Phononen: Gitterschwingungen

Bisher: statisches Gitter (außer debwall) Jetzt: Vibrationen

quantisiert → Quasiteilchen mit Energie, Quasiimpuls

Wo sind Phononen wichtig?

- Einfachste Elementaranregung (a la Plasmon, Magnon, Polaron (e^- + elastisch)
- thermische Eigenschaften wie:
  - c_V
  - therm. Ausdehnung
  - Wärmeleitung
- Supraleitung, Elektron-Phonon-Kopplung, elektronische Lebensdauern
- schmalbandige Filter
- (Lichtschalter)

Adiabatic or Born-Oppenheimer Approximation

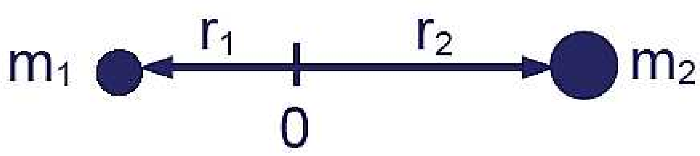
Idea:

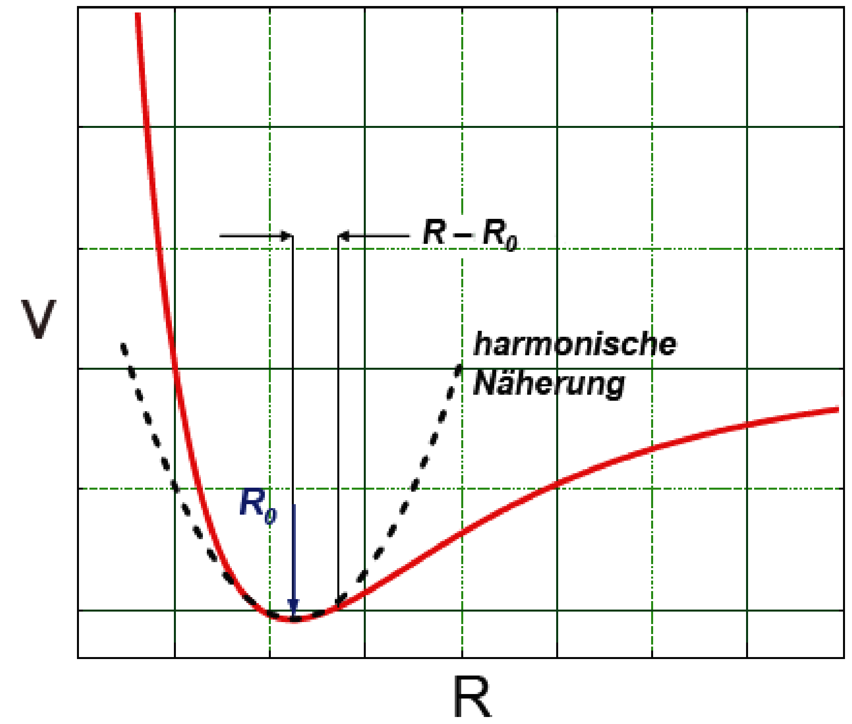
- electrons adapt "instantaneously" to nuclear displacements
- energy of electronic system changes – but it remains in its ground state
- use potential V(R) to represent energy of electronic system

$$m_{nucleus} \gg m_{electron} \quad \Rightarrow \quad v_{nucleus} \ll v_e$$

$$V = V(\vec{R}, \cancel{\vec{r}_i})$$

Zweiatomiges Molekül





$$R := r_1 + r_2$$

Bewegungsgleichung:

$$m_1 \frac{d^2 r_1}{d t^2} = -\frac{dV}{dr_1} \qquad m_2 \frac{d^2 r_2}{dt^2} = -\frac{dV}{dr_2}$$

reduzierte Masse : $\mu^{-1} = m_1^{-1} + m_2^{-1}$

$$\frac{d^2 R}{d t^2} = -\frac{1}{\mu} \frac{dV}{dR}$$

harmonische Näherung:

½ u² f

$$V(R) = V(R_0) + \cancel{(R - R_0) \frac{dV}{dR}} + \frac{1}{2}(R - R_0)^2 \frac{d^2 V}{d R^2} + \ldots$$

Harmonischer Oszillator:

$$\ddot{u} = -\frac{f}{\mu}u = -\omega^2 u \qquad \omega = \sqrt{\frac{f}{\mu}}$$

quantisiert gemäß:

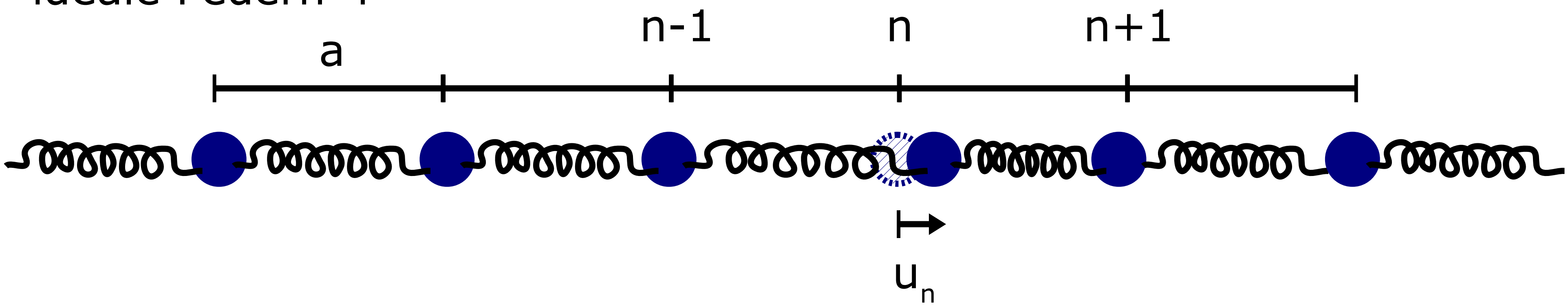
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega; \quad n \in \mathbb{N}_0$$

... und jetzt das Ganze für ein Gitter

(ersteinmal 1D)

Lineare Kette identischer Atome

- wie gehabt: adiabatische & harmonische Näherung
- lineare Kette von Massenpunkten m
- ideale Federn f



Bewegungsgleichung (gleich für alle Einheitszellen !!):

$$m\,\ddot{u}_n = -f\left(u_n - u_{n-1}\right) - f\left(u_n - u_{n+1}\right)$$

$$= f\left(-2u_n + u_{n+1} + u_{n-1}\right)$$

Ansatz "ebene Wellen": $u_n(t) = A\exp\left(i\left(k\,na - \omega t\right)\right)$

Löst Bewegungsgleichung, wenn:

$$-m\omega^2 = f\left(\exp(ika)+\exp(-ika)-2\right)$$

$$= -2f\left(1-\cos(ka)\right) = -4f\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

