4 Phononen in harmonischer Näherung

4.a Bewegungsgleichungen

In diesem Abschnitt betrachten wir die klassischen Bewegungsgleichungen für die Phononen. Wir tun das, da sehr vieles davon für den quantenmechanischen Fall übernommen werden kann. Das liegt daran, dass die Bewegungsgleichungen für die klassischen Auslenkungen $\boldsymbol{\eta}$ und die quantenmechanischen Operatoren der Auslenkungen die gleichen sind.

Die Ionen befinden sich an den Orten $\mathbf{R}_{n,i} + \boldsymbol{\eta}_{ni}$. Dabei nummeriert $n = (n_1, n_2, n_3)$ die Einheitszellen und i nummeriert das Ion innerhalb dieser Zelle, $i = 1, ...r$. Die kinetische Energie lässt sich dann

$$\mathcal{T} = \sum_{ni\alpha} \frac{M_i}{2} \dot{\eta}_{ni\alpha}^2 \tag{4.1}$$

schreiben. Dabei nummeriert α die kartesischen Komponenten. Die potentielle Energie schreiben wir in harmonischer Näherung

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum V_{ni\alpha}^{mj\beta} \eta_{ni\alpha} \eta_{mj\beta} + O(\eta^3). \tag{4.2}$$

Dabei sind die Matrix-Elemente $V_{\cdots}^{\cdots}$ die zweiten Ableitungen des Potentials nach den Auslenkungen. Die harmonische Näherung besteht darin, dass wir die Terme der Ordnung η^3 vernachlässigen. Daraus ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$M_i \ddot{\eta}_{ni\alpha} = -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \eta_{ni\alpha}} = -\sum_{mj\beta} V_{ni\alpha}^{mj\beta} \eta_{mj\beta}. \tag{4.3}$$

4.b Symmetrien

Wir betrachten nun die Symmetrien der $V_{\cdots}^{\cdots}$. Die Matrix V ist reell. Sie ist auch symmetrisch. Nur in dieser symmetrischen Form ist die Bewegungsgleichung (4.3) richtig. Andernfalls müsste $V_{ni\alpha}^{mj\beta}$ durch $\frac{1}{2}(V_{ni\alpha}^{mj\beta} + V_{mj\beta}^{ni\alpha})$ ersetzt werden, was dann der Symmetrisierung entspricht,

$$V_{ni\alpha}^{mj\beta} = V_{mj\beta}^{ni\alpha}. \tag{4.4}$$

Bei Verschiebung des Festkörpers um einen konstanten Vektor $\delta\eta$, $\eta_{mi\beta} \to \eta_{mi\beta} + \delta\eta_\beta$ ändert sich die Kraft nicht,

$$\sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\beta} = 0. \tag{4.5}$$

Bei Rotation des Gitters um einen konstanten Winkel tritt keine rücktreibende Kraft auf. Die infinitesimale Rotation stellen wir durch die orthogonale Matrix $1 + \delta\phi$ dar. Aus der Orthogonalität folgt $(1 + \delta\phi)(1 + \delta\phi^{\mathrm{t}}) = 1$ in linearer Ordnung in $\delta\phi$. Dabei ist zeigt der Index $^{\mathrm{t}}$ das Transponierte an. Es muss also

$$\delta\phi + \delta\phi^{\mathrm{t}} = 0 \tag{4.6}$$

gelten. $\delta\phi$ ist also eine antisymmetrische Matrix. Die drei unabhängigen Komponenten $\delta\phi_{12}$, $\delta\phi_{23}$ und $\delta\phi_{31}$ sind die drei infinitesimalen Drehwinkel um z-, x- und y-Achse. Die durch die Rotation aus der Ruhelage entstehende Auslenkung ist gegeben durch

$$\mathbf{R} + \boldsymbol{\eta} = (1 + \delta\phi)\mathbf{R}, \quad \eta_{ni\alpha} = \sum_{\beta} \delta\phi_{\alpha\beta} R_{ni\beta}. \tag{4.7}$$

Daraus folgt dann

$$\sum_{mj\beta\gamma} V_{ni\alpha}^{mj\beta} \delta\phi_{\beta\gamma} R_{mj\gamma} = 0, \tag{4.8}$$

woraus dann für gegebenes $\beta\gamma$

$$\sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\beta} R_{mj\gamma} = \sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\gamma} R_{mj\beta} \tag{4.9}$$

folgt. Unter Verwendung von (4.5) können wir das auch

$$\sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\beta}(R_{mj\gamma} - R_{ni\gamma}) = \sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\gamma}(R_{mj\beta} - R_{ni\beta}) \tag{4.10}$$

schreiben. Schließlich gilt für ein periodisches Gitter noch

$$V_{ni\alpha}^{mj\beta} = V_{n+l,i\alpha}^{m+l,j\beta} = V_{i\alpha}^{j\beta}(m-n). \tag{4.11}$$

