

8. Vibrationen der 1D monatomischen Kette

8.1 1D-Kette

8.2 Reziprokes Gitter = Brillouin Zone

8.3 Dispersions eigen schaften

8.4 Quanten moden: Phononen

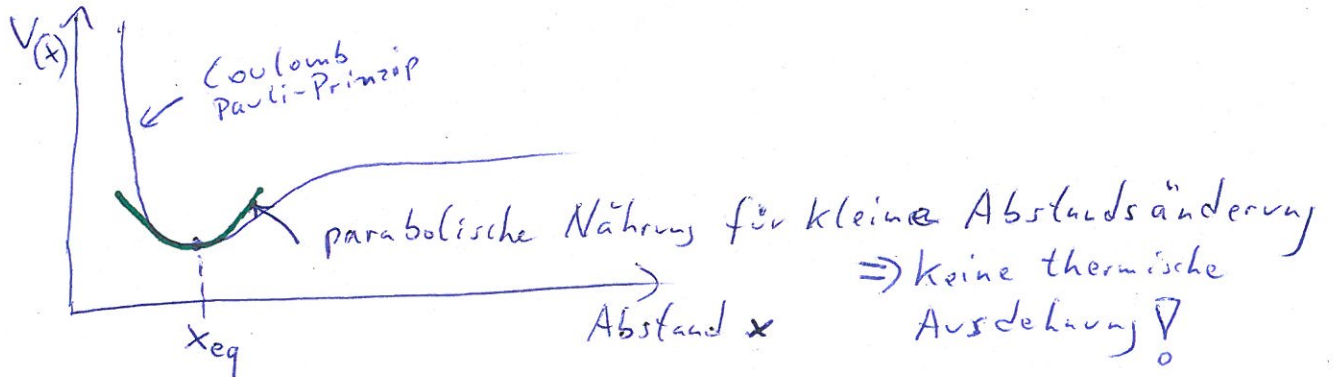
8.5 Kristall-Impuls

- im Kap. 2 hatten wir Boltzmann, Einstein und Debye Modelle
- das folgende Modell wird viele Mängel beheben

8.1 1D monatomische Kette



- Potential zwischen zwei benachbarten Atome

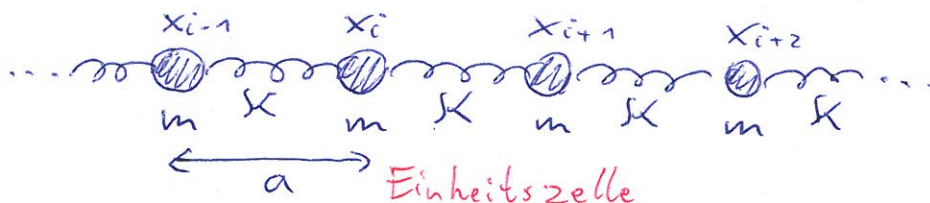


- Taylor Entwicklung

$$V(x) \approx V(x_{eq}) + \frac{K}{2} (x - x_{eq})^2 - \frac{K_3}{3!} (x - x_{eq})^3 + \dots$$

Lineare Term ist Null, da Equilibrium $\frac{\partial V}{\partial x} = 0$ bei x_{eq}

- harmonische Näherung: nehmen nur quadratischen Term
 $\Rightarrow$ Kette mit Federn und Massen



Gleichgewichtspositionen: $x_n^{eq} = na \quad n \in \mathbb{Z}$

Gitterkonstante: a

Auslenkung: $\delta x_n = x_n - x_n^{eq}$

Gesamte potentielle Energie

$$V_{\text{total}} = \sum_i V(x_{i+1} - x_i) \stackrel{\text{harmonische Näherung}}{=} \sum_i \frac{K}{2} (x_{i+1} - x_i - a)^2 \\ = \sum_i \frac{K}{2} (\delta x_{i+1} - \delta x_i)^2$$

Kraft auf die n -te Masse

$$F_n = - \frac{\partial V_{\text{total}}}{\partial x_n} = K (\delta x_{n+1} - \delta x_n) + K (\delta x_{n-1} - \delta x_n) \quad \text{vertauscht, da minus}$$

Newton'sche Bewegungsgleichung

$$m \delta \ddot{x}_n = F_n = K (\delta x_{n+1} + \delta x_{n-1} - 2 \delta x_n) \quad (8.1)$$

