

# Phononen: Gitterschwingungen

Bisher: statisches Gitter (außer Debye-Waller)

Jetzt: Vibrationen

quantisiert → Quasiteilchen mit Energie, Quasiimpuls

## Wo sind Phononen wichtig?

- Einfachste Elementaranregung (à 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

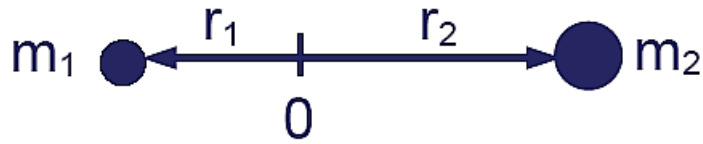
Idea:

- 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

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

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

# Zweiatomiges Molekül



$$R := r_1 + r_2$$

Bewegungsgleichung:

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

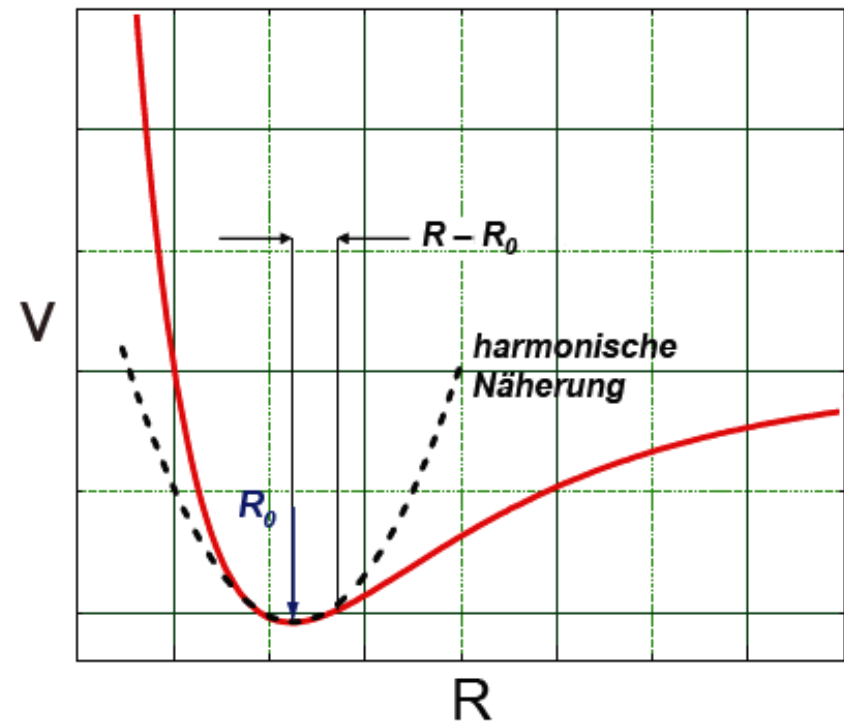
reduzierte Masse :  $\mu^{-1} = m_1^{-1} + m_2^{-1}$

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

harmonische Näherung:

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

$\frac{1}{2} \quad u^2 \quad f$



Harmonischer Oszillator:

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

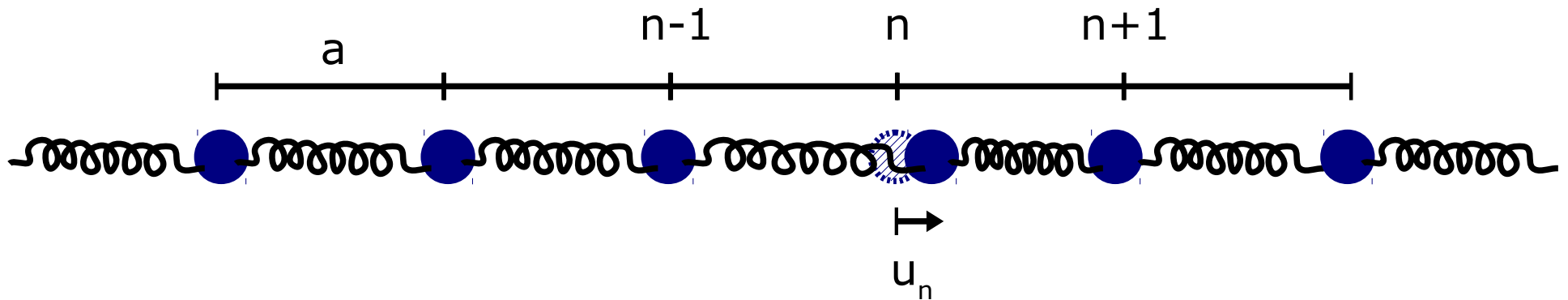
quantisiert gemäß:

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

... 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 !!):

$$\begin{aligned} m \ddot{u}_n &= -f(u_n - u_{n-1}) - f(u_n - u_{n+1}) \\ &= f(-2u_n + u_{n+1} + u_{n-1}) \end{aligned}$$

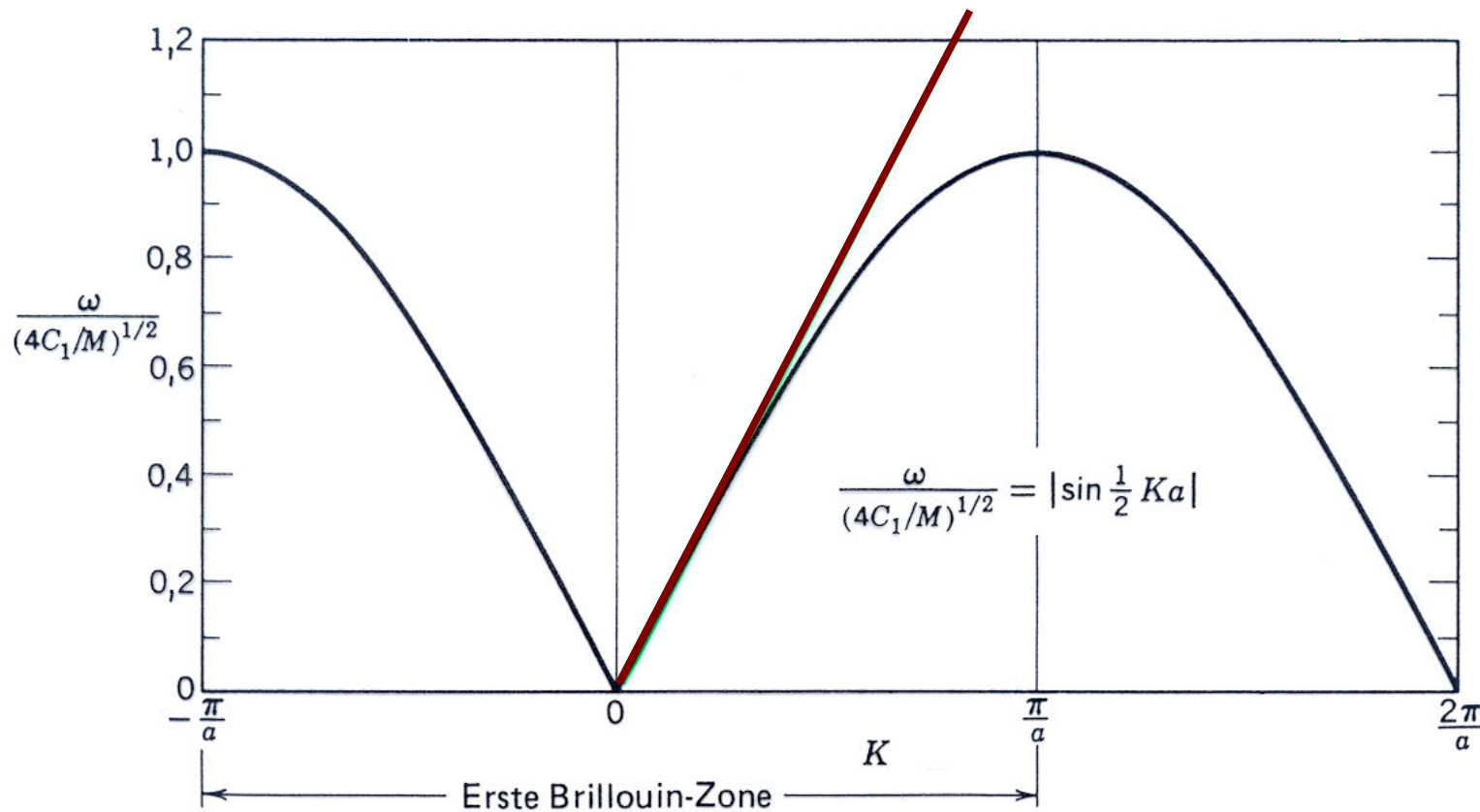
Ansatz "ebene Wellen":  $u_n(t) = A \exp(i(kna - \omega t))$

