

Phononen

Vorbemerkung: Es schadet nichts, diesen Modul schon beim [ersten Link](#), der auf ihn führt zu lesen.

Es ist aber *sehr* zu empfehlen, nach der Erarbeitung von Kapitel 2 oder noch besser Kapitel 4 dieses Skripts noch einmal darauf zurückzukommen; vieles wird dann (hoffentlich) viel klarer sein.

Was wissen wir über Gitterschwingungen?

Advanced

Das Thema "Phononen" ist zu komplex und kompliziert, um hier komplett abgehandelt werden zu können, deshalb wollen wir nur einige "highlights" betrachten. Wir benutzen dazu einfach mal folgende qualitative Definition:

Ein Phonon ist eine quantisierte Gitterschwingung

Wir versuchen jetzt mal, mit dem was wir (aus Kapitel 2) schon wissen diese Aussage zu interpretieren!

Was wir schon kennen, ist der Terminus "[Schwingung](#)" (falls nicht, schnell nachlesen).

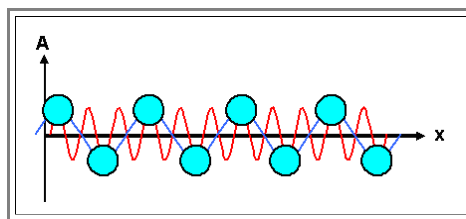
- In voller Strenge ist eine *Schwingung* ein periodischer Vorgang in der Zeit – eine Welle wäre dann der Oberbegriff eines periodischen Vorgangs in Raum *und* Zeit. Beim Phonon sehen wir es aber nicht so streng, es kann auch eine quantisierte *Welle* sein.
- Wie auch immer, um eine Schwingung oder Welle zu beschreiben, müssen wir Begriffe wie Wellenlänge λ (oder besser gleich den [Wellenvektor](#) \mathbf{k} mit $\mathbf{k} = 2\pi/\lambda$), (Kreis)frequenz ω , Ausbreitungsgeschwindigkeit $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ (oder genauer [Phasen- und Gruppengeschwindigkeit](#) $\mathbf{v}_{\mathbf{P}}$ bzw. $\mathbf{v}_{\mathbf{G}}$) und Amplitude \mathbf{A} einführen.
- Damit wissen wir auch schon, dass jede mathematische Beschreibung den typischen Wellenterm $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega \cdot t)]$ enthalten muss.
- Wir können aber auch gleich noch eins drauflegen: Was immer auch "*quantisiert*" und "*Gitter*" in diesem Zusammenhang bedeuten mögen, ein Phonon wird nicht umhinkommen, eine Energie E_{phon} zu haben und, sofern es nicht gerade eine stehenden Welle "ist", einen Impuls \mathbf{p}_{phon} .

Der Terminus "*Gitter*" ist uns aber auch schon bekannt.

Schwingen damit Gitterpunkte? Das wäre nicht so sinnvoll, gemeint kann nur sein, dass Atome in einem *Kristall* schwingen. Eigentlich sollte die Definition wohl besser lauten: *Ein Phonon ist eine quantisierte Kristallwelle*.

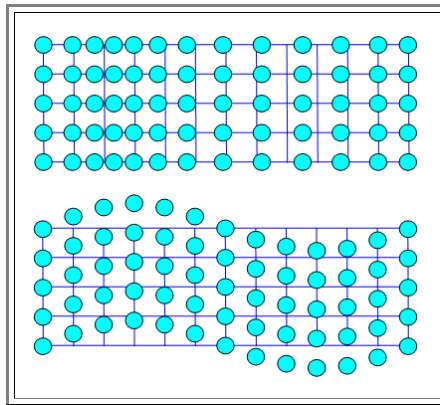
Damit können wir sofort einige sehr allgemeine und weitreichende, aber im Grunde einfache Aussagen für Phononen machen:

- Wellenlängen größer als die Abmessungen des Kristalls gibt's nicht. "Lange" Wellen passen genausowenig in einen kurzen Kristall wie tiefe Töne in eine Pikkoloflöte.
- Wellenlängen kleiner als der (halbe) Abstand zwischen den Atomen gibt's auch nicht. Das ist ein wenig schwieriger zu sehen, das nachfolgende Bild hilft aber:



- Die rote Schwingung mit der kurzen Wellenlänge führt exakt zur gleichen (hier maßlos übertriebenen) Auslenkung der Atome wie die blaue Welle mit der viel größeren Wellenlänge.
 - Das gilt immer: Jede zu kurze Wellenlänge (= großer Wellenvektor \mathbf{k}) ist ununterscheidbar von einer Welle mit entsprechend größer gewählten Wellenlänge oder entsprechend kleinerem Wellenvektor.
- In anderen Worten: Wir können uns bei der Darstellung von was auch immer über dem Wellenvektor \mathbf{k} auf den Wertebereich $\mathbf{k} = \pm \pi/a$ beschränken. Größere Wellenvektoren kann man "irgendwie" auf Wellenvektoren in diesem Bereich reduzieren.
- Jetzt sollte ein Glöckchen klingeln: Das kommt uns bekannt vor (falls wir Kapitel 4 schon hinter uns haben)!
 - Sonst nehmen wir mal zur Kenntnis: Die Wellenvektoren der Phononen liegen alle in der [1. Brillouinzone](#) des Kristalls. Auch das wird weitreichende Konsequenzen haben.
- Machen wir erstmal weiter: Da es immer eine [Dispersionsrelation](#), d.h. eine Beziehung zwischen der Frequenz und der Wellenlänge (oder besser dem Wellenvektor) geben muß, ist der *Spektralbereich*, in dem es Phononen gibt, damit endlich und definiert.
- Wir sind damit aber noch keineswegs am Ende, sondern können durch scharfes Nachdenken noch sehr viel mehr Honig aus der Definition der Phononen saugen – ohne groß rechnen zu müssen.

- Wenn man auf eine Metallplatte haut, z.B. mit dem Klöppel auf eine (im Zweifel gern einkristalline) Glocke, wird's laut im Saale: Die Glocke vibriert, d.h. im Metall befinden sich jetzt **stehende** Schallwellen, die dann ihrerseits die Luft zu Schwingungen anregen.
 - Schallwellen**, die durch das (kristalline) Material laufen, sind jedenfalls auch Gitterschwingungen; damit fallen sie also wohl auch unter die Überschrift Phononen (falls wir das "quantisiert" noch mal vergessen).
 - Wir wissen auch, dass für unser Ohr die höchste noch sinnvolle Frequenz so bei **20 kHz** liegt, die Dispersionrelation in Luft schlicht $v_{\text{Schall}} = v \cdot \lambda$ lautet, und die kleinsten Wellenlängen von Schallwellen in Kristallen damit in der Größenordnung von $\lambda_{\text{min}} = v_{\text{Schall}}/v$ liegen.
 - Selbst wenn die Schallgeschwindigkeit in einem Kristall nicht größer sein sollte als die in Luft (d.h. ca. **300 m/s**), ergibt sich doch für die Wellenlänge der "kleinsten" Schallwellen nur ein Wert von $\lambda \approx (300/20.000) \text{ m} = 15 \text{ mm}$. Bis zur Wellenlänge in der Größenordnung der Gitterkonstante ist also noch reichlich "Platz" für hochfrequente Wellen.
- Von Schallwellen in Luft wissen wir auch noch, dass sie **longitudinale Wellen** sind, d.h. Amplitudenrichtung und Ausbreitungsrichtung sind parallel. Wie ist das im Kristall?
 - Bisher haben wir nicht darauf geachtet, aber wenn wir mal kurz nachdenken (oder die folgende Zeichnung betrachten), wird klar, dass Wellen in einem Kristall sowohl **longitudinal** als auch **transversal** sein können. Im letzteren Fall müssen wir dann noch die **Polarisationsrichtung** angeben.
- Das nachfolgende Bild zeigt schematisch, wie eine longitudinale und eine transversale Welle in einem Kristall aussehen. Die blauen Kreise symbolisieren die Atome; im perfekten Kristall lägen sie alle ruhig auf den durch das Gitter angedeuteten Plätzen.

