

5. Übungsblatt

Verteilung 23. Oktober 2007
Besprechung 31. Oktober/1. November 2007

Thema: Phononen (Teil 1)

Aufgabe 1: *Ein Modell für Gitterschwingungen: Phononen und Elastizität*

Untersuchen Sie die Dynamik von Kristallebenen bestehend aus Atomen der Masse M . Die Grösse $u_n(t)$ gibt die Auslenkung der Atome in Ebene n aus ihrer Ruhelage an (d.h. senksrecht zur Ebene n). Wechselwirkungen sollen zunächst zwischen *beliebig* weit entfernten Ebenen möglich sein. Die Kraft pro Atom F_n in Ebene n ist also gegeben durch

$$F_n = \sum_s C_s (u_{n+s} - u_n) + C_s (u_{n-s} - u_n),$$

wobei C_s die Kraftkonstante pro Atom für die Wechselwirkung einer Ebene mit ihrem s -ten Nachbarn ist. Stellen Sie die klassischen Bewegungsgleichungen für die Ebenen auf.

1. Lösen Sie die Bewegungsgleichung mit dem Ansatz $u_n(t) = A \exp[i(nka - \omega t)]$, wobei a der Gleichgewichtsabstand der Ebenen und k ein Wellenvektor ist. Geben Sie die Dispersionsrelation $\omega(k)$ an.
2. Zur Vereinfachung betrachten Sie in diesem Aufgabenteil nur Wechselwirkung zwischen direkten Nachbarn, also $C_s = 0$ für $s > 1$.
 - Skizzieren Sie die Dispersionsrelation. Welche Bedeutung hat die Steigung der Dispersion für $k \rightarrow 0$?
 - Wie sieht die Welle für $k \rightarrow \pm\pi/a$ aus? Welche Steigung hat die Dispersion dort?
 - Welche Bedingung ergibt sich für den Wellenvektor k , wenn der Kristall aus N Kristallebenen besteht? **Tipp:** Verwenden Sie die periodische Randbedingung $u_0(t) = u_N(t)$.
 - Gibt es Gitterschwingungen mit $k > \pi/a$? **Tipp:** Zeigen Sie, dass jede Gitterschwingung mit $k > \pi/a$ auf eine Schwingung in der ersten Brillouin-Zone zurückgeführt werden kann.
 - Wieviele Phononenmoden (mögliche k -Werte) gibt es für den Kristall mit N Kristallebenen? Skizzieren Sie für $N = 3, 10, 30$ die Dispersion.
3. Angenommen, Sie haben die Dispersion $\omega(k)$ in einem Experiment ausgemessen. Wie können Sie die Koeffizienten C_s bestimmen? **Tipp:** Interpretieren Sie die allgemeine Dispersionsrelation aus Teilaufg. 1 als Fourierreihe (Teilergebnis: $\omega^2(k) = \sum_s \frac{2C_s}{M} [1 - \cos(ska)]$). Wie können Sie die Fourierkoeffizienten bestimmen?
4. Zeigen Sie, dass die Bewegungsgleichungen der diskreten Kristallebenen im Grenzfall grosser Wellenlängen in die Differentialgleichung für Wellen in kontinuierlichen Medien

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}$$

übergeht. Wie hängt die Schallgeschwindigkeit c mit den Federkonstanten C_s zusammen? Wie hängt das Elastizitätsmodul des Materials mit den C_s zusammen? **Tipp:** Entwickeln Sie unter der Bedingung $ka \ll 1$ die Funktionen $u_{n+s} = u(x_n + sa)$ in eine Taylorreihe bis zur 2. Ordnung.

5. GaAs (Zinkblende Struktur, d.h. fcc-Gitter mit zweiatomiger Basis) hat eine Gitterkonstante von $d = 5.65 \text{ \AA}$ und eine Schallgeschwindigkeit $c = 4.73 \times 10^5 \text{ cm/s}$ für longitudinal akustische Phononen in der (100)-Richtung. Schätzen Sie die Kraftkonstante C_1 der "Elementarfeder" ab (unter Vernachlässigung von Wechselwirkungen, die über die benachbarten Gitterebenen hinausgehen).
6. Ein Rasterkraftmikroskop tastet mit einer im Idealfall atomar scharfen Spitze eine Oberfläche ab. Die Spitze ist am Ende eines federnden Cantilevers (engl. cantilever = frei tragender Arm) angebracht. Welche Federkonstante wählen Sie für den Cantilever, damit Sie ein atomar scharfes Bild der Oberfläche erhalten (d.h. einen Höhenkontrast von 100pm)? Die Kräfte zwischen Spitze und Oberfläche sind in der Grössenordnung von 0.1nN (van der Waals-Kräfte). Vergleichen Sie den Wert der Federkonstante mit dem Resultat aus Teilaufgabe 5. Wie sollte das Verhältnis der Federkonstanten von Cantilever und "Elementarfeder" gewählt werden?