Löst Bewegungsgleichung, wenn:

$$\begin{aligned}
 -m \omega^2 &= f (\exp(ika) + \exp(-ika) - 2) \\
 &= 2 f (1 - \cos(ka)) = -4f \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)
 \end{aligned}$$

Dispersionsrelation  $\omega(k)$

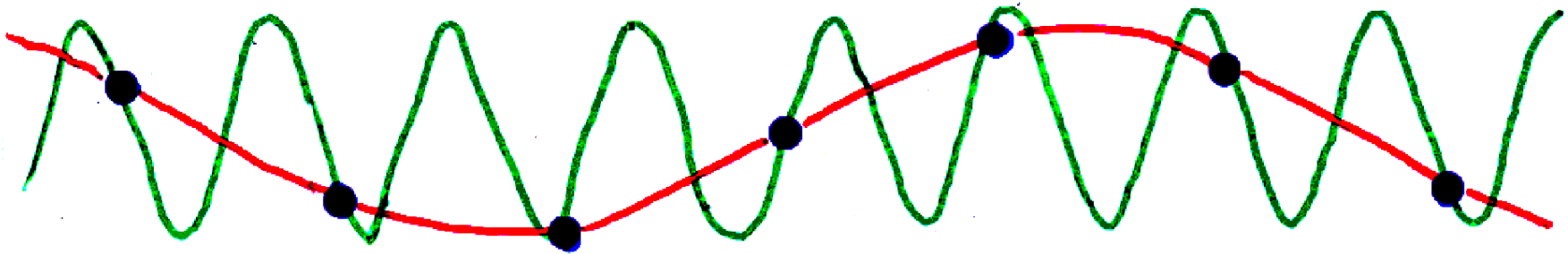
$$\omega(k) = \omega_{max} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|; \quad \omega_{max} = 2 \sqrt{\frac{f}{m}}$$



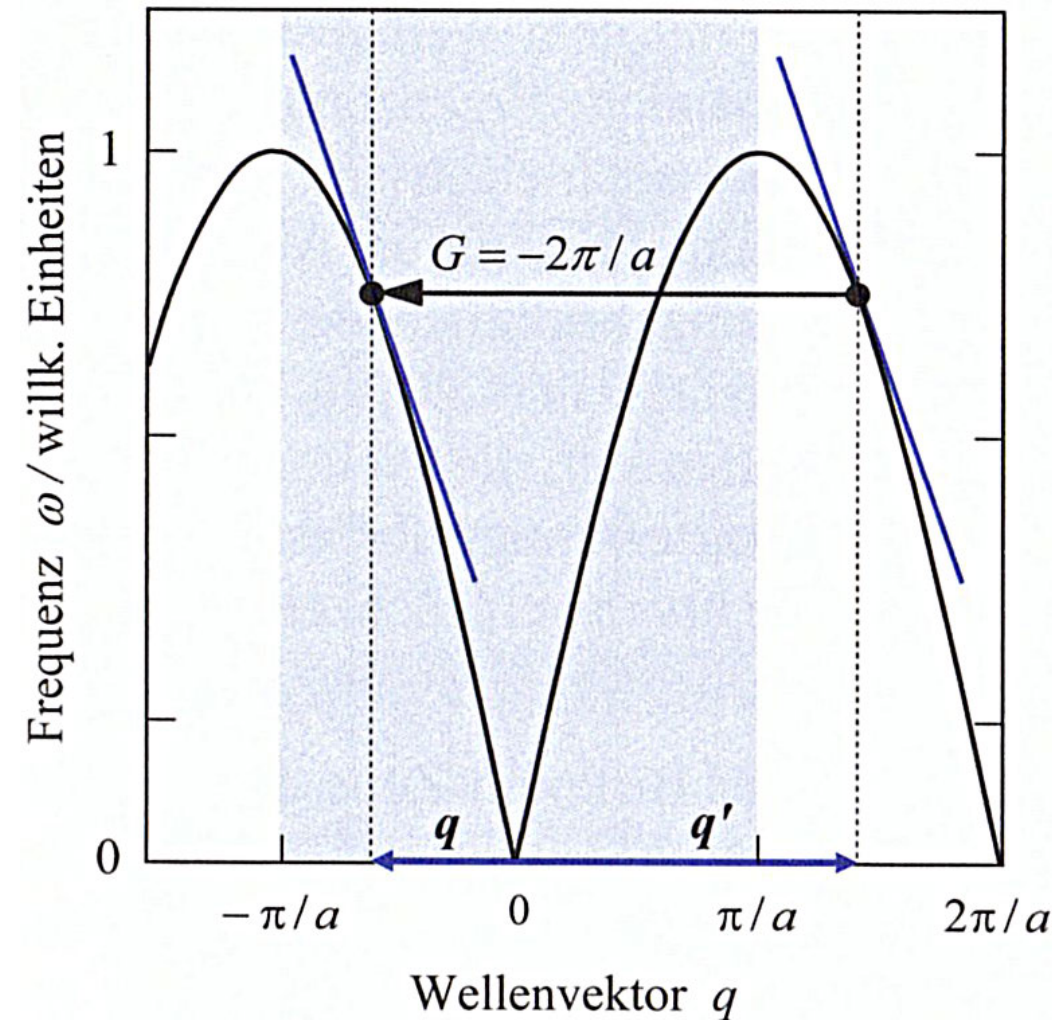
$$\omega = \sqrt{\frac{E}{\rho}} k = ck$$

- ◆  $0 < \omega < \omega_{\max}$ , d. h. Gitter ist Filter für elastische Wellen
- ◆ Kontinuumsnäherung:  $\omega = c k$
- ◆ periodisch in  $k$ :

$$\omega(k) = \omega(k+G); \quad G = n \frac{2\pi}{a}$$



# Reduktion auf die 1. Brillouin-Zone



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

Die Steigung der Dispersionskurven bei diesen Wellenvektoren und damit auch die Gruppengeschwindigkeit ändern sich dabei nicht.



