

UNIVERSITÄT POTSDAM



## Masterarbeit

---

# Theoretische und experimentelle Untersuchungen von Hyperschallwellen in Dysprosium-Scandat und Galliumarsenid im Hinblick auf Solitonen

---

**Autor**  
Philipp Leisering

**Erstgutachter**  
Prof. Dr. Matias Bargheer

**Zweitgutachter**  
Dr. Axel Heuer

MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE FAKULTÄT  
INSTITUT FÜR PHYSIK UND ASTRONOMIE



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>9</b>
2.1	Lineare Kette als Modell zur Beschreibung einer Gitterdynamik im Kristall . . . . .	9
2.2	Übergang zur nicht linearen Wellengleichung . . . . .	10
2.3	Zusammenhang zwischen der nicht linearen Wellengleichung und der Kortweg-de-Vries-Gleichung . . . . .	12
2.4	Solitonen als Lösungen der assoziierten Schrödinger-Gleichung .	15
2.4.1	Bedeutung der Streutheorie für das Lösen der Kortweg-de-Vries-Gleichung . . . . .	17
2.4.2	Bedeutung der inversen Streutheorie für das Lösen der Kortweg-de-Vries-Gleichung . . . . .	17
2.4.3	Konkrete solitonische Lösung der Kortweg-de-Vries-Gleichung . . . . .	19
2.5	Zusammenfassung der wesentlichen Eigenschaften von Solitonen	20
<b>3</b>	<b>Erzeugung einer Hyperschallwelle in einem Kristall</b>	<b>22</b>
3.1	Kurzdarstellung . . . . .	22
3.2	Form der induzierten Anfangsdehnung für einen Spezialfall . . .	22
3.3	Allgemeine Form der induzierten Anfangsdehnung . . . . .	25
3.4	Amplitude der Anfangsdehnung . . . . .	28
3.5	Physikalischer Hintergrund . . . . .	30
3.6	Erläuterungen zu den verwendeten Proben . . . . .	30
3.6.1	Strontium-Ruthenat-Transducer und Dysprosium-Scandat-Substrat . . . . .	30
3.6.2	Al-Transducer und GaAs-AlAs-GaAs-Substrat . . . . .	32
<b>4</b>	<b>Analytische und numerische Untersuchungen</b>	<b>35</b>
4.1	Numerische Lösung der linearen Kette für einen SRO-Transducer auf einem DSO-Substrat . . . . .	35
4.2	Numerische Lösung der Kortweg-de-Vries-Burgers-Gleichung mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren . . . . .	38
4.2.1	Klassisches Runge-Kutta-Verfahren . . . . .	38

4.2.2	Anwendung des klassischen Runge-Kutta-Verfahrens auf die Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung . . . . .	40
4.2.3	Numerische Berechnung für einen Al-Transducer und auf GaAs-Substrat . . . . .	41
4.3	Lösung der assoziierten Schrödinger-Gleichung für eine bestimmte Anfangsbedingung . . . . .	46
4.3.1	Aufstellen der Wellenfunktion . . . . .	47
4.3.2	Stetigkeitsbedingungen . . . . .	49
4.3.3	Beispielrechnung für einen Al-Transducer und GaAs-Substrat . . . . .	51
4.4	Vergleich der verschiedenen Methoden für die Beschreibung einer Dynamik in einem Kristall . . . . .	55
<b>5</b>	<b>Experimentelle Untersuchungen</b>	<b>60</b>
5.1	Detektion einer Hyperschallwelle in einem Kristall . . . . .	60
5.2	Aufbau des pump-probe-Experiments . . . . .	63
5.3	Auswertung der Messergebnisse für die Dysprosium-Scandat-Probe . . . . .	64
5.3.1	Vergleich der Simulation mit den Messdaten . . . . .	70
5.3.2	Detektion von Solitonen in Dysprosium-Scandat . . . . .	74
5.4	Aufbau des Experiments und Auswertung der Messergebnisse für die Galliumarsenid-Probe . . . . .	77
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>85</b>
<b>7</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>87</b>
<b>8</b>	<b>Anhang</b>	<b>I</b>