4.c Lösung der Bewegungsgleichungen

Die allgemeine Lösung (siehe Mechanik-Vorlesung) ist durch die Überlagerung von zeitlich periodischen partikulären Lösungen der Form

$$\eta_{ni\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{M_i}} u_{ni\alpha} e^{-i\omega t} \tag{4.12}$$

gegeben. Die Amplitude der Auslenkungen sind die $u/\sqrt{M}$. Der Faktor $1/\sqrt{M}$ wurde eingeführt, damit wir anschließend eine symmetrische Matrix zu diagonalisieren haben. Wir erhalten dann durch Einsetzen und Ausfaktorisieren von $e^{-i\omega t}$ die Eigenwertgleichung

$$\omega^2 u_{ni\alpha} = \sum_{mj\beta} \Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} u_{mj\beta}, \quad \Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} = \frac{V_{ni\alpha}^{mj\beta}}{\sqrt{M_i M_j}}. \tag{4.13}$$

Da die Matrix Φ symmetrisch ist, wissen wir, dass die $3rN$ Eigenwerte ω^2 reell sind. Ist ω^2 positiv, so handelt es sich tatsächlich um Oszillatoren. Ist $\omega^2 = 0$, so ist $e^{-i\omega t}$ durch $t - t_0$ zu ersetzen; dies findet man für die Translationen und (für kleine Winkel) für die Rotationen. Ist schließlich $\omega^2 < 0$, dann ist $i\omega$ reell und man hat eine exponentiell anwachsende und eine exponentiell verschwindende Lösung; der Festkörper ist instabil. Die harmonische Näherung gilt nur für kleine Auslenkungen. Ist ω^2 negativ, dann wird der Festkörper in eine andere stabile Lage übergehen oder er verliert seine Festigkeit.

Die Matrix Φ hat die Größe $3rN \times 3rN$. Ihre Diagonalisierung wird aber für ein periodisches Gitter sehr vereinfacht. Hier setzt man

$$u_{ni\alpha} = c_{i\alpha}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n} \tag{4.14}$$

an. Die Amplitude der Auslenkung hängt also nur von dem Gitterplatz i innerhalb einer Gitterzelle ab und ist dann noch mit der Phase $e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n}$ multipliziert; es handelt sich um eine ebene Welle mit dem Wellenvektor $\mathbf{q}$. Man beachte, dass $\mathbf{q}$ nur bis auf reziproke Gittervektoren definiert ist.

Man findet mit diesem Ansatz die Eigenwertgleichungen

$$\omega^2 c_{i\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{mj\beta} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \Phi_{i\alpha}^{j\beta}(m-n) c_{j\beta}(\mathbf{q}) \tag{4.15}$$

oder mit der dynamischen Matrix

$$D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) = \sum_m \Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} = \frac{1}{\sqrt{M_i M_j}} \sum_m V_{i\alpha}^{j\beta}(m) \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} \tag{4.16}$$

in der Form

$$\omega^2 c_{i\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{j\beta} D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) c_{j\beta}(\mathbf{q}). \tag{4.17}$$

Die Matrizen D haben die Größe $3r \times 3r$ und führen auf $3r$ Phononenäste $\omega = \omega^\lambda(\mathbf{q})$ mit Amplituden $c_{i\alpha} = c_{i\alpha}^\lambda(\mathbf{q})$. Die speziellen Lösungen haben dann die Form

$$\boldsymbol{\eta}_{ni}(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{M_i}} \mathbf{c}_i^\lambda(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q}\mathbf{R}_n - \omega^\lambda(\mathbf{q})t)}. \tag{4.18}$$

Wir betrachten noch einige Symmetrien:

a) Es gilt

$$\omega_\lambda(\mathbf{q}) = \omega_\lambda(\mathbf{q} + \mathbf{G}), \text{ da } D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) = D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \tag{4.19}$$

für alle reziproken Gittervektoren $\mathbf{G}$.
b) Weiter gilt

$$\omega_\lambda(-\mathbf{q}) = \omega_\lambda(\mathbf{q}) \text{ und } \mathbf{c}_i(-\mathbf{q}) = \mathbf{c}_i^*(\mathbf{q}), \text{ da } D_{i\alpha}^{j\beta}(-\mathbf{q}) = D_{i\alpha}^{j\beta *}(\mathbf{q}) \tag{4.20}$$

c) Weiter ist D hermitesch,

$$D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) = \sum_m \Phi_{i\alpha}^{j\beta}(m) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} = \sum_m \Phi_{j\beta}^{i\alpha}(-m) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} = \sum_m \Phi_{j\beta}^{i\alpha}(m) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} = D_{j\beta}^{i\alpha *}(\mathbf{q}) = D_{j\beta}^{i\alpha}(-\mathbf{q}) \tag{4.21}$$