# Ausbreitungsgeschwindigkeiten

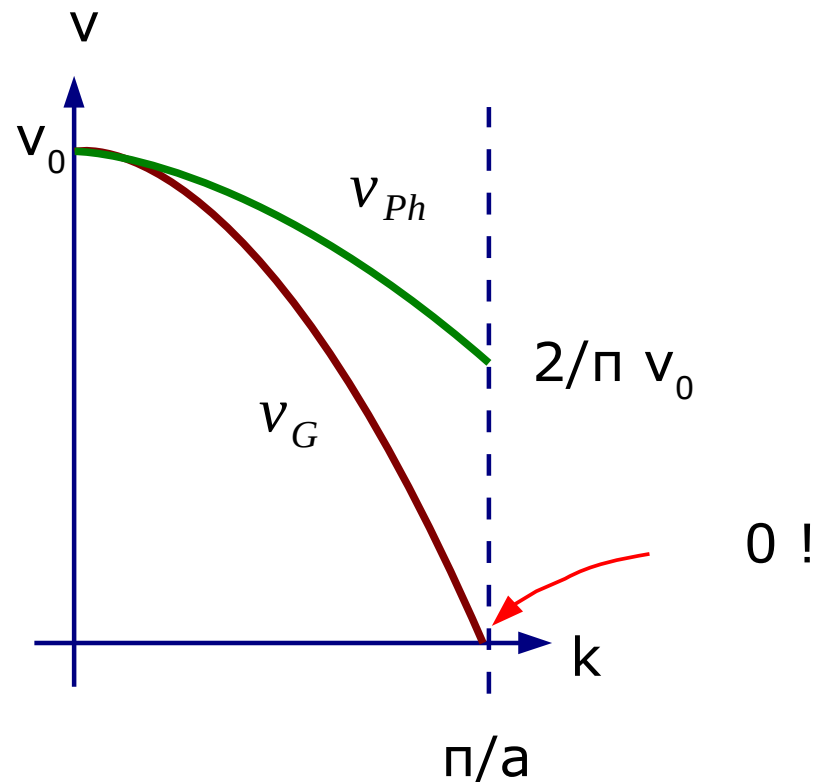
$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{f}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

Phasengeschwindigkeit

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

Gruppengeschwindigkeit

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



$$v_g = 0 ?$$

$$u_n(t) = A \exp(i(k n a - \omega t))$$

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

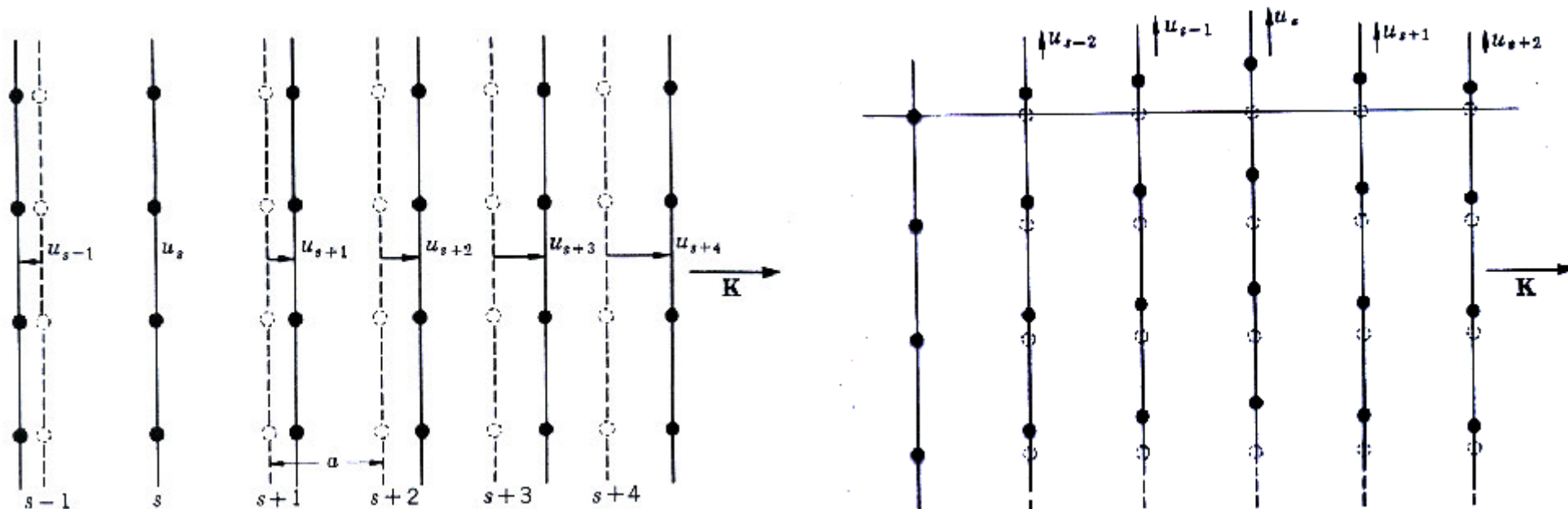
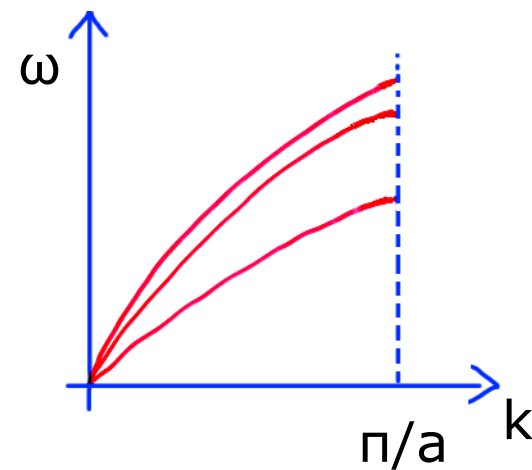
bei  $k = \pi/a$ :  $\operatorname{Re}(u_n(t)) = u_0(t) (-1)^n$

Also: stehende Welle  
kein Energietransport

vgl. Braggreflexe

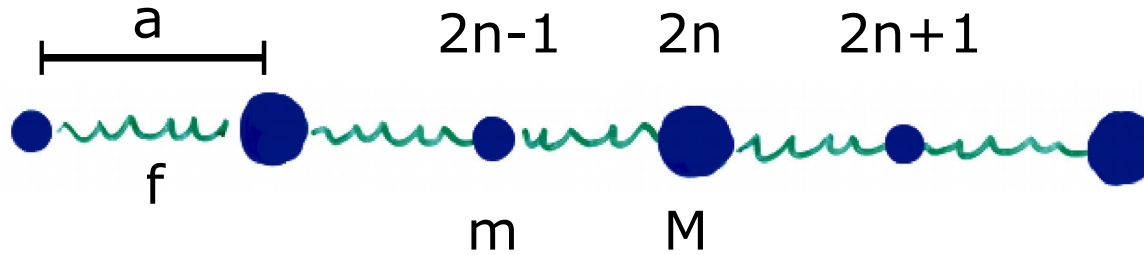
# Polarisation

3D: 3 unabhängige Polarisationsrichtungen  
eine longitudinale  
zwei transversale



# Gitter mit Basis

Modell: Zweiatomige lineare Kette



## 2 Bewegungsgleichungen

$$M \ddot{u}_{2n} = f(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n}) \quad m \ddot{u}_{2n+1} = f(u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1})$$