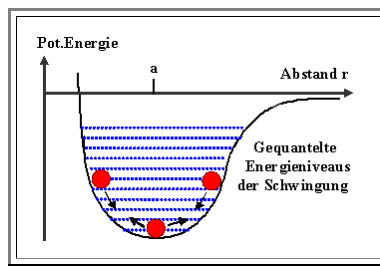


Quantisierte Schwingungen

- Wir haben jetzt zu mindest ein Gefühl dafür, was sich hinter dem Ausdruck Gitterschwingung verbirgt und müssen das ganze jetzt nur noch **quantisieren**.
 - Müssen wir dazu eine Schrödingergleichung lösen? Eigentlich schon, wir werden das aber hier nicht tun, sondern mit Analogieschlüssen und ein bißchen Raten arbeiten.
- Dazu schauen wir uns mal das andere Extrem an:
 - Wir betrachten ein einzelnes Atom, das in seinem Bindungspotential hin und her **schwingt** – in diesem Fall ist es wirklich eine Schwingung und keine Welle.
 - Viel müssen wir dazu nicht tun, denn **wir haben es schon getan** – in MaWi I. Das Ergebnis war, dass die Schwingungsfrequenz im Bereich von **10^{13} Hz** liegt und gegeben war durch

$$\omega = \left(\frac{Y \cdot a}{m_a} \right)^{1/2}$$

- Hier sind **Y** = Elastizitätsmodul (**Y** steht für "Youngs modulus", da unsere alte Abkürzung **E** zuviel Verwechslungsgefahr mit Energie oder elektrischem Feld induziert) und **m_a** = Masse des Atoms.
- Veranschaulichen konnte und kann man sich das ganze am Besten im [Potentialtopfbild](#):

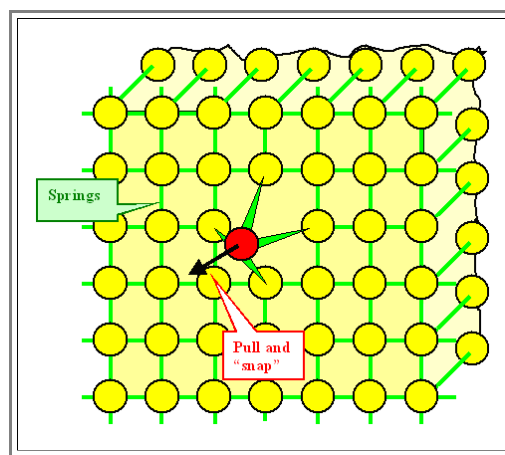


Das ist das alte [Bild](#) – allerdings mit Quantisierung!

- Um eine Quantisierung der Schwingung zu erhalten, müssen wir nur annehmen (wie eigentlich immer in solchen Fällen), dass die Gesamtenergie nur diskrete Werte annehmen kann, die überdies immer durch $E_{\text{ges}} = \hbar \cdot \omega$ gegeben sind.
- Wir hatten das schon für die [Elektronen](#), die im Potentialtopf "schwingen"; für Atome ist das kein Haar anders, nur dass durch die größere Masse die Energieniveaus sehr dicht liegen – ähnlich wie in einem [Band](#) für Elektronen.

Ein einzelnes Atom in einem sonst nicht schwingenden Kristall schwingt also *gequantelt* (und mit ca. 10^{13} Hz).

- Es ist aber schlicht nicht möglich, dass nur *ein* Atom schwingt und alle anderen stillhalten. Wir können uns ja mal bildlich vorstellen, was man dazu bräuchte:



Wir haben - im Gedankenexperiment - lauter ruhende Atome, ziehen dann kurz an einem und lassen dann los wie oben für die hintere Hälfte des Kristall gezeigt (die vordere muss man sich denken).