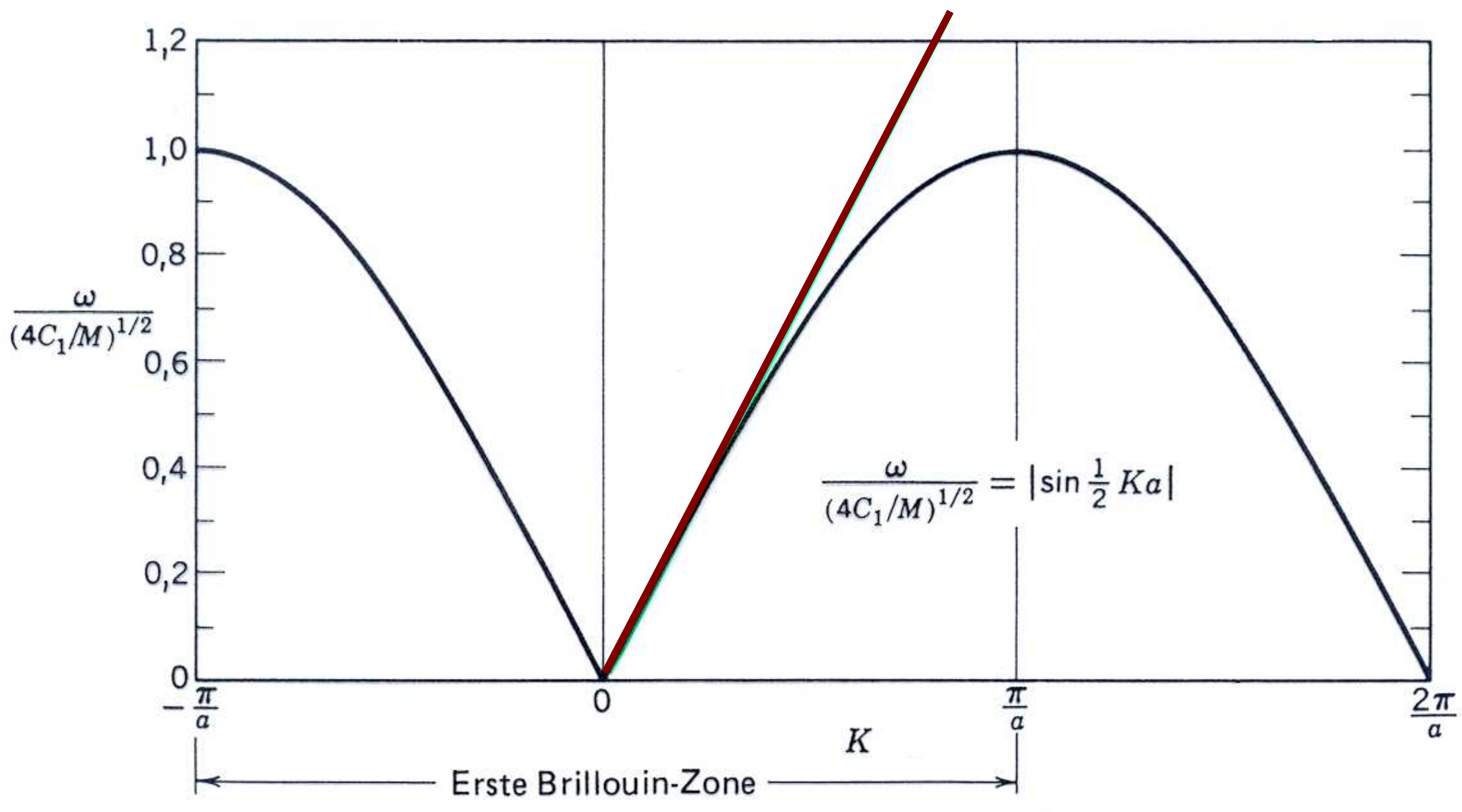
Dispersionsrelation ω(k)

$$\omega(k) = \omega_{max}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|; \qquad \omega_{max} = 2\sqrt{\frac{f}{m}}$$

- $0 < \omega < \omega_{max}$, d. h. Gitter ist Filter für elastische Wellen

Kontinuumsnäherung:

$$\omega = c\,k = \sqrt{\frac{E}{\rho}}\,k$$



Ausbreitungsgeschwindigkeiten

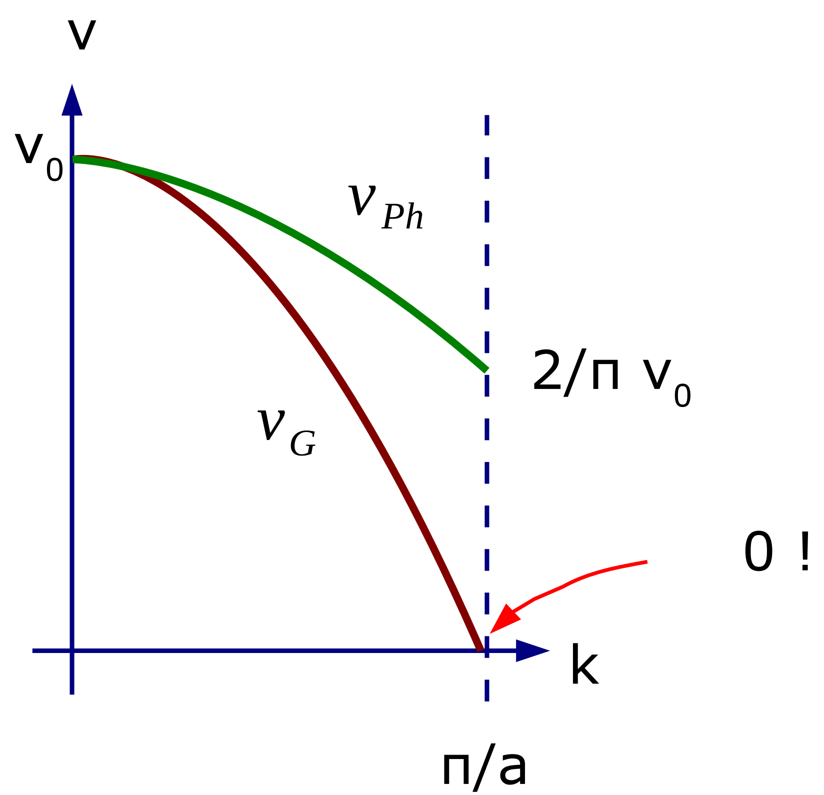
$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{f}{m}}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$$

Phasengeschwindigkeit

$$v_{Ph} = \frac{\omega}{k} = 2\sqrt{\frac{f}{m}}\ \frac{1}{k}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$$

Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{d\,\omega}{d\,k} = a\sqrt{\frac{f}{m}}\ \left|\cos\frac{ka}{2}\right|$$



$v_g = 0$?

$$u_n(t) = A\exp\left(i\left(k\, na - \omega\, t\right)\right)$$

$$u_0(t) = A\exp\left(-i\omega\, t\right)$$

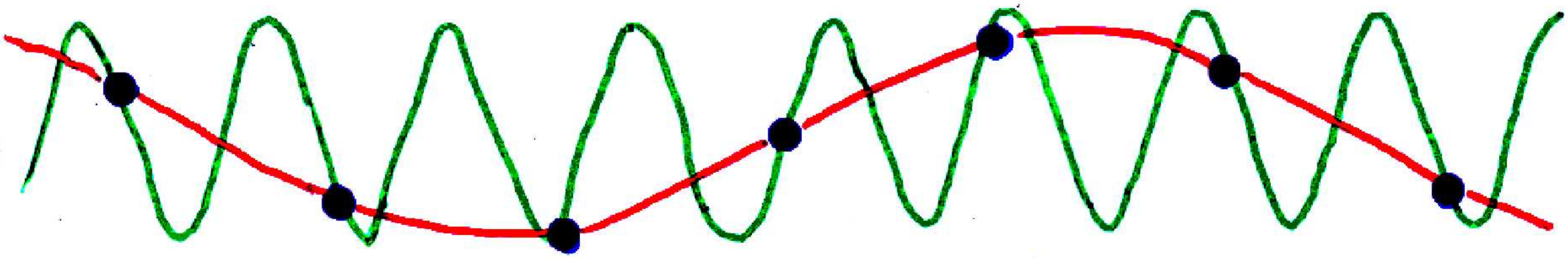
bei $k = \pi/a$: $Re(u_n(t)) = u_0(t)\ (-1)^n$