# 1 Einleitung

Viele der wichtigsten technischen Forschungsfelder sind limitiert aufgrund der zur Verfügung stehenden Materialien. Demzufolge ist der Anwendungsbereich von Festkörpern und die Entwicklung neuer Materialien von höchstem Interesse. Die Basis hierfür ist das Verständnis von den physikalischen Eigenschaften eines Festkörpers. Fokussieren wir uns auf einen kristallinen Festkörper, so beschränken sich die meisten physikalischen Eigenschaften auf die Bewegungen der Atomkerne und der Elektronen. Beschränkt man sich auf ein Metall, so kann man zwischen den Bewegungen der Atomkerne mit ihren quasi gebundenen Elektronen und den quasi freien Elektronen unterscheiden. Diese Differenzierung hat gleich mehrere Vorteile. Zum einen ist für die Beeinflussung der quasi freien Elektronen auf die Atomkerne nur deren mittlere Verteilung relevant, was mit der unterschiedlichen Trägheit beider Systeme zu begründen ist. Andererseits sind verschiedene Eigenschaften eines Festkörpers entweder mit den Bewegungen der Atomrümpfe, mit ihren quasi gebundenen Elektronen, oder mit den Bewegungen der quasi freien Elektronen zu begründen [1].

In dieser Arbeit werden wir uns hauptsächlich auf die Bewegungen der Atomkerne konzentrieren. Um genau diese Bewegung zu untersuchen, besteht die Möglichkeit, das Verhalten einer zeitlich sehr kurzen Schallwelle  $\approx 10$  ps zu beobachten. Diese Schallwelle enthält Frequenzkomponenten von bis zu 100 GHz und kann daher auch als Hyperschallwelle bezeichnet werden.

Hyperschallwellen sind auch besonders Interessant für die Entwicklung eines Akustische-Oberflächenwellen-Filters mit Durchlassfrequenzen im GHz-Bereich. Akustische-Oberflächenwellen-Filter dienen als Zwischenfrequenzfilter vieler Funkempfangsgeräte, wie z.B. Fernsehgeräte und Mobiltelefone.

Von besonderem Interesse ist die nicht lineare Wechselwirkung zwischen den Gitteratomen und die Dispersion der Schallwelle, denn genau diese beiden Effekte beeinflussen die Hyperschallwelle maßgeblich. Diese beiden Effekte sind auch die Voraussetzung für das Entstehen sogenannter Solitonen.

Solitonen sind einzelne stabile Wellenpakete, deren räumliches Profil zeitunabhängig ist. Dies ist beachtlich, da man aufgrund der Dispersion und der nicht linearen Wechselwirkung der Gitteratome erwartet, dass ein Wellenpaket seine Form verändert. Solitonen entstehen genau dann, wenn sich diese beiden Effekte gerade kompensieren.

Solitonen wurden zuerst in einem flachen schottischen Kanal 1834 von John Scott Russell, einem Professor für Experimentelle Physik an der Hochschule in Edinburgh, entdeckt. Seine Beobachtung beschrieb er mit folgenden Worten:

*I was observing the motion of a boat which was rapidly drawn*

*along a narrow channel by a pair of horses, when the boat suddenly stopped – not so the mass of water in the channel which it had put in motion; it accumulated round the prow of the vessel in a state of violent agitation, then suddenly leaving it behind, rolled forward with great velocity, assuming the form of a large solitary elevation, a rounded, smooth and well-defined heap of water, which continued its course along the channel apparently without change of form or diminution of speed. I followed it on horseback, and overtook it still rolling on at a rate of some eight or nine miles an hour, preserving its original figure some thirty feet long and a foot to a foot and a half in height. Its height gradually diminished, and after a chase of one or two miles I lost it in the windings of the channel. Such, in the month of August 1834, was my first chance interview with that singular and beautiful phenomenon which I have called the Wave of Translation. [2]*

Mathematisch kann das Phänomen mit der Korteweg-de-Vries-Gleichung beschrieben werden. Diese Differentialgleichung wurde im Jahr 1895 von Diederik Korteweg und Gustav de Vries wiederentdeckt [3], nachdem sie bereits im Jahre 1877 von Joseph Boussinesq aufgestellt und untersucht wurde [4]. Diese Differentialgleichung wurde jedoch bis dahin ausschließlich für die Beschreibung von Flachwasserwellen angewendet.

Im Jahr 1965 konnten dann Norman Zabusky und Joseph Kruskal nachweisen, dass die Korteweg-de-Vries-Gleichung auch geeignet ist, um eine Gitterdynamik eines Festkörpers zu beschreiben. Nur zwei Jahre später konnten Gardner *et al* zeigen, dass die Korteweg-de-Vries-Gleichung auch analytische Lösungen besitzt, welche mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung bestimmt werden können [5].