4.d Periodische Randbedingungen

Genau genommen ist diese Behandlung nur zulässig für einen Körper mit periodischen Randbedingungen. Für große Körper wird das Volumen-Verhalten (bulk) hierdurch korrekt beschrieben. Dagegen sind Oberflächenwellen hier vernachlässigt. Bei periodischen Randbedingungen etwa von der Form

$$\eta_{(n_1,n_2,n_3)i\alpha} = \eta_{(n_1+N_1,n_2+N_2,n_3+N_3)i\alpha}, \tag{4.22}$$

besteht das Periodizitätsvolumen V_P aus $N = N_1 N_2 N_3$ Elementar- oder Einheitszellen. Dementsprechend gibt es dann N verschiedene q-Werte. Sie müssen den Bedingungen

$$N_i \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}^{(i)} = 2\pi\nu_i \tag{4.23}$$

mit ganzen ν_i genügen. Die Lösung findet man am einfachsten, indem man $\mathbf{q}$ nach reziproken Gittervektoren entwickelt

$$\mathbf{q} = \sum_j \alpha_j \mathbf{b}^{(j)} \tag{4.24}$$

Dann folgt mit (3.19)

$$N_i \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}^{(i)} = 2\pi N_i \alpha_i = 2\pi\nu_i, \quad \alpha_i = \frac{\nu_i}{N_i}. \tag{4.25}$$

Benachbarte $\mathbf{q}$-Vektoren sind daher um die Vektoren $\mathbf{b}^{(1)}/N_1$, $\mathbf{b}^{(2)}/N_2$, $\mathbf{b}^{(3)}/N_3$ entfernt. Ihre Dichte um $\mathbf{q}$-Raum beträgt daher

$$\frac{N_1 N_2 N_3}{|(\mathbf{b}^{(1)} \times \mathbf{b}^{(2)}) \cdot \mathbf{b}^{(3)}|} = \frac{N V_\mathrm{z}}{(2\pi)^3} = \frac{V_\mathrm{P}}{(2\pi)^3}, \tag{4.26}$$

weshalb man für makroskopische Systeme die Summe über $\mathbf{q}$ ersetzt durch das Integral

$$\frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{q}} ... \to \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3 q ... \tag{4.27}$$

5 Kontinuumstheorie

5.a Mikroskopische Kontinuumstheorie

Wir beschränken uns auf ein Bravais-Gitter. Sonst ist noch die Verschiebung der Untergitter gegeneinander zu berücksichtigen, was zu umfangreicheren Rechnungen führt. Wir beginnen mit der Bewegungsgleichung

$$M\ddot{\eta}_{n\alpha} = -\sum_{m\beta} V_{n\alpha}^{m\beta}\eta_{m\beta}. \tag{5.1}$$

Wir nehmen nun an, $\boldsymbol{\eta}$ sei eine langsam veränderliche Funktion des Ortes und entwickeln $\boldsymbol{\eta}_m$ in eine Taylor-Reihe um $\mathbf{R}_n$.

$$\eta_{m\beta} = \eta_\beta(\mathbf{R}_n) + \sum_\gamma (R_m - R_n)_\gamma \frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{1}{2}\sum_{\gamma,\delta}(R_m - R_n)_\gamma (R_m - R_n)_\delta \frac{\partial^2 \eta_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} + ... \tag{5.2}$$

Es folgt dann die Bewegungsgleichung

$$M\ddot{\eta}_\alpha = -\sum_{m,\beta} V_{n\alpha}^{m\beta}\eta_\beta - \sum_{m,\beta,\gamma}(R_m - R_n)_\gamma V_{n\alpha}^{m\beta}\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} - \frac{1}{2}\sum_{m,\beta,\gamma,\delta}(R_m - R_n)_\gamma (R_m - R_n)_\delta V_{n\alpha}^{m\beta}\frac{\partial^2 \eta_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} - ... \tag{5.3}$$

Wir betrachten nun die verschiedenen Terme in der Entwicklung: Der erste Term verschwindet, da $\sum_m V_{n\alpha}^{m\beta} = 0$ wegen der Translationsinvarianz (4.5).

Wir gehen davon aus, dass im Inneren die Summe

$$\Gamma_{\alpha\gamma}^\beta := \sum_m V_{n\alpha}^{m\beta}(R_{m\gamma} - R_{n\gamma}) \tag{5.4}$$

vom Gitterpunkt n unabhängig ist, und dass die Beiträge am Rand nur von der Größenordnung aV sind, so dass etwaige Abweichungen am Rand in der folgenden Mittelung vernachlässigbar sind. Dann können wir Γ ersetzen durch

$$\Gamma_{\alpha\gamma}^\beta = \frac{1}{N}\sum_{mn} V_{n\alpha}^{m\beta}(R_{m\gamma} - R_{n\gamma}) = \frac{1}{N}\sum_m R_{m\gamma}\sum_n V_{n\alpha}^{m\beta} - \frac{1}{N}\sum_n R_{n\gamma}\sum_m V_{n\alpha}^{m\beta}. \tag{5.5}$$

Da die jeweils innere Summe verschwindet, verschwindet Γ und damit der Entwicklungskoeffizient vor der Ableitung $\frac{\partial \eta}{\partial x}$.