## Ansatz

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

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

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

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

$$\mathbf{D} - \omega^2 \mathbf{1} = 0$$

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

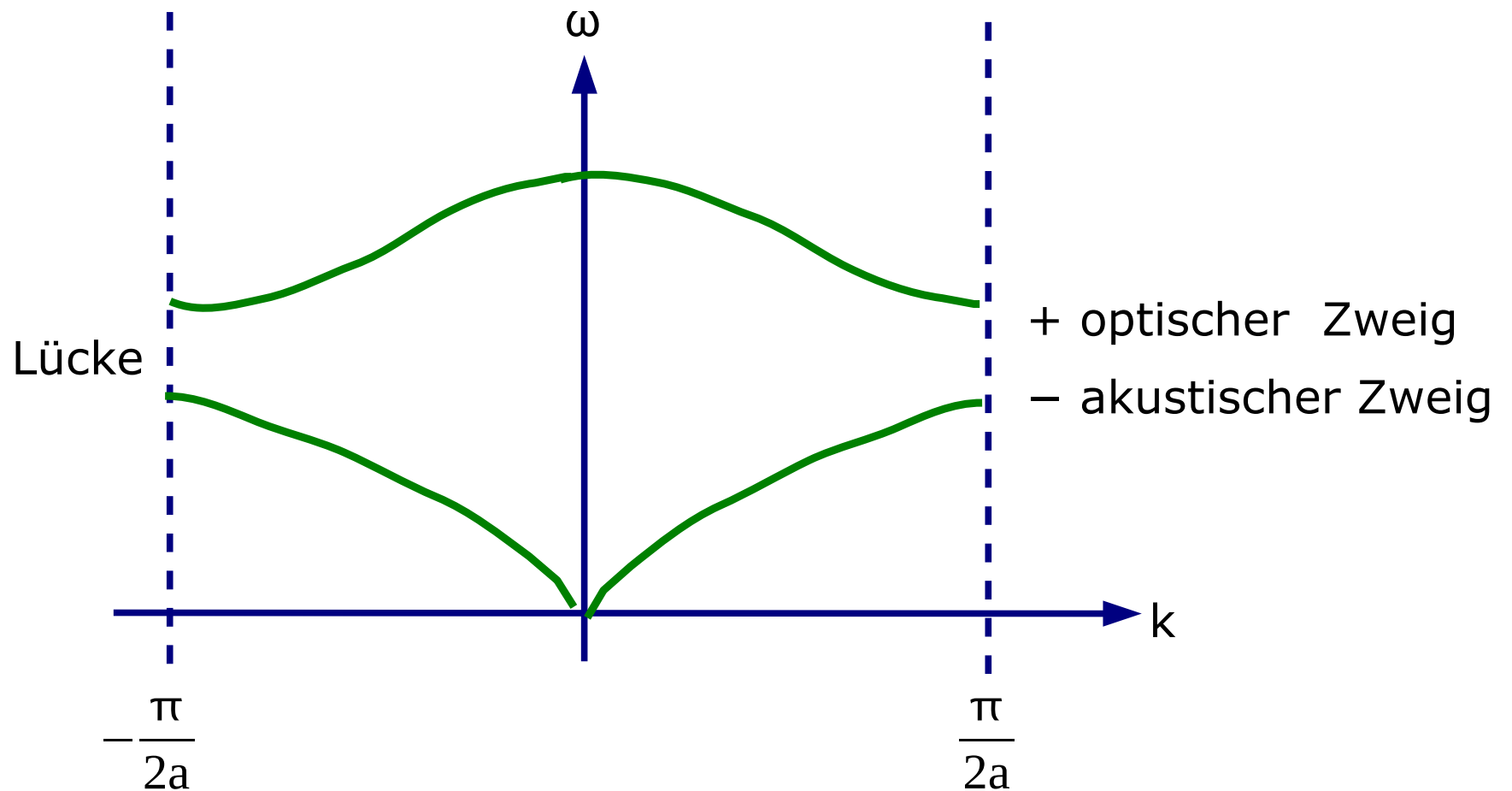
dynamische Matrix  $\mathbf{D}$

LGS für  $A_M, A_m$ ; nichttriviale Lösung für  $\text{Det}(\mathbf{D} - \omega^2 \mathbf{1}) = 0$

$$\begin{vmatrix} \frac{2f}{M} - \omega^2 & -\frac{2f}{m} \cos ka \\ -\frac{2f}{M} \cos ka & \frac{2f}{m} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad \text{Quadratische Gleichung für } \omega$$

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

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



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

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

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

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

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

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

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

# Auslenkungsmuster

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

Amplitudenverhältnis  $\frac{A_M}{A_m} = \frac{2f \cos ka}{2f - M \omega^2} = \frac{\cos ka}{1 - M \omega^2 / 2f}$

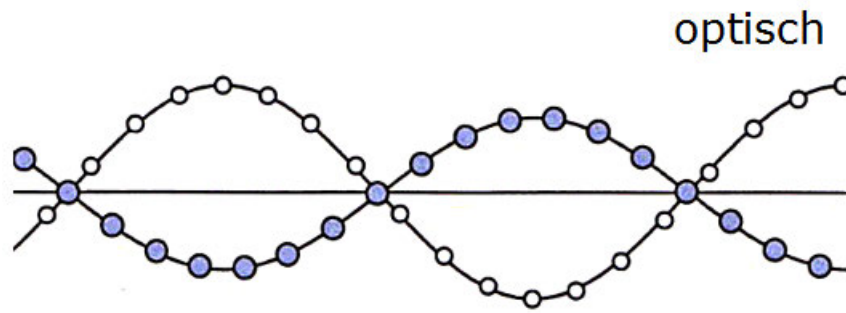
bei  $k = 0$ :      akustisch       $\omega = 0$        $A_M = A_m$

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

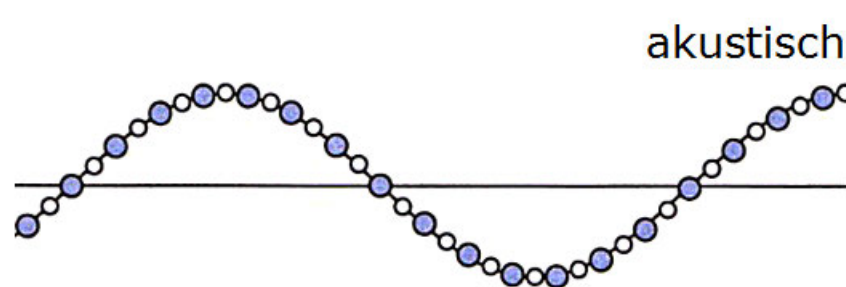
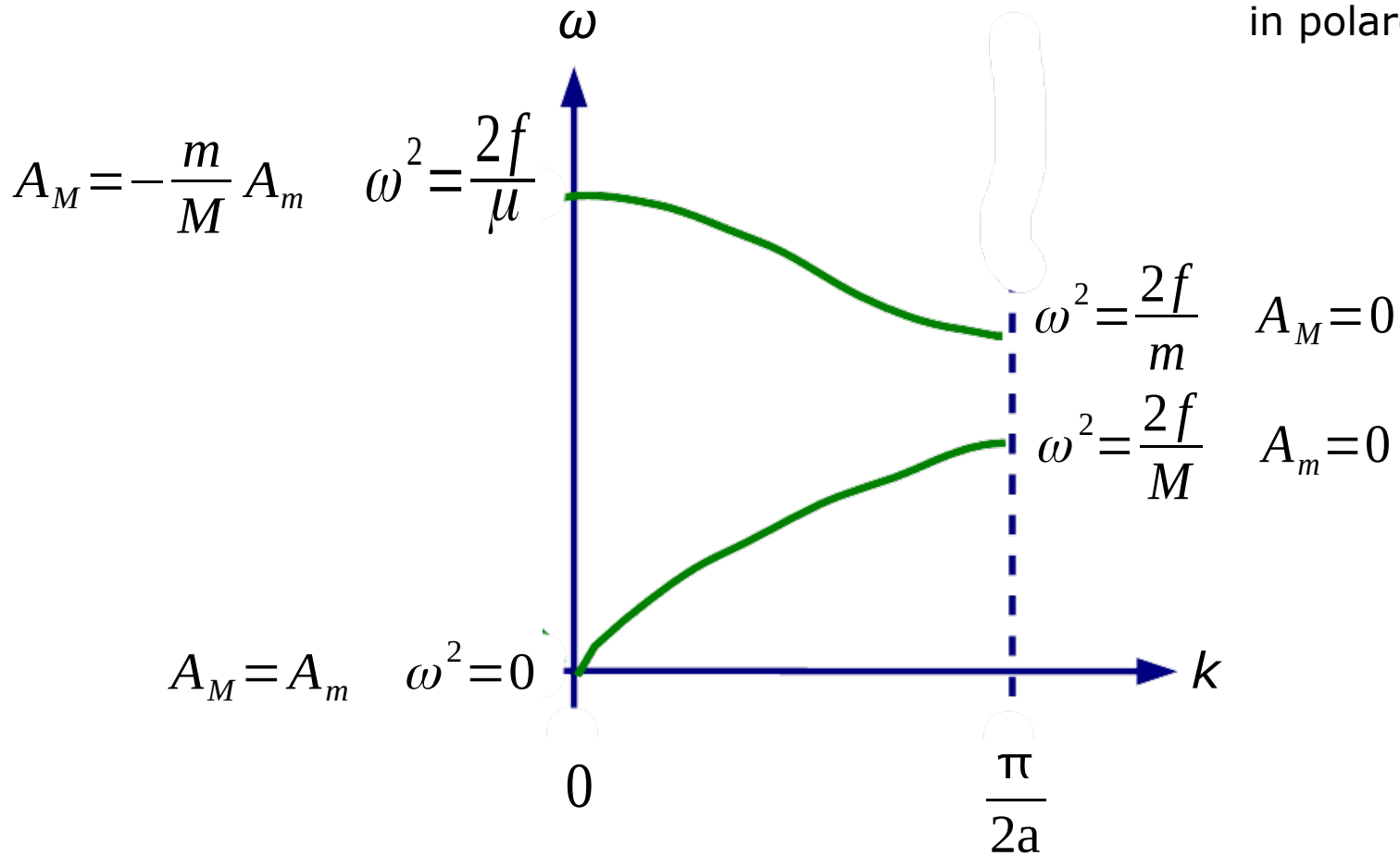
bei  $k = \pi/2a$ :      akustisch       $\omega^2 = \frac{2f}{M}$        $A_m = 0$

