

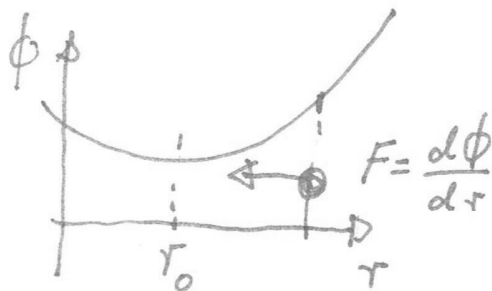
4. Gitterschwingungen

Hier: adiabatische Näherung
(Born - Oppenheimer)

Elektronen sind vielschneller, als
Atome $\rightarrow$ Elektronen immer im
Gleichgewicht

keine Wechselwirkung von elektron.
Zuständen mit der Atombewegung

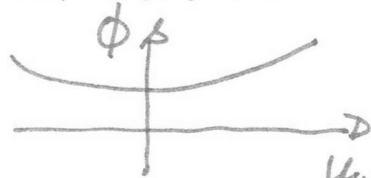
In diesem Fall kann die Wechselwirkung d.
Atome untereinander durch ein Potential be-
schrieben werden.



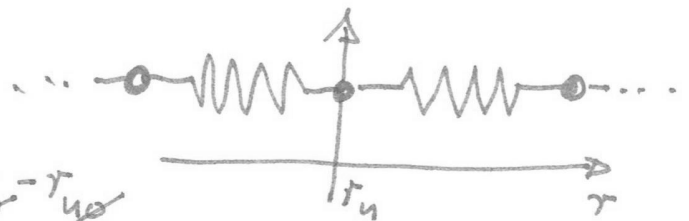
Gesamtpotential muß
nur nahe d. Gleichgewichts
bekannt sein.

4.1 Entwicklung in Taylor-Reihe, Bewegungsglg.

1-dimensional

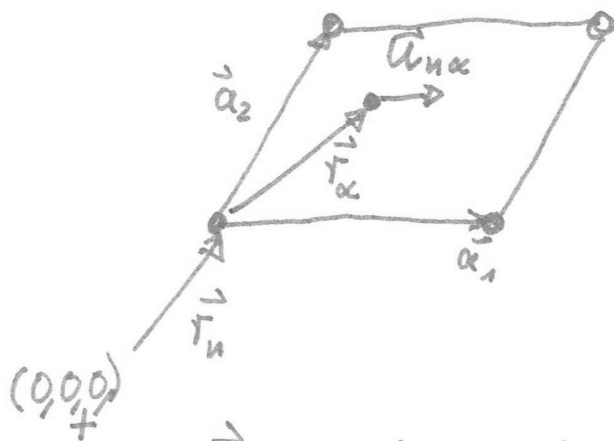


$$u_n = r - r_n$$



$$\begin{aligned} \phi(r_n + u_n) &= \phi(r_n) + \underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial r_n}}_{=0} u_n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_n^2} u_n^2 + \dots \\ &= 0 \end{aligned}$$

3-dimensional



Position d. n-ten Zelle: $\vec{r}_n$ 4.2

Position eines Atoms: $\vec{r}_\alpha$
in d. n-ten Zelle

Auslenkung dieses Atoms (α): $\vec{u}_{n\alpha}$

$$\vec{r}_n = u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 + u_3 \vec{a}_3$$

$$\vec{r}_{n\alpha} = \vec{r}_n + \vec{r}_\alpha$$

Potential $\phi(\vec{r}_{n\alpha} + \vec{u}_{n\alpha})$ hängt vom Ort ab.

Koordinaten Schreibweise $\phi(r_{n\alpha i} + u_{n\alpha i})$

Taylor-Reihe:

$$\phi(r_{n\alpha i} + u_{n\alpha i}) = \phi(r_{n\alpha i}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n\alpha i \\ m\beta j}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n\alpha i} \partial r_{m\beta j}} u_{n\alpha i} u_{m\beta j}$$

Summation über Elementarzellen m, n

" " Atome in d. EZ α, β

" " 3 Raumricht. i, j

harmonische Effekte: keine höheren Ordnungen als angegeben.

anharmonische " : z.B. zusätzl. 3. Ableitung d. Taylor-Reihe

→ therm. Ausdehnung

im folgenden nur harmon. Effekte.