Also: stehende Welle

kein Energietransport

vgl. Braggreflexe

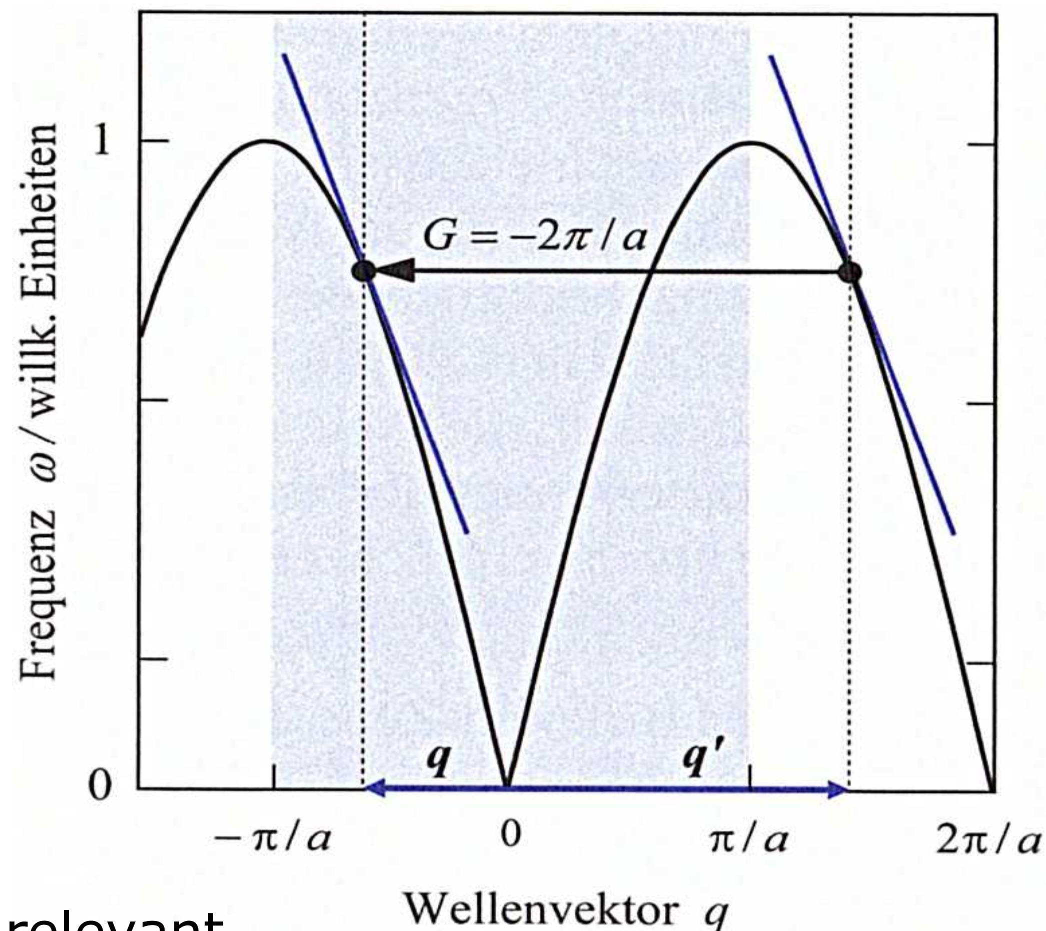
- Dispersion periodisch in k: $\omega(k) = \omega(k+G)\,;\qquad G = n\dfrac{2\pi}{a}$



Reduktion auf die 1. Brillouin-Zone

Addition des reziproken Gittervektors $G = -2\pi/a$ führt q' in q über.

Steigung der Dispersionskurven (-> Gruppengeschwindigkeit) ändert sich nicht.



(Hunklinger)

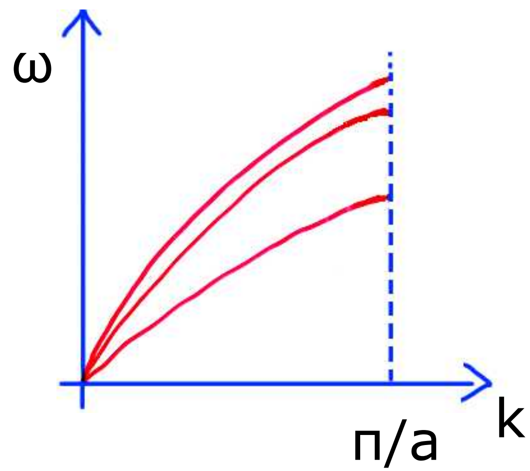
- Nur 1. Brillouinzone ist physikalisch relevant

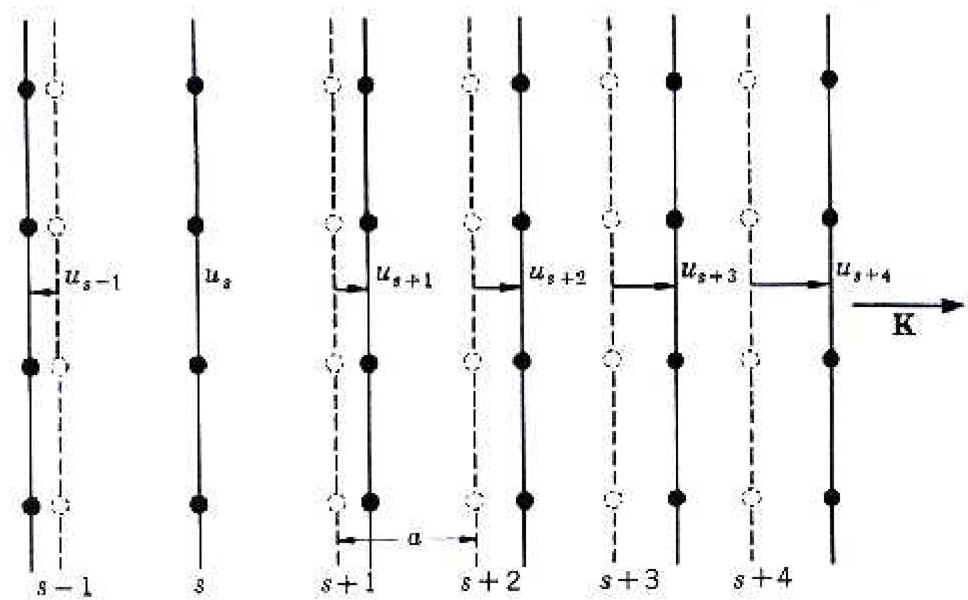
Polarisation

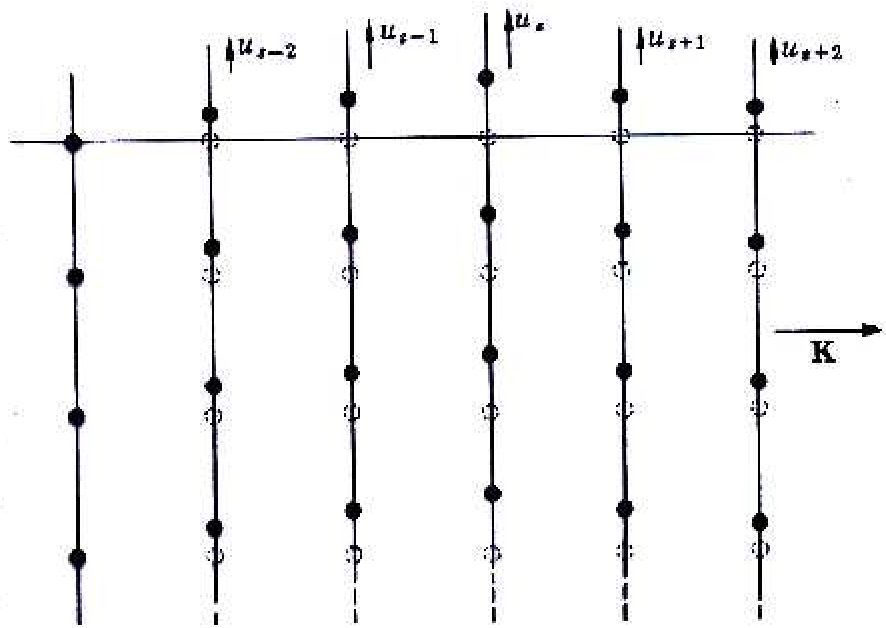
3D: 3 unabhängige Polarisationsrichtungen

eine longitudinale

zwei transversale

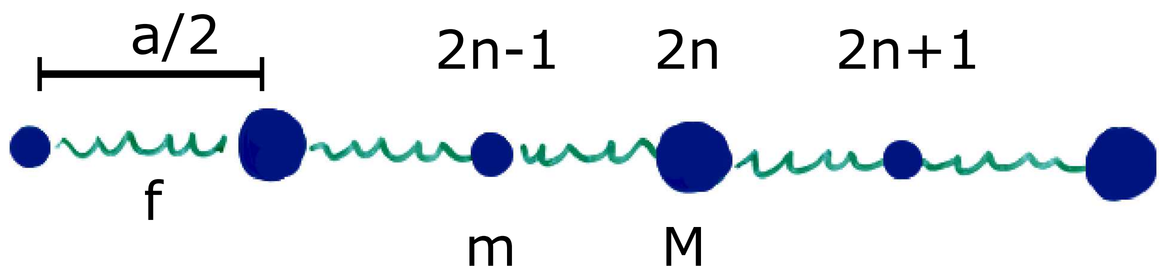






Gitter mit Basis

Modell: Zweiatomige lineare Kette



2 Bewegungsgleichungen

$$M\,\ddot{u}_{2n} = f\left(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2\,u_{2n}\right) \qquad m\,\ddot{u}_{2n+1} = f\left(u_{2n+2} + u_{2n} - 2\,u_{2n+1}\right)$$