Solitonen werden aber weder ausschließlich in Flachwasserwellen und Kristallen beobachtet, noch sind sie nur Lösungen der Korteweg-de-Vries-Gleichung. Darüber hinaus konnten sie bereits in Lichtwellenleitern beobachtet werden. In diesem Fall sind Solitonen Lösungen der nicht linearen Schrödinger Gleichung [6]. Wäre es somit möglich, einzelne Solitonen zu erzeugen, so könnte man schließlich Informationen mit Hilfe von Lichtwellenleitern über eine beliebig weite Strecke übertragen. Aufgrund der Tatsache, dass die Transmission eines Lichtwellenleiters nicht 100 % beträgt, müssten die Solitonen nur nach einer bestimmten Strecke wieder verstärkt werden. Dies setzt aber voraus, dass das in dem Lichtwellenleiter eingekoppelte Bit bereits exakt die Form eines Soli-

tons aufweist. Diese technische Hürde ist ein Grund dafür, warum Solitonen noch nicht für die Informationsübertragung in einem Lichtwellenleiter eingesetzt werden [7].

Des Weiteren konnten bereits Solitonen in Spinwellen eines magnetischen Systems beobachtet werden, wobei Solitonen in diesem Fall Lösungen der Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung sind [8, 9].

Mittlerweile konnten akustische Solitonen bereits in vielen Kristallen beobachtet werden. Einerseits konnten sie in Magnesiumoxid, Silicium, Siliciumdioxid und Saphir gemessen werden, indem genau zu dem Zeitpunkt ihrer Reflexion an der Probenoberfläche die relative optische Reflektionsänderung der Probe vermessen wurde [10]. Andererseits wurden Solitonen auch in Galliumarsenid mit Hilfe eines Interferometers detektiert [11].

Ebenso wurde bereits die nicht lineare Wechselwirkung zwischen den Gitteratomen in Strontiumtitanat mit Hilfe von Brillouinstreuung in der Arbeitsgruppe Bargheer beobachtet [12].

Diese Arbeit konzentriert sich in erster Linie auf die Verbindungen Dysprosium-Scandat und Galliumarsenid. In diesen Materialien sollen die nicht lineare Wechselwirkung zwischen den Gitteratomen und die Dispersion eines Wellenpakets untersucht werden, wobei hier die Entstehung von Solitonen im Vordergrund steht. Die theoretische Betrachtung dieser physikalischen Effekte erfolgt mit Hilfe des Modells der linearen Kette, der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung und der Schrödinger-Gleichung. Der mathematische Zusammenhang zwischen diesen drei Gleichungen wird im Kapitel 2 verdeutlicht. Die numerischen bzw. analytischen Lösungen der Differentialgleichungen und deren Vergleich erfolgt im Kapitel 4. Die Erzeugung einer Hyperschallwelle, welche die für die Differentialgleichungen notwendige Anfangsbedingung darstellt, ist Gegenstand des 3. Kapitels. Im Kapitel 5 hingegen sollen die theoretisch gewonnenen Erkenntnisse experimentell mit einem optischen pump-probe-Aufbau überprüft werden. Das Kapitel 6 hingegen fasst die wichtigsten Erkenntnisse, welche in dieser Arbeit gewonnen wurden, zusammen. Auch werden in diesem Kapitel offene Fragen benannt und weiterführende Experimente vorgeschlagen. Die Abbildung 1.1 gibt sowohl einen Überblick über den Inhalt dieser Arbeit als auch über den historische Ursprung der hier angewendeten Differentialgleichungen.

