repetition

Hooks law

elastical properties of continuous materials

stress tensor $\sigma_{\alpha\beta} = \sum_{\delta\gamma} \underbrace{C_{\alpha\beta\delta\gamma}}_{\text{stiffness tensor}} e_{\gamma\delta}$

⇒ wave equations

Schallwellen

$$\rho \frac{d^2 U_x}{dt^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \qquad \sigma_{xx} = C_{11}\frac{\partial u_x}{\partial x}$$

Allg. Form $$\rho \frac{d^2 U_\alpha}{dt^2} = \sum_{\beta\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta}\frac{\partial u_\delta}{\partial r_\delta}$$

Lösung $$u_\alpha = u_{0\alpha}\, e^{i\omega t - i\vec{q}\vec{r}}$$

kubische Kristalle

$$\underbrace{\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2}}_{\text{Kraft in x Richtung}} = C_{11} \underbrace{\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2}}_{\text{Verformung in x-Richt.}} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}\right) + (C_{12}+C_{44})\left(\frac{\partial u_x^2}{\partial x \partial y} + \frac{\partial u_z^2}{\partial x \partial z}\right)$$

analog
$$\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} =$$
$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} =$$

⇒ Dispersionsrelation $\omega_\alpha = v_\alpha q$ — Wellenzahl $q = k$

3 Moden: 1 longitudinal Kraft $\parallel q$

2 transversal Kraft $\perp q$

Für isotrope Medien

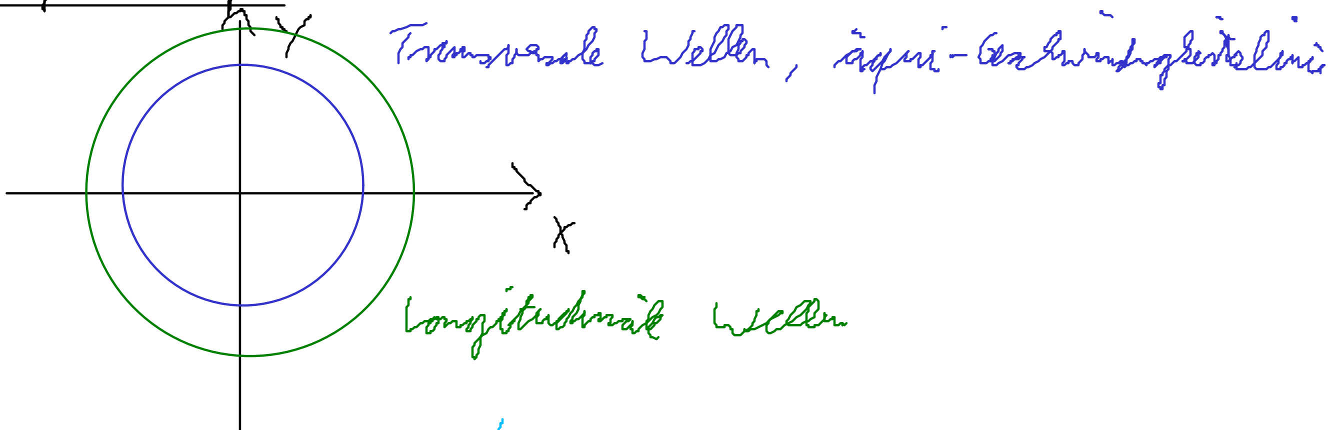
(Geschwind. der Wellen)

$\vec{u} \parallel \vec{q}$ $\qquad \dfrac{\omega_{\parallel}}{q} = \sqrt{\dfrac{C_{11}}{\rho}} = v_{\parallel}$ $\qquad$ L

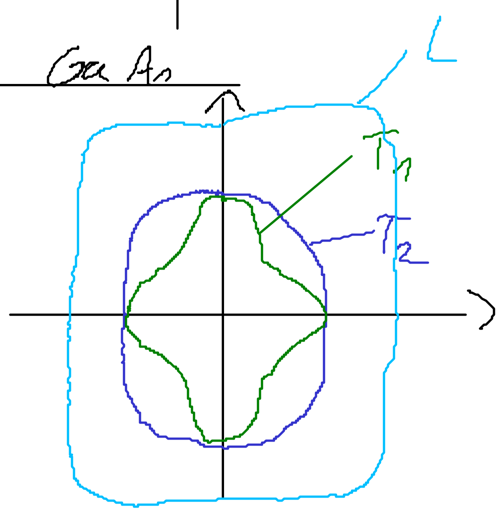
$\vec{u}_2, \vec{u}_3 \perp \vec{q}$, $\qquad \dfrac{\omega_{\perp}}{q} = \sqrt{\dfrac{C_{44}}{\rho}} = v_{\perp}$ $\qquad$ T