Ansatz

$$u_{2n}(t) = A_M \exp\left(i\left(nak - \omega t\right)\right) \qquad u_{2n+1}(t) = A_m \exp\left(i\left(\left(2n+1\right)ak/2 - \omega t\right)\right)$$

Einsetzen

$$\left(M\omega^2 - 2f\right)A_M + \left(2f\cos\left(ka/2\right)\right)A_m = 0$$

$$\left(2f\cos\left(ka/2\right)\right)A_M + \left(m\omega^2 - 2f\right)A_m = 0$$

$$\left(\frac{2f}{M}-\omega^2\right)A_M - \left(\frac{2f}{M}\cos(ka/2)\right)A_m = 0$$

$$\left(\frac{-2f}{m}\cos(ka/2)\right)A_M + \left(\frac{2f}{m}-\omega^2\right)A_m = 0$$

D – ω^2 **1** = 0

dynamische Matrix **D**

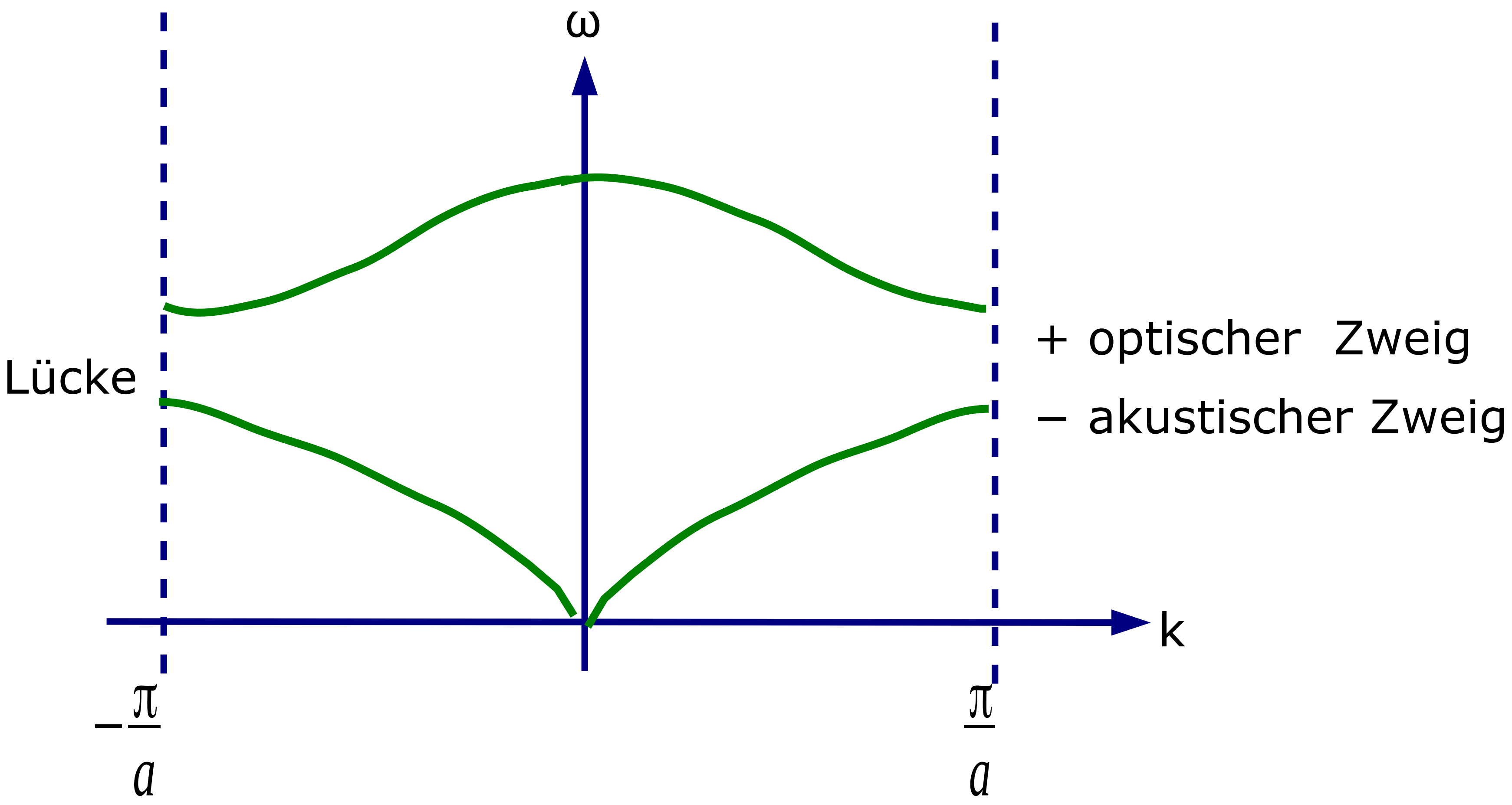
LGS für A_M, A_m; nichttriviale Lösung für Det (**D** – ω^2 **1**) = 0

$$\begin{vmatrix} 2\frac{f}{M}-\omega^2 & -2\frac{f}{M}\cos(ka/2) \\ -2\frac{f}{m}\cos(ka/2) & 2\frac{f}{m}-\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

Quadratische Gleichung für ω

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm f\sqrt{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(ka/2)}{mM}}$$

$$\omega^2 = \frac{f}{\mu}\left(1 \pm \sqrt{1 - 4\frac{mM}{(m+M)^2}\sin^2(ka/2)}\right) \qquad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m}+\frac{1}{M}$$



1. BZ $\frac{-\pi}{a} \dots \frac{\pi}{a}$ reicht: $\omega(k) = \omega\left(k + \frac{2n\pi}{a}\right)$

Grenzfälle von $\omega^2 = \frac{f}{\mu}\left(1 \pm \sqrt{1 - 4\frac{mM}{(m+M)^2}\sin^2(ka/2)}\right)$

$akustischer\ Zweig,\ k \rightarrow 0: \quad \omega \rightarrow ck$; c = a [f/(2(m+M))]$^{1/2}$

$optischer\ Zweig,\ k = 0: \quad \omega^2 = \frac{2f}{\mu}$; 'Molekül' schwingt

$akustischer\ Zweig,\ k = \frac{\pi}{a}: \quad \omega^2 = \frac{2f}{M}$; M (schwere Masse) bewegt

$optischer\ Zweig,\ k = \frac{\pi}{a}: \quad \omega^2 = \frac{2f}{m}$; m (leichte Masse) bewegt

Lücke → 0 bei $m \rightarrow M$; wie einatomige Kette, gespiegelt bei $k = \frac{\pi}{2a}$

Auslenkungsmuster

1. Bewegungsgleichung $\quad \left(M\omega^2 - 2f\right) A_M + \left(2f\cos(ka/2)\right) A_m = 0$

Amplitudenverhältnis $\quad \dfrac{A_M}{A_m} = \dfrac{2f\cos(k\,a/2)}{2f - M\,\omega^2} = \dfrac{\cos(k\,a/2)}{1 - M\,\omega^2/2f}$

bei k = 0:

akustisch $\quad \omega = 0 \quad A_M = A_m$

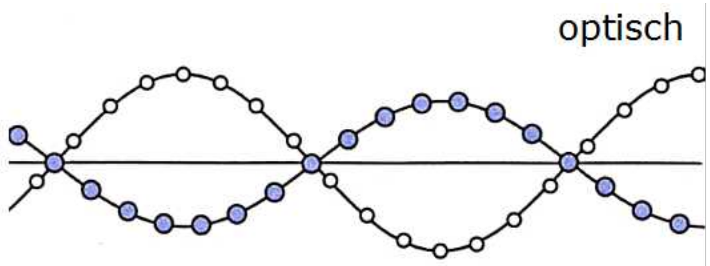
optisch $\quad \omega^2 = \dfrac{2f}{\mu} \quad A_M = -\dfrac{m}{M} A_m$

