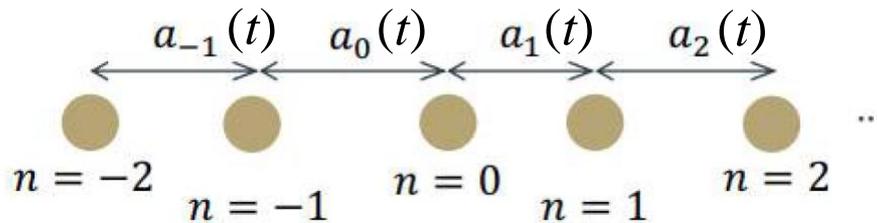


# Jetzt: Strukturelle Dynamik

## I.5 Phononen (Gitterschwingungen)



### Fahrplan

- Schwingungsfrequenzen  $\omega(k)$  („Dispersionsrelation“)
- Dispersion für komplexere Strukturen
- Quantisierung der Energien  $E_n = \hbar\omega (n + 1/2)$
- Thermische Anregung via Bose-Einstein-Statistik
- Resultierende kollektive Eigenschaften / Wärmekapazität etc.
- Experimentelle Beobachtung / Phononenspektroskopie
- Implikationen für andere Eigenschaften (d.h. für alles !)

[http://www.soft-matter.uni-tuebingen.de/vorlesung\\_ws23\\_condmat.html](http://www.soft-matter.uni-tuebingen.de/vorlesung_ws23_condmat.html)