4.3

Translationsinvarianz: $\frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n\alpha i} \partial r_{m\beta j}} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{0\alpha i} \partial r_{m-n\beta j}}$

Bewegungsgleichung:

$$\left[M_{\alpha} \ddot{u}_{n\kappa i} + \sum_{m\beta j} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n\kappa i} \partial r_{m\beta j}} u_{m\beta j} = 0 \right] \quad (4.1)$$

$\alpha = 1 \dots r; i = 1 \dots 3; n = 1 \dots N$

+ Atome in jeweils $N \in \mathbb{Z}$: $3rN$ gekoppelte Diff.-gleichungen

Ausatz:

$$\left[u_{n\kappa i} = \frac{1}{\sqrt{M_{\alpha}}} u_{\alpha i}(\vec{q}) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r}_n - \omega t)} \right] \quad (4.2)$$

ähnlich wie ebene Welle, aber nur am Gitterpunkt definiert.

Einsetzen:

$$-\omega^2 u_{\alpha i}(\vec{q}) + \underbrace{\sum_{\beta j} \sum_m \frac{1}{\sqrt{M_{\alpha} M_{\beta}}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n\kappa i} \partial r_{m\beta j}} e^{i(\vec{r}_m - \vec{r}_n) \cdot \vec{q}}}_{=: D_{\alpha i \beta j}(\vec{q})} u_{\beta j}(\vec{q}) = 0$$

unabh. von n

$$\Rightarrow -\omega^2 u_{\alpha i}(\vec{q}) + \sum_{\beta j} D_{\alpha i \beta j}(\vec{q}) u_{\beta j}(\vec{q}) = 0 \quad (4.3)$$

jetzt nur noch $3r$ Gleichungen

Nehme an, dass $r=1$ (prim. Gitter)

4.4

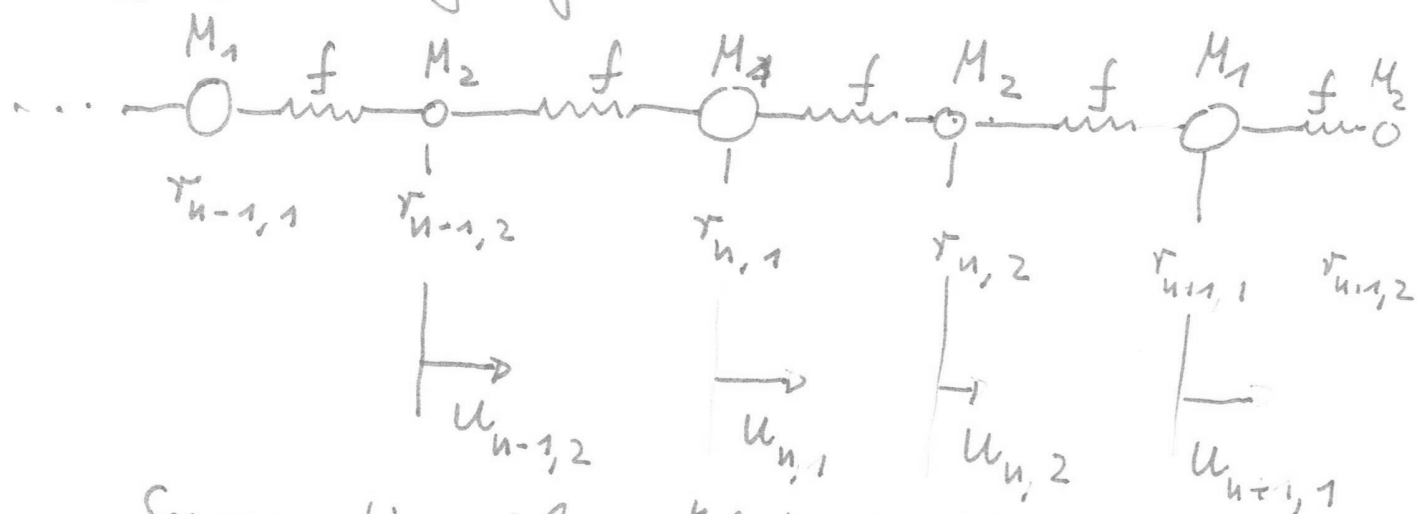
$$-\omega^2 u_i(\vec{q}) + \sum_j D_{ij}(\vec{q}) u_j = 0 \quad (4.4)$$