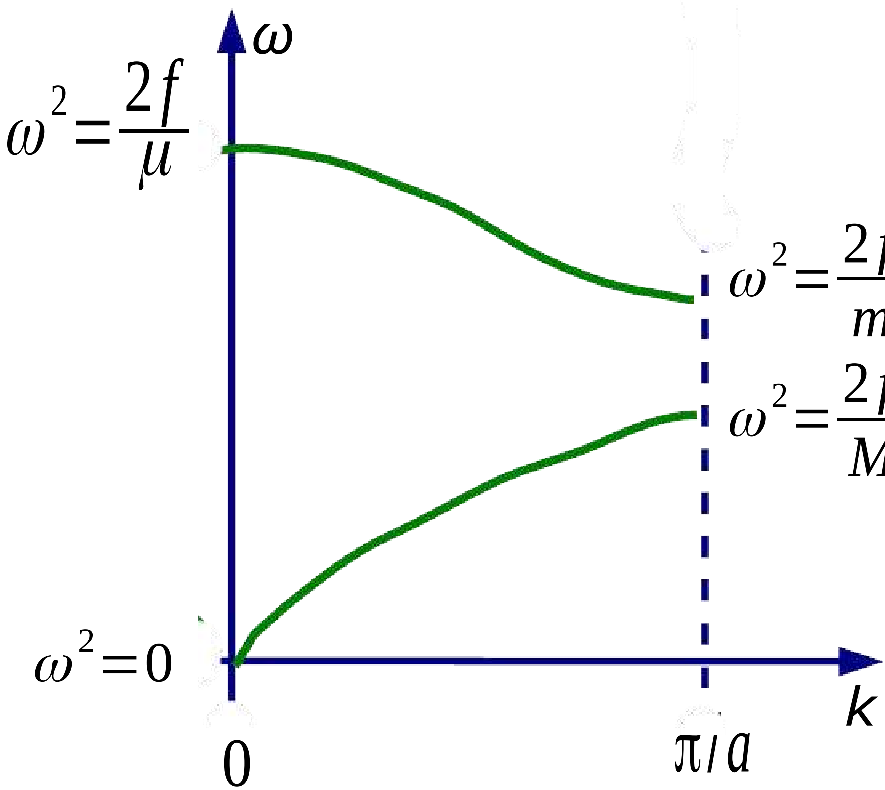
bei k = π/a:

akustisch $\quad \omega^2 = \dfrac{2f}{M} \quad A_m = 0$

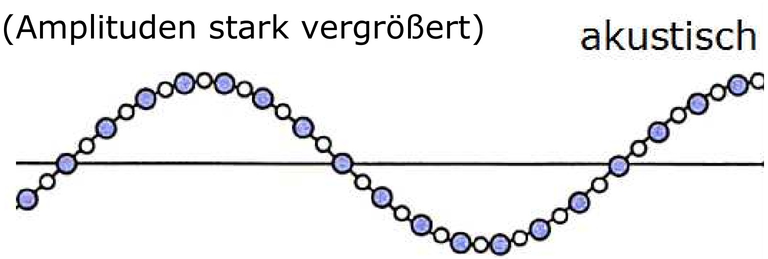
optisch $\quad \omega^2 = \dfrac{2f}{m} \quad A_M = 0$

in polaren Kristallen IR-aktiv

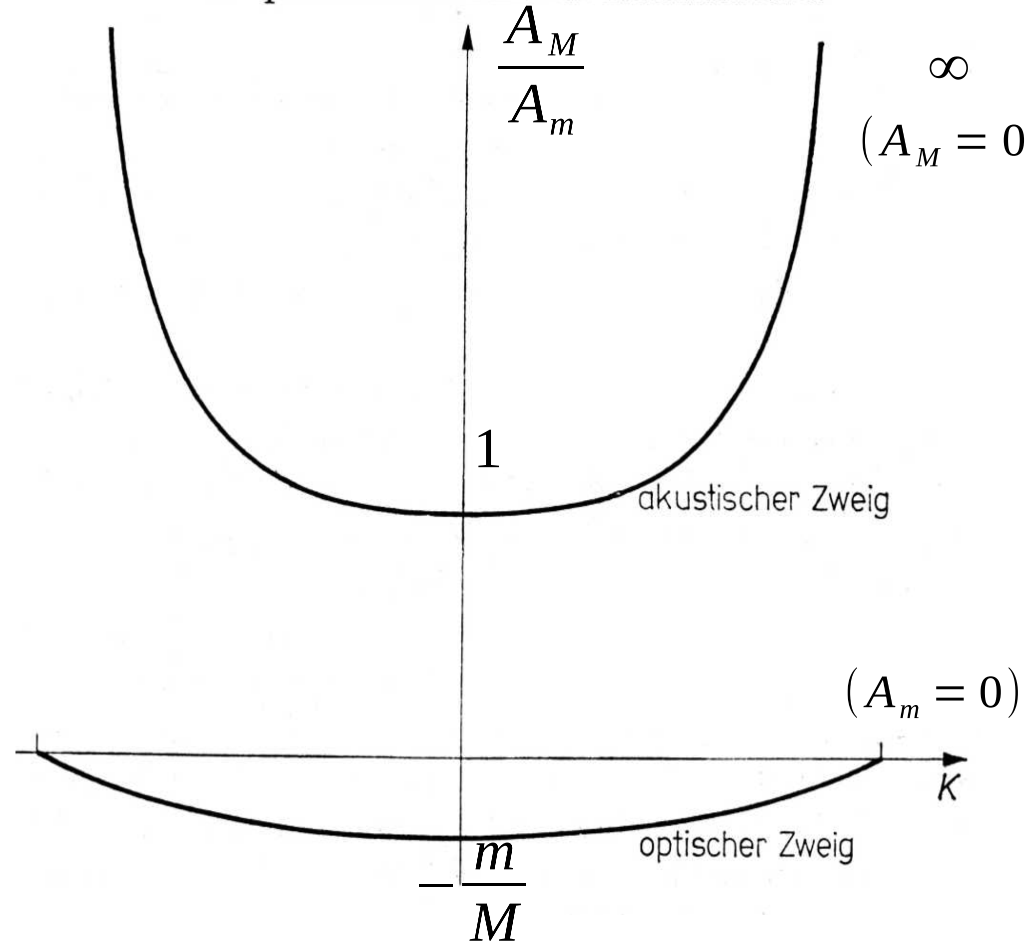




(Amplituden stark vergrößert)



Amplitudenverhältnis für Nachbaratome

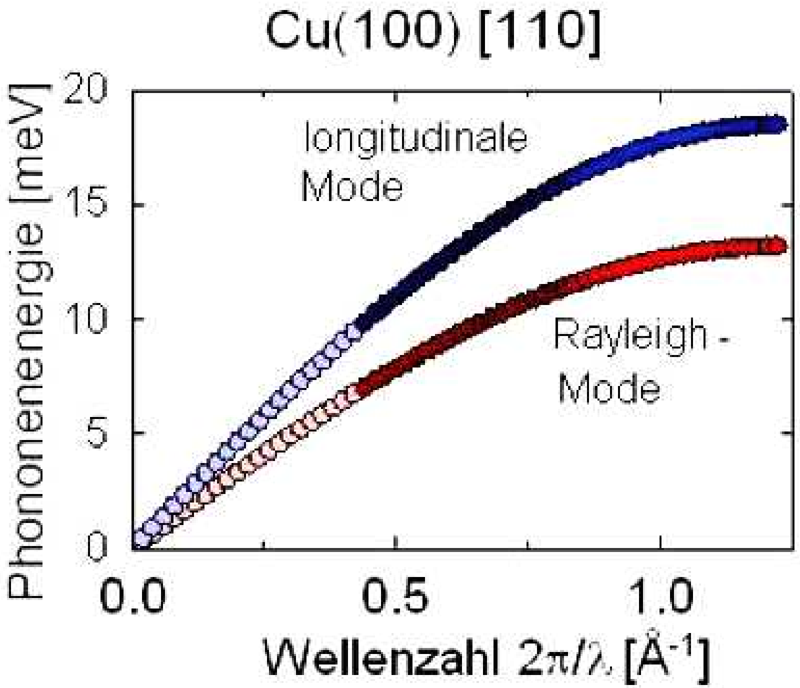


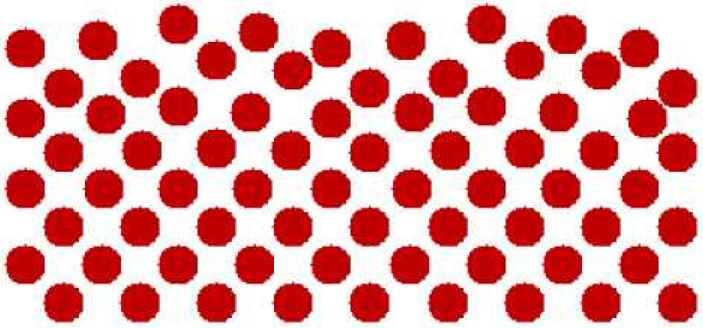
Weitere Anregungen

$$\omega^2 = \frac{f}{\mu} \pm f\sqrt{\left(\frac{1}{\mu}\right)^2 - \frac{4\sin^2(ka/2)}{mM}}$$

