

3.6.2. Elastische Theorie - Elastostatik

Erinnerung: $u(r,t)$ Auslenkung der Gitterpunkte als kont. Verschiebungsfeld

• u langsam veränderlich auf Längenskalen des Gitters

Bewegungsgleichung

$$\rho \ddot{u}_i = \sum_{j,k,l} C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_j}{\partial r_k \partial r_l}$$

Massendichte

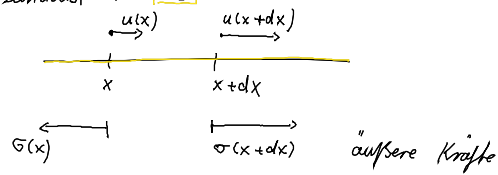
Elastizitätstensor

≙ Wellengleichung

Lösungen sind ebene Wellen

$$u(r,t) = u_0 e^{i(qr - \omega t)}$$

Einführung des Dehnungstensors: Idee zunächst in 1D



$$\text{Dehnung: } \epsilon(x) = \frac{u(x+dx) - u(x)}{dx} = u'(x)$$

$$\epsilon = 0 \text{ falls } \sigma = 0$$

ϵ größer je größer σ

→ Hooke'sches Gesetz

$$\sigma(x) = C \cdot \epsilon(x) = C \cdot u'(x)$$

in 3D

(Lineare Näherung)

• lineare Abhängigkeit

$$u_i = \sum_j v_{ij} r_j \quad (u = \underline{v} \cdot \underline{r})$$

$$\text{mit } v_{ij} = \partial_{r_j} u_i$$

Zerlegung der Änderungen \underline{v} in symmetrischen und anti-symmetrischen Anteil

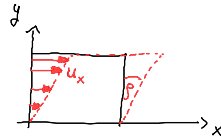
$$v_{ij} = \underbrace{\frac{1}{2} (v_{ij} + v_{ji})}_{\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}} + \underbrace{\frac{1}{2} (v_{ij} - v_{ji})}_{\omega_{ij} = -\omega_{ji}}$$

reine Verformung
"Dehnung"

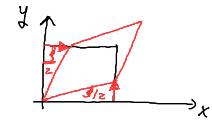
reine Drehung

Bsp.

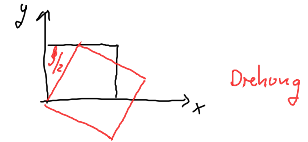
$$\underline{V} = \begin{pmatrix} 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



wird zerlegt in $\underline{\underline{\epsilon}} = \begin{pmatrix} 0 & \beta/2 & 0 \\ \beta/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$



$$\underline{\underline{\omega}} = \begin{pmatrix} 0 & \beta/2 & 0 \\ -\beta/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



=> Definition des Dehnungstensors : $\epsilon_{ij}(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right)$

Definition des Spannungstensor

$$\sigma_{ik} = \sum_{j,l} C_{ijkl} \epsilon_{jl}$$

Hooke'sches Gesetz der Elastomechanik

Masse der Atome pro EZ
 $\rho = \frac{M}{V_{EZ}}$

Tangentalkraft in i-Richtung auf Fläche mit Normale in k-Richtung.

-> Bewegungsgleichung

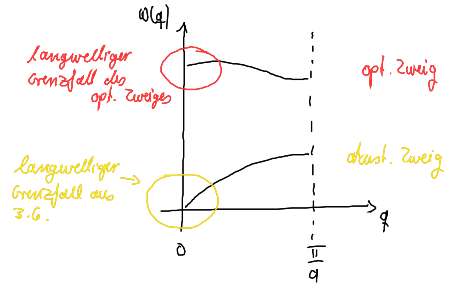
$$\rho \ddot{u}_i = \sum_k \frac{\partial}{\partial r_k} \sigma_{ik}$$

3.6.3 Analogie zwischen Elastostatik und Elektrostatik

Elektrostatik	Elastostatik
Potenzial $\phi(r)$	Verdrängungsfeld $u_i(r)$
elektrisches Feld $E_i(r) = -\frac{\partial \phi}{\partial x_i}$	Dehnungstensor $\epsilon_{ij}(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$
Quellen sind Ladungen $\rho(r)$	Kräfte (Kraftdichte) $k_i(r)$
dielektrische Verschiebung $D_i(r)$	Spannungstensor $\sigma_{ij}(r)$
Materialgleichung $D_i = \sum_j \epsilon_{ij} E_j$	Hooke'sches Gesetz $\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} \epsilon_{kl}$
Maxwell Gl.: $\text{div } \underline{D} = \rho$ $\sum_i \partial_{x_i} D_i(k) = \rho(r)$	$\sum_i \partial_{x_i} \sigma_{ij}(r) + k_i(r) = 0$