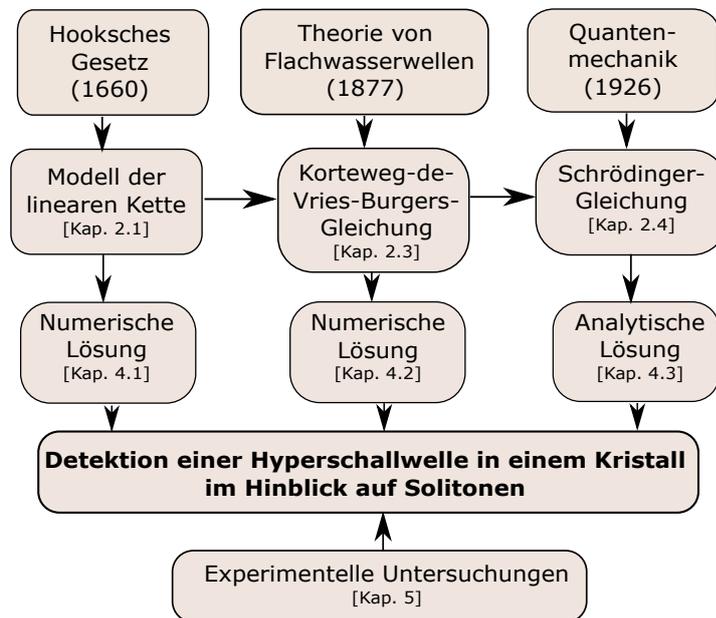


Abbildung 1.1: Überblick über den Inhalt dieser Arbeit und den historischen Ursprung der hierfür relevanten Differentialgleichungen.

## 2 Theoretische Grundlagen

Dieses Kapitel befasst sich mit dem mathematischen Zusammenhang zwischen dem Modell der linearen Kette, der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung und der Schrödinger-Gleichung. Ebenfalls wird explizit auf die Entstehung von Solitonen eingegangen.

### 2.1 Lineare Kette als Modell zur Beschreibung einer Gitterdynamik im Kristall

Um eine Dynamik in einem Festkörper zu beschreiben, ist es erforderlich, dessen diskrete Struktur zu untersuchen. Eine allgemeine Analyse von Schwingungen eines Systems, welches aus vielen Atomen besteht, ist sehr kompliziert. Daher ist es von Vorteil, wenn man diese Dynamik besonders einfach darstellt. Mittels folgender Annahmen werden wir die Bewegung der Atome in einem kristallinen Festkörper um ihre Ruhelage mathematisch beschreiben.

- i) Eine eindimensionale Kette von Atomen ist bereits ausreichend, um eine spezielle Dynamik eines dreidimensionalen Gitters zu beschreiben, wobei wir uns auf longitudinale Gitterschwingungen beschränken. Aufgrund der Symmetrie kompensieren sich somit alle Kräfte vertikal zur Schwingungsrichtung.
- ii) Jedes Atom erfährt nur die Kräfte seiner direkten Nachbarn.
- iii) Die Kraft, die ein Atom aufgrund seiner Auslenkung erfährt, wird durch das Hooksche Gesetz beschrieben und durch einen anharmonischen Term ergänzt. Zusätzlich nimmt man an, dass das System linear gedämpft ist.

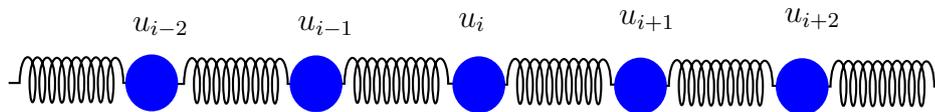


Abbildung 2.1: Lineare Kette von Atomen

Für die Auslenkung  $u_i$  des  $i$ -ten Atoms, siehe Abbildung 2.1, kann nun folgende Differentialgleichung formuliert werden

$$\begin{aligned}
 m\ddot{u}_i = & k \left[ (u_{i+1} - u_i) - (u_i - u_{i-1}) \right] \\
 & + \alpha \left[ (u_{i+1} - u_i)^2 - (u_i - u_{i-1})^2 \right] \\
 & + \epsilon \left[ (\dot{u}_{i+1} - \dot{u}_i) - (\dot{u}_i - \dot{u}_{i-1}) \right],
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

wobei  $m$  die Masse eines Schwingers,  $k$  die Federkonstante,  $\alpha$  die Anharmonizität und  $\epsilon$  die Dämpfung ist.

Die erste numerische Lösung der Differentialgleichung<sup>1</sup> (2.1) ist auch als das im Jahr 1955 durchgeführte Fermi-Pasta-Ulam-Experiment bekannt [13]. Es war ebenfalls das erste Experiment, welches mit Hilfe eines Computers simuliert wurde [14]. Aufgrund der Nichtlinearität erwartete man ein chaotisches Verhalten [15], entgegen der Annahme wurde ein periodisches beobachtet.

Dies veranlasste intensive Untersuchungen nicht linearer Differentialgleichungen, da man nun nicht mehr ausschließen konnte, dass diese nicht lösbar seien [16]. Wie später noch gezeigt wird, besteht die Möglichkeit, die Gleichung (2.1) mit einer lösbaren nicht linearen Differentialgleichung, der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung, zu approximieren.

