5. Übungsblatt: Lösungen 31. Oktober/1. November 2007

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

1. Die Bewegungsgleichung für die Atome in der Ebene n lautet

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = \sum_s C_s(u_{n+s} + u_{n-s} - 2u_n).$$

Dabei beschreibt $u_n(t)$ die Auslenkung der Atome in der Ebene n senkrecht zu dieser Ebene. Einsetzen des angegebnen Ansatzes $u_n(t) = A\exp\left[i\left(nka - \omega t\right)\right]$ ergibt

$$\omega^2 \quad = \quad \sum_s \frac{2C_s}{M}\left[1 - \cos(ska)\right] = \sum_s \frac{4C_s}{M}\sin^2(ska/2).$$

Die Dispersionsrelation lautet also

$$\omega(k) = \sqrt{\sum_s \frac{4C_s}{M}\sin^2(ska/2)}.$$

2. - Für die Dispersionsrelation folgt aus Teilaufgabe 1:

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}}\left|\sin(ka/2)\right|.$$

Für $k \to 0$ ist die Dispersion linear, d.h. $\omega = \sqrt{C/M}ka$. Die Steigung ist die Schallgeschwindigkeit $c = \sqrt{Ca^2/M}$.

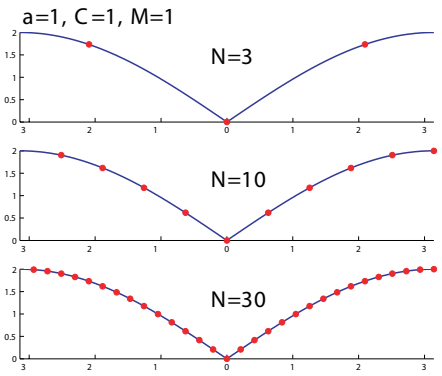
- Für $k \to \pm\pi/a$ (Rand der ersten Brillouin-Zone) ergeben sich die Amplituden $u_n = A(-1)^n\exp(-i\omega t)$. Benachbarte Ebenen schwingen also genau gegenphasig, es handelt sich um eine stehende Welle. Die Steigung der Dispersion (=Gruppengeschwindigkeit) ist Null.
- Es soll gelten:

$$A\exp\left[i(0\cdot ka - \omega t)\right] = A\exp\left\{i\left[Nka - \omega t\right]\right\}.$$

Daraus ergibt sich $1 = \exp\left[iNka\right]$, d.h. $Nka = 2\pi\cdot p$, wobei p eine ganze Zahl ist, oder

$$k_p = \frac{2\pi}{Na}\cdot p\,.$$

- Es gilt $\exp\left[(in(k' - 2\pi/a)a\right] = \exp(ink'a)$. Der Wellenvektor $k = k' - 2\pi/a$ mit der Eigenschaft $-\pi/a < k < \pi/a$ beschreibt also genau die gleichen Auslenkungen wie der Wellenvektor k'. Damit ist die zweite Brillouin-Zone auf die erste "zurückgefaltet". Gleiches gilt für die höheren Brillouin-Zonen.
- Aus $-\pi/a < k_p = 2\pi/(Na)\cdot p \leq \pi/a$ ergibt sich $-N/2 < p \leq N/2$. Für N Ebenen gibt es also N Moden. Die nachstehende Abbildung zeigt das Auffüllen der diskreten Dispersion mit zunehmender Anzahl Gitterebenen.



3. Das Quadrat der Dispersion ist eine gerade Funktion mit Periode $2\pi/a$. Um die Fourierkoeffizienten zu erhalten, multipliziert man auf beiden Seiten mit $\cos(nka)$ und integriert über die erste Brillouin-Zone:

$$\begin{aligned}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk\omega^2(k)\cos(nka) &= \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \sum_s \frac{2C_s}{M}\left[1-\cos(ska)\right]\cos(nka) \\ &= -\frac{2\pi C_n}{Ma}.\end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$C_n = -\frac{Ma}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk\omega^2(k)\cos(nka).$$

4. Taylorentwicklung ergibt:

$$u_{n+s} - 2u_n + u_{n-s} = \frac{\partial^2 u(x_n,t)}{\partial x^2}\cdot s^2a^2.$$

Damit lautet die Bewegungsgleichung:

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

mit

$$c^2 = \frac{a^2}{M}\sum_s C_s s^2.$$

In der Kontinuumsmechanik gilt der Zusammenhang

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

wobei ρ die Massendichte und E das Elastizitätsmodul des Materials ist. Daraus ergibt sich

$$E = \rho c^2 = \frac{\rho a^2}{M}\sum_s C_s s^2.$$

5. In der kubischen Einheitszelle befinden sich vier Ga und vier As Atome. Unter der Annahme, dass nur benachbarte Ebenen wechselwirken ($C_s = 0$ für $s > 1$), ergibt sich aus Teilaufgabe 4:

$$C_1 = \frac{Mc^2}{a^2}.$$

Der Abstand der Ebenen a im fcc-Gitter ist die halbe Gitterkonstante, die Masse M ist die Summe der Massen von Ga und As. Es folgt

$$C_1 = 269\frac{\mathrm{N}}{\mathrm{m}}.$$

6. Aus dem Hook'schen Gesetz erhalten wir für die Federkonstante k:

$$k = \frac{Kraft}{Auslenkung} = \frac{0.1nN}{0.1nm} = 1\frac{N}{m}$$

Der AFM-Cantilever soll die Oberfläche abtasten, ohne die Atome signifikant zu verschieben. Man kann auch sagen, die Cantileverfeder soll weich gegen die atomare Elementarfeder sein.