Festkörperphysik

3rd Exercise Session | Wanda Duss

1

Heute

- Schwingungen: Kontinuum vs. Gitter
- Dispersionsrelation & 1st Brillouin Zone
- 2-Atomisches Gitter: Akustisch & Optischer Ast
- Quantisierung: Phononen
- Quasi-Impuls & Streuung

2

Kontinuierliche Wellen

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$ $c \equiv$ Ausbreitungs-Geschwindigkeit

Eigenmode: Lösung die mit konst. ω oszilliert
s.t. $u_\omega = e^{-i\omega t} f(x)$ mit $f(x) = A e^{\pm ikx}$

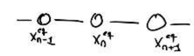
Allgemeine Lösung ist dann eine lineare Kombination

$$U(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} s(\omega)\, U_\omega(x,t)\, d\omega \quad \Rightarrow \text{Fourierzerlegung}$$

Setzen wir Lösungsansatz ein, finden wir:

$$\boxed{\omega = ck}$$

Gitter-Wellen



Durch lineare Koordinatentrafo. zu Normalkoordinaten führt zu entkoppelten Oszillatoren

$$\delta x_n = x_n - x_n^{eq} \Rightarrow \delta \ddot{x}_n = c^2(\delta x_{n+1} + \delta x_{n-1} - 2\delta x_n)$$

Ansatz via Eigenmode für alle Teilchen:

$$\delta x_n = A e^{i\omega t - ikx_n^{eq}} = A e^{i(\omega t - kna)}$$

mit $x_n^{eq} = na$

Setzen wir Lösungsansatz ein, finden wir

$$\boxed{\omega = 2c \left|\sin\left(\tfrac{ka}{2}\right)\right|}$$

vs.

$\Rightarrow$ Quantisiertes Medium führt zu nicht-linearer Dispersionsrelation

3

16) Elastische Wellen in Gittern und in kontinuierlichen Medien

In kontinuierlichen Medien lautet die 1-D Wellengleichung $\frac{\partial^2 \xi(x,t)}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \xi(x,t)}{\partial x^2}$, mit Schallgeschwindigkeit $v = \sqrt{E/\rho}$, Elastizitätsmodul E und Dichte ρ. Für eine lineare Atomkette mit Atomabstand a, Massen m und Federkonstanten C erhielten wir $m\frac{\partial^2 \xi_n}{\partial t^2} = C(\xi_{n+1} + \xi_{n-1} - 2\xi_n)$. Zeigen Sie, dass im Grenzfall für kontinuierliche Medien $\lambda >> a$ diese Bewegungsgleichung in die 1-D Wellengleichung übergeht. Wie gross wird E, ausgedrückt durch C, m und a?

Taylor $\xi(x)$ um x_n

$$\xi(x) = \underbrace{\xi(x_n)}_{=\xi_n} + \frac{\partial \xi}{\partial x}\Big|_{x_n}(x - x_n) + \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}\Big|_{x_n}(x - x_n)^2 \cdot 1/2$$

Evaluate this function at x_{n+1} & x_{n-1}

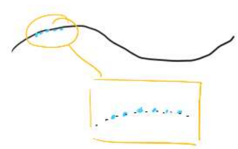
$$\xi_{n+1} \stackrel{\sim}{=} \xi(x_{n+1}) = \xi(x_n) + \xi'\big|_{x_n}\underbrace{(x_{n+1} - x_n)}_{a} + \xi''\big|_{x_n}\underbrace{(x_{n+1} - x_n)}_{a}{}^2 \cdot 1/2$$
$$= \xi_n + \xi'\big|_{x_n} a + \xi''\big|_{x_n} a^2 \cdot 1/2$$

$$\xi_{n-1} \stackrel{\sim}{=} \xi(x_{n-1}) = \xi_n + \xi'\big|_{x_n}(-a) + \xi''\big|_{x_n}(-a)^2 \cdot 1/2$$