## 2.2 Übergang zur nicht linearen Wellengleichung

Um den Umgang mit der Differentialgleichung der linearen Kette zu vereinfachen, bietet es sich an, diese mit einer nicht linearen Wellengleichung zu approximieren. Es besteht somit die Möglichkeit, dass die nicht lineare Wellengleichung analog zur linearen Wellengleichung behandelt werden kann. Die lineare eindimensionale Wellengleichung hingegen gilt als eine vielseitig angewandte Differentialgleichung in der Physik und wurde bereits 1746 von d'Alembert aufgestellt [17].

Mit der Verwendung der folgenden Notation wird ein Übergang von der diskreten Koordinate  $u_i$  zu einer stetigen Koordinaten  $u(x)$  vollzogen:

$$u(x - a, t) = u_{i-1} \tag{2.2}$$

$$u(x, t) = u_i \tag{2.3}$$

$$u(x + a, t) = u_{i+1}. \tag{2.4}$$

---

<sup>1</sup> Hierbei wurde der Dämpfungsparameter  $\epsilon = 0$  gesetzt.

Somit ergibt sich Gleichung (2.1) zu:

$$\begin{aligned}
 m\ddot{u}(x, t) = & k \left[ (u(x + a, t) - u(x, t)) - (u(x, t) - u(x - a, t)) \right] \\
 & + \alpha \left[ (u(x + a, t) - u(x, t))^2 - (u(x, t) - u(x - a, t))^2 \right] \quad (2.5) \\
 & + \epsilon \left[ (\dot{u}(x + a, t) - \dot{u}(x, t)) - (\dot{u}(x, t) - \dot{u}(x - a, t)) \right].
 \end{aligned}$$

Mit Hilfe einer Reihenentwicklung nach Taylor gilt:

$$u(x + a, t) = u + a \frac{\partial}{\partial x} u + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u + \frac{a^3}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} u + \frac{a^4}{24} \frac{\partial^4}{\partial x^4} u + \mathcal{O}(a^5) \quad (2.6)$$

$$u(x - a, t) = u - a \frac{\partial}{\partial x} u + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u - \frac{a^3}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} u + \frac{a^4}{24} \frac{\partial^4}{\partial x^4} u + \mathcal{O}(a^5), \quad (2.7)$$

wobei  $u = u(x, t)$  verwendet wurde.

Nach dem Einsetzen der Gleichungen (2.6) und (2.7) in (2.5), wobei in dem ersten Summanden der Gleichung (2.5) die Taylorentwicklung bis zur Ordnung vier und in dem zweiten und dritten Summanden die Taylorentwicklung bis zur Ordnung zwei berücksichtigt wurden, erhält man die nicht lineare Wellengleichung:

$$\begin{aligned}
 m\ddot{u} = & k \left[ a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u \right] + \alpha \left[ 2a^3 \left( \frac{\partial}{\partial x} u \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} u \right] \\
 & + k \left[ \frac{a^4}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} u \right] + \epsilon \left[ a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \dot{u} \right] \quad (2.8)
 \end{aligned}$$

Mit Hilfe der elastischen Konstante  $C_1 = k/a$ , der nicht linearen elastischen Konstante  $C_3 = 2\alpha$  und der Massendichte  $\rho_0 = m/a^3$  ergibt sich Gleichung (2.8) zu

$$\boxed{\rho_0 \ddot{u} = \underbrace{\left( C_1 + C_3 \frac{\partial}{\partial x} u \right)}_{\text{I}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u + \underbrace{2\rho_0 c \gamma}_{\text{II}} \frac{\partial^4}{\partial x^4} u + \underbrace{\frac{\epsilon}{a} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \dot{u}}_{\text{III}},} \quad (2.9)$$

wobei  $c$  die Schallgeschwindigkeit und  $\gamma$  die Dispersion ist. Diese Größen werden über die Dispersionsrelation eines Phonons definiert:

$$\omega_p(q) = \underbrace{a\sqrt{\frac{k}{m}}}_c q - \underbrace{\frac{a^3}{24}\sqrt{\frac{k}{m}}}_\gamma q^3 + \mathcal{O}(q^5). \quad (2.10)$$

Der in Gleichung (2.9) als II gekennzeichnete Term ist die Dispersion der Welle, der Term III hingegen die Dämpfung. Der in Gleichung (2.9) als I gekennzeichnete Bereich ist somit die dispersions- und dämpfungsfreie nicht lineare Wellengleichung [18, 19].