Ansatz: Welle mit Normalschwingung (normal mode)

$$\delta x_n = A e^{i\omega t - i k x_n^{\text{eq}}} = A e^{i\omega t - i k n a} \quad (8.2)$$

A : Amplitude

k : Wellenvektor

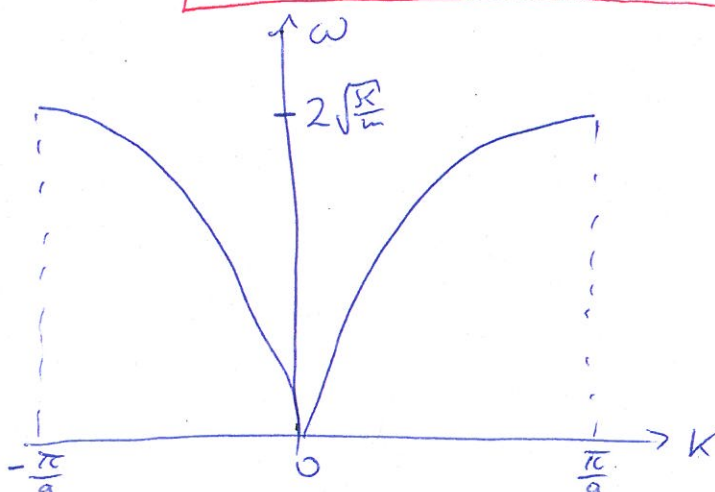
ω : Kreisfrequenz

Wir starten mit komplexen Zahlen, nehmen dann den Realteil der Lösung $\Rightarrow \omega \geq 0$, aber k positiv und negativ

$$-m \omega^2 A e^{i\omega t - i k n a} = K A e^{i\omega t} [e^{-i k n (n+1)} + e^{i k n (n-1)} - 2 e^{-i k n a}]$$

$$\Rightarrow m \omega^2 = 2 K [1 - \cos(ka)] = 4 K \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\omega = 2 \sqrt{\frac{K}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|} \quad (8.3)$$



Dispersionsrelation

periodisch für
 $k \rightarrow k + \frac{2\pi}{a}$

Debye: $\omega = v k$ (linear)

Einstein: $\omega = \omega_E = \text{const.}$

8.2 Reziprokes Gitter - Brillouin Zone

(Gitter: reales oder direktes Gitter, Raunggitter, Kristallgitter)

Prinzip: Für ein reales periodisches Gitter mit Periodizität a in realem Raum gibt es ein reziprokes Gitter mit Periodizität $\frac{2\pi}{a}$ im reziproken Raum (k -Raum)

$\Rightarrow$ für $x \rightarrow x+a$ periodisch $\Rightarrow k = k + \frac{2\pi}{a}$ periodisch

Def: Die Einheitszelle im reziproken Raum heißt Brillouin Zone (BZ)

- die erste Brillouin Zone ist um $k=0$ zentriert
- die BZ-Grenzen sind bei $k = \pm \frac{\pi}{a}$
- die zweite BZ geht von $|k| = \frac{\pi}{a}$ bis $\frac{2\pi}{a}$

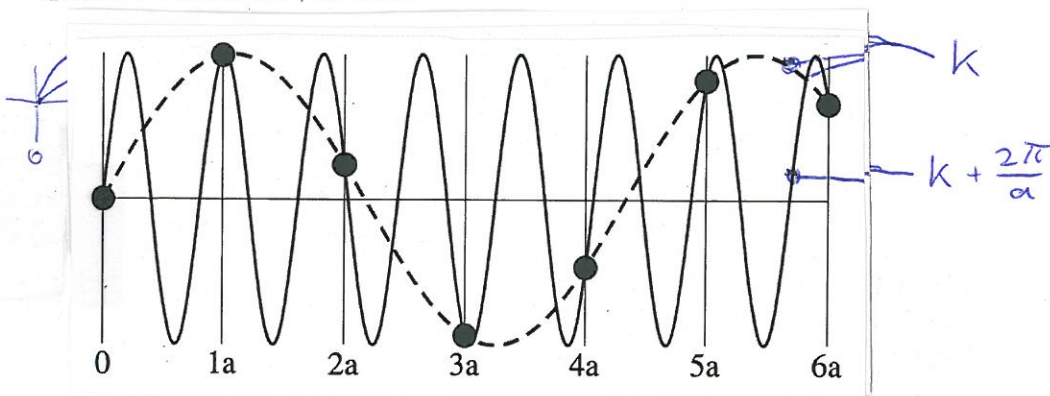
Beweis der Periodizität:

Schwingungsmoden $\delta x_n = A e^{i\omega t - i k n a}$ (8.4)

für $k \rightarrow k + \frac{2\pi}{a}$

$$\delta x_n = A e^{i\omega t - i(k + \frac{2\pi}{a})na} = A e^{i\omega t - i k n a} \cdot \underbrace{e^{i 2\pi n}}_{=1 \text{ für } n \in \mathbb{Z}}$$

Alias - Effekt



für $k \rightarrow k + \frac{2\pi}{a}$ erhalten wir die selbe Schwingung

(kann irreführend sein wenn man mit k die Energie oder Wellenlänge bestimmt: $E = \frac{\hbar k^2}{2m}$, $\lambda = \frac{2\pi}{k}$)

• das Gleiche gilt für $k \rightarrow k + \frac{2\pi m}{a}$ mit $m \in \mathbb{Z}$

Analogie:

reales Gitter: $x_n = na$... $-2a, -a, 0, a, 2a, \dots$

reziproker Gitter: $G_m = \frac{2\pi m}{a}$... $-2(\frac{2\pi}{a}), -\frac{2\pi}{a}, 0, \frac{2\pi}{a}, 2(\frac{2\pi}{a}), \dots$

Def.: Das reziproke Gitter ist definiert durch
alle Punkte G_m mit
$$e^{iG_m x_n} = 1 \quad (8.5)$$

 $m, n \in \mathbb{Z}$

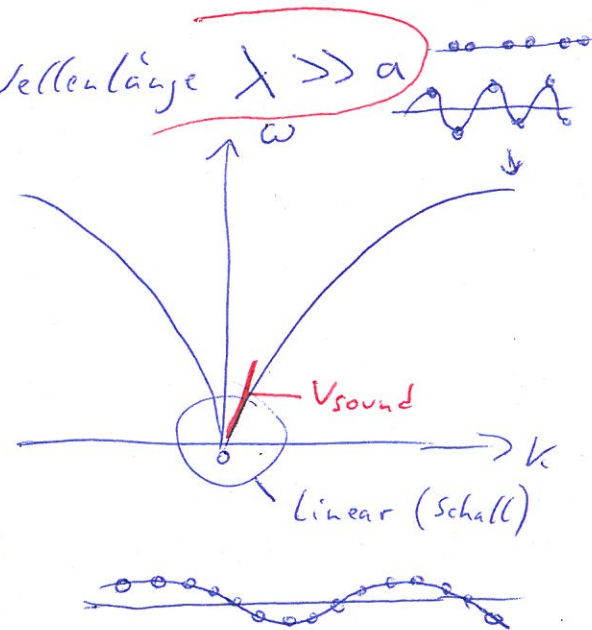
8.3 Dispersions Eigenschaften

Schallwellen: Vibrationswellen mit Wellenlänge $\lambda \gg a$

$$(8.3) \Rightarrow \omega = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

• für $k \ll \frac{\pi}{a} \Rightarrow \omega \approx 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \frac{ka}{2} = v_{\text{sound}} \cdot k$

mit
$$v_{\text{sound}} = a \sqrt{\frac{\kappa}{m}}$$



- Debye-Modell hat $\omega = vk$ für alle k
Um Divergenz der Zustandsdichte zu vermeiden, haben wir uns auf $3N$ Moden beschränkt.