Ergänzungen zur Vorlesung

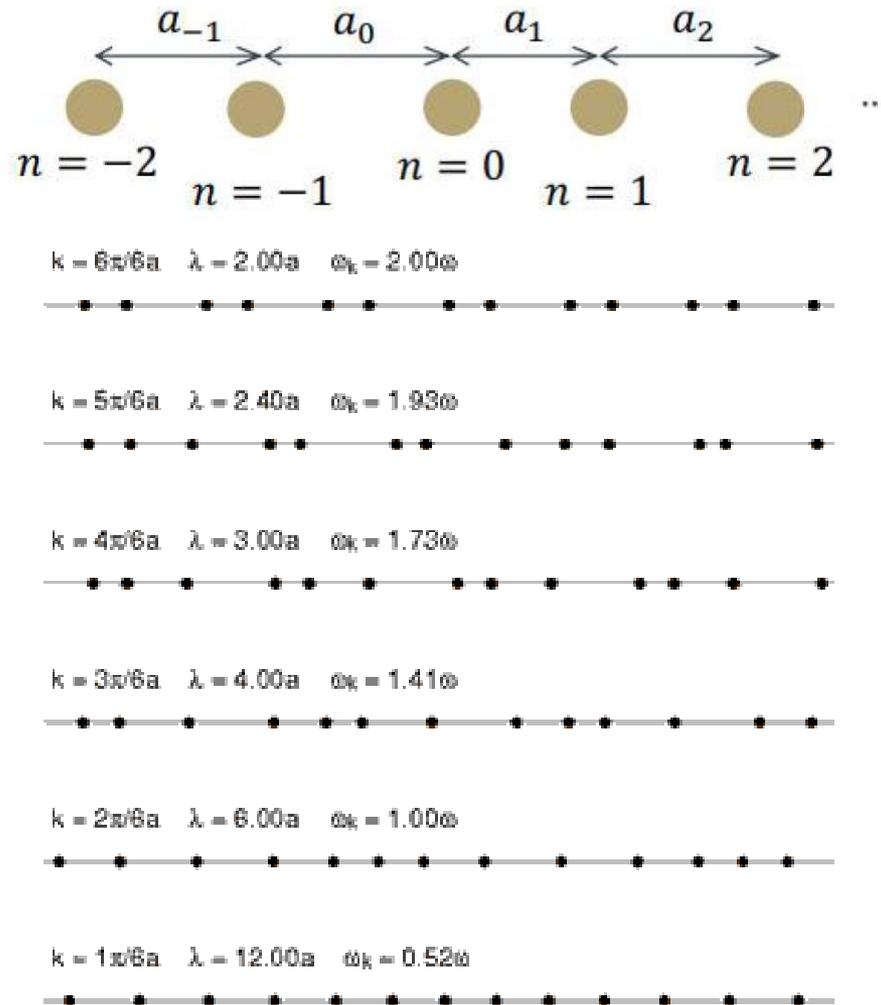
... Zusammenfassung Phononen

... Zusammenfassung Quantenstatistik

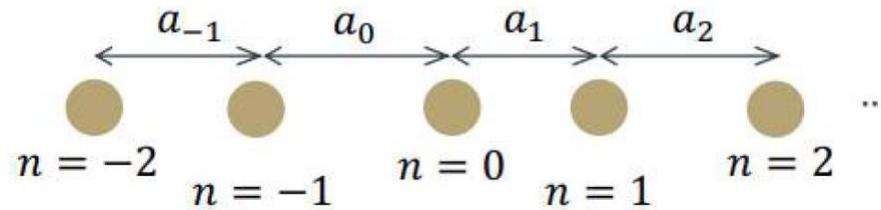
... Neutron spectroscopy