$v_\alpha : 1 \ldots 10 \ \frac{km}{s}$ $\qquad$ Schallgeschwindigkeit in Kristallen

Bsp Glaß



Bsp GaAs

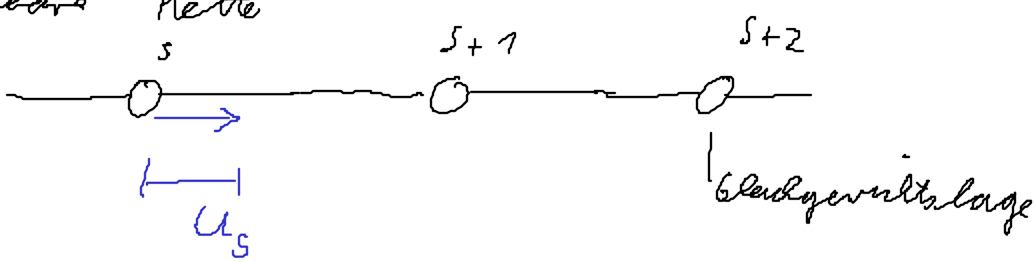


unterschiedliche Schallgeschwind. in verschiedene Richtungen

$\Rightarrow$ aus Schallgeschwindigkeit kann man C_{11}, C_{12} usw. berechnen $\qquad (C_{11} - C_{12} = 2C_{44})$

Gitterschwingungen

lineare Kette



u_s Auslenkung von Atom s

Bewegungsgleichung

alle Atome gleich, Masse M

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n \left(u_{s+n} - u_s \right)$$

Wechselwirkung auch mit übernächste Nachbarn

Lösungsansatz

$$u_{s+n} = u_0 e^{-i(\omega t - qna)}$$

einsetzen

$$\omega^2 M = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n \left(1 - e^{iqna}\right) \qquad C_n = C_{-n}$$

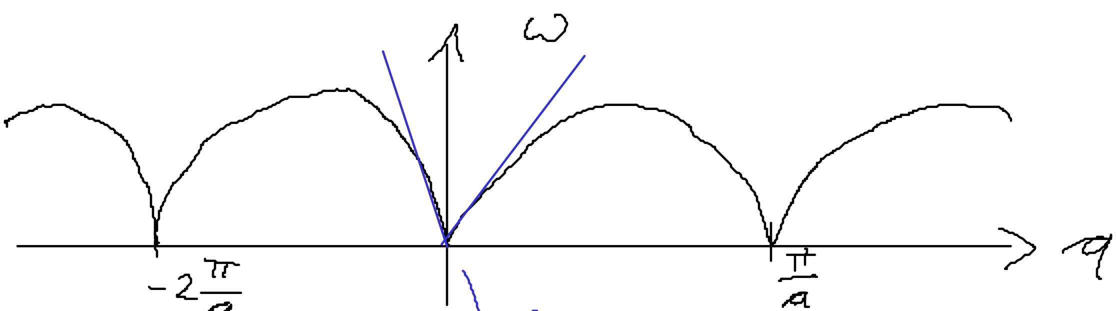
$$\omega^2 = \frac{1}{M} \sum_{n=1}^{\infty} C_n \left(2 - e^{iqna} - e^{-iqna}\right)$$

$$= \frac{2}{M} \sum_{n=1}^{\infty} C_n \left(1 - \cos(qna)\right)$$

$$C_1 \gg C_n \quad (n \geq 2) \quad \Rightarrow \quad \omega^2 = \frac{2C_1}{M}\left(1 - \cos(qa)\right) = \frac{4C_1}{M} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\longrightarrow \quad \omega = 2\sqrt{\frac{C_1}{M}} \left|\sin\left(\frac{qa}{2}\right)\right|$$

Dispersionsrelation für Gitterschwingungen



$$q \ll a \Rightarrow \quad \sin(qa) \approx qa$$

bei $C_2 \neq 0$

$$\omega^2 = \frac{4C_1}{M}\left[\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + \frac{C_2}{C_1}\sin(qa)\right]$$

wichtig in Ion. Kristallen

Phasenunterschied $\frac{u_{s+1}}{u_s} = e^{iqa}$

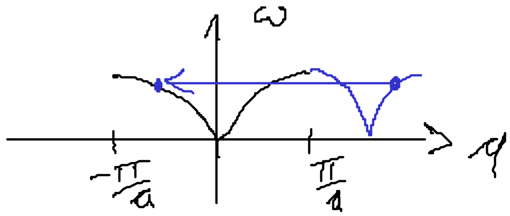
(wieder wie mit $C_2 = 0$)