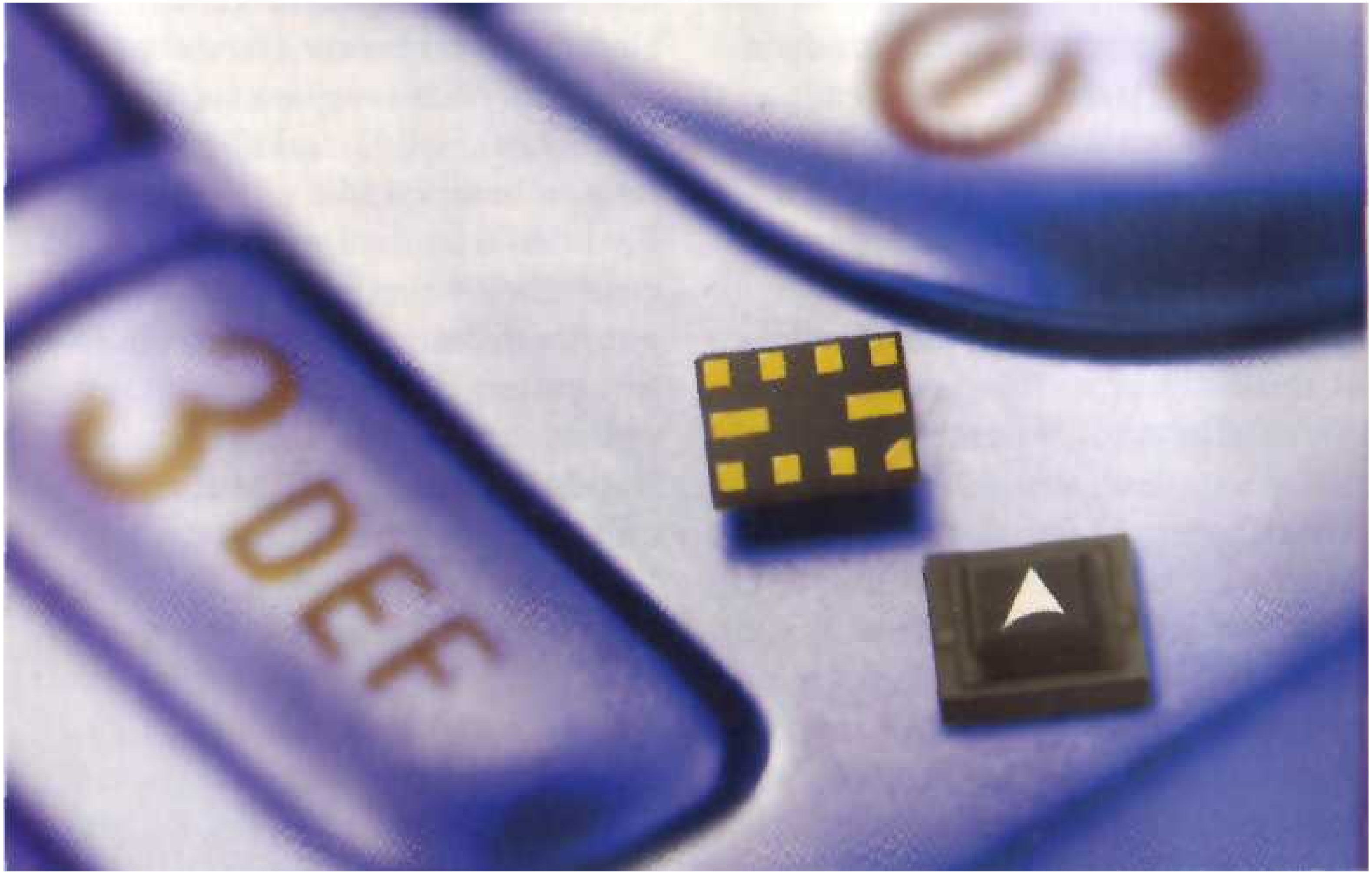
Es gibt auch Lösungen in der Lücke, aber nur für imaginäre k.

Das sind Oberflächenwellen, die ins Kristallinnere abklingen.



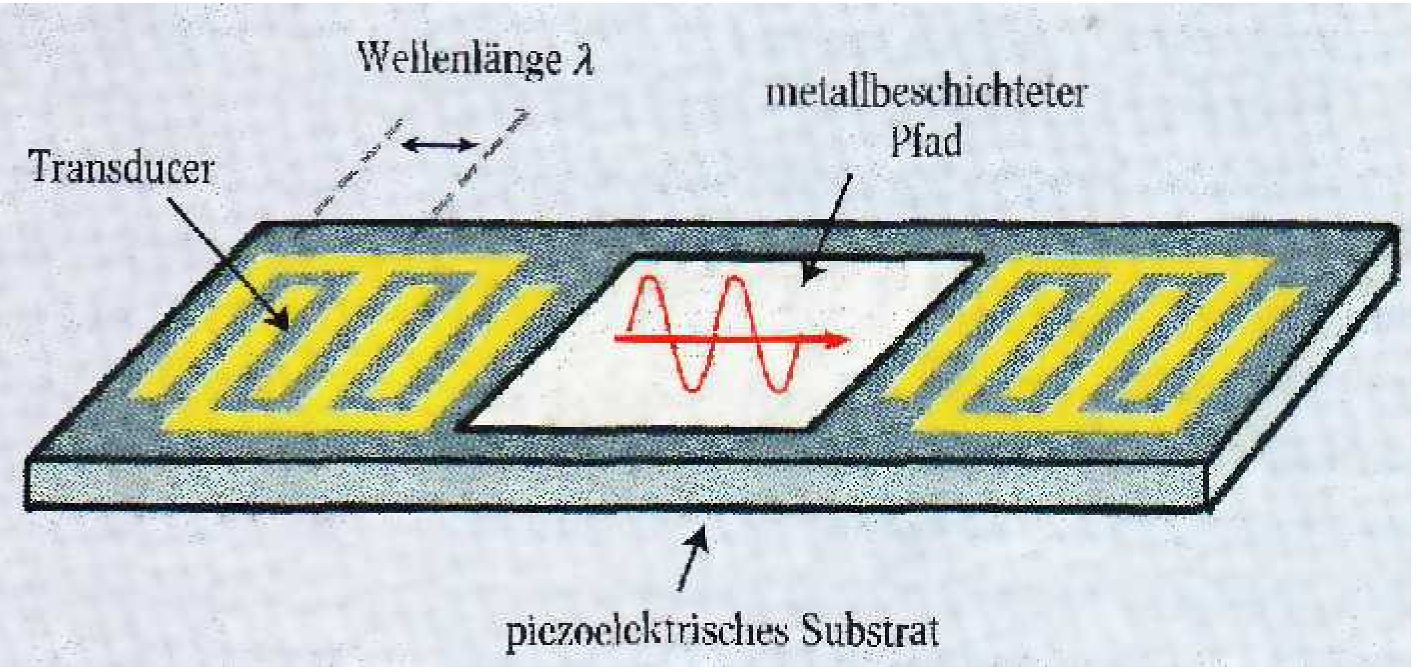


(Gruppe Chr. Wöll)



Frequenzfilter für Handys, welche auf so genannten akustischen Oberflächenwellenelementen (SAW) beruhen, werden immer winziger. Hier ist ein typischer SAW-Frequenzfilter (Kantenlänge 2 mm) für ein modernes Dualband-Handy zu sehen. (Quelle: Epcos)