Ähnlich behandeln wir auch die Entwicklungskoeffizienten der zweiten Ableitungen. Wir definieren

$$2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = -\frac{1}{V_\mathrm{Z}}\sum_m (R_m - R_n)_\gamma (R_m - R_n)_\delta V_{n\alpha}^{m\beta} \tag{5.6}$$

Auch hier gehen wir davon aus, dass die Grössen innerhalb des Gitters unabhängig von n sind. Dann haben wir

$$\begin{aligned} 2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= -\frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_{mn}(R_m - R_n)_\gamma (R_m - R_n)_\delta V_{n\alpha}^{m\beta} \\ &= -\frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_m R_{m\gamma}R_{m\delta}\sum_n V_{n\alpha}^{m\beta} + C_{\alpha\delta,\beta\gamma} + C_{\alpha\gamma,\beta\delta} - \frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_n R_{n\gamma}R_{n\delta}\sum_m V_{n\alpha}^{m\beta} \end{aligned} \tag{5.7}$$

mit

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_{mn} R_{m\gamma}R_{n\delta}V_{n\alpha}^{m\beta}. \tag{5.8}$$

Die in (5.7) angegebenen expliziten Summen verschwinden, da die innere Summe wegen (4.5) verschwindet. Es bleibt also

$$2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = C_{\alpha\delta,\beta\gamma} + C_{\alpha\gamma,\beta\delta} \tag{5.9}$$

und die Bewegungsgleichung

$$\rho \ddot{\eta}_\alpha = \sum_{\beta\gamma\delta} \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} \frac{\partial^2 \eta_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta}. \tag{5.10}$$

Symmetrien: Vertauschen wir in der Definition von C die Indices $n\alpha\delta$ mit $m\beta\gamma$, so ändert sich C nicht. C ist daher invariant gegenüber Vertauschung des vorderen mit dem hinteren Index-Paar,

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = C_{\beta\gamma,\alpha\delta}. \tag{5.11}$$

Aus der Rotationsinvarianz (4.9) folgt, dass man die vorderen beiden Indices α und δ miteinander vertauschen kann, wie auch die hinteren beiden β und γ,

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = C_{\delta\alpha,\beta\gamma} = C_{\delta\alpha,\gamma\beta}. \tag{5.12}$$

Aus diesen Gleichungen leitet man auch leicht her, dass die gleichen Symmetrien auch für die $\hat{C}$ gelten,

$$\hat{C}_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \hat{C}_{\delta\alpha,\beta\gamma} = \hat{C}_{\delta\alpha,\gamma\beta} = \hat{C}_{\beta\gamma,\alpha\delta}. \tag{5.13}$$

Wir bemerken, dass sich mit Hilfe der Symmetrie-Relationen die C durch die $\hat{C}$ ausdrücken lassen

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} + \hat{C}_{\alpha\gamma,\beta\delta} - \hat{C}_{\alpha\delta,\beta\gamma}. \tag{5.14}$$

Da C invariant ist gegen Vertauschung der beiden hinteren Indices können wir die Bewegungsgleichung auch in der Form

$$\rho \ddot{\eta}_\alpha = \sum_\delta \frac{\partial}{\partial x_\delta} \left(\sum_{\beta\gamma} C_{\alpha\delta,\beta\gamma} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial \eta_\gamma}{\partial x_\beta} \right) \right) \tag{5.15}$$

schreiben. Man bezeichnet die Grösse

$$\epsilon_{\beta\gamma} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial \eta_\gamma}{\partial x_\beta} \right) \tag{5.16}$$

als den Verzerrungstensor. Er ist offensichtlich symmetrisch

$$\epsilon_{\beta\gamma} = \epsilon_{\gamma\beta}. \tag{5.17}$$

Die Größe

$$\sigma_{\alpha\delta} = \sum_{\beta\gamma} C_{\alpha\delta,\beta\gamma} \epsilon_{\beta\gamma} \tag{5.18}$$

bezeichnet man als Spannungstensor. Er ist ebenfalls symmetrisch auf Grund der Symmetrie von C, (5.12)

$$\sigma_{\alpha\delta} = \sigma_{\delta\alpha}. \tag{5.19}$$

Daher kann die Bewegungsgleichung auch

$$\rho \ddot{\eta}_\alpha = \sum_\delta \frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} \tag{5.20}$$

geschrieben werden. Auf Grund der Symmetrien ist es üblich, die Indices der 6 unabhängigen Komponenten des Verzerrungstensors ϵ und des Spannungstensors σ in folgender Weise zusammen zu fassen:

11	22	33	23	13	12
1	2	3	4	5	6

(5.21)

$C_{i,j}$, $i, j = 1..6$ ist dann symmetrisch und hat im Allgemeinen 21 unabhängige Komponenten. Durch Kristallsymmetrie reduziert sich deren Anzahl aber häufig.