Inserting into the above equation, we find terms cancelling

$$\ddot{\xi} = \left(\cancel{\xi_n} - \cancel{a\xi'_{x_n}} + \xi''_{x_n}\tfrac{a^2}{2} + \cancel{\xi_n} + \cancel{a\xi'_{x_n}} + \xi''\tfrac{a^2}{2} - \cancel{2\xi_n}\right)$$

Wenn $\lambda >> a$:



Solange Variation um einen Punkt klein ist, können wir ξ_{n+1} mit Taylor von $\xi(x)\big|_{x_n}$ annähern

We find $m\ddot{\xi} = C \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} a^2$ s.t. $v^2 = \frac{Ca^2}{m}$

Vergleichen mit kont. Medium $v = \sqrt{E/\rho}$

$$\Rightarrow \frac{E}{\rho} = \frac{Ca^2}{m} \qquad / \ \rho = V/m = \frac{a \cdot A}{m}$$

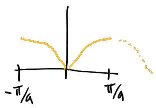
$$\Rightarrow E = \frac{\rho C a^2}{m} = \frac{ACa^3}{m^2}$$

with A the dimension in y & z

4

Dispersionsrelation

Gibt Verhältnis von Frequenz ω und Wavevector k
(Energie) (Impuls)



$$\boxed{\omega = 2c\,|\sin(ka)|}$$ 1-atomige Kette

Endliche Systeme

1ste Brillioun-Zone

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$

ω wiederholt sich nach $k = \pi/a$

$\Rightarrow$ λ kann nicht kürzer als Atomabstand sein
↳ tatsächlich nur 2a wegen Nyquist-Frequenz

"Aliasing" → kürzere Wellen sehen gleich aus wie ihre längeren Schwestern

Jedes $k > \pi/a$ kann mit $\vec{G}$ in 1ste BZ zurück gefaltet werden

$\Rightarrow$ $\boxed{k \text{ kann maximal } \pi/a \text{ sein !}}$

k-Raum beschränkt auf $\pm \pi/a$
+
Anzahl k beschränkt

Wie verteilen sich k-States im Raum ?

⇓

Density of States

Anzahl Eigenmoden

Ist beschränkt ! I.e. es gibt nur endlich viele ω-Zustände
↳ ω ist quantisiert

Weil Anzahl Atome N endlich ist, gibt es nur N Eigenmoden
↳ $\boxed{\text{Anzahl } \omega/k \text{ ist beschränkt}}$

Zustandsdichte

Anzahl ω-Zustände pro $\Delta\omega$

$$\rho(\omega) = \frac{dN}{d\omega}$$

Würden annehmen, das diese gleichverteilt sind, aber Nein

Note

Weil ω mit k zusammenhängt können wir die beiden austauschen

$E = \hbar\omega$

Note

Wird oft auch als Anzahl Energie-Zustände pro ΔE ausgedrückt

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE}$$

↓

1-Atomige Kette

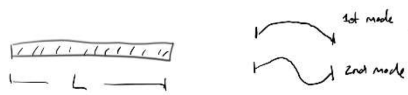
$$\rho(k) = \frac{2N}{\pi\,(\omega_{max}^2 - \omega^2)^{1/2}}$$

20) Zustandsdichte für kontinuierliche Medien

Wie sieht die Zustandsdichte für Eigenschwingungen in einem linearen kontinuierlichen Medium (z.B. langer homogener Stab) der Länge L aus, wenn die Schallgeschwindigkeit konstant ist? Bestimmen Sie dazu zunächst die möglichen k-Werte und überlegen Sie sich, was in einem realen Material k bzw. die Schwingungsfrequenz ω nach oben begrenzt.

Vergleichen Sie das Resultat grafisch mit der Zustandsdichte für eine einatomige Kette aus der Vorlesung.

Eigenschwingungen eines kontinuierlichen, endlichen Mediums sind stehende Wellen



$\rightarrow \boxed{\lambda_1 = 2L}$

$\rightarrow \lambda_2 = \frac{2L}{2}$

Benutzen $k_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1} = \frac{\pi}{L}$ s.t. $k_n = n\frac{\pi}{L}$

$\Rightarrow$ Haben Quantisierung k gefunden.
Auf welchen Raum ist k beschränkt?