### 2.3 Zusammenhang zwischen der nicht linearen Wellengleichung und der Korteweg-de-Vries-Gleichung

Um nun die Differentialgleichung (2.8) analytisch zu lösen, besteht die Möglichkeit, diese in die Korteweg-de-Vries–Burgers-Gleichung zu transformieren, dessen Lösungen bereits bekannt sind.

Norman Zabusky und Joseph Kruskal gelang es 1965 zu zeigen, dass die Korteweg-de-Vries-Gleichung, ein Spezialfall der Korteweg-de-Vries–Burgers-Gleichung, dem kontinuierlichen Grenzfall der nicht linearen, dämpfungsfreien Wellengleichung entspricht, womit das Fermi-Pasta-Ulam-Experiment erklärt werden konnte [20].

Heute sind mehrere Herleitungen für die Korteweg-de-Vries-Gleichung bekannt [21, 10]. Der hier vorgestellte Übergang von der nicht linearen Wellengleichung zur Korteweg-de-Vries-Gleichung ist an die Herleitung von Richard Palais [22] angelehnt.

Das Ziel ist nun die Darstellung der Wellengleichung (2.8) für den kontinuierlichen Grenzfall. Dieser liegt vor, falls man annimmt, dass die Anzahl der Oszillatoren  $N$  einer linearen Kette der Länge  $l$  unendlich ist.

Für die Gitterkonstante  $a$  gilt:

$$a = \frac{l}{N - 1} \quad (2.11)$$

und für den kontinuierlichen Grenzfall somit  $a \rightarrow 0$ .

Nun fokussieren wir uns auf die Gleichung (2.8). Nach der Division dieser Gleichung durch  $ka^2$  erhalten wir:

$$\underbrace{\frac{1}{c^2}\ddot{u} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}u - \frac{\epsilon}{k}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\dot{u}}_{\text{lineare Wellengleichung mit Dämpfung}} = \frac{2a\alpha}{k} \left( \frac{\partial}{\partial x}u \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2}u + \frac{a^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4}u. \quad (2.12)$$

Aus der Gleichung (2.12) ist ersichtlich, dass bei dem Übergang zum kontinuierlichen Grenzfall sich die Wellengleichung zu einer gedämpften linearen Welle vereinfacht [23].

Somit gilt:

$$\lim_{a \rightarrow 0} \underbrace{\left[ \frac{1}{c^2} \ddot{u} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} u - \frac{\epsilon}{k} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \dot{u} \right]}_{\text{lineare Wellengleichung mit Dämpfung}} = \lim_{a \rightarrow 0} \left[ \frac{2a\alpha}{k} \left( \frac{\partial}{\partial x} u \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} u + \frac{a^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} u \right] = 0. \quad (2.13)$$

Die Lösung der gedämpften linearen Wellengleichung  $u_{lin}(x, t)$  kann bekanntlich als eine nach links und rechts laufende Welle separiert werden [24]. Aus Symmetriegründen ist die Fokussierung auf eine Propagationsrichtung ausreichend:

$$u_{lin}(x, t) = u_R(x - ct), \quad (2.14)$$

wobei dieser Ausdruck eine nach rechts laufende Welle beschreibt.

Die Lösung der nicht linearen Wellengleichung  $u$  kann nun wie folgt dargestellt werden:

$$u(x, t) = y(x - ct, a^2 ct). \quad (2.15)$$

Somit ist gewährleistet, dass

$$\lim_{a \rightarrow 0} u(x, t) = y(x - ct) \quad (2.16)$$

gilt und in eine Lösung der gedämpften linearen Wellengleichung übergeht, was in Übereinstimmung mit dem kontinuierlichen Grenzfall der nicht linearen Wellengleichung steht, siehe Gleichung (2.13).