... Neutron spectroscopy II (phonons and magnons; animations)

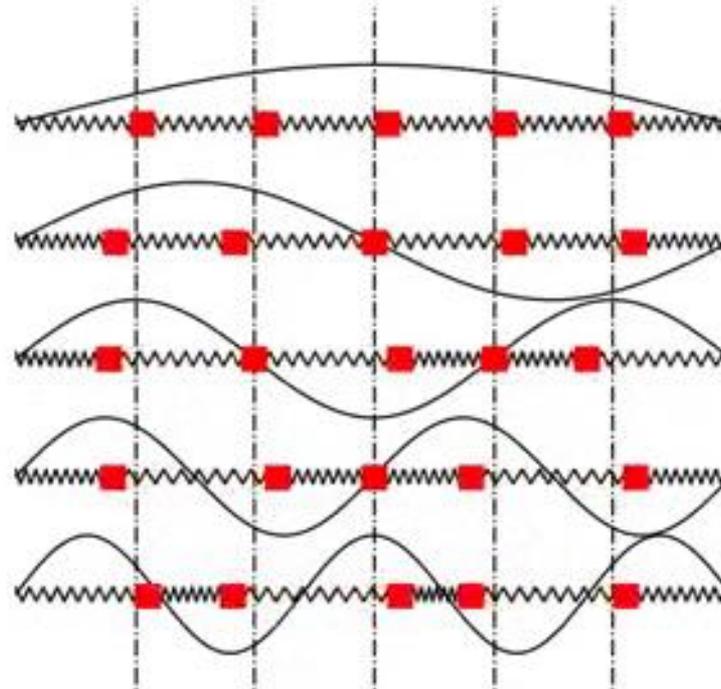
# Jetzt: Strukturelle Dynamik



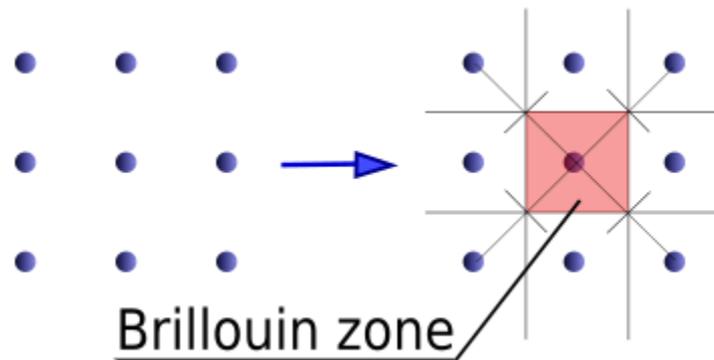
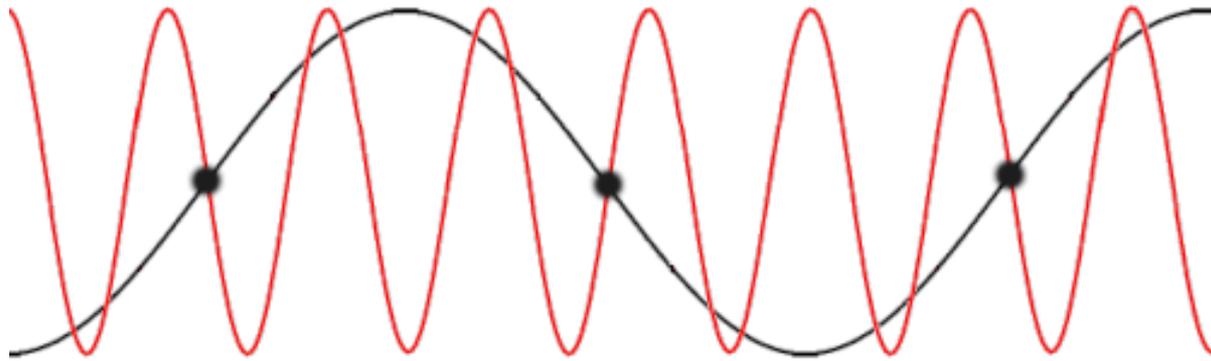
# Jetzt: Strukturelle Dynamik