Hier mischen wir Argument mit mikroskop. Überlegungen

$\hookrightarrow$ maximal kann jedes Atom schwingen s.t. $k_{max} = N\pi/L$

Note $L = Na$ s.t. $k_{max} = \frac{\pi}{a}$

$\Delta k = k_{n+1} - k_n = (n+1)\frac{\pi}{L} - n\frac{\pi}{L} = \frac{\pi}{L}$ Abstand zw. zwei Zuständen

$\hookrightarrow \rho(k) = \frac{dN(k)}{dk} \triangleq \frac{1}{\Delta k} = \frac{L}{\pi}$

Wollen dies in ω ausdrücken $\Rightarrow$ Dispersion für kont. Medium

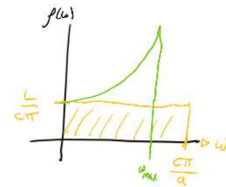
$\omega(k) = ck$ mit $c \equiv$ Fortpflanzungsgeschw.

$\Rightarrow \Delta\omega = c(k_{n+1} - k_n) = c\pi/L$

$\rho(\omega) = \frac{1}{\Delta\omega} = \frac{L}{c\pi}$

vs.

$\rho(\omega) = \frac{2N}{\pi\left[\omega_{max} - \omega\right]^{1/2}}$

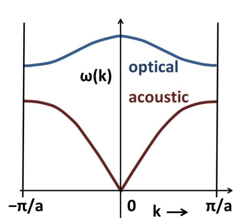


7

2-atomige Kette

Dispersionsrelation wird komplexer

$$\omega_{\pm}^2 = K\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \pm K\sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)^2 - \frac{4\sin^2\frac{ka}{2}}{m_1 m_2}},$$



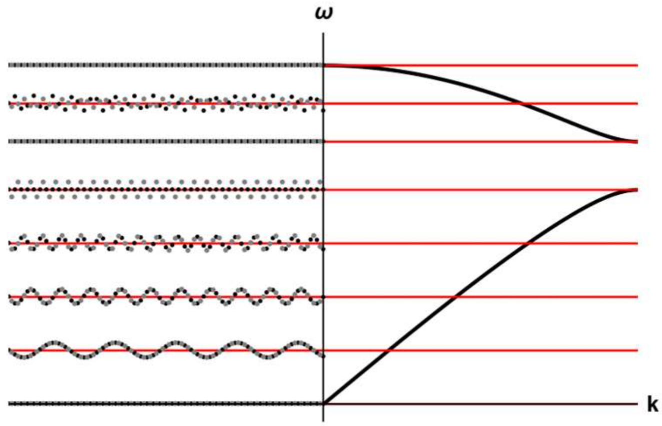
$\rightarrow$

Gruppengeschwindigkeit

Die Geschwindigkeit eines Wellenpaket im Raum.

$$\boxed{v_g = \frac{d\omega}{dk}}$$

8



Optischer Zweig

1) $\lim_{k\to 0} V_g(k) = 0$

2) Benachbarte Atome bewegen sich gegeneinander

3) Werden von Photonen angeregt

Akustischer Zweig

1) $\lim_{k\to 0} V_G(k) = C$

2) Benachbarte Atome bewegen sich miteinander

3) Sieht aus wie akustische Welle Angeregt durch Neutronen

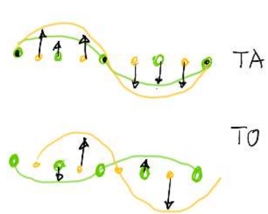
9

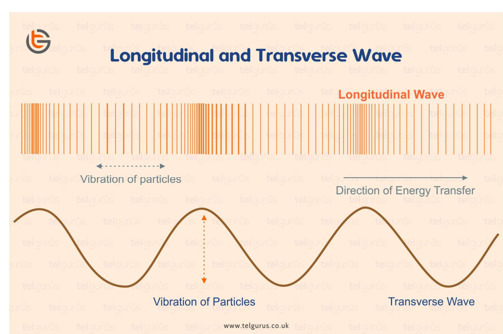
19) Akustische und optische Schwingungen in 2D

Skizzieren Sie longitudinal akustische und optische (LA und LO) bzw. transversal akustische und optische (TA und TO) Schwingungen für eine 2-dimensionale NaCl-Struktur der Gitterkonstanten a. Der Wellenvektor mit $\lambda = 4a$ sei in der [1 0] Richtung.

