1 3.Übungsblatt-Phononen

1.1 Phonon dispersion relation for atoms on a 2-d square lattice

Das Gesetz von Newton beschreibt die Kraft zwischen Atomen auf einem Gitter, wobei nur die Wechselwirkung zwischen den nächsten Nachbarn berücksichtigt wird. Um die Differentialgleichung zu lösen, verwendet man ebene Wellen $\mathrm{u}_{n,m}$. Danach kann die Dispersionsrelation hergeleitet werden.
Für die Herleitung des Newton'schen Gesetz sei folgende Abbildung zu beachten:

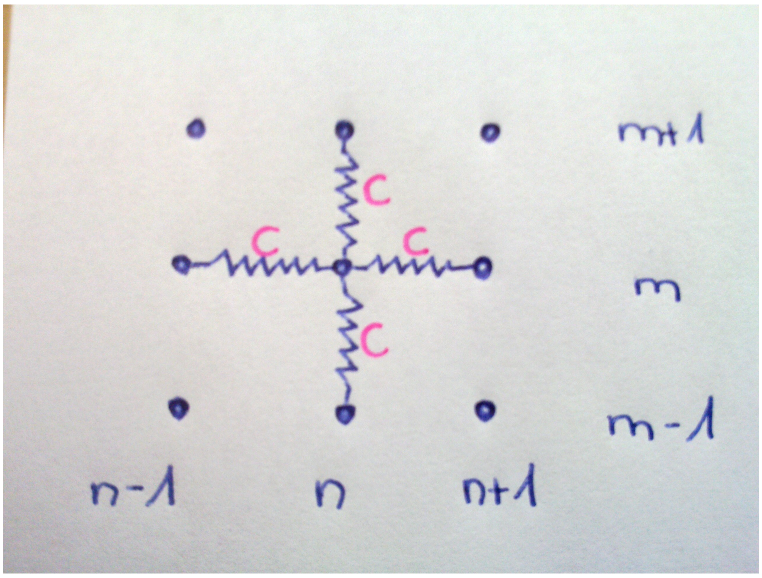

Abbildung 1: Skizze zur Veranschaulichung des Newton'schen Gesetzes.

Man erkennt die Atome, die an bestimmten Gitterplätzen sitzen. Zwischen ihnen sollen sich Federn mit gleicher Federkonstante befinden und man nimmt an, dass die Masse aller Atome gleich ist. Somit wechselwirken alle nächste Nachbarn in horizontale und vertikale Richtung, wobei aber diese nicht miteinander gekoppelt sondern unabhängig voneinander sind. In x-Richtung ergibt sich folgende Kraft:

$$\mathrm{F}_x = C \underbrace{\left(\mathrm{u}_{n+1,m} - \mathrm{u}_{n,m}\right)}_{nachRechts} - C \underbrace{\left(\mathrm{u}_{n,m} - \mathrm{u}_{n-1,m}\right)}_{nachLinks} \tag{1}$$

In y-Richtung folgt:

$$\mathrm{F}_y = C\underbrace{\left(\mathrm{u}_{n,m+1} - \mathrm{u}_{n,m}\right)}_{nachOben} - C\underbrace{\left(\mathrm{u}_{n,m} - \mathrm{u}_{n,m-1}\right)}_{nachUnten} \tag{2}$$

Die Gesamtkraft berechnet sich so zu:

$$\mathrm{F} = \frac{d^2}{dt^2}\mathrm{u}_{n,m} = \mathrm{F}_x + \mathrm{F}_y$$

Wir erhalten schlussendlich folgende Differentialgleichung:

$$M\frac{d^2\mathrm{u}_{n,m}}{dt^2} = C[(\mathrm{u}_{n+1,m} - 2\mathrm{u}_{n,m} + \mathrm{u}_{n-1,m}) + (\mathrm{u}_{n,m+1} - 2\mathrm{u}_{n,m} + \mathrm{u}_{n,m-1})] \tag{3}$$

Zur Lösung dieser Gleichung verwende einen Ansatz der folgenden Form:

$$\mathrm{u}_{n,m} = A_{\vec{k}} \exp(i(\mathrm{nk}_x\mathrm{a} + \mathrm{mk}_y\mathrm{a} - \omega t)) \tag{4a}$$

$$\frac{d}{dt}\mathrm{u}_{n,m} = -A_{\vec{k}} i\omega \exp(i(\mathrm{nk}_x\mathrm{a} + \mathrm{mk}_y\mathrm{a} - \omega t)) \tag{4b}$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\mathrm{u}_{n,m} = -A_{\vec{k}} \omega^2 \exp(i(\mathrm{nk}_x\mathrm{a} + \mathrm{mk}_y\mathrm{a} - \omega t)) \tag{4c}$$