Hier nicht nötig, da $\omega_{\text{max}} = \omega\left(\frac{\pi}{a}\right) = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$

- für große k -Werte definiert man die

Gruppengeschwindigkeit

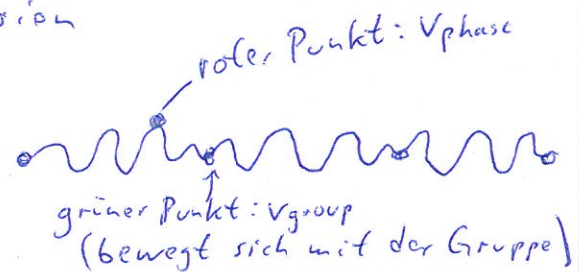
$$v_{\text{group}} = \frac{d\omega}{dk} \quad \left(\text{Geschw. der Hüllkurve eines Wellenpakets} \right)$$

und

Phasengeschwindigkeit

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{k} \quad \left(\text{Geschw. einer konstanten Phase} \right)$$

- $v_{\text{group}} = v_{\text{phase}}$ für lineare Dispersion
- $v_{\text{group}} \rightarrow 0$ am BZ-Rand
- Wikipedia: Gruppengeschwindigkeit



• Wieviele Normalmoden?

- System hat N Massen, periodische Randbedingung: $x_{n+N} = x_n$

- Wellenausatz

$$e^{i\omega t - ikna} \stackrel{!}{=} e^{i\omega t - ik(N+n)a}$$

$$\Rightarrow e^{ikNa} = 1$$

$$\Rightarrow k = \frac{2\pi p}{Na} = \frac{2\pi p}{Na} = \frac{2\pi p}{L} \quad \text{wo } p \in \mathbb{Z}$$

$Na = L$: Länge

$\Rightarrow$ nur diskrete k -Werte

$$\text{möglich mit Abstand } \frac{2\pi}{Na} = \frac{2\pi}{L}$$

• - nur erste $\mathbb{Z}$

$$\text{Gesamtzahl von Moden} = \frac{\text{k-Bereich}}{\text{Abstand zwischen k-Werten}}$$

$$= \frac{2\pi/a}{2\pi/Na} = N \quad (9.6)$$

$\Rightarrow$ Anzahl von Moden = Anzahl von Freiheitsgrade
(siehe Debye)

8.4. Quantenmoden: Phononen

• Quantenkorrespondenz: wenn ein klassisches harmonisches System eine Normalschwingung mit Frequenz ω hat, dann hat das entsprechende Quantensystem Eigenzustände mit Energie

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9.7)$$

- Hier kennen Sie für einen einfachen harmonischen Oszillator. Hier Anwendung für ein kollektiver Mode von N Massen

- Das heißt für jeden k -Wellenvektor gibt es unendlich viele Eigenzustände $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$

$\Rightarrow$ klassische Amplitude

Def: Jedes Vibrationsquanta $\hbar\omega$ ist ein Phonon

- analog der Quantisierung von Licht

- Dualität: Teilchen $\xleftrightarrow{\text{Phonon}}$ quantisierte Welle

II• Phonone sind Bosone, da man ∞ -viele Phonone in eine Normalschwingung unterbringen kann

- für $T > 0$, Boltzmann-Verteilung auf alle E_n -Energie
niveaus

$\Rightarrow$ Bose-Verteilung

$$n_B(\beta\hbar\omega) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$\Rightarrow$ Energieerwartungswert für k -Wert

$$E_k = \hbar\omega(k) \left(n_B(\beta\hbar\omega(k)) + \frac{1}{2} \right)$$

$\Rightarrow$ Gesamtenergie

$$U_{\text{total}} = \sum_k E_k$$

- Summe heißt

$$\sum_k \rightarrow \sum_{\substack{p = -\frac{N}{2} \\ p = \frac{N}{2} \\ k = 2\pi p/Na}}$$

- für sehr große N :

$$\sum_k \rightarrow \frac{Na}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk$$

- Anzahl der Moden:

$$\frac{Na}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk = N \quad (\text{siehe Debye})$$

$$\Rightarrow U_{\text{total}} = \frac{Na}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \hbar\omega(k) \left(n_B(\beta\hbar\omega(k)) + \frac{1}{2} \right)$$