5.b Verzerrungs- und Spannungstensor

5.b.α Verzerrungstensor

Wir haben oben den Verzerrungs- und den Spannungstensor definiert. Der Verzerrungstensor ist verknüpft mit den Ableitungen $\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma}$. Im allgemeinen hat man neun derartige Komponenten. Man zerlegt sie üblicherweise in den symmetrischen und den antisymmetrischen Anteil

$$\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} = \epsilon_{\beta\gamma} + \omega_{\beta\gamma}, \quad \epsilon_{\beta\gamma} = \epsilon_{\gamma\beta}, \quad \omega_{\beta\gamma} = -\omega_{\gamma\beta}. \tag{5.22}$$

Der symmetrische Anteil beschreibt (in linearer Ordnung) die Verzerrung. Hierzu bilden wir zunächst die Veränderung des Orte des Gitters in Abhängigkeit von ihrer Ruhelage

$$\mathrm{d}(R+\eta)_\alpha = \mathrm{d}x_\alpha + \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta}\mathrm{d}x_\beta. \tag{5.23}$$

Hieraus ergibt sich für das Quadrat eines infinitesimalen Abstands $\mathrm{d}l$

$$(\mathrm{d}l)^2 = \mathrm{d}(\mathbf{R}+\boldsymbol{\eta})\cdot\mathrm{d}(\mathbf{R}+\boldsymbol{\eta}) = (\mathrm{d}x_\alpha)^2 + 2\frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta}\mathrm{d}x_\alpha\mathrm{d}x_\beta + \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial x_\alpha}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial x_\beta}\mathrm{d}x_\alpha\mathrm{d}x_\beta = (\delta_{\alpha\beta} + 2\epsilon_{\alpha\beta})\,\mathrm{d}x_\alpha\mathrm{d}x_\beta \tag{5.24}$$

mit

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial x_\alpha}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial x_\beta}\right). \tag{5.25}$$

In linearer Ordnung stimmt ϵ mit dem oben definierten überein. Man kann ϵ diagonalisieren. Der Körper ist in Richtung der Eigenvektoren um den Faktor $1+\epsilon^{(i)}$ verlängert, wenn $\epsilon^{(i)}$ die Eigenwerte sind. (Dies gilt in linearer Näherung in $\frac{\partial \eta}{\partial x}$. Exakt gilt es, wenn man ϵ durch

$$(\mathrm{d}l)^2 = ((1+\epsilon)^2)_{\alpha\beta}\mathrm{d}x_\alpha\mathrm{d}x_\beta \tag{5.26}$$

definiert. Das Volumen vergrößert sich dann um den Faktor $\prod_i(1+\epsilon^{(i)})$, was in linearer Näherung mit $1+\sum_i \epsilon^{(i)} = 1+$ Spur (ϵ) übereinstimmt.

Der antisymmetrische Anteil von $\frac{\partial \eta}{\partial x}$ beschreibt eine Drehung. Wir hatten ja schon infinitesimale Rotationen eingeführt, die auf Auslenkungen

$$\eta_\alpha = \Phi_{\alpha\beta}x_\beta, \text{ d.h. } \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta} = \Phi_{\alpha\beta} \tag{5.27}$$

mit antisymmetrischem Φ führten.

5.b.β Spannungstensor

In Gleichung (5.20) haben wir die Kraftdichte als Divergenz des Spannungstensors σ ausgedrückt

$$\rho\ddot{\eta}_\alpha = k_\alpha = \sum_\delta \frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} \tag{5.28}$$

Die Kraft, die auf ein Volumen V wirkt, kann daher mittels des Gaussschen Satzes in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden

$$K_\alpha = \int_V \mathrm{d}^3r\frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} = \int_{\partial V}\mathrm{d}f_\delta\sigma_{\alpha\delta}. \tag{5.29}$$

Das Drehmoment, das auf das Volumen wirkt, kann nun wahlweise durch die im Volumen wirkende Kraftdichte oder die Oberflächenkraft ausgedrückt werden. Dabei schreiben wir das Drehmoment als antisymmetrischen Tensor

$$M^{\mathrm{V}}_{\alpha\beta} = \int_V \mathrm{d}^3r(x_\alpha k_\beta - x_\beta k_\alpha), \tag{5.30}$$

$$M^{\mathrm{F}}_{\alpha\beta} = \int_{\partial V}\mathrm{d}f_\delta(x_\alpha\sigma_{\beta\delta} - x_\beta\sigma_{\alpha\delta}). \tag{5.31}$$

Formen wir den zweiten Ausdruck in ein Volumen-Integral um, so erhalten wir

$$\begin{aligned} M^{\mathrm{F}}_{\alpha\beta} &= \int_{\partial V} \mathrm{d}f_\delta (x_\alpha \sigma_{\beta\delta} - x_\beta \sigma_{\alpha\delta}) = \int_V \mathrm{d}^3 r \frac{\partial}{\partial x_\delta} (x_\alpha \sigma_{\beta\delta} - x_\beta \sigma_{\alpha\delta}) \\ &= M^{\mathrm{V}}_{\alpha\beta} + \int_V \left(\frac{\partial x_\alpha}{\partial x_\delta} \sigma_{\beta\delta} - \frac{\partial x_\beta}{\partial x_\delta} \sigma_{\alpha\delta} \right) = M^{\mathrm{V}}_{\alpha\beta} + \int_V (\sigma_{\beta\alpha} - \sigma_{\alpha\beta}) \,. \end{aligned} \tag{5.32}$$