Nicht-triviale ($u_i \neq 0$) Lösung nur für:

$$\text{Det} \{ D_{\alpha\beta j}(\vec{q}) - \omega^2 \mathbb{1} \} = 0 \quad (4.5)$$

$\rightarrow$ 3r Dispersionsrelationen $\omega(\vec{q})$

4.2. Mehratomige Gitter



Summation über nächste Nachbarn $m=n+1, n, n-1$

$$(4.1) \quad M_1 \ddot{u}_{n,1} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,1} \partial r_{n-1,2}} u_{n-1,2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,1} \partial r_{n,1}} u_{n,1} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,1} \partial r_{n,2}} u_{n,2} = 0$$

$$M_2 \ddot{u}_{n,2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,2} \partial r_{n,1}} u_{n,1} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,2} \partial r_{n,2}} u_{n,2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,2} \partial r_{n+1,1}} u_{n+1,1} = 0$$

Gleiche Federn:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,1} \partial r_{n-1,2}} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,1} \partial r_{n,2}} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,2} \partial r_{n,1}} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n,2} \partial r_{n+1,1}} = f$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n1} \partial r_{n1}} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{n2} \partial r_{n2}} = + 2f$$

$$M_1 \ddot{u}_{n1} + f \cdot (2u_{n1} - u_{n2} - u_{n-1,2}) = 0$$

$$M_2 \ddot{u}_{n2} + f \cdot (2u_{n2} - u_{n1} - u_{n+1,1}) = 0$$

Ausatz: ebene Welle (4.2)

$$u_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} u_\alpha(q) e^{i(qa n - \omega t)}$$

$$(4.5) \quad \left(\frac{2f}{M_1} - \omega^2 \right) u_1 - f \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{-iqa}) u_2 = 0$$

$$-f \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{+iqa}) u_1 + \left(\frac{2f}{M_2} - \omega^2 \right) u_2 = 0$$

Dynamische Matrix $D_{\alpha\beta j}(q) =$

$$\begin{pmatrix} \frac{2f}{M_1} & -\frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{-iqa}) \\ -\frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{+iqa}) & \frac{2f}{M_2} \end{pmatrix}$$

$$\text{Det} \{ D_{\alpha\beta j}(q) - \omega^2 \mathbb{1} \} = 0 \rightarrow$$

$$\omega^2 - f \cdot \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{qa}{2} \right]^{1/2} \cdot f$$

