

## 12) Kurzwelliger Grenzfall $q \rightarrow \pm \frac{\pi}{a}$

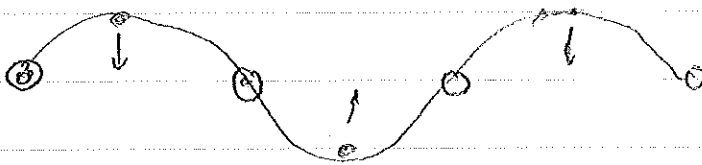
3-7

$$\omega_0^2 = \frac{2C}{M_1} \rightarrow v/u = 0$$

$$\omega_a^2 = \frac{2C}{M_2} \rightarrow u/v = 0$$

1. Phasen- und Gruppengeschw. ist null  $\rightarrow$  Es existieren keine Schwingungen mit dieser Frequenz
2. Entweder linksgrößer der schweren od. der leichten Atome in Ruhe

3. Dipolmoment im opt. Zweig vorhanden, da sich Atome benachbarter Elementarzellen gegenphasig bewegen.



## c) 3 dim Kristall

Ergebnis der linearen Kette läßt sich weitestgehend auf 3-dim Kristallstrukturen übertragen:

- In allen Fällen findet man 3 akustische Zweige (1x longitudinal + 2x transversale Schwingungsmoden) die für bestimmte Ausbreitungsrichtungen entartet sein können (isotrope Medien: 2 transversale akustische Zweige fallen zusammen, auch bei  $(1,00)$  Polzug)
- Enthält primitive Elementarzelle nur als 1 Atom so treten zu den akustischen Zweigen auch noch optische Zweige auf:  $(3p-3)$ -Zweige

Fig: 3,5

$p = \text{Zahl Atom / EZ}$

## d.) Quantisierung der Gitterschwingungen: Phononen

Die Energie der Gitterschwingungen ist gequantelt.

Für eine Schwingungsmode  $(\omega_q, q)$ :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_q$$

Das Energiequant  $\hbar \omega$  nennt man in Analogie zum Photon des e.m. Feldes: Phonon

Wenn eine Schwingungsmode bis zur QZ  $n$  angeregt ist, so ist sie mit  $n$  Phononen besetzt.

Schwingungszustand entspricht nicht der Schwingung eines einzelnen Atoms sondern einer Schwingung des ganzen Kristalls: Ein Phonon entspricht der Auslenkung des gesamten Kristalls - jedes Atom trägt bei.

Der Term  $\frac{1}{2} \hbar \omega_q$  ist die Nullpunkt-Schwingung der Mode.

## e.) Streuung an dynamischen Gittern

Bisher wurde die Streuung an Kristallgittern nur für den elast. Fall  $|\vec{k}_0| = |\vec{k}|$  diskutiert:  $\vec{k} = \vec{k}_0 + \vec{G}$

Die Streuung von Röntgenstrahl bzw. Neutronen kann aber auch inelastisch geschehen, wobei dann Gitterschwingungen (Phononen)  $(q, \omega)$  angeregt oder vernichtet werden.

Für die Energie/Impulsbeziehung dieses Prozesses gilt dann:

$$\begin{array}{l} \hbar \omega = \hbar \omega_0 \pm \hbar \omega_q \\ \hbar \vec{k} = \hbar \vec{k}_0 \pm \hbar \vec{q} + \hbar \vec{G} \end{array} \left. \begin{array}{l} \text{"-"} = \text{Erzeugung v. Phonon} \\ \text{"+"} = \text{Vernichtung von Phonon} \\ \vec{G} = \text{beliebiger Gittervektor} \end{array} \right\}$$

Fig 3.6

Beim Streuprozess wird also ein Phonon erzeugt/vernichtet wobei gleichzeitig eine Bragg-Reflexion erfolgt.

Impuls  $\hbar \vec{G}$  wird an Kristall als ganzes übertragen.  
Die Größe  $\hbar \vec{q}$  bezeichnet man als Quasi-Impuls.

Im Gegensatz zu Photonen tragen Phononen keinen echten Impuls. <sup>(\*)</sup> Den Impulsübertrag bei der Streuung übernimmt der FK als ganzes. Phononen sind deshalb auch keine fundamentalen Teilchen sondern Quasi-Teilchen.