Da die Ausdrücke für das Volumen- und das Flächenintegral übereinstimmen müssen, muss $\sigma_{\beta\alpha} - \sigma_{\alpha\beta}$ verschwinden, das heißt σ muss ein symmetrischer Tensor sein. Die Oberflächenkraftdichte $\sigma \mathrm{d}f$ gibt die Kraft an, die von außen auf das Volumen wirkt. Umgekehrt übt das Volumen auf seine Umgebung die Kraftdichte $-\sigma \mathrm{d}f$ aus. Befindet sich der Körper in einem isotropen Druck p, so ist σ diagonal $\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta}$ und die Oberflächenkraft ergibt sich zu $-p\mathrm{d}\mathbf{f}$. Sie steht also senkrecht auf der Oberfläche. Im allgemeinen ist aber σ nicht proportional zur Einheits-Matrix. Dann treten auch Scherkräfte, das heißt Kräfte parallel zur Oberfläche auf.

5.c Akustische Äste

Die Bewegungsgleichung ergibt sich aus (5.10) mit dem Ansatz einer ebenen Welle

$$\boldsymbol{\eta} = \mathbf{u} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \tag{5.33}$$

wobei $\mathbf{u}$ die Richtung der Auslenkung angibt. Damit erhält man das Eigenwertproblem

$$\rho \omega^2 u_\alpha = \sum_{\beta\gamma\delta} \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} q_\gamma q_\delta u_\beta \tag{5.34}$$

mit der Eigenwertgleichung

$$\det_{\alpha\beta} \left(\sum_{\gamma\delta} \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} q_\gamma q_\delta - \rho\omega^2 \delta_{\alpha\beta} \right) = 0. \tag{5.35}$$

In diesen Gleichungen kann man auch $\hat{C}$ durch C ausdrücken und wegen der Symmetrie in γ und δ letztendlich $\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ durch $C_{\alpha\delta,\beta\gamma}$ ersetzen. Man erkennt aus (5.35), dass sich die Eigenfrequenzen in der Form

$$\omega_\lambda(\mathbf{q}) = q c_\lambda(\hat{q}), \quad \hat{q} = \mathbf{q}/q \tag{5.36}$$

schreiben lassen. Die Frequenzen sind also proportional q, der Proportionalitätsfaktor c ist die Schallgeschwindigkeit. Sie ist im Allgemeinen richtungsabhängig.

5.c.α Spezialfall: Kubischer Kristall

Für den kubischen Kristall setzen wir voraus, dass er durch orthogonale Transformationen, die die x-, y-, und z-Achse ineinander überführen, in sich übergeht. Dann ist

$$C_{11} = C_{22} = C_{33}, \quad C_{12} = C_{13} = C_{23}, \quad C_{44} = C_{55} = C_{66}. \tag{5.37}$$

Hier waren die vier Indices $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ von C jeweils paarweise gleich. Vorzeichenfaktoren bei den orthogonalen Transformationen traten daher jeweils paarweise auf. Sind von den vier Indices drei gleich und der vierte verschieden, so führt eine Drehung um eine dieser beiden Achsen um 180^0 diese Komponente von C in ihr Negatives über (z.B. $x, x, x, y \to x, x, x, -y$ bei Drehung um x-Achse); daher ist diese Komponente gleich 0. Sind von den vier Indices zwei gleich und die beiden anderen jeweils verschieden, so führt eine Drehung um 90^0 um die Achse, die zweifach vorkommt, C in sein Negatives über (z.B. $x, x, y, z \to x, x, z, -y$); daher verschwindet diese Komponente auch.

Mit den Abkürzungen

$$A = C_{11} - C_{44}, B = C_{12} + C_{44}, E = \rho\omega^2 - C_{44} q^2 \tag{5.38}$$

und

$$\sum_{\gamma\delta} C_{1\delta,1\gamma} q_\gamma q_\delta = C_{11} q_1^2 + C_{44}(q_2^2 + q_3^2) = A q_1^2 + C_{44} q^2, \tag{5.39}$$

$$\sum_{\gamma\delta} C_{1\delta,2\gamma} q_\gamma q_\delta = (C_{12} + C_{44}) q_1 q_2 = B q_1 q_2 \tag{5.40}$$

folgt dann die Eigenwertgleichung

$$\begin{vmatrix} A q_1^2 - E & B q_1 q_2 & B q_1 q_3 \\ B q_1 q_2 & A q_2^2 - E & B q_2 q_3 \\ B q_1 q_3 & B q_2 q_3 & A q_3^2 - E \end{vmatrix} = 0. \tag{5.41}$$