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



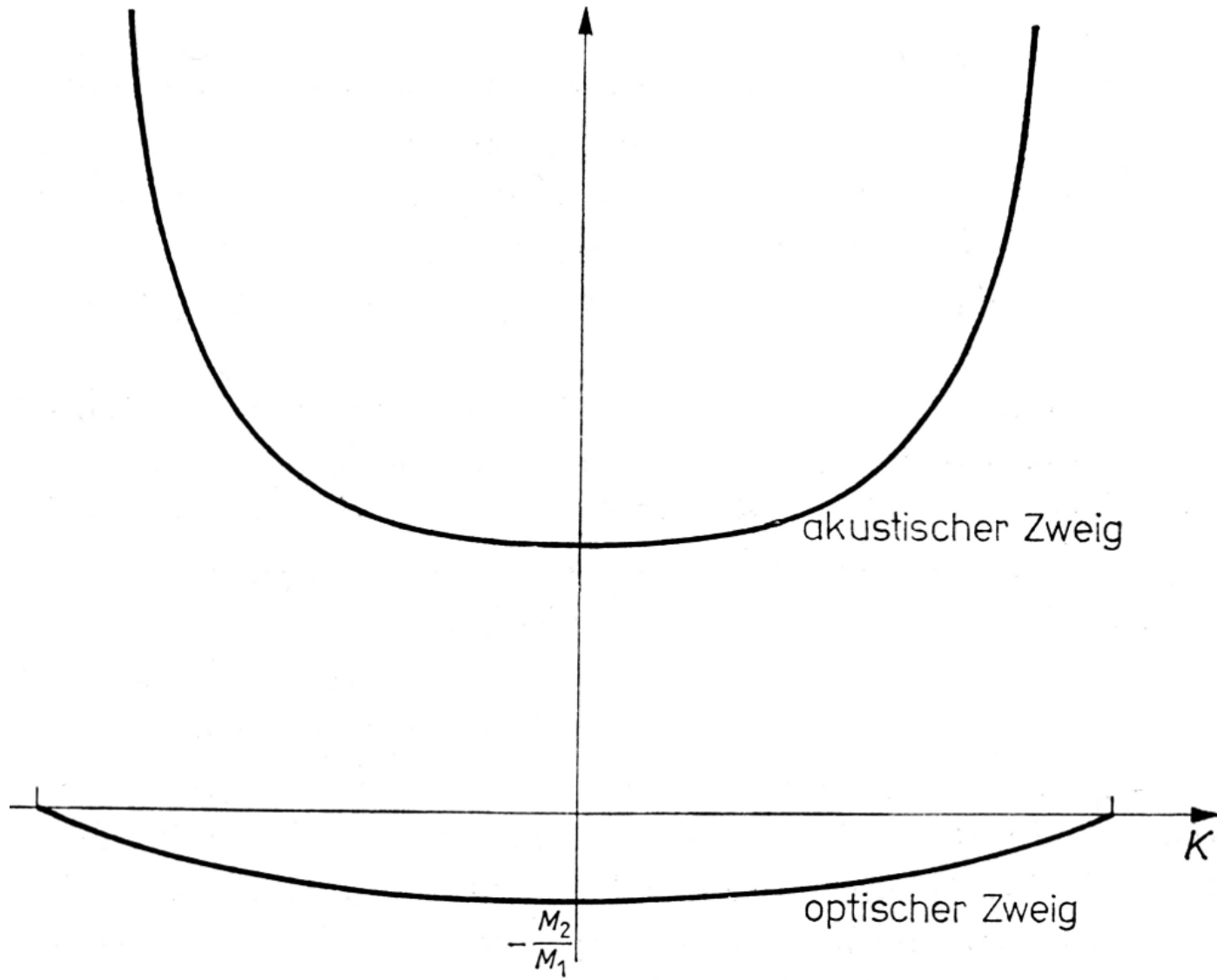


in polaren Kristallen IR-aktiv



(Amplituden stark vergrößert im Vgl. zu  $\lambda$ )

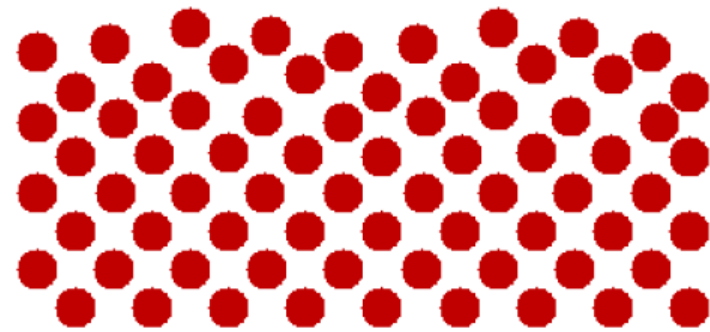
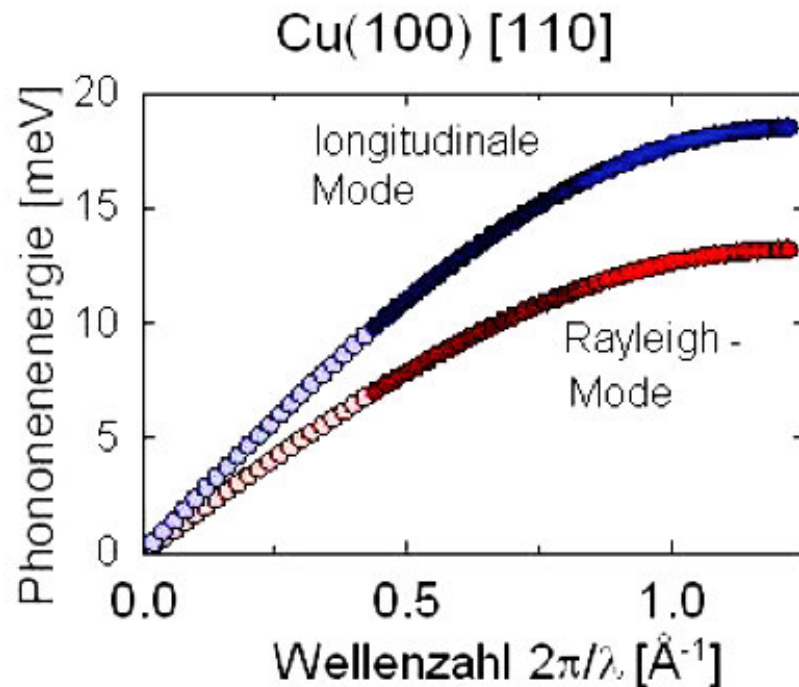
# Amplitudenverhältnis für Nachbaratome