Setzt man die Gleichungen (??)-(??) in das Gesetz (??) ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} -M\omega^2 A_{\vec{k}} \exp(i(\mathrm{nk}_x\mathrm{a} + \mathrm{mk}_y\mathrm{a} - \omega t)) &= C\big[\big(A_{\vec{k}} \exp(i((\mathrm{n}+1)\mathrm{k}_x\mathrm{a} + \mathrm{mk}_y\mathrm{a} - \omega t)) \\ &- 2A_{\vec{k}} \exp(i(\mathrm{nk}_x\mathrm{a} + \mathrm{mk}_y\mathrm{a} - \omega t)) \\ &+ A_{\vec{k}} \exp(i((\mathrm{n}-1)\mathrm{k}_x\mathrm{a} + \mathrm{mk}_y\mathrm{a} - \omega t))\big) \\ &+ \big(A_{\vec{k}} \exp(i(\mathrm{nk}_x\mathrm{a} + (\mathrm{m}+1)\mathrm{k}_y\mathrm{a} - \omega t)) \\ &- 2A_{\vec{k}} \exp(i(\mathrm{nk}_x\mathrm{a} + \mathrm{mk}_y\mathrm{a} - \omega t)) \\ &+ A_{\vec{k}} \exp(i(\mathrm{nk}_x\mathrm{a} + (\mathrm{m}-1)\mathrm{k}_y\mathrm{a} - \omega t))\big)\big] \end{aligned} \tag{5}$$

Nun wird auf beiden Seiten mit $A_{\vec{k}} \exp(i(\mathrm{nk}_x\mathrm{a} + \mathrm{mk}_y\mathrm{a} - \omega t))$ gekürzt. So bleibt:

$$-M\omega^2 = C\big[\big(\exp(i\mathrm{k}_x\mathrm{a}) - 2 + \exp(-i\mathrm{k}_x\mathrm{a})\big) + \big(\exp(i\mathrm{k}_y\mathrm{a}) - 2 + \exp(-i\mathrm{k}_y\mathrm{a})\big)\big] \tag{6}$$

Dies kann nun umgeformt werden zu:

$$\omega = \pm\sqrt{\frac{2C}{M}\big(2 - \cos(\mathrm{k}_x\mathrm{a}) - \cos(\mathrm{k}_y\mathrm{a})\big)} \tag{7}$$

Diese Dispersionsrelation $\omega(k)$ entspricht jener, die es galt zu zeigen.
Nun soll die Dispersionsrelation graphisch ausgewertet werden. Hierzu wird C=1 und M=1 gewählt.

1.1.1 $\mathrm{k} = \mathrm{k}_x$, $\mathrm{k}_y = 0$

Hier gilt:

$$\omega = \pm\sqrt{\frac{2C}{M}\big(1 - \cos(ka)\big)}$$

In der folgenden Abbildung sind Ergebnisse für verschiedene Werte von a dargestellt.

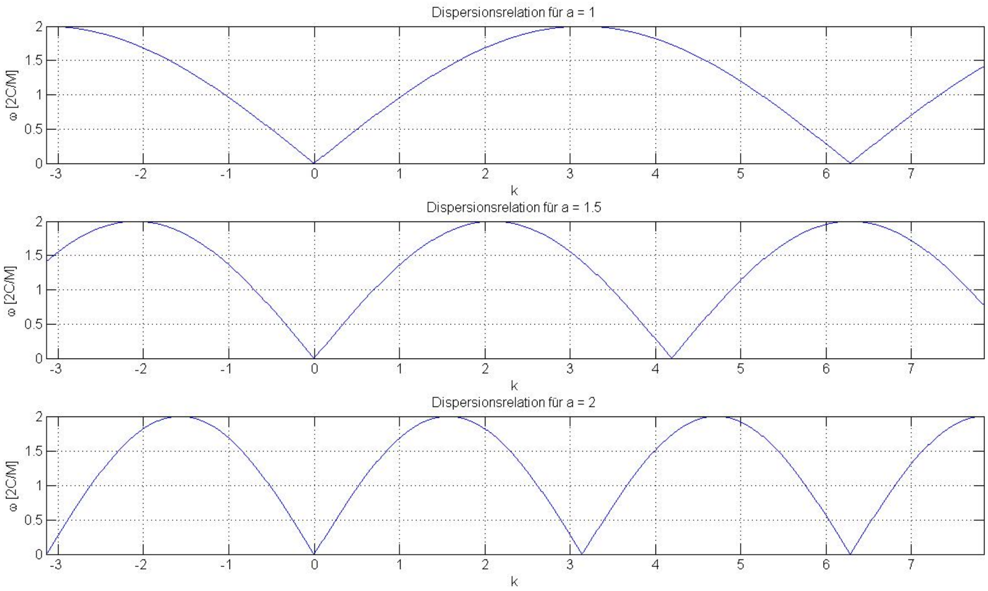

Abbildung 2: Dispersionsrelation

1.1.2 $\mathrm{k} = \mathrm{k}_x = \mathrm{k}_y$

Hier gilt:

$$\omega = \pm\sqrt{\frac{2C}{M}\big(2 - 2\cos(ka)\big)}$$

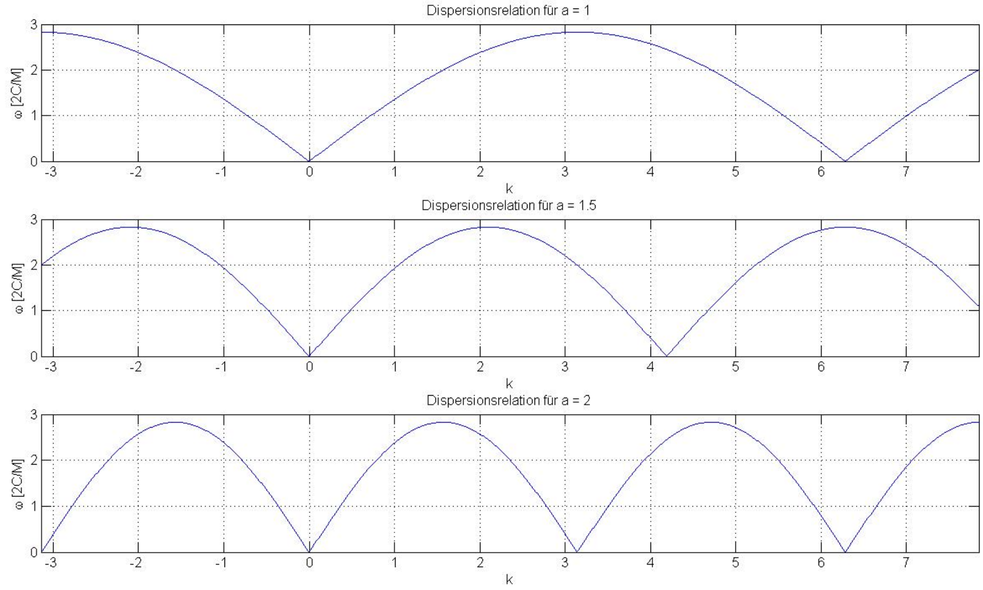

Abbildung 3: Dispersionsrelation

2 Erklärung

2.1 Phononen

Phononen sind Quasiteilchen, die verwendet werden um Gitterschwingungen in einem Kristall mit einem vereinfachten Modell zu beschreiben. Sie sind delokalisiert, ihnen kann also kein bestimmter Ort zugewiesen werden.
Man nimmt an, dass Atome an einem bestimmten Gitterplatz eine Masse besitzen und diese Atome miteinander durch Federn gekoppelt sind. Um diese Wechselwirkung untereinander zu beschreiben, wird das Newton'sche Gesetz herangezogen. Aus dieser erhält man dann die Dispersionsrelation $\omega(k)$ und in weiterer Folge die Zustandsdichte $D(\omega)$. Bei den Phononen erhält man aus $\omega(k)$ zwei Zweige (akustisch und optisch), wenn man annimmt, dass unterschiedliche Atome (unterschiedliche Masse) an der Schwingung im Festkörper beteiligt sind, wobei der optische höher als der akustische ist.
Sollte es nun zwei Massen M_1 und M_2 geben, dann gilt:

- akustischer Zweig: Die beiden Massen schwingen gleich.
- optischer Zweig: Die beiden Massen schwingen gegeneinander.
- Es gibt p Atome pro Einheitszelle.

- 3p Zweige.
- 3 akustische Zweige (1 longitudinal, 2 transversal)
- 3p-3 optische Zweige

2.2 Dispersionsrelation

Dies ist eine Beziehung zwischen der Kreisfrequenz ω und dem Wellenvektor k. Man erhält sie durch eine Fouriertransformation aus der Wellengleichung und hat allgemein die Form:

$$\omega = f(k)$$

Den Phononen (Gitterschwingungen des Atomgitters) kann eine Dispersionsrelation zugeordnet werden.