Bem.: Da der Impuls des Phonons exakt Null ist, ist mit den Gitterbewegungen auch kein Massetransport verbunden.

Die obigen Dispersionskurven werden mittels inelastischer Neutronenstreuung (Streuung vor allem an Atomkernen) bestimmt. Messwerte:  $\vec{k}_0$ ,  $\omega$ ,  $\vec{k}$

→ mit obigen Energie/Impuls BL folgt:  $\omega_{\vec{q}}$ ,  $\vec{q}$  und damit  $\omega_{\vec{q}}(\vec{q})$ . (Muss hier an beschriebene Reflexion durchgeführt).

Neutronen sind deshalb besonders gut geeignet, da ihre  $E_{kin} = 0,1 \dots 1 \text{ eV}$  und der typ. Energieübertrag ebenfalls in dieser Größenordnung liegt.

(\*) tiefere Ursache liegt darin, dass die Gitterbewegungen mit der Relativkoordinate der Atome verbunden ist  

$$\rho = M \frac{d}{dt} (\sum u_s) \approx \dots \approx M \frac{du}{dt} \cdot \sum e^{i s q a} = 0$$

S. Kittel  
Kap 4

### 3.2 Spezifische Wärme / Wärmekapazität

mit  
Gitteranteil

Spezifische Wärme ist wichtige thermodynam. Größe die in dielektrischem FK durch die therm. angeregten Phononen bestimmt wird: Korrekte Beschreibung ist ein Test der Theorie der Gitterschwingungen.

Bem.: In Metallen spielen Elektronen ausschließliche Rolle.

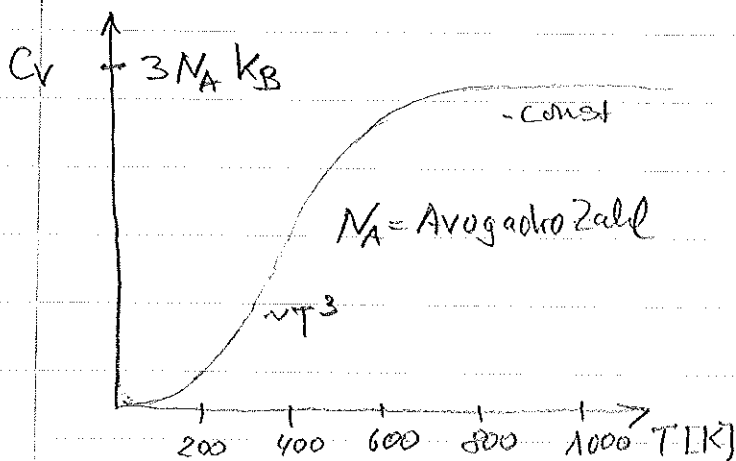
Aus exp. Gründen wird für FK  $C_p =$  Wärmekap. bei konst. Druck gemessen. Thermodynam. Beschreibung aber am einfachsten für  $C_v =$  Wärmekap. bei konst. Volumen:

$$C_v = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V = \text{const}} \quad U = \text{innere Energi}$$

$$T = \text{Temp.}$$

Es gilt aber  $C_p - C_v = \beta^2 \cdot VT / \kappa$   
 $\beta =$  thermischer Ausdehnungskoeff.  
 $\kappa =$  Kompressibilität

Typ Verlauf von  $C_v$  (s. Fig. 3.7.1):



Für große Temp.  $T$ :

Dulong-Petit'sches Gesetz

Gitteranteil von  $C_v =$

Energie der  $N_A$  Schw. Atome =

$N_A$  Oszillatoren  $\times$

3 Schwingungsmoden  $\times$

2 Schwingungsfreiheitsgrade  $\times$

$\frac{1}{2} k_B T = 3 N_A k_B T$

Bei tiefen Temp. muß die Quantisierung der Schwingungen berücksichtigt werden.