- Alle Atome sind mit ihren Nachbarn durch "Federn" verbunden - es ist klar, dass in diesem Gebilde jetzt sehr schnell *alle* Atome "irgendwie" schwingen.

Was machen wir also? Das sollte jetzt klar sein:

- Wir beschreiben das ganze Spektrum der Schwingungen / Wellen durch eine Summe von elementaren Schwingungen, d.h. durch viele überlagerte $A_i \cdot \exp(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i \cdot t)$, und *quanteln den Wellenvektor* wie gehabt - deshalb der Index i .
- Dann berechnen wir uns die Dispersionsrelation - also die Beziehung zwischen \mathbf{k} und ω , oder, falls wir gleich wieder etwas verallgemeinern, zwischen *Impuls* und *Energie*. Das ist im übrigen gar nicht so schwer; wir schauen uns aber nur das Ergebnis (für Kristalle mit einem Atom in der Basis) an:

$$\omega = \left(\frac{2Y \cdot a}{m_a} \left(1 - \cos(ka) \right) \right)^{1/2}$$

- Für "lange" Wellen (= kleines \mathbf{k} , damit $\cos \approx 1$) ist das die Formel [von weiter oben](#). Eigentlich müsste man ω und \mathbf{k} mit dem Index i versehen, da das ganze ja quantisiert ist; aber [wie immer](#) sparen wir uns das.

Damit wissen wir schon eine ganze Menge über quantisierte Gitterschwingungen. Es fehlt nur noch der letzte Schritt, die Begründung warum das ganze "*Phonon*" heißt und irgendwie wie ein *Teilchen* behandelt wird.

- Dafür gibt es viele Gründe, formal-abstrakte und ganz praktische. Die praktische Seite zeigt sich am besten, wenn man jetzt mal (mit einigem mathematischen Aufwand) *zwei* quantisierte Gitterschwingungen miteinander wechselwirken lässt.
- Dazu lassen wir im Modellkristall zwei Wellen oder auch [Wellenpakete](#) aufeinander los und berechnen was passiert wenn sie aufeinander stoßen.

Das Ergebnis ist einfach und spannend: Es gilt für den "Stoß" zweier beliebiger quantisierter Kristallwellen immer der Energieerhaltungssatz und der (Kristall)impulserhaltungssatz, *und zwar so* wie wir es von den quantisierten Elektronenwellen schon kennen.

- Das heißt etwas vereinfacht ausgedrückt, dass die Summen aller $\hbar \cdot \omega$'s (= Energie) und der $\hbar \cdot \mathbf{k}$'s (= Impuls) aller Teilchen und Quasiteilchen vor und nach der Interaktion (dem "Stoß") unverändert bleiben.
- Exakt so wie bei den anderen quantisierten Teilchen, die wir schon ein bißchen kennen: Den *Elektronen* (im Kristall) und den *Photonen*. Die ersteren waren mal "richtige" Teilchen und erhielten durch die Quantentheorie auch Wellencharakter, die letzteren waren mal "richtige" Wellen und erhielten Teilcheneigenschaften.

Es gibt also keinen Grund, quantisierte Gitterschwingungen nicht genauso als Teilchen zu betrachten, wie quantisierte elektromagnetische Schwingungen.

- Ein kleiner Unterschied ist aber schon da: Phononen gibt es *nur* in Kristallen (und mit einigen Klimmzügen auch in amorphen Materialien). Sie sind, im Gegensatz zu Photonen und Elektronen, im "leeren Raum" nicht existent.
- Deswegen nennt man Phononen meistens auch nicht "Teilchen" sondern "**Quasiteilchen**".
- Außerdem merken wir uns mal ohne Begründung (die gibt es in einem eigenen Modul): Das "Durchschnitts*photon*" (so *IR - UV*) trägt zwar viel Energie, aber wenig Impuls mit sich herum, für das Durchschnitts *phonon* ist es genau umgekehrt: Viel Impuls, wenig Energie. Das wird Konsequenzen haben!