$$\omega(q) = \omega(q + z \cdot \frac{2\pi}{a}) \quad z \in \mathbb{Z}$$

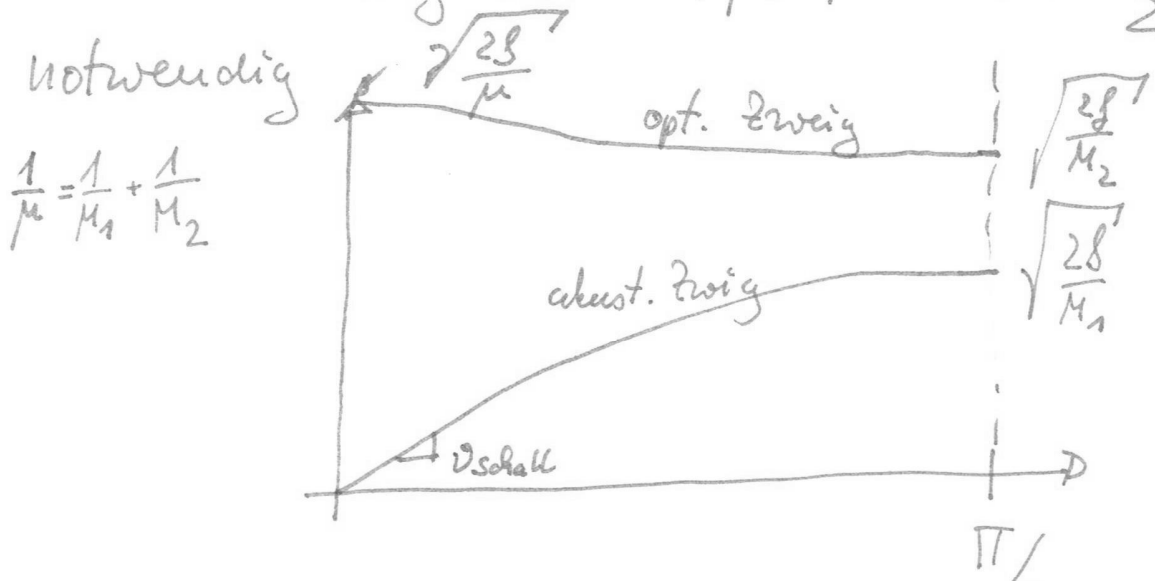
Allgem. kann man zeigen, daß

$$D_{\alpha\beta_j}(\vec{q}) = D_{\alpha\beta_j}(\vec{q} + \vec{G}_2) \quad (\vec{G}_2 \vec{r}_n = 2\pi m)$$

$$\hookrightarrow \omega(\vec{q}) = \omega(\vec{q} + \vec{G}_2)$$

Aus Zeitumkehr - Invarianz: $\omega(-\vec{q}) = \omega(+\vec{q})$

Nur Darstellung von $\omega(\vec{q})$ für $0 \leq q \leq \frac{G}{2}$



$$q \rightarrow 0: \omega_{\text{akust.}} = \sqrt{\frac{g}{2M_1 + M_2}} \cdot a \cdot q \Rightarrow v_{\text{schall}} = \sqrt{\frac{2g}{2M_1 + M_2}} \cdot a$$

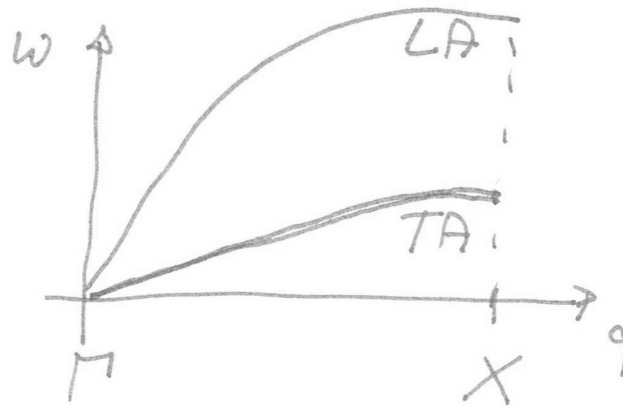
$$q \rightarrow 0: \omega_{\text{opt}} = \sqrt{\frac{2g}{\mu}} \quad \text{d.h. } \omega_{\text{opt}} \text{ unabh. v. } q$$

$$q \rightarrow \frac{\pi}{2}: \begin{array}{ll} M_2 \text{ in Ruhe} & M_1 \text{ schwingt} \\ M_1 \text{ "} & M_2 \text{ "} \end{array}$$

$$\Gamma : \vec{q} = 0$$

$$X : \vec{q} = \frac{1}{2} \vec{G}_{100}$$

(3D)



LA longitudinal
akustisch.

TA transversal
akustisch.