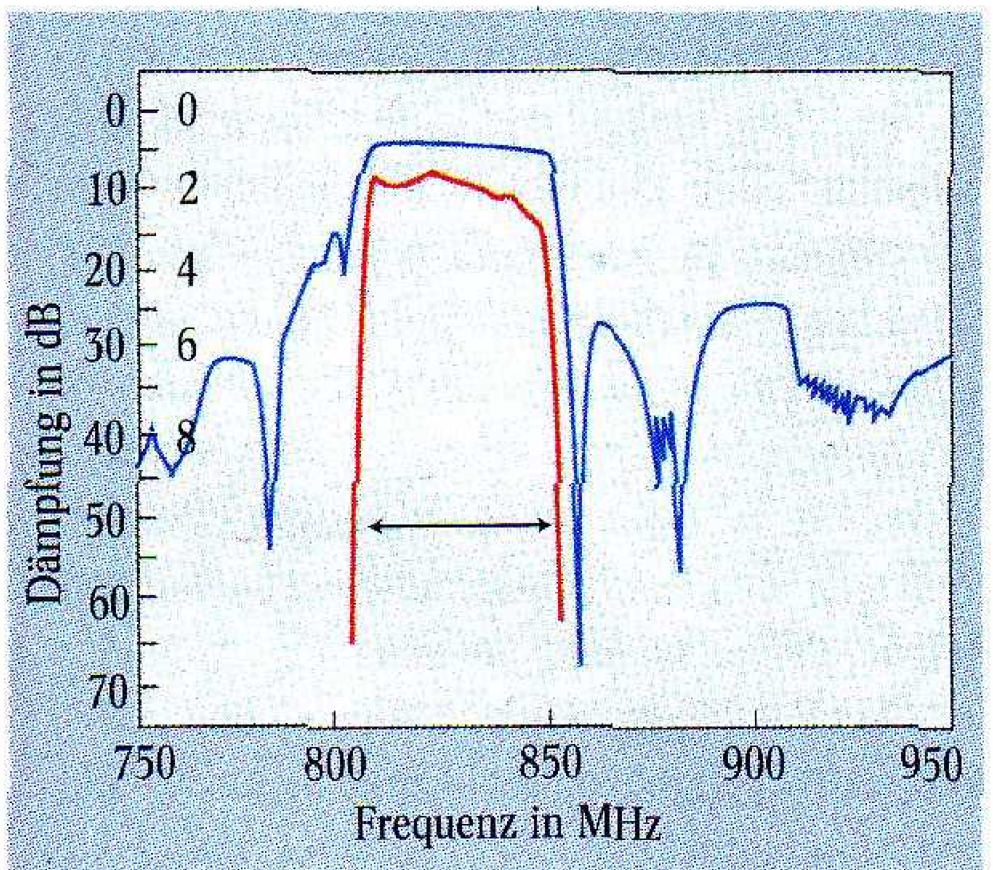
Surface Acoustic Wave Filter

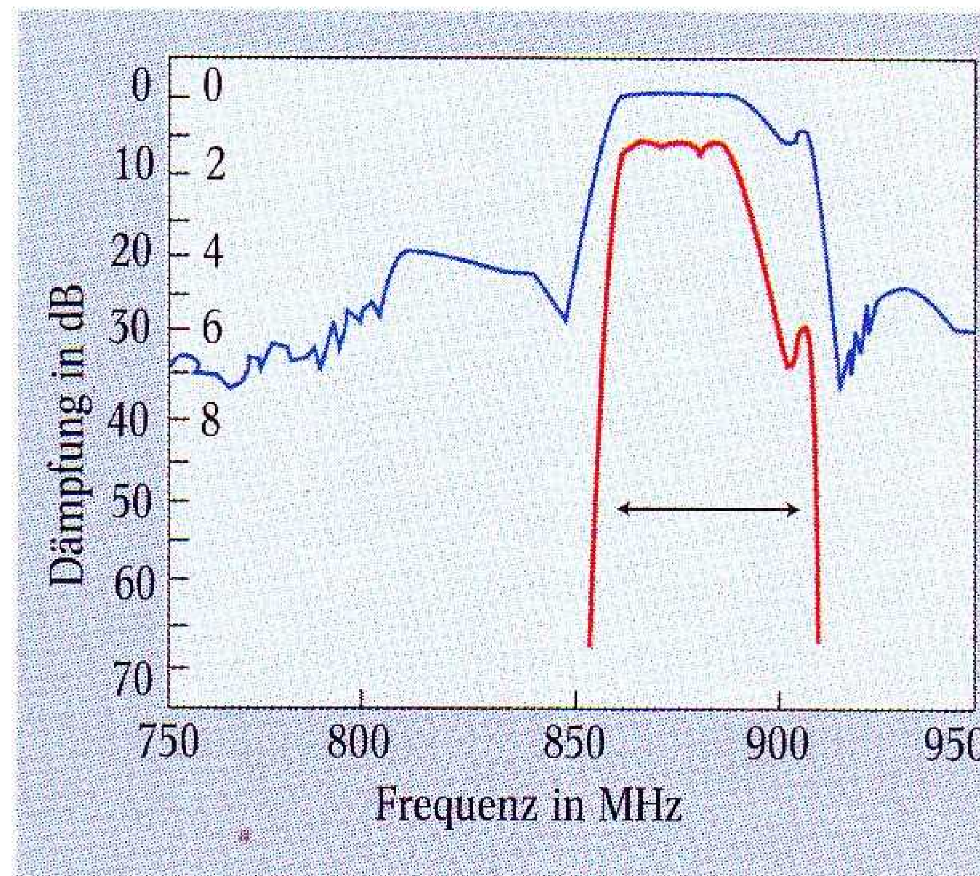


- Interdigitaler Wandler (IDT) auf piezoelektrischem Einkristall

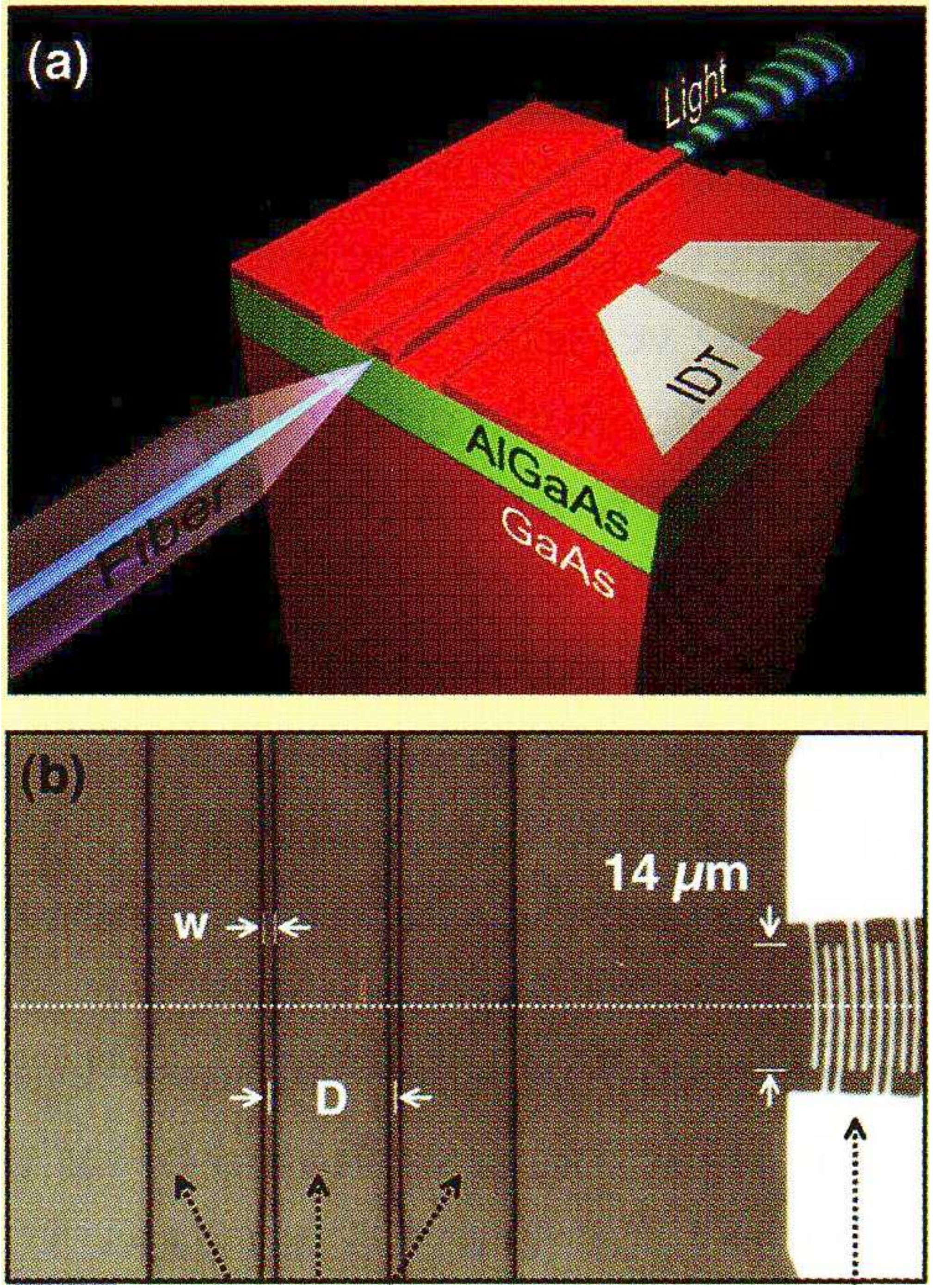
  Lithiumniobat ($LiNbO_3$), Quarz (SiO_2)
- akustische Oberflächenphononen
- λ = 2 x Fingerabstand, Durchlassfrequenz $f_0 = v_{Schall} / \lambda$
- Zweiter IDT konvertiert in Spannungssignal
- Hohe Unterdrückung, konfigurierbar (z.B. via Fingerdesign)
- Niedrige Leistungen