©2017, Bhaskar Kamble

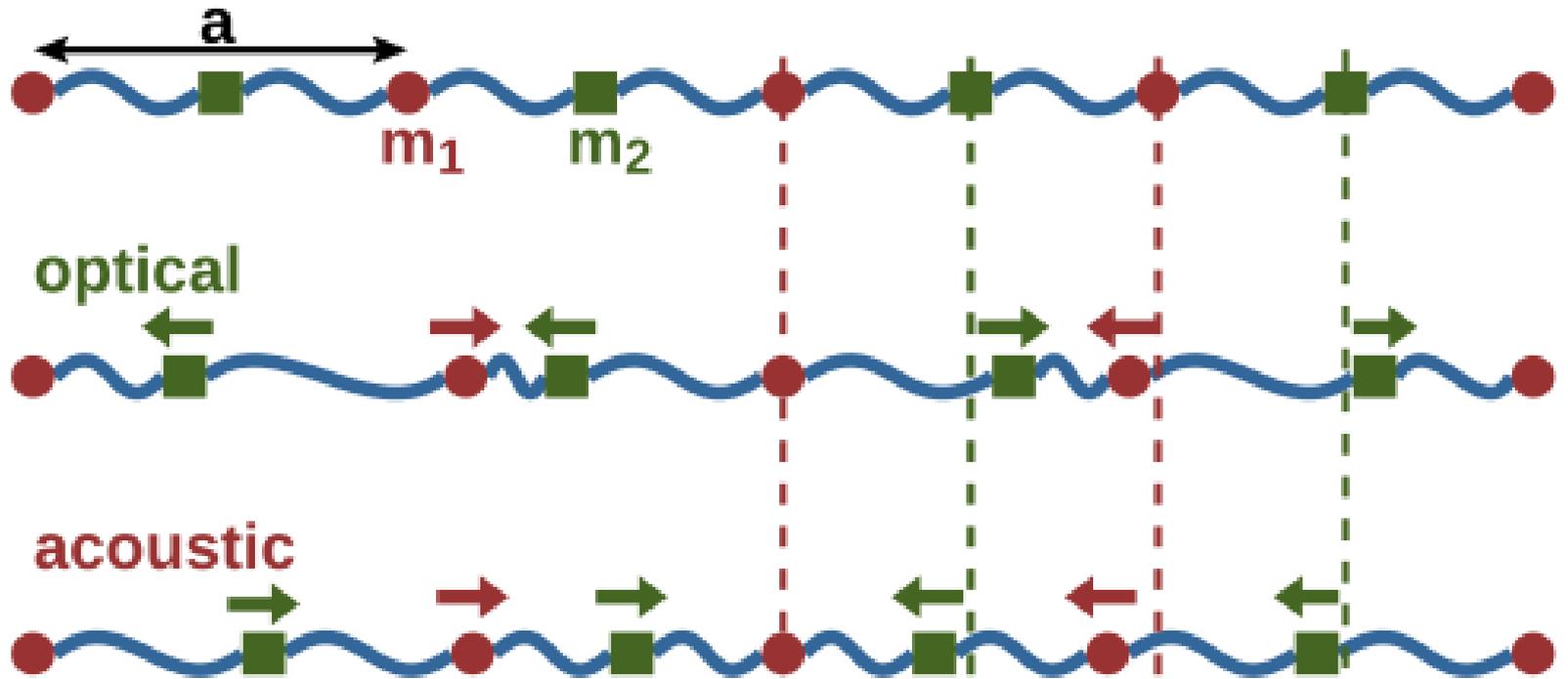


# Periodizität impliziert: 1. Brillouin-Zone reicht

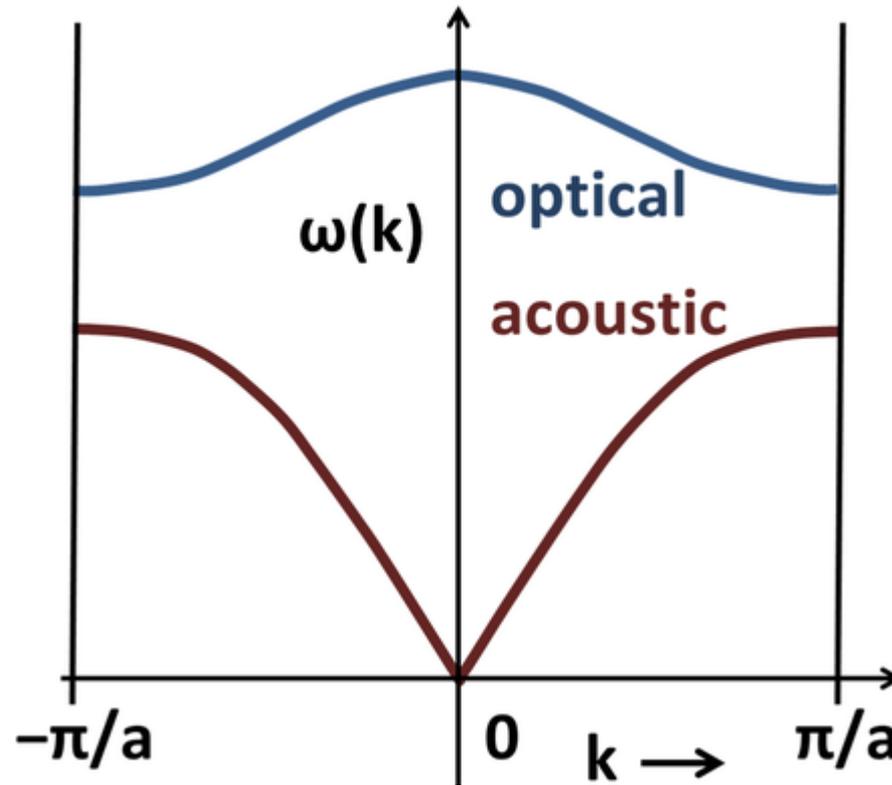