Diese Gleichung dritten Grades in E, das die Eigenfrequenz ω enthält, vereinfacht sich für die Symmetrie-Richtungen

$$\mathbf{q} = q \cdot (1,0,0) \quad l \quad \rho\omega_1^2 = C_{11} q^2 \tag{5.42}$$

$$t \quad \rho\omega_{2,3}^2 = C_{44} q^2 \tag{5.43}$$

$$\mathbf{q} = \frac{q}{\sqrt{2}} \cdot (1,1,0) \quad l \quad \rho\omega_1^2 = (\frac{1}{2} C_{11} + \frac{1}{2} C_{12} + C_{44}) q^2 \tag{5.44}$$

$$t \quad \rho\omega_2^2 = (\frac{1}{2} C_{11} - \frac{1}{2} C_{12}) q^2 \tag{5.45}$$

$$t \quad \rho\omega_3^2 = C_{44} q^2 \tag{5.46}$$

$$\mathbf{q} = \frac{q}{\sqrt{3}} \cdot (1,1,1) \quad l \quad \rho\omega_1^2 = (\frac{1}{3} C_{11} + \frac{2}{3} C_{12} + \frac{4}{3} C_{44}) q^2 \tag{5.47}$$

$$t \quad \rho\omega_{2,3}^2 = (\frac{1}{3} C_{11} - \frac{1}{3} C_{12} + \frac{1}{3} C_{44}) q^2 \tag{5.48}$$

Man sieht hier explizit, dass die Schallgeschwindigkeiten richtungsabhängig sind. Im Allgemeinen sind alle drei Schallgeschwindigkeiten wie hier im Fall der (1,1,0)-Richtung voneinder verschieden. Man vergleiche mit Abb. 5.13 auf Seite 149 im Skriptum Hunklinger/Enss.

Im isotropen Fall reduzieren sich die drei Elastizitäts-Konstanten auf zwei. Der Tensor vierter Stufe C muss dann gegenüber beliebigen Rotationen invariant sein. Er reduziert sich dann auf die Form

$$C_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} C_{12} + (\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) C_{44}, \tag{5.49}$$

woraus

$$C_{11} = C_{12} + 2C_{44} \tag{5.50}$$

folgt. In diesem Fall erhält man unabhängig von der Richtung die Frequenzen

$$l \quad \rho\omega_1^2 = C_{11} q^2 \tag{5.51}$$

$$t \quad \rho\omega_{2,3}^2 = C_{44} q^2. \tag{5.52}$$

5.d Ergänzungen

5.d.α Lagrange-Formulierung

Im Rahmen einer phänomenologischen Kontinuumstheorie geht man davon aus, dass man kinetische und potentielle Energie durch die Auslenkungen $\boldsymbol{\eta}$ als Funktion des Ortes und der Zeit ausdrücken kann. Die kinetische Energie lässt sich dann schreiben als

$$\mathcal{T} = \frac{\rho}{2} \int d^3 r \dot{\boldsymbol{\eta}}^2(\mathbf{r}, t). \tag{5.53}$$

Die potentielle Energie drückt man durch den Verzerrungstensor aus

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \int d^3 r C_{\alpha\beta,\gamma\delta} \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon_{\gamma\delta}. \tag{5.54}$$

Die Bewegungsgleichungen erhält man am einfachsten aus der Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V}, \tag{5.55}$$

wobei sich die Lagrange-Funktion als Integral über die Lagrange-Dichte schreiben lässt.

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \int \mathrm{d}^3 r L(\dot{\eta}, \frac{\partial \eta}{\partial x}) & (5.56)\\ L &= \frac{\rho}{2}\sum_\alpha \dot{\eta}_\alpha^2 - \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta}\epsilon_{\alpha\beta}\epsilon_{\gamma\delta}. & (5.57)\end{aligned}$$

Die Bewegungsgleichung erhält man durch Variation der Wirkung

$$S = \int \mathrm{d}t\mathcal{L} \tag{5.58}$$

bezüglich η,

$$\begin{aligned} \delta S &= \int \mathrm{d}t\mathrm{d}^3 r \sum_\alpha \delta L = \int \mathrm{d}t\mathrm{d}^3 r \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_\alpha}\delta\dot{\eta}_\alpha + \sum_\beta \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta}}\delta\frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta}\right) & (5.59)\\ &= \text{Randterme } - \int \mathrm{d}t\mathrm{d}^3 r \sum_\alpha \delta\eta_\alpha \left(\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_\alpha} + \sum_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta}\frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta}}\right), & (5.60)\end{aligned}$$

woraus dann die generelle Form der Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_\alpha} + \sum_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta}\frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta}} = 0 \tag{5.61}$$

folgt. Die Auswertung dieser Gleichung führt wieder auf die Bewegungsgleichung (5.10).