2.3 Brillouin-Zone

Die Brillouin Zone beschreibt einen symmetrischen Polyeder im reziproken Gitter. Die erste Brillouin Zone ist die primitve Wigner-Seitz Zelle des reziproken Gitters eines Kristalls. Für die Konstruktion wählt man einen Gitterpunkt und halbiert alle Verbindungsstrecken zu sämtlich anderen Punkten durch Normalebenen, d. h. durch Ebenen, auf denen die Verbindungsstrecken jeweils senkrecht stehen. Indem man die Mittelsenkrechte (bzw. -ebene in 3D) zu allen Punkten einzeichnet, erhält man rund um den Gitterpunkt eine Fläche (bzw. Volumen in 3D). Das Polyeder, das durch die Normalebenen begrenzt wird, ist die Brillouin-Zone.

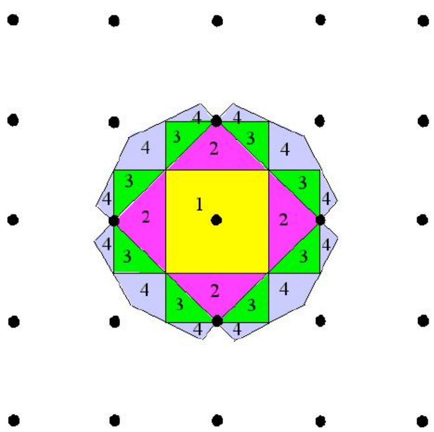

Abbildung 4: Konstruktion und Veranschaulichung der Brillouin-Zone in 2D.

2.4 Zustandsdichte

Die Zustandsdichte $D(\omega)$ ist eine physikalische Größe, die angibt, wie viele Zustände innerhalb eines Frequanzbereichs $[\omega, \omega + d\omega]$ existieren. Um sie numerisch zu berechnen, müsste man ω für jedes erlaubte k in der ersten Brillouin-Zone berechnen. In unserem Fall sieht die Zustandsdichte wie folgt aus:

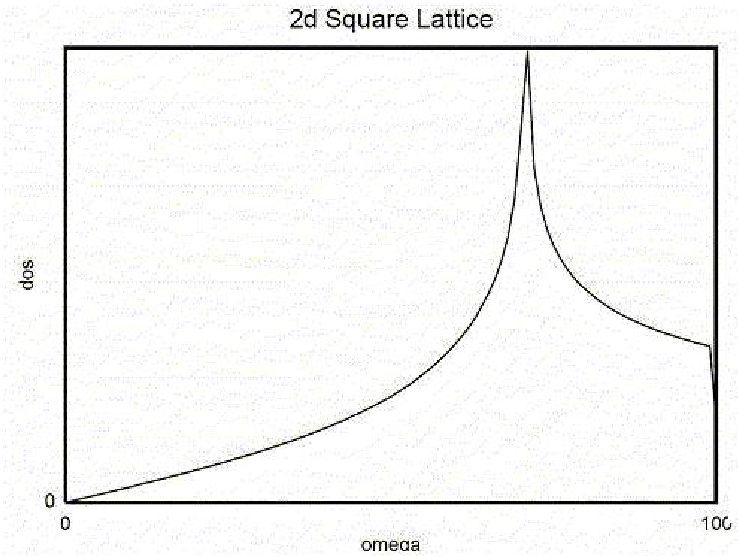

Abbildung 5: Zustandsdichte in 2D square Gitter.

3 Anhang

Matlab Code zu den obigen Plots:

```
clc;
close all;
clear all;

C=1;
M=1;
a=[1,1.5,2];
K=2.*C./M;
k=-pi:0.01:5*pi/2;
omega=zeros(6,numel(k));
omega1=zeros(6,numel(k));

```

```
for n=1:3
    omega(n,:)=sqrt(K.*(1-cos(k.*a(n))));
    omega(3+n,:)=-sqrt(K.*(1-cos(k.*a(n))));
    omega1(n,:)=sqrt(K.*(2-2.*cos(k.*a(n))));
    omega1(3+n,:)=-sqrt(K.*(2-2.*cos(k.*a(n))));
end

figure(1)
for n=1:3
    subplot(numel(a),1,n)
    plot(k,omega(n,:),'b',k,omega(3+n,:),'r');
    xlabel('k');
    ylabel('\omega [2C/M]');
    xlim([min(k) max(k)]);
    legend('optisch','akustisch');
    title(['Dispersionsrelation für a = ',num2str(a(n))]);
    grid on;
end
figure(2)
for n=1:3
    subplot(numel(a),1,n)
    plot(k,omega1(n,:),'b',k,omega1(3+n,:),'r');
    xlabel('k');
    ylabel('\omega [2C/M]');
    xlim([min(k) max(k)]);
    legend('optisch','akustisch');
    title(['Dispersionsrelation für a = ',num2str(a(n))]);
    grid on;
end
```