## 2-atomare Kette: Akustischer und optischer Zweig

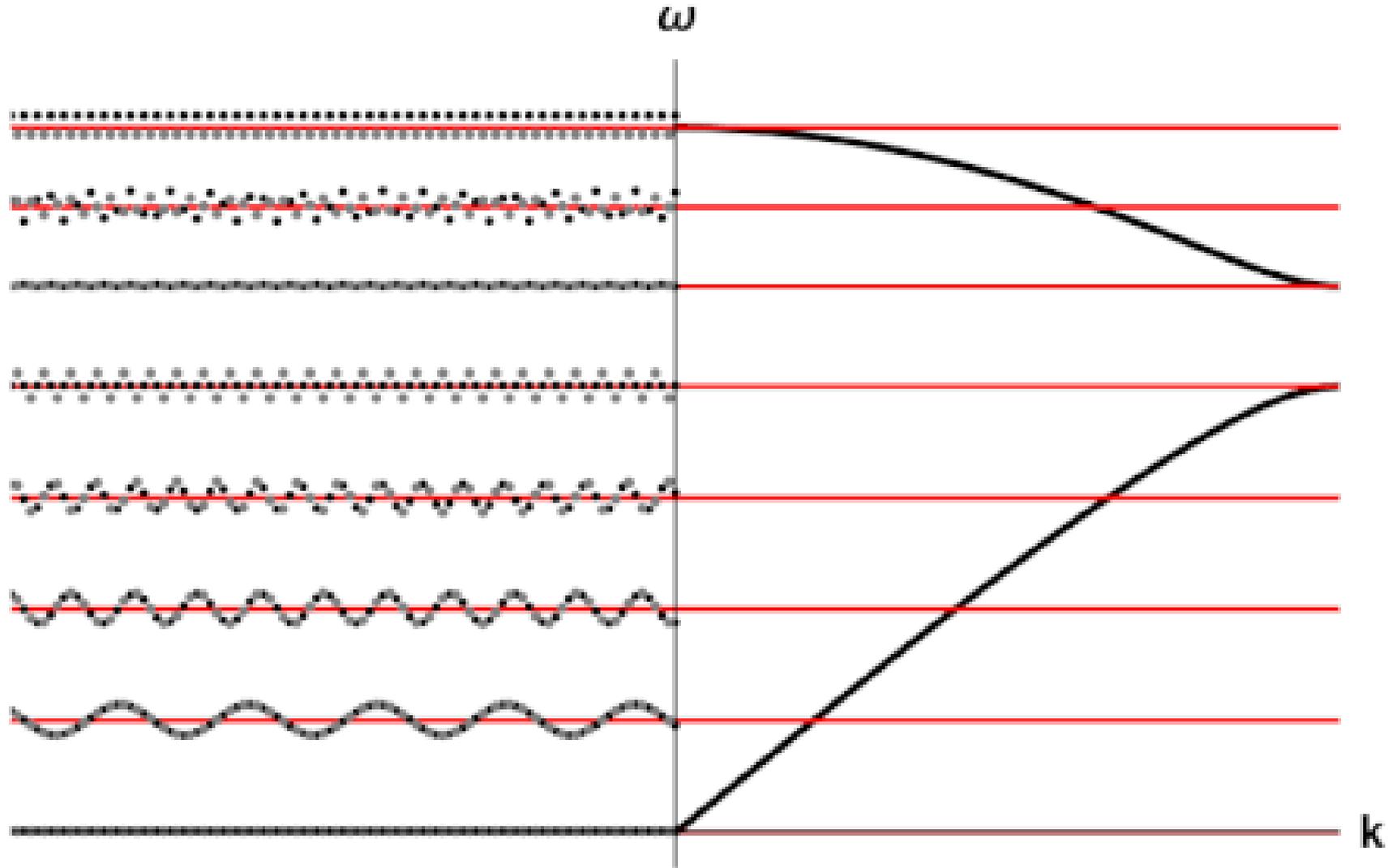
# 2-atomare Kette: Akustischer und optischer Zweig