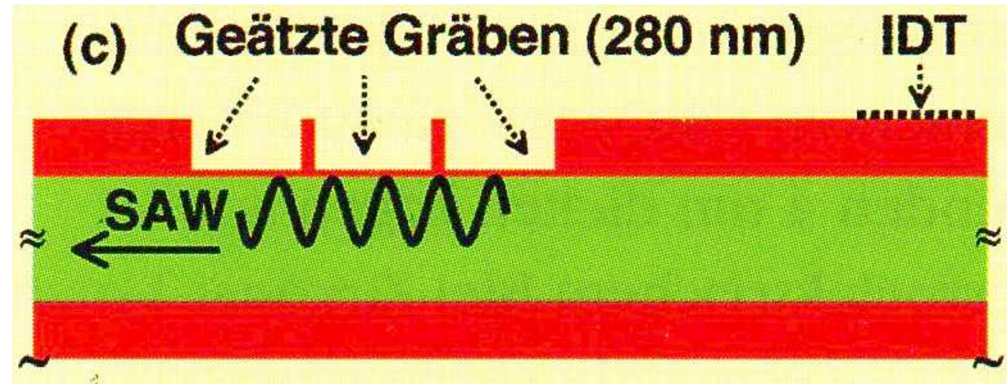
Akustische Oberflächenwellen-Bauelemente lassen sich als Frequenzfilter in Handys nutzen. Hier sieht man, wie ein SAW-Filter zwei verschiedene Frequenzbänder (rot, links: ca. 800–850 MHz, rechts: ca. 850–920 MHz) aus dem Gesamtspektrum (blau) herausfiltert. Die Außenskala der (nach unten ansteigenden) Signaldämpfung bezieht sich dabei auf die blauen, die Innenskala auf die roten Kurven. (Quelle: Murata)





Akustische Oberflächenwellen schalten Lichtstrahlen

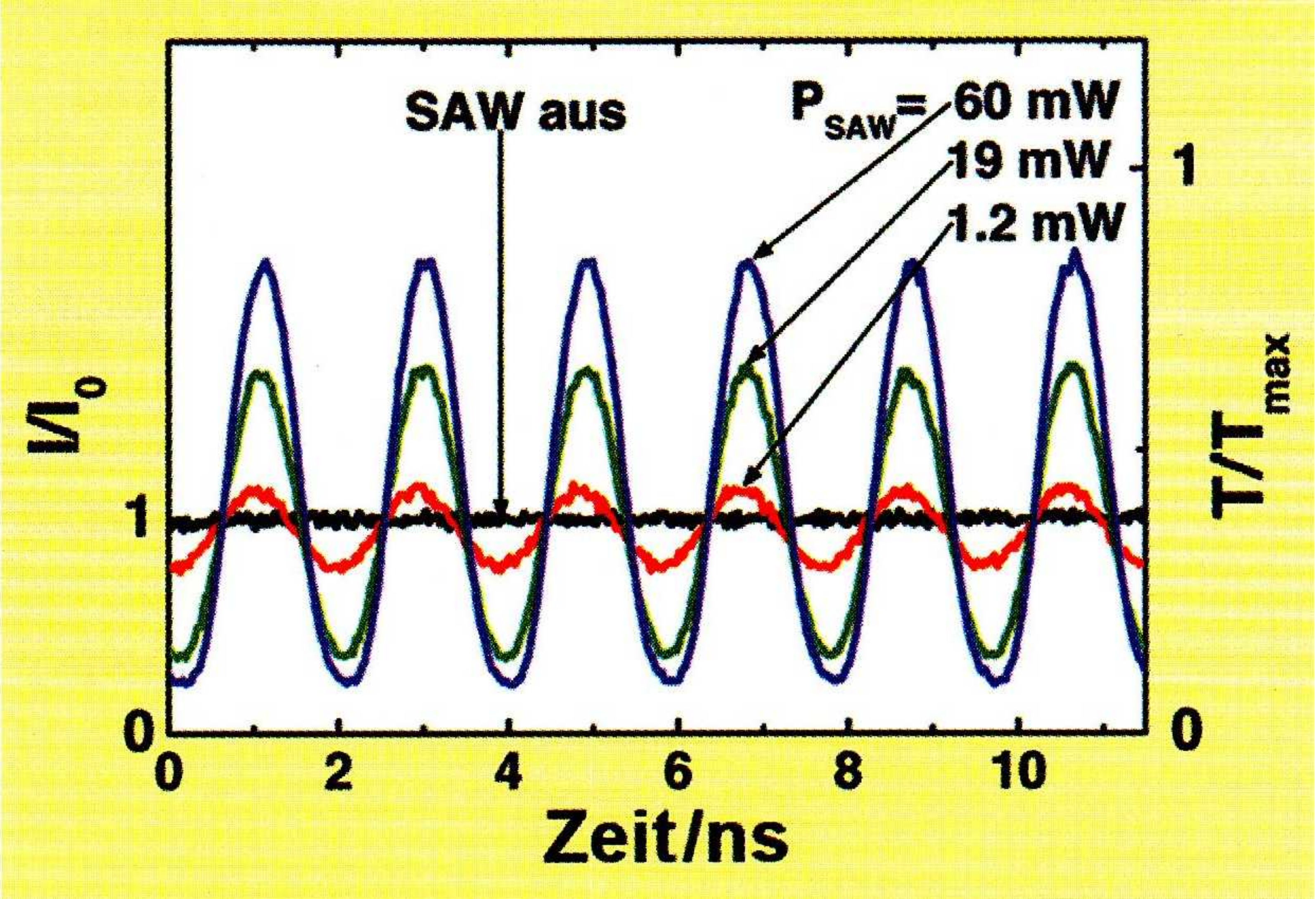




Mach-Zehnder Interferometer
GaAs ist piezoelektrisch
n variiert mit *a*

a) Mit Hilfe elektrischer Fingerkontakte (IDT) wird eine Oberflächenwelle erzeugt. Licht wird links mit einer Glasfaserspitze in einen Wellenleiter gekoppelt und in zwei Teilstrahlen aufgespalten. b) Probe von oben: Der Abstand D der beiden Wellenleiter beträgt 14 µm, entsprechend 2,5 λ. c) Probenquerschnitt: Die akustische Welle erzeugt in den beiden Wellenleitern entgegengesetzte Phasenverschiebungen. Bei der Interferenz der beiden Strahlen entsteht so eine Modulation des transmittierten Lichts.

eck et al.,
hiuZ 2 (2007)



Beck et al.,
PhiuZ 2 (2007)

Zeitaufgelöste Transmission durch das Mach-Zehnder-Interferometer bei drei Leistungswerten der akustischen Oberflächenwelle. Linke Ordinate: gemessene Intensität bezogen auf Intensität ohne Oberflächenwelle, rechte Ordinate: berechneter Transmissionskoeffzient.