(a) Bose-Einstein Statistik für Phononen:

Die innere Energi des Gitters:  $U = \sum_q \sum_\lambda \langle n_{q,\lambda} \rangle \hbar \omega_{q,\lambda}$

$q$  = Schwingungsmodus mit Wellenvektor  $\vec{q}$

$\lambda$  = Polarisation ( $\ell, 2t$ )

BE-Statistik bestimmt die mittlere Besetzungszahl  $\langle n_{q,\lambda} \rangle$  eines Schwingungszustandes  $(\omega, q)$ :

$$\langle n_q \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \quad \left. \begin{array}{l} \text{abh. von} \\ \text{Polarisationsgrad.} \end{array} \right\}$$

Die obige Summe über die Schwingungsmoden kann bei großen Kristallen (Schwingungszustände liegen sehr dicht) durch ein Integral über die Schwingungsfrequenz unter Berücksichtigung der Zustandsdichte  $D(\omega)$  ersetzt werden:

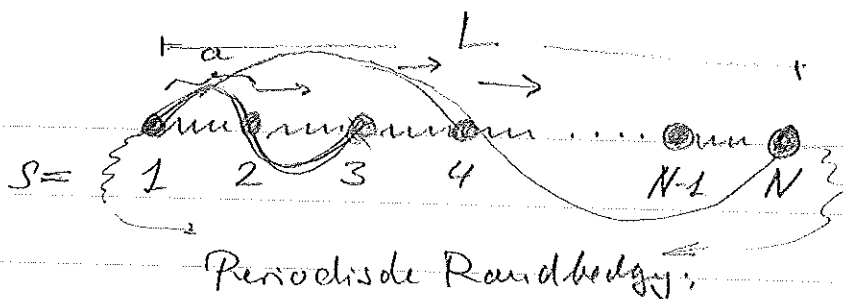
$$U = \sum_\lambda \int d\omega D_\lambda(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad \text{mit } \tau = k_B T$$

$$\text{bzw. } \langle U \rangle_{\text{Gitter}} = k_B \sum_\lambda \int d\omega D_\lambda(\omega) \frac{x^2 \exp(-x)}{(\exp x - 1)^2} \quad \text{mit } x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

(b) Phononische Zustandsdichte

Um die Zahl der möglichen Schwingungszustände im Kristall zu bestimmen betrachtet man ein endliches Vol. mit Kantenlänge  $L$ .

- Lineare Kette mit periodischen Randbedingungen (Gesamtl.  $N$  Atome)  
(man kann die Zustandsdichte ganz analog auch für Kette mit festen Randbedingungen herleiten)



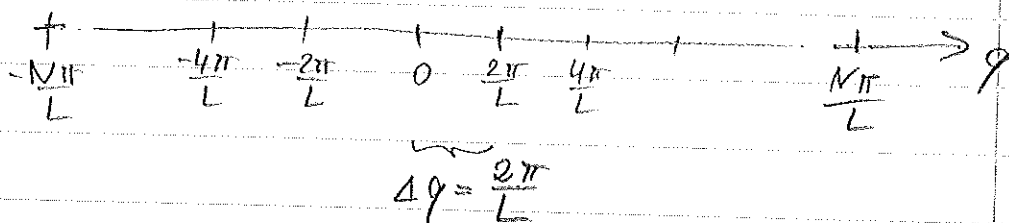
$$u_s = u_{s+N}$$

Symbol  
schliefst  
Kette wieder  
an 1 an.

Als mögliche Schwingungslsg. findet man eine laufende Welle

$$\text{mit } u_s = u_0 \exp(i(s \cdot qa - \omega t))$$

$$\text{und mit } q = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm \frac{N\pi}{L}$$



$$\text{Zustandsdichte } G(q) = \begin{cases} \frac{L}{2\pi} & \text{für } -\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a} \\ 0 & \text{für } |q| > \frac{\pi}{a} \end{cases}$$

= # Zustände /  $\Delta q = 1$

— Zustandsdichte im 3-Dimensionalen

analog findet man  $q_x, q_y, q_z = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm \frac{N\pi}{L}$

Gesamtzahl der Zustände mit Wellenvektoren kleiner  $q = q_{\max}$  ist gegeben durch Kugelvolumen im  $q$ -Raum  $\times G(q)$ :

$$N = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \left(\frac{4}{3}\pi q^3\right) \quad (*)$$

Dies gilt für jede Polarisationsrichtung  $\lambda$  der Schwingung.

Für die Zustandsdichte  $D_\lambda(\omega)$  im Frequenzraum

$$D_\lambda(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = \frac{dN}{dq} \cdot \left(\frac{dq}{d\omega}\right) = \frac{V q^2}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{dq}{d\omega}\right)$$

mit  $V = L^3$   $= 1/v_g = 1/v_s$