Verteilungsfunktion für viele Phononen

Jetzt sind wir soweit gekommen, dass wir auch noch den letzten Schritt wagen können: Die Betrachtung *vieler* Phononen, die in dem "Gefäß" Kristall genauso eingesperrt sind wie zuvor die freien Elektronen.

- Wir haben jetzt einen Kristall voll mit individuellen Phononen, die wir durch ihren Wellenvektor \mathbf{k} und der Dispersionsrelation hinreichend charakterisiert haben. Sie können irgendwelche Zustände einnehmen, die im \mathbf{k} - oder Zustandsraum durch Punkte definiert sind, wobei immer Entartung möglich ist, d.h. es gibt möglicherweise mehrere Zustände mit derselben Energie.

Die Frage ist jetzt: Wieviele Phononen haben wir eigentlich in einem beliebigen Energieintervall? Laufen z.B. die meisten Phononen als "Schallwellen" herum, d.h. sind die meisten niederfrequent, oder überwiegen die hektischen 10^{13} Hz Atomschwingungs-Phononen?

- Einfach: Alles was wir zu Beantwortung dieser (und anderer) Fragen brauchen ist die **Zustandsdichte** und die Wahrscheinlichkeit, dass ein Zustand besetzt ist, also die Verteilungsfunktion der Phononen.
- Für die **Zustandsdichte** müssen wir kräftig nachdenken und Näherungen finden. Die Herren **Einstein** und **Debye** waren die ersten, die das getan haben. Wenn wir es genau wissen wollen, müssen wir heftig rechnen oder halt messen.
- Für die Verteilungsfunktion müssen wir aber nur eines tun: Entscheiden, ob das Phonon ein Fermion oder ein Boson ist.
- Das ist aber sowohl formal als auch intuitiv sofort klar: *Das Phonon ist ein Boson*, denn es hat keinen Spin, und Spin = 0 gilt als ganzzahlig. Außerdem gibt es keinen einleuchtenden Grund, warum zwei quantisierte Gitterschwingungen nicht ein-und-denselben Wellenvektor haben könnten.

Wir dürfen also nicht wie bei Elektronen die Fermi-Dirac Verteilung nehmen, sondern wir brauchen die **Bose-Einstein Verteilungsfunktion** (die wir allerdings bisher nie ausführlich behandelt haben).

- Die Bose-Statistik, wie man sie auch nennt, unterscheidet sich von der Fermistatistik nur durch ein Vorzeichen; das es allerdings dann in sich hat:

$n_i = N_i \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1}$	$n_i = N_i \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) - 1}$
Fermiverteilung	Boseverteilung

- Und diese beiden Verteilungsfunktionen beschreiben *alle* Teilchen oder Quasiteilchen; andere gibt es nicht! Die Boltzmannverteilung gibt es in voller Strenge z.B. nicht, sie ist nur eine Näherung der Fermi- oder Boseverteilung für bestimmte Umstände.

Was soll das Ganze? Nun, wer's noch nicht selbst erahnt liest weiter:

- Fast alles bei der Betrachtung von (großen) Teilchen- oder Quasiteilchenensembles läßt sich mit Zustandsdichten und der jeweils passenden Verteilungsfunktionen (vergleichsweise) *extrem einfach* darstellen!

- ▀ Wenn wir jetzt noch mal zur Kenntnis nehmen (je nach persönlicher Disposition staunend, freudig erregt oder geängstigt), dass es in Festkörpern außer Phononen noch jede Menge anderer Quasiteilchen gibt (Exzitonen, Polaronen, Plasmonen, Magnonen, Cooper-Paare, Polaritonen,...), die für "High-Tech" Produkte immer wichtiger werden, verstehen wir jetzt, warum die Vorlesung soviel Wert auf diese Thema legt: Wir werden das noch brauchen!
- Wer will, kann sich ja mal anschauen wie das [mit Photonen funktioniert](#): Man kann die berühmte Plancksche Strahlungsformel, für die Planck **1900** noch jede Menge mathematische und physikalische Klimmzüge machen mußte, mit Zustandsdichte und Verteilungsfunktion in wenigen Zeilen direkt hinschreiben!