$-\pi < qa < \pi$

⇒ Phasenunterschied wiederholt sich nach 2π

⇒ Beschränke Dispersionsrelation auf Bereich von $-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$

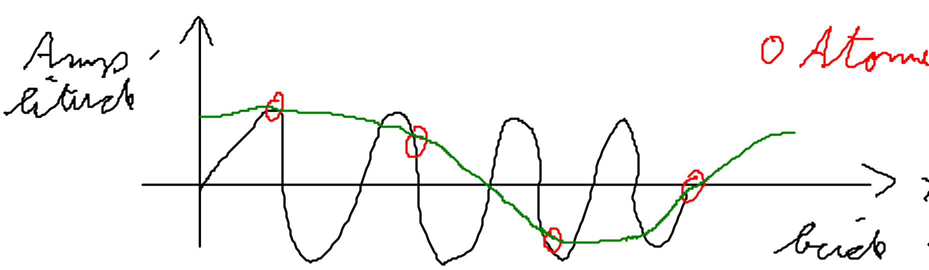
⇔ 1. Brillouin-Zone



Verschiebung um 2π ändert nichts

Anschaulich:

Welle im direkten Raum



beide Wellen beschreiben die gleiche Physik

$$q' = q + \underbrace{\frac{2\pi N}{a}}_{\text{Gittervektor im reziproken Raum}}$$

Phasengeschwindigkeit $v = \frac{\omega}{q}$

Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial q}$ ≙ Energietransport

am Rand der BZ wird kein Energie transportiert, Atome schwingen gegenphasig ⇔ stehende Welle

Fall $q \to 0$, $\lambda \to \infty$

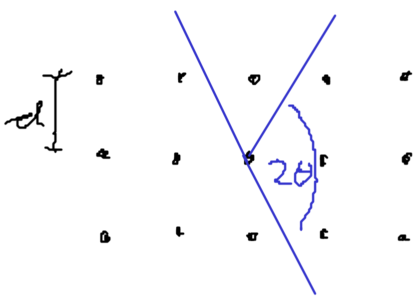
$$\omega^2 \approx \frac{q^2 a^2}{M} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 C_n \qquad \left(\cos x \approx 1 - \frac{1}{2}x^2 + \dots\right)$$

$$M = \frac{\rho}{a^3} \qquad C_{11} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2}{a} C_n^{\parallel}$$

$$C_{44} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2}{a} C_n^{\perp}$$

Fall $|q| \approx \frac{\pi}{a}$, $\lambda = 2a$

Phasenunterschied $\frac{u_{s+1}}{u_s} = e^{i\pi} = -1$

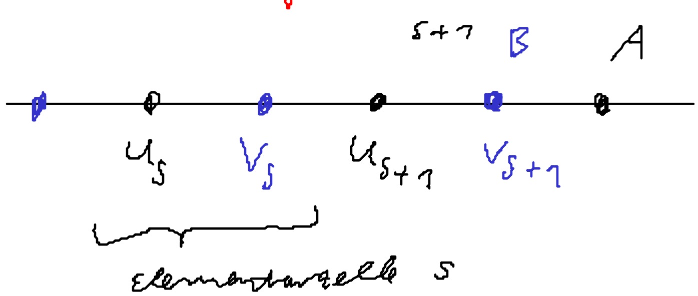


$2d \sin\theta = \lambda$

Rückreflexion $\theta = 90°$

$\Rightarrow 2d = \lambda$

2 Atomige Gitter



$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C'(v_s - u_s) - C''(u_s - v_{s-1})$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C''(u_{s+1} - v_s) - C'(v_s - u_s)$$

C' und C'' können verschieden sein, in Ion. Kristallen sind sie gleich

Lösungsansatz

$$u_s = u\, e^{-i(\omega t - qsa)}$$

$$v_s = v\, e^{-i(\omega t - qsa)}$$

BGL in Matrix schreiben , det(Matr. $- \omega \mathbb{1}$) $= 0$

$$\omega_\pm = \frac{\omega_0^2}{2} \sqrt{1 \pm \sqrt{1-\gamma^2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}}$$

$$\omega_0 = (C'+C'')\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)$$

$$\gamma = 4\frac{\sqrt{C'C''}}{C'+C''} \cdot \frac{\sqrt{M_1 M_2}}{M_1+M_2}$$

für $C' = C''$
und $M_1 = M_2$
kommt obiges
Bsp heraus,
aber a ist doppelt so groß
$2a' = a$