$\Rightarrow$ spez. Wärme $C = \frac{dU_{\text{total}}}{dT}$

• U_{total} ist wie bei Debye, aber Dispersionsrelation anders

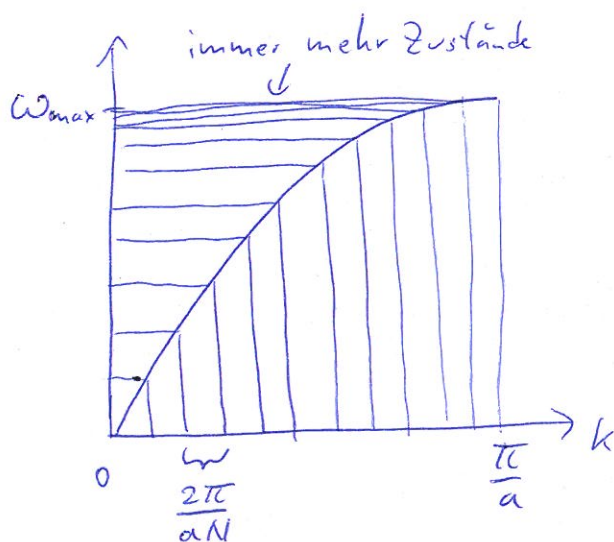
• Einsteinmodell war nur eine Frequenz ω_E

• anstatt Integral über k , Integral über Zustandsdichte

$$\frac{Na}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk = \int_0^{\omega_{\text{max}}} d\omega g(\omega) \quad \omega \geq 0$$

mit $g(\omega) = 2 \frac{Na}{2\pi} \left| \frac{dk}{d\omega} \right|$

↑ für jedes ω gibt es zwei k -Werte



$$\omega = 2 \underbrace{\sqrt{\frac{\kappa}{m}}}_{\omega_{\text{max}}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

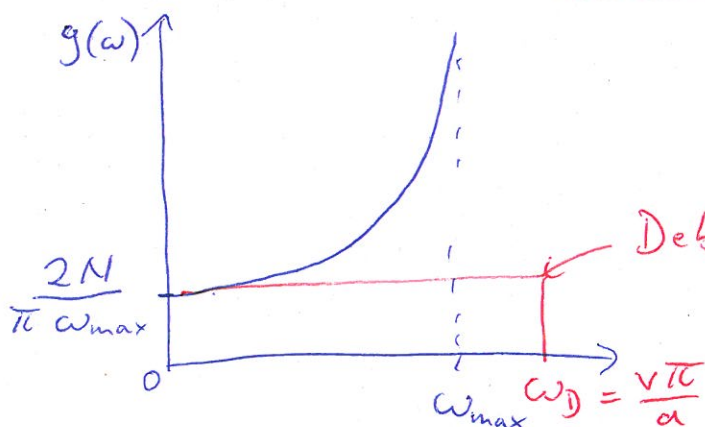
$$\frac{d\omega}{dk} = \omega_{\text{max}} \frac{a}{2} \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

$$= \frac{a}{2} \sqrt{\omega_{\text{max}}^2 - \omega_{\text{max}}^2 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

$$= \frac{a}{2} \sqrt{\omega_{\text{max}}^2 - \omega^2}$$

$$\Rightarrow g(\omega) = 2 \frac{Na}{2\pi} \cdot \frac{1}{\frac{a}{2} \sqrt{\omega_{\text{max}}^2 - \omega^2}}$$

Zustandsdichte hat eine Singularität bei ω_{max} , $\frac{d\omega}{dk} = 0$
 $\Rightarrow$ heißt Van-Hove-Singularität



Einstein Modell:

Zustandsdichte ist Delta-Fkt.

$$\delta(\omega - \omega_E)$$

8.5 Kristall-Impuls

- Phonon ist nur modulo dem reziproken Gitter definiert $k \rightarrow k + G_m$ mit $G_m = \frac{2\pi m}{a}$
- Phononen sind auch Teilchen mit Energie $\hbar\omega$ und Impuls $\hbar k$, aber $\hbar k$ oder $\hbar(k + G_m)$ ist das selbe Phonon

Def: Kristall-Impuls = Impuls mod G_m

oder wir wählen k immer aus der ersten BZ

- nützlich für Phononenstreuung wo immer die Energie und der Kristall-Impuls erhalten sind

z.B. Streuung von 3 Phononen mit $\hbar \frac{2}{3} \frac{\pi}{a}$
zu 3 Phononen mit $-\hbar \frac{2}{3} \frac{\pi}{a}$

Beweis $3 \cdot \frac{2}{3} \frac{\pi}{a} = 3 \cdot \left(-\frac{2}{3}\right) \frac{\pi}{a} \mod \frac{2\pi}{a}$