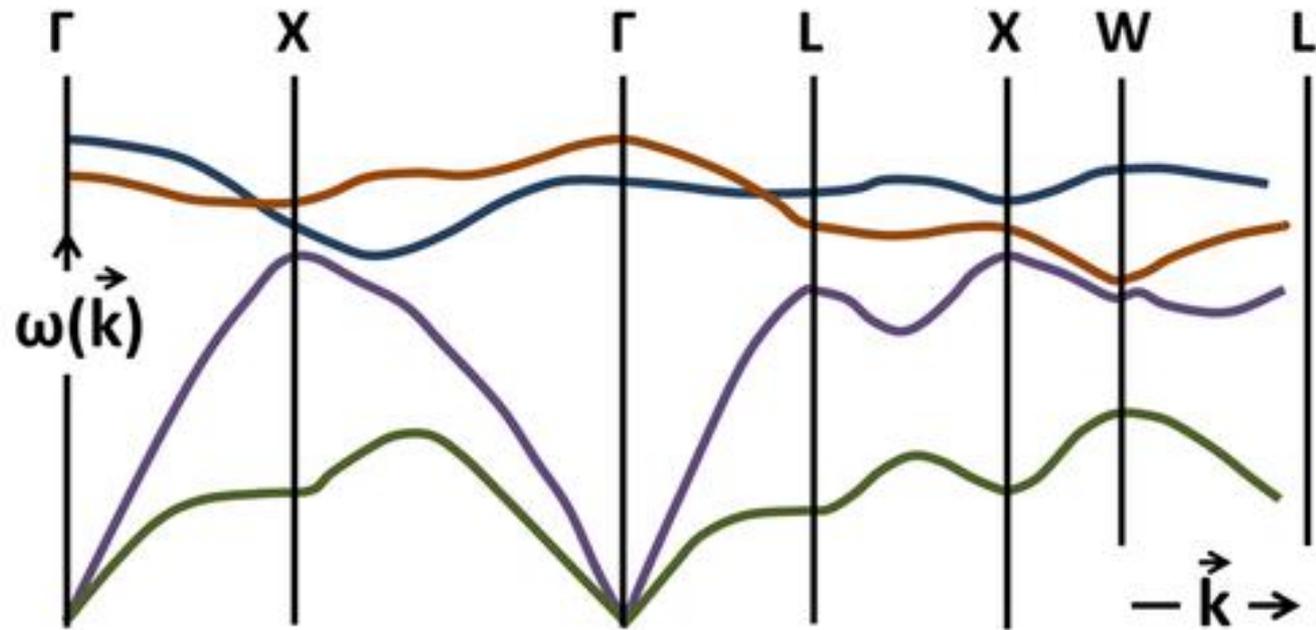
# 2-atomare Kette: Akustischer und optischer Zweig