5.d.β Kristall unter äußerer Spannung

Wir hatten früher argumentiert, dass das Potential keine Beiträge linear in η hat, da sonst bereits unausgelenkt Kräfte auftreten würden. Steht allerdings ein Kristall unter einer äußeren Spannung, dann gibt es lineare Beiträge des Potentials, die durch die äußeren Kräfte kompensiert werden

$$\mathcal{V}^{\text{Kristall}} = \sum K_{n\alpha}\eta_{n\alpha} + \frac{1}{2}\sum_{mn} V_{n\alpha}^{m\beta}\eta_{n\alpha}\eta_{m\beta}. \tag{5.62}$$

Hinzu kommen dann die äußeren Kräfte, die durch das Potential

$$\mathcal{V}^{\text{aus}} = -\sum K_{n\alpha}\eta_{n\alpha} \tag{5.63}$$

beschrieben werden.

Steht der Kristall unter homogener Spannung, dann bilden wir das Integral über die auf den Kristall wirkende Kraftdichte multipliziert mit den Ortskoordinaten

$$\int \mathrm{d}^3 r k_\alpha x_\beta = \int \mathrm{d}^3 r x_\beta \frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} = \int \mathrm{d}^3 r \frac{\partial x_\beta \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} - \int \mathrm{d}^3 r \frac{\partial x_\beta}{\partial x_\delta}\sigma_{\alpha\delta} - \int \mathrm{d}^3 r \sigma_{\alpha\beta} = -V_{\mathrm{P}}\sigma_{\alpha\beta}. \tag{5.64}$$

Hierbei haben wir verwendet, dass die Spannung im Kristall natürlich nur im Kristallvolumen besteht. Ersetzen wir das Integral über die Kraftdichte durch die Summe über die Kräfte, so folgt

$$\sum_n K_{n\alpha}R_{n\beta} = -V_{\mathrm{P}}\sigma_{\alpha\beta}. \tag{5.65}$$

Als nächstes betrachten wir die Rotationsinvarianz. Sie trifft auf das Kristallpotential, aber in der Regel nicht auf das Potential der äußeren Kraft zu. Wir erhalten daher unter der Rotation (4.7)

$$\delta\mathcal{V}^{\text{Kristall}} = \sum K_{n\alpha}\Phi_{\alpha\beta}(R_{n\beta} + \eta_{n\beta}) + \sum V_{n\alpha}^{m\beta}\eta_{n\alpha}\Phi_{\beta\gamma}R_{m\gamma} + O(\eta^2) \tag{5.66}$$

Dieses $\delta\mathcal{V}$ muss identisch verschwinden. Daher folgt für den von η unabhängigen Beitrag

$$\sum K_{n\alpha}R_{n\beta} = \sum K_{n\beta}R_{n\alpha}, \tag{5.67}$$

also die Symmetrie des Spannungstensors. Der mit $\Phi_{\beta\gamma}\eta_{n\alpha}$ multiplizierte Beitrag aus (5.66) muss mit dem mit $\Phi_{\gamma\beta}\eta_{n\alpha}$ multiplizierten übereinstimmen. Daraus folgt

$$\delta_{\alpha\gamma}K_{n\beta} + \sum_m V_{n\alpha}^{m\beta}R_{m\gamma} = \delta_{\alpha\beta}K_{n\gamma} + \sum_m V_{n\alpha}^{m\gamma}R_{m\beta}. \tag{5.68}$$

Multiplizieren wir mit $R_{n\delta}$, summieren über n und setzen wir die Definitionen von C und σ ein, so finden wir

$$-\delta_{\alpha\gamma}\sigma_{\beta\delta} + C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = -\delta_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta} + C_{\alpha\delta,\gamma\beta}. \tag{5.69}$$

Daraus folgt, dass die Grösse

$$S_{\alpha\delta,\beta\gamma} := C_{\alpha\delta,\beta\gamma} + \delta_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta} = C_{\alpha\delta,\gamma\beta} + \delta_{\alpha\gamma}\sigma_{\beta\delta} \tag{5.70}$$

die Symmetrien

$$S_{\alpha\delta,\beta\gamma} = S_{\alpha\delta,\gamma\beta} = S_{\delta\alpha,\beta\gamma} = S_{\beta\gamma,\alpha\delta} \tag{5.71}$$

hat. Für die Größen $\hat{C}$ folgt dann

$$\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \hat{S}_{\alpha\beta,\gamma\delta} - \delta_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta}, \quad \hat{S}_{\alpha\beta,\gamma\delta} := \frac{1}{2}(S_{\alpha\delta,\beta\gamma} + S_{\alpha\gamma,\beta\delta}), \tag{5.72}$$

wobei auch $\hat{S}$ wieder die Symmetrien

$$\hat{S}_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \hat{S}_{\alpha\delta,\gamma\beta} = \hat{S}_{\delta\alpha,\beta\gamma} = \hat{S}_{\beta\gamma,\alpha\delta}. \tag{5.73}$$

folgen. Für einen isotropen Druck $\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta}$ folgen die Symmetrien (5.13) auch für die

$$\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \hat{S}_{\alpha\beta,\gamma\delta} + p\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}. \tag{5.74}$$