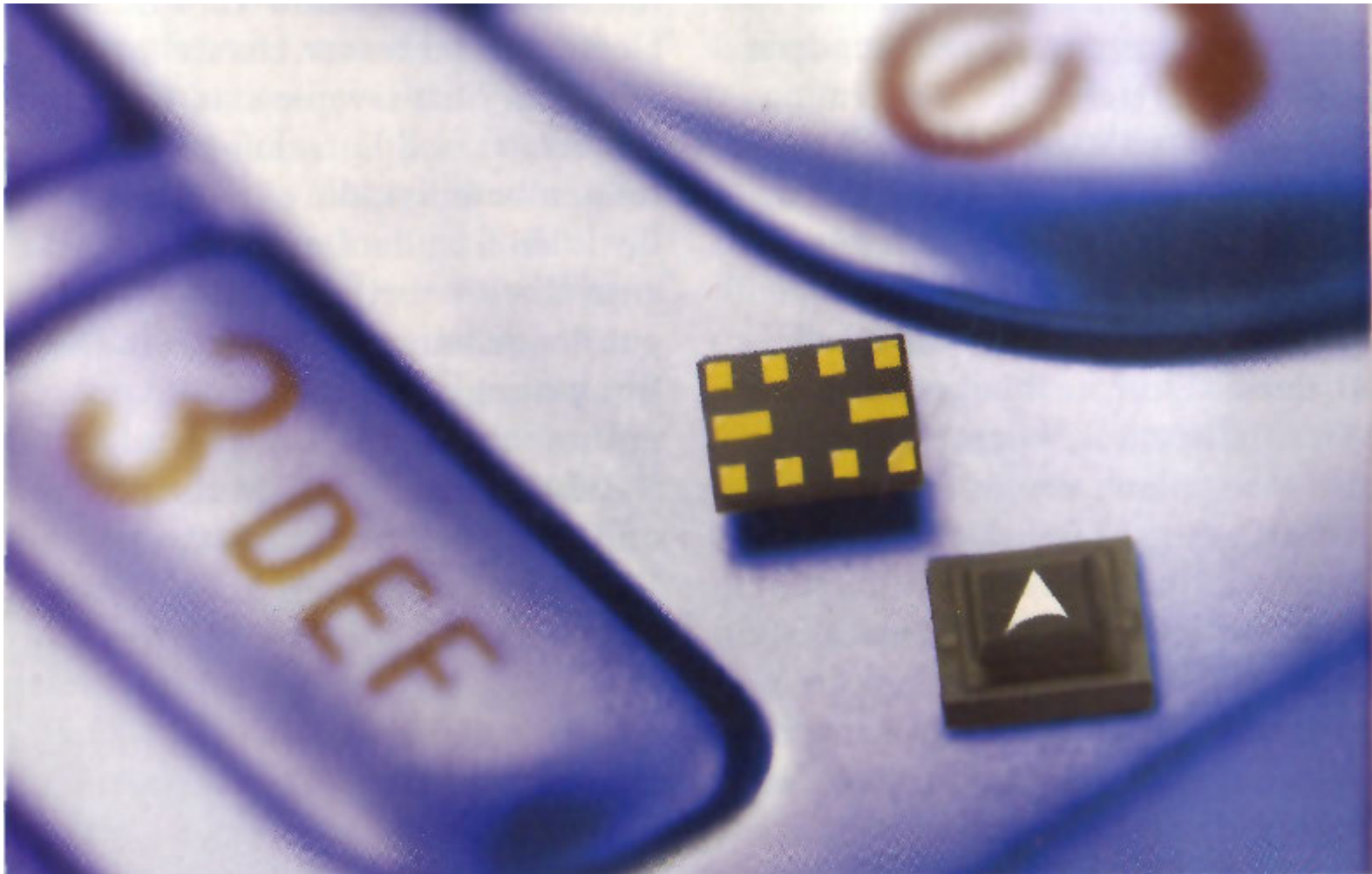
# Weitere Anregungen

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

Es gibt auch Lösungen in der Lücke, aber nur für imaginäre  $k$ . Das sind Oberflächenwellen, die ins Kristallinnere abklingen.



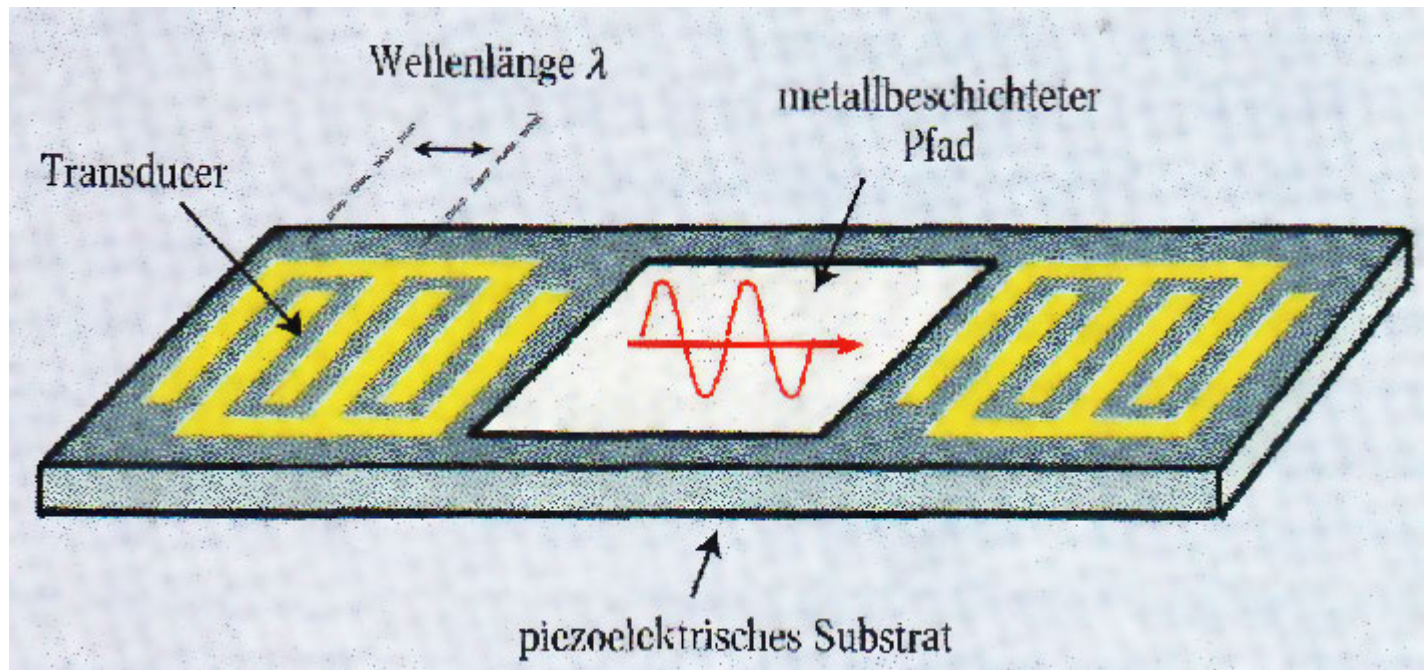
(Gruppe Chr. Wöll)



**Frequenzfilter für Handys, welche auf so genannten akustischen Oberflächenwellenelementen (SAW) beruhen, werden immer winziger. Hier ist ein typischer**

