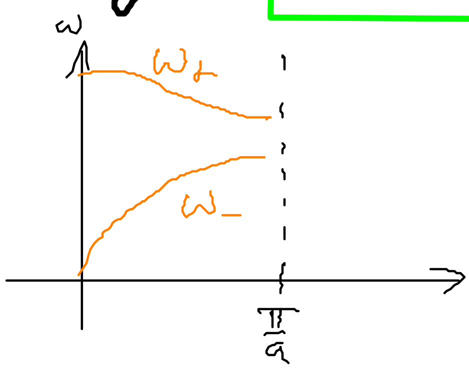
BGL (wieder nur direkt nächste Nachbarn)

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

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

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

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



Dispersionsrelation mit zwei „Dispersionszweigen"
ω_+ „optischer Zweig"
ω_- „akustischer Zweig"