# 2-atomare Kette: Akustischer und optischer Zweig

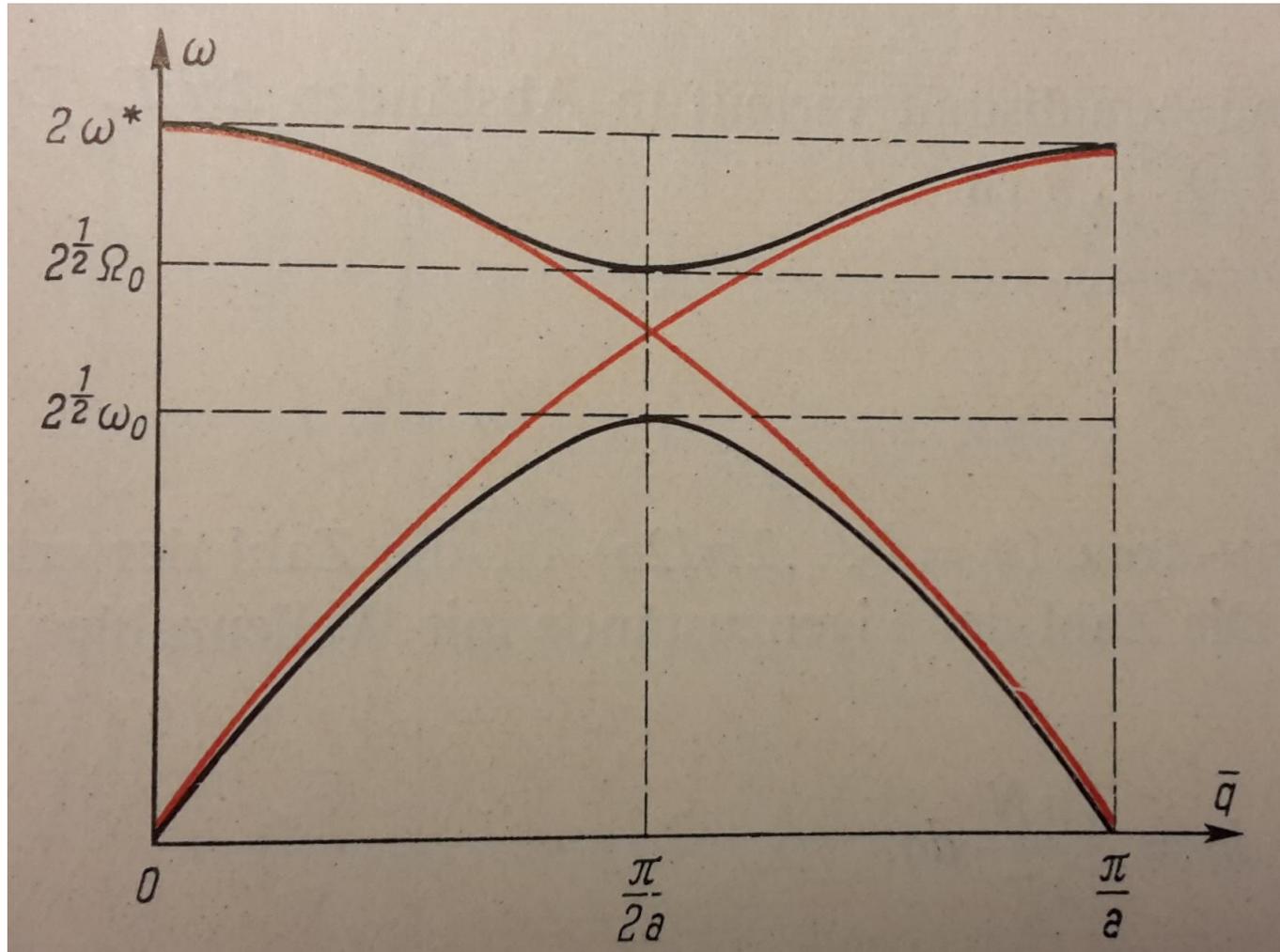


## 2 different atoms in 3D: GaAs



# Übergang: 2-atomare zu 1-atomare Kette

$$m_1 \rightarrow m_2 = m$$



# Thermische Statistik von Phononen

## I.5.2 Thermische Eigenschaften von Phononen

Wir folgen dem allg. "Rezept"

$$\text{Mittelwert} \\ (\text{z.B. Innere Energie}) = \sum \left( \begin{array}{c} \text{Einzelgröße} \\ \text{z.B. } \hbar\omega \end{array} \right) \left( \begin{array}{c} \text{Wahrscheinlichkeit} \\ \text{(Statistik)} \end{array} \right)$$

$$= \int \left( \quad \right) \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \right) \left( \begin{array}{c} \text{Zustands-} \\ \text{dichte} \\ \text{"DOS"} \end{array} \right)$$

In unserer Situation  
(Phonon = 3D)

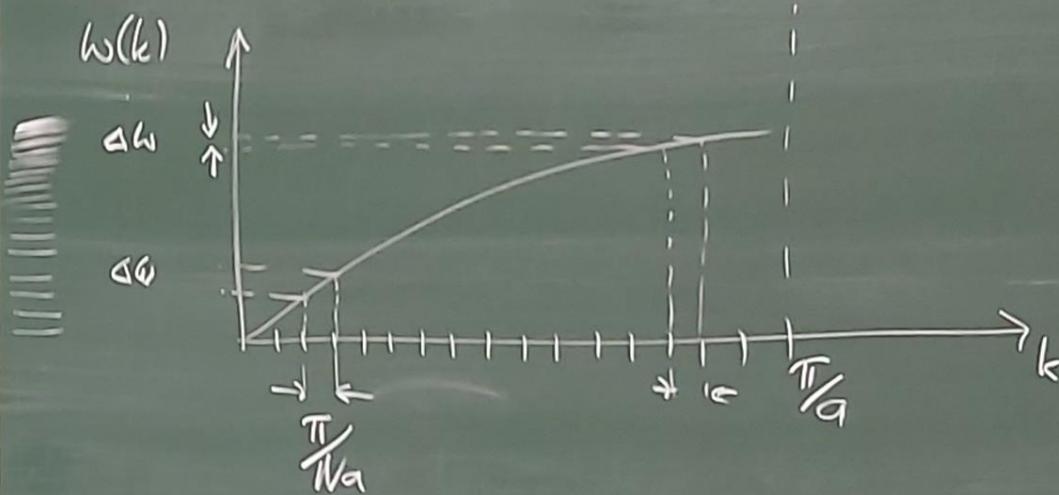
$$U = \int d\omega \quad \hbar\omega \quad \left( \quad \right)$$