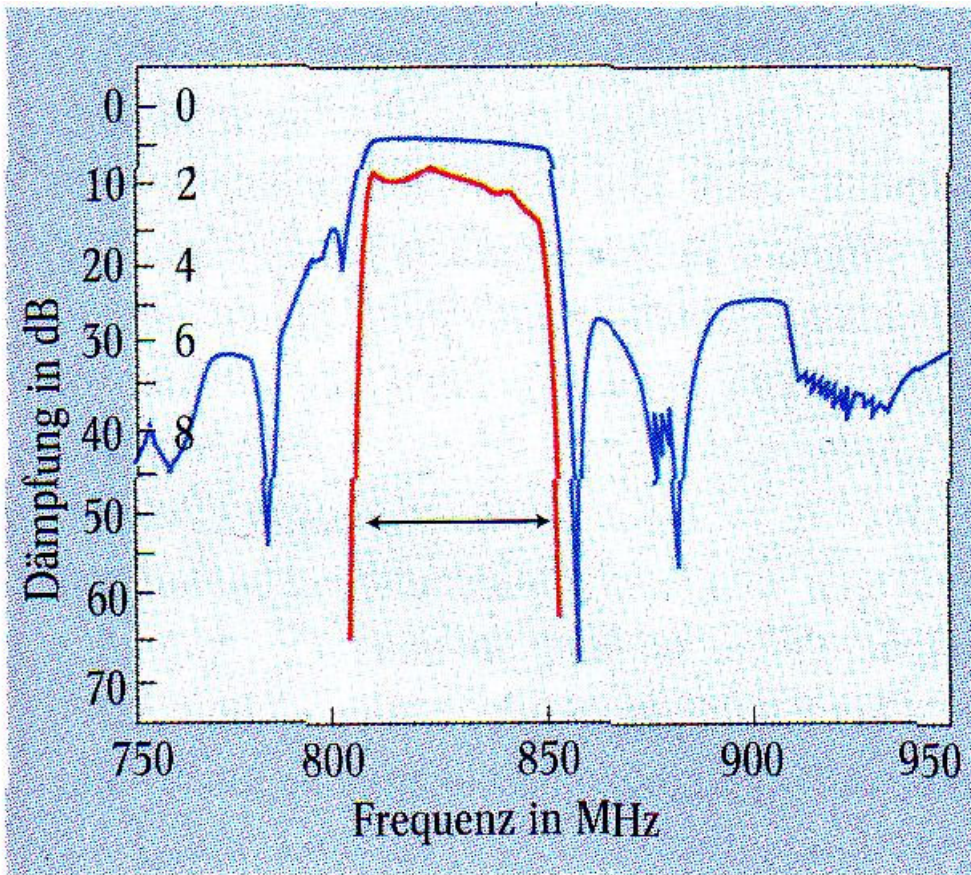
**SAW-Frequenzfilter (Kantenlänge 2 mm) für ein modernes Dualband-Handy zu sehen. (Quelle: Epcos)**

# Surface Acoustic Wave Filter

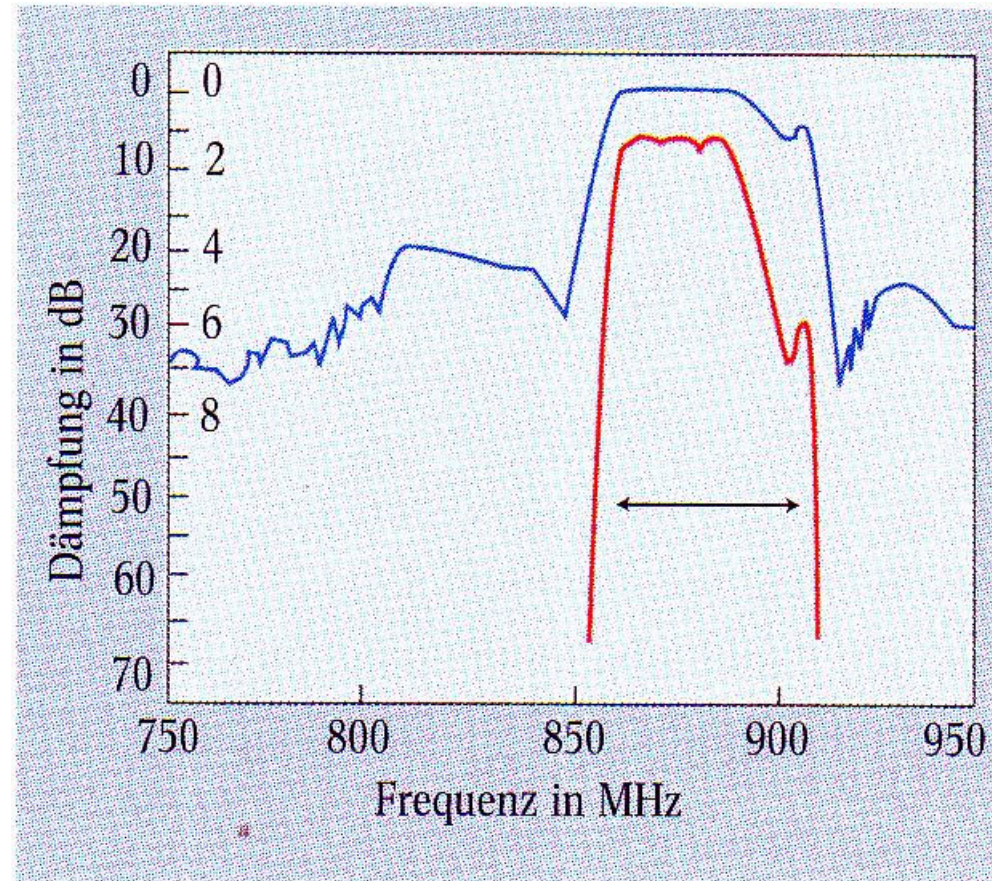


- ◆ Interdigitaler Wandler (IDT) auf piezoelektrischem Einkristall  
Lithiumniobat ( $\text{LiNbO}_3$ ), Quarz ( $\text{SiO}_2$ )
- ◆ akustische Oberflächenphononen
- ◆  $\lambda = 2 \times \text{Fingerabstand}$ , Durchlassfrequenz  $f_0 = v_{\text{Schall}} / \lambda$
- ◆ Zweiter IDT konvertiert in Spannungssignal
- Hohe Unterdrückung, konfigurierbar (z.B. via Fingerdesign)
- Niedrige Leistungen

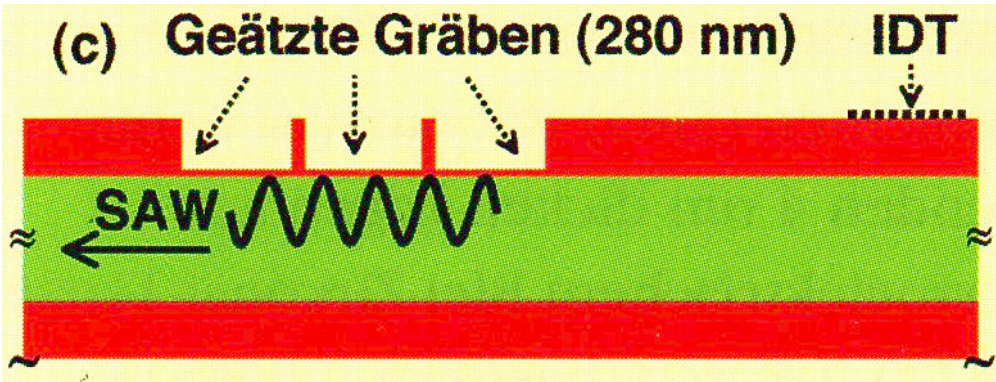
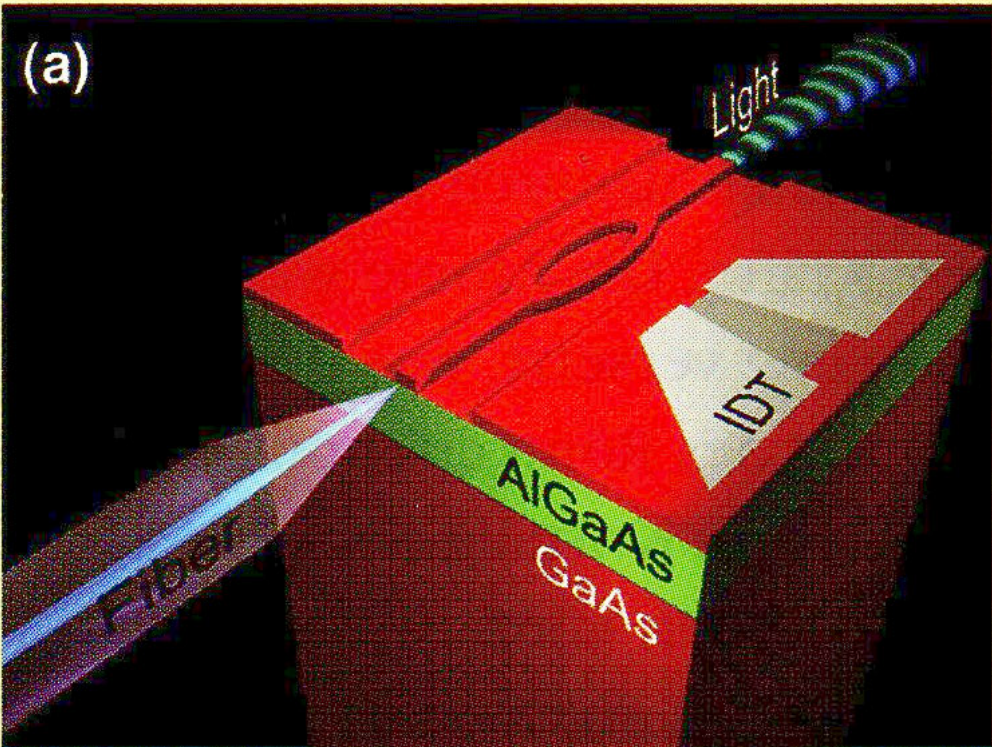
**Akustische Oberflächenwellen-Bau-  
elemente lassen sich als Frequenzfilter  
in Handys nutzen. Hier sieht man, wie  
ein SAW-Filter zwei verschiedene Fre-  
quenzbänder (rot, links: ca. 800-850  
MHz, rechts: ca. 850-920 MHz) aus dem**