4.3 Streuung an zeitl. veränderlichen Streukörpern 4.8

s. Kap. 3.1 $A_B \propto e^{-i\omega_0 t} \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} d^3r$



mit $\rho(\vec{r}, t) = \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t))$ (punktförm. Streuer)

$$A_B \propto e^{+i\omega_0 t} \sum_n e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_n(t)} = e^{+i\omega_0 t} \sum_n e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_n(t=0)} \cdot e^{-i\vec{k} \cdot \vec{u}_n(t)}$$

$$\vec{k} \cdot \vec{u}_n(t) \ll 1: \approx e^{+i\omega_0 t} \sum_n e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_n} [1 - i\vec{k} \cdot \vec{u}_n(t)]$$

$$= \sum_n e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r}_n - \omega_0 t)} - \underbrace{\sum_n i\vec{k} \cdot \vec{u}_n \frac{1}{\sqrt{M}} e^{\pm i(\vec{q} \cdot \vec{r}_n - \omega_q t)} \cdot e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r}_n - \omega_0 t)}}_{A_{\text{inelast}}}$$

$$A_{\text{inelast}} \propto \sum_n e^{-i(\vec{k} \mp \vec{q}) \cdot \vec{r}_n} i\vec{k} \cdot \vec{u}_n \frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i(\omega_0 \pm \omega_q)t}$$

entspricht gestreuter Welle mit

Frequenz $\omega = \omega_0 \pm \omega_q$

Impuls/h $\vec{k} \mp \vec{q} = \vec{Q}; \quad \vec{k} = \vec{k} - \vec{k}_0$

Quantenmech. Energie- und Impulserhaltung 4.9

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 \pm \hbar\omega_q$$

$$\hbar\vec{k} - \hbar\vec{k}_0 = \hbar\vec{q} = \hbar\vec{G}$$

Fasse Gitterschwingungen als 'Teilchen' auf
Phononen

Quasi-Impuls nur bis auf $\vec{G}$ definiert.

Intensitäten d. Reflexe

$$\begin{aligned} A_B &\propto e^{i\omega_0 t} \sum_n e^{-i\vec{k}\vec{r}_n} e^{-i\vec{k}\vec{u}_n(t)} = \\ &= e^{i\omega_0 t} \sum_n e^{-i\vec{G}\vec{r}_n} \left(1 - i\vec{G}\vec{u}_n(t) - \frac{1}{2}(\vec{G}\vec{u}_n)^2 \right) \end{aligned}$$

Bilde therm. Mittelwert $\langle \vec{G}\vec{u}_n \rangle_T$ für unabh. Schwing.
Atome (für $T \geq 300\text{K}$) gute Näherung)

$$\begin{aligned} A_B &\propto \sum_n e^{-i\vec{G}\vec{r}_n} \left(1 - i\langle \vec{G}\vec{u}_n \rangle_T - \frac{1}{2} \langle (\vec{G}\vec{u}_n)^2 \rangle_T \right) = \\ &= \sum_n e^{-i\vec{G}\vec{r}_n} \left(1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} G^2 \langle (\vec{u}_n)^2 \rangle \right) \end{aligned}$$

$\langle F(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T F(t) dt$
 $T \rightarrow \infty$

$$I = |A_0|^2 \cdot \underbrace{e^{-\frac{1}{3}\langle u^2 \rangle G^2}}_{\text{Debye-Waller-Faktor}}$$

4.10

Debye-Waller-Faktor

$$e^{-\frac{1}{6}\langle u^2 \rangle G^2} \approx 1 - \frac{1}{6}\langle u^2 \rangle G^2$$

$\langle u^2 \rangle \hat{=}$ mittl. quadr. Auslenkung

Mittl. potentielle Energie $\langle U \rangle$

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} f \langle u^2 \rangle = \frac{1}{2} M \omega^2 \langle u^2 \rangle$$

$$\langle U \rangle = \frac{3}{2} k_B T \quad (\text{kin. Gastheorie})$$

$$\rightarrow \langle u^2 \rangle = \frac{3 k_B T}{M \omega^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{I_{hkl} = I_{hkl}(T=0K) \cdot e^{-\frac{k_B T}{M \omega^2} G_{hkl}^2}}$$

D.-W. Faktor hängt nicht von $\vec{K}$ ab $\rightarrow$

Reflexe werden nicht breiter bei höherem T !