$\downarrow$   
 $\downarrow$   
 $\text{K}^2$   
für 3D  
↖ ω ∝ k

# Zustandsdichte

Zum Begriff der Zustandsdichte ("DOS")

Kette mit  $N$  Atome



Sei 
$$U = \sum_k \dots$$

$$= \int d\omega \dots \quad (\text{DOS})$$

in 3D	in 2D	in 1D
$N_k \sim k^3$	$\frac{dN}{dk} \sim k$	$\frac{dN}{dk} = \text{const}$

Zustandsdichte

$$D(\omega) = \frac{dN_k}{d\omega} = \left( \frac{dN_k}{dk} \right) \left( \frac{dk}{d\omega} \right)$$

aus Dimension

aus Dispersion  $w(k)$

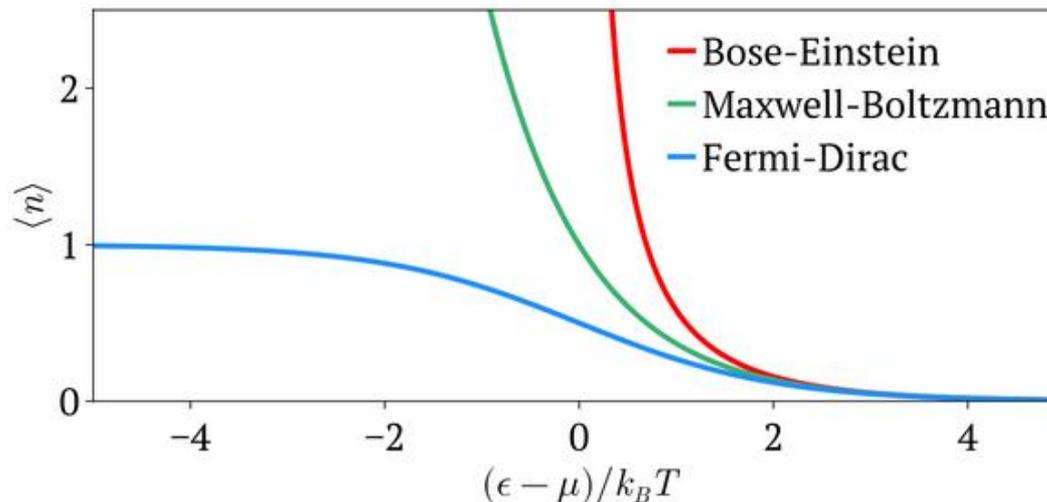
# Thermische Statistik

<u>Bosonen</u>	<u>Fermionen</u>
Spin ganzzahlig	Spin halbzahlig
Gesamtwellenfunktion symmetrisch	Gesamtwellenfunktion anti-symmetrisch („Pauli-Prinzip“)
mehrere Teilchen können im gleichen Zustand sein	keine 2 Teilchen im gleichen Zustand
Beispiel in BM KoMa: Phononen, Magnonen, ... Beachte: Bei diesen Quasi-Teilchenanregungen ist die Teilchenzahl nicht erhalten (d.h. $\mu = 0$ ); allgemein kann bei anderen Bosonen Teilchenzahlerhaltung gefordert sein (d.h. $\mu \neq 0$ )	Beispiel in BM KoMa: Elektronen Beachte: Teilchenzahl erhalten (d.h. $\mu \neq 0$ )

$$\bar{n}_i = \frac{g_i}{e^{(\epsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}$$

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/k_B T} + 1}$$

Mittlere Besetzung  $\langle n \rangle$   
 der Zustände  
 als f(Energie, Temperatur)



# Ergänzungen zur Vorlesung (vgl. homepage)

Zusammenfassung

Phononen I

Phononen II Zustandsdichte

Quantenstatistik