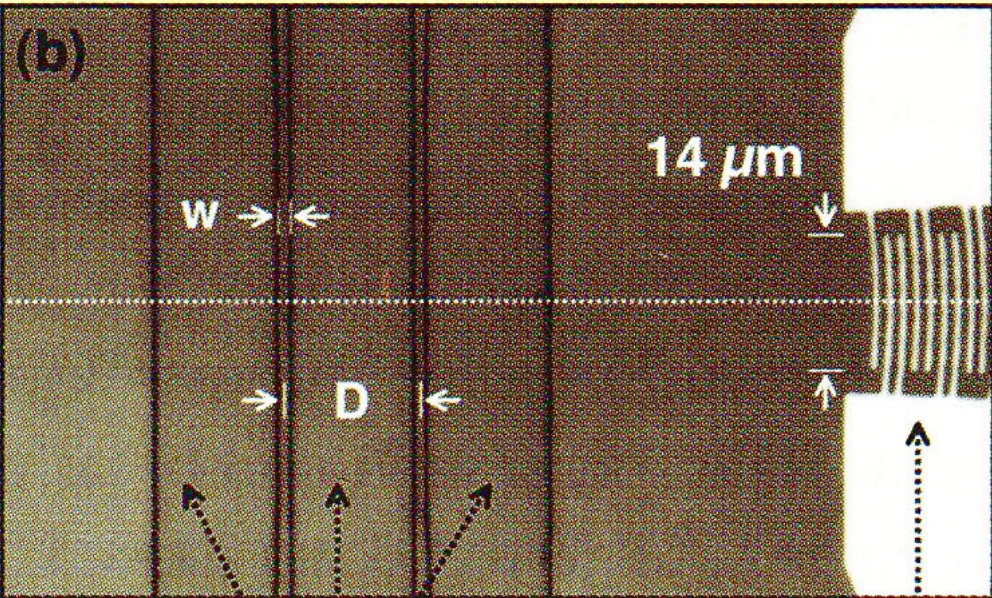
**Gesamtspektrum (blau) herausfiltert. Die  
Außenskala der (nach unten ansteigen-  
den) Signaldämpfung bezieht sich dabei  
auf die blauen, die Innenskala auf die  
roten Kurven. (Quelle: Murata)**



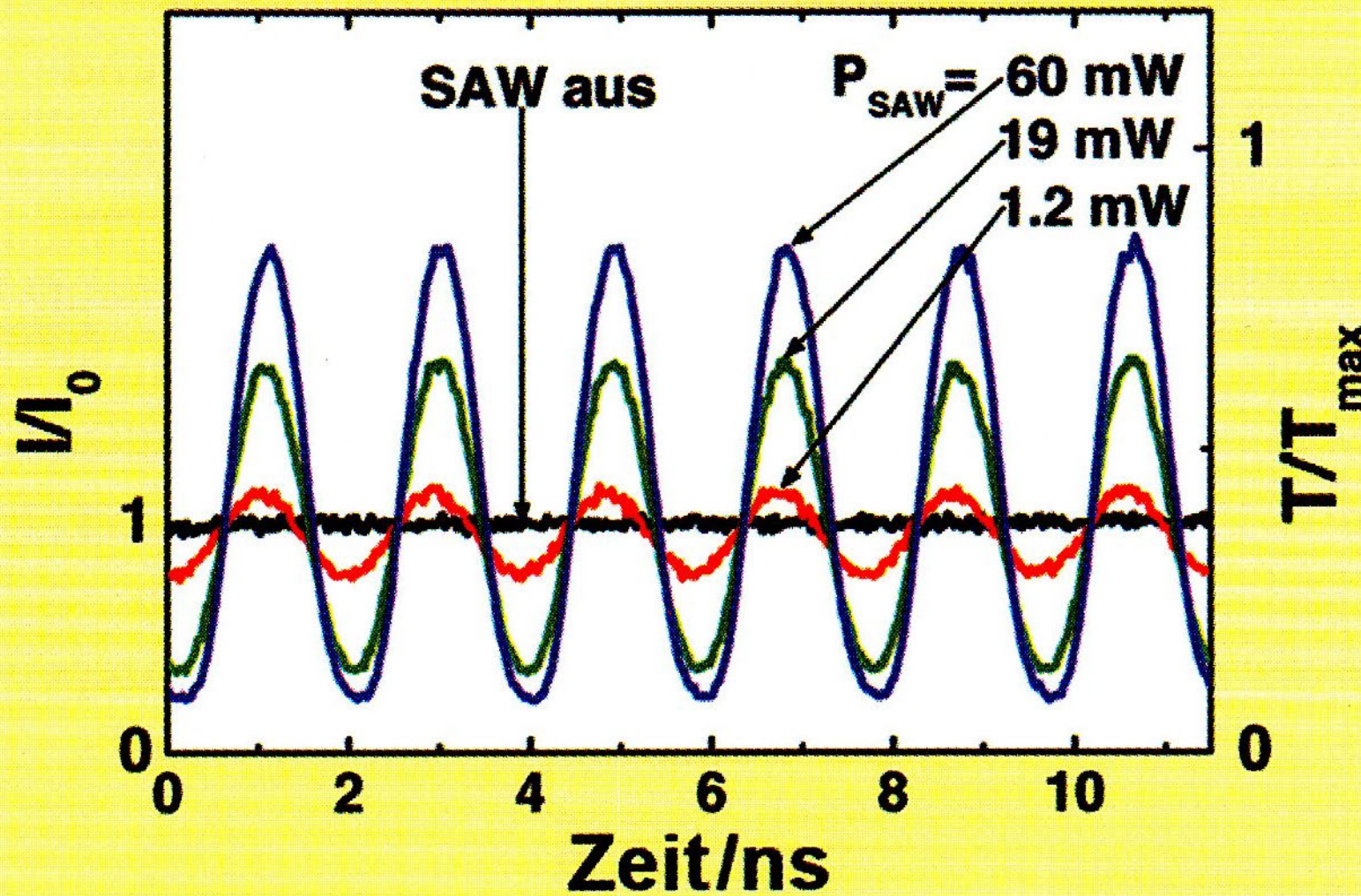
# Akustische Oberflächenwellen schalten Lichtstrahlen



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  $14 \mu\text{m}$ , entsprechend  $2,5 \lambda$ . 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.



**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 Transmissionskoeffizient.**