2-dim NaCl :

Wellenlänge $\lambda = 4a \Rightarrow$





10

Bisher:

Für klassische Kette von Atomen gilt,

- Eigenmoden sind diskret und ihre Anzahl beschränkt
- Dispersionsrelation $\omega(k)$ ist Periodisch
- Maximales $k = \pm \pi/a$

Phononen

Die Eigenmoden des klassischen Systems sind die Eigenzustände des quanten Systems

Phonon: Ein Quantum Vibration

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

Wobei ω eine Eigenfrequenz d. klassischen System ist

Quasi-Momentum

Phonen haben maximales Momentum weil $k_{max} = \pm \pi/a$

$$\hbar k = \hbar(k + G)$$

Bei Streuung muss das Quasi-k erhalten bleiben, nicht k selber !

Bosonen

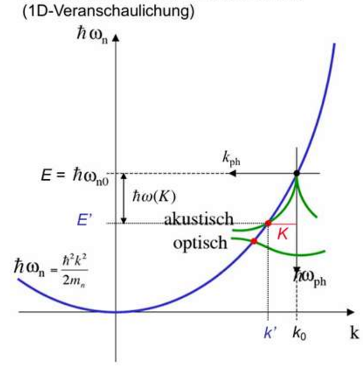
In jedem ω-Zustand können mehrere Phononen sein

11

22) Inelastische Streuung von Licht an Phononen

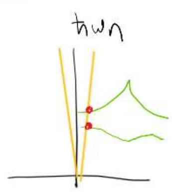
In der Vorlesung wurde ein Energie-Impulsschema gezeigt, bei dem die inelastische Streuung von Neutronen an Phononen veranschaulicht wurde. Zeichnen Sie ein analoges, qualitativ korrektes Schema für die inelastische Streuung von *Licht* an Phononen. Achten Sie dabei auf ein physikalisch sinnvolles Verhältnis von Phononenfrequenzen/-impulsen zu den zugehörigen Lichtfrequenzen/-impulsen. Welche Bedingung muss ein Festkörper erfüllen, damit dessen Phononen besonders effizient Licht absorbieren, und für welche Lichtwellenlängen geschieht dies typischerweise?

Phononen-Erzeugung durch Neutronen (1D-Veranschaulichung)



Inelastisch: $(k_\gamma - k'_\gamma) = k_{ph} + G$

$$|E_\gamma - E'_\gamma| = \hbar\omega(k_{ph})$$

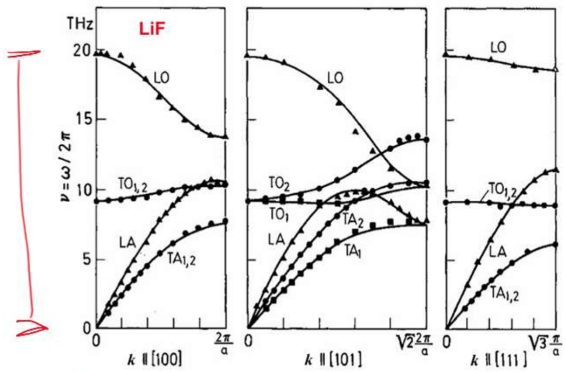


Einzige Möglichkeit, damit $\Delta\omega_{ph} \sim \Delta E$ genug gross ist, ist wenn wir von Ak. zu OP streuen.

$\omega = ck \qquad c = 3 \times 10^8 \, m/s$

12

2-atomige Basis



20 THz ist maximales $f = 2 \times 10^{11}$ Hz ~ $\underline{\underline{\text{IR}}}$

13