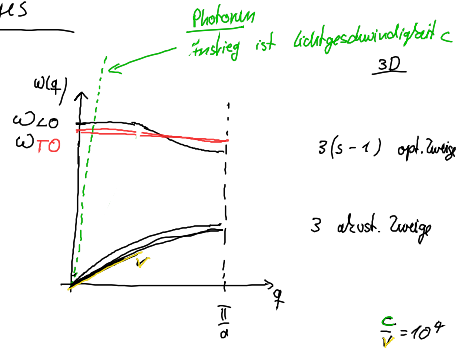
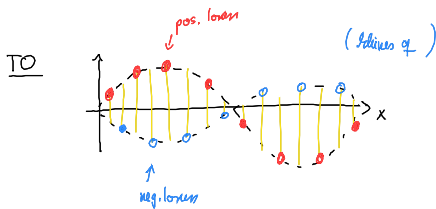
- anisotroper Fall
3 unabhängige Komponenten
- isotrop
z.B. eine für kubische Symmetrie
 $\epsilon_{ij} = \epsilon_0 \delta_{ij}$

- anisotroper Fall
 C_{ijkl} : 21 unabhängige Komponenten
- isotrop: z.B. kubische Symmetrie
3 unabhängige Komponenten



3.7. langwelliger Grenzfall des opt. Zweiges

- (s=2)
- 2 Ionen pro Elementarzelle mit unterschiedlicher Ladung → optisch aktive Phononen
- TO : transversal optisch $\underline{x} \perp \underline{q}$
- LO : longitudinal optisch $\underline{x} \parallel \underline{q}$



- ganze Teilgitter schwingen gegeneinander → makroskopisches EM Feld
- LO : Feld wirkt der Bewegung entgegen → größere Kraftkonstante
- TO : • Feld \perp Schwingung → kleinere Schwingungsenergie
- hat ein Dipolmoment, das an Licht koppeln kann

Wechselwirkung mit Licht

- wieder im Kontinuumslimit da Phononen und TO-Phononen Dispersionskurven sich nahe bei $q=0$ schneiden.

Bewegungsgleichung (in semi-klassischer Näherung)

$$(I) \quad \ddot{\underline{u}} = -\omega_0^2 \underline{u} + e^* \underline{E}$$

↑
Frequenz des TO-Phonons

2 Beiträge zur Polarisation

$$\underline{P} = \beta \underline{u} + \gamma \underline{E}$$

↑
↑ direkte Ladungsverdrängung
Polarisation durch Gitterschwingungen

Ansätze ebener Wellen:

$$\begin{aligned} \underline{E} &= \underline{E}_0 e^{i(\underline{q}\underline{r} - \omega t)} \\ \underline{P} &= \underline{P}_0 e^{i(\underline{q}\underline{r} - \omega t)} \\ \underline{u} &= \underline{u}_0 e^{i(\underline{q}\underline{r} - \omega t)} \end{aligned}$$

Ansatz in (I) einsetzen:

$$\underline{u} = \frac{e^*}{\omega_0^2 - \omega^2} \underline{E}$$

$$\underline{P} = \left(\frac{\beta e^*}{\omega_0^2 - \omega^2} + \gamma \right) \underline{E} = \chi(\omega) \underline{E} = (\epsilon(\omega) - 1) \underline{E}$$

falls $\epsilon(0) = \epsilon_0$ und $\epsilon(\omega \rightarrow \infty) = \epsilon_\infty$ bekannt

$$\begin{aligned} \epsilon(0) &= \frac{\beta e^*}{\omega_0^2} + \gamma + 1 \\ \epsilon(\omega \rightarrow \infty) &= \gamma + 1 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \underline{\epsilon}(\omega) = \frac{\omega_0^2 \epsilon_0 - \omega^2 \epsilon_\infty}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

Ausbreitung des Lichtes im Festkörper mit angeregten Schwingungen:

1) EM-Wellen sind transversal aufser für $\epsilon(\omega) = 0$

dann gilt $\omega_{LO}^2 = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \omega_0^2$

\uparrow
 ω_{LO}

Lyddane - Sachs - Teller Relation

[aus $\omega_{LO} > \omega_{TO}$ folgt, dass $\epsilon_0 > \epsilon_\infty$]

2) falls $\epsilon(\omega) \neq 0 \rightarrow$ EM-Wellen sind transversal

aus Maxwell-Gleichungen berechnen wir:

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \underline{E}) &= \dots & \nabla \times \underline{E} &= -\dot{\underline{B}} \\ & & \nabla \times \underline{H} &= \underline{j} + \dot{\underline{D}} \end{aligned}$$

\vdots ebene Wellen \vdots
 $\underline{q} \times (\underline{q} \times \underline{E}) = -\left(\frac{\omega^2}{c^2}\right) \epsilon(\omega) \underline{E}$

$\underline{D} = \epsilon(\omega) \underline{E}$

$$\Rightarrow \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \frac{\omega_0^2 \epsilon_0 - \omega^2 \epsilon_\infty}{\omega_0^2 - \omega^2} = q^2$$

Lösungen

$$\hookrightarrow \omega_{\pm}(q)^2 = \frac{1}{2\epsilon_\infty} \left(c^2 q^2 + \omega_0^2 \epsilon_0 \pm \sqrt{(c^2 q^2 + \omega_0^2 \epsilon_0)^2 - 4c^2 q^2 \omega_0^2 \epsilon_\infty} \right)$$

\uparrow
 Dispersionsrelation der gekoppelten Anregung von Phononen und Photonen $\hat{=}$ Polaritonen

[Quasiteilchen, das wir schon beinhalten]