Dies motiviert dementsprechend die Substitution:

$$u(x, t) = y(\xi, \tau) \quad (2.17)$$

mit

$$\xi = x - ct \quad (2.18)$$

$$\tau = a^2 ct. \quad (2.19)$$

Demnach gilt nach der Kettenregel:

$$\frac{\partial^k}{\partial x^k} = \frac{\partial^k}{\partial \xi^k} \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = -c \left( \frac{\partial}{\partial \xi} - a^2 \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} = c^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - 2a^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \tau} + a^4 \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \right). \quad (2.22)$$

Somit kann nun die Gleichung (2.12) mit der Gleichung (2.17) substituiert und durch  $-2a^2$  dividiert werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \tau} - \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2 y}{\partial \tau^2} - \frac{\epsilon}{2\sqrt{C_1 m}} \left( \frac{1}{a^{3/2}} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - \sqrt{a} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \frac{\partial y}{\partial \tau} \right) = \\ - \frac{\alpha}{C_1 a^2} \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - \frac{1}{24} \frac{\partial^4 y}{\partial \xi^4}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

wobei wieder  $c = a\sqrt{\frac{k}{m}}$  und  $k = aC_1$  verwendet wurden.

Der kontinuierliche Grenzfall  $a \rightarrow 0$  der Gleichung (2.23) ergibt somit:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \tau} - \frac{\epsilon}{2\sqrt{C_1 m}} \frac{1}{a^{3/2}} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} = - \frac{\alpha}{C_1 a^2} \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - \frac{1}{24} \frac{\partial^4 y}{\partial \xi^4} \quad (2.24)$$

Nach der Einführung der Dehnung (engl. strain)  $\eta = \frac{\partial y}{\partial \xi}$  und dem Übergang von  $\tau \rightarrow t$  in Gleichung (2.19) erhalten wir die Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung [25]:

$$\boxed{\frac{\partial \eta}{\partial t} = - \frac{C_3}{2\rho_0 c} \eta \frac{\partial \eta}{\partial \xi} - \gamma \frac{\partial^3 \eta}{\partial \xi^3} + \epsilon' \frac{\partial^2 \eta}{\partial \xi^2}}, \quad (2.25)$$

mit

$$\epsilon' = \frac{\epsilon}{2a\rho_0}. \quad (2.26)$$

Nun können wir die Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung auch in normierten Koordinaten darstellen. Dazu wählen wir:

$$n = n_1 n' \quad (2.27)$$

$$\xi = x_1 x' = \sqrt{\frac{-12\rho_0 c \gamma}{n_1 C_3}} x' \quad (2.28)$$

$$t = \frac{x_1^3}{\gamma} t', \quad (2.29)$$

wobei für die meisten Materialien  $C_3 < 0$  gilt und somit  $x_1$  eine reelle Größe ist. Damit erhalten wir:

$$\frac{\partial \eta'}{\partial t'} = 6\eta' \frac{\partial \eta'}{\partial x'} - \frac{\partial^3 \eta'}{\partial x'^3} + \frac{\epsilon x_1}{2\gamma a \rho_0} \frac{\partial^2 \eta'}{\partial x'^2} \quad (2.30)$$

Für den dämpfungsfreien Fall ( $\epsilon = 0$ ) erhält man:

$$\boxed{\frac{\partial \eta'}{\partial t'} = 6\eta' \frac{\partial \eta'}{\partial x'} - \frac{\partial^3 \eta'}{\partial x'^3}} \quad (2.31)$$

Die Gleichung (2.31) ist nun die Kortweg-de-Vries-Gleichung, welche somit ein Spezialfall der Kortweg-de-Vries-Burgers-Gleichung, siehe Gleichung (2.25), ist.

Hier ist zu beachten, dass wir uns aufgrund der Koordinatentransformation, siehe Gleichung (2.18), in einem mit der Schallgeschwindigkeit als Relativgeschwindigkeit bewegten Bezugssystem (engl. propagating frame of reference) befinden.

## 2.4 Die Solitonen als Lösungen der assoziierten Schrödinger-Gleichung

In diesem Kapitel wird gezeigt, dass die Kortweg-de-Vries-Gleichung mit der assoziierten Schrödinger-Gleichung gelöst werden kann, wobei sich deren Lösung ausschließlich auf Solitonen bezieht. Die Kortweg-de-Vries-Gleichung ist in ihrer normierten Form die Gleichung (2.31).

Nun wollen wir folgenden Satz [26] nutzen:

Gilt für die Operatoren  $L(x', t')$  und  $A(x', t')$ :

$$L\Psi = \lambda\Psi \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial\lambda}{\partial t'} = 0 \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t'} = A\Psi, \quad (2.34)$$

dann folgt daraus:

$$\frac{\partial L}{\partial t'} + LA - AL = 0, \quad (2.35)$$

wobei  $\Psi = \Psi(x', t')$  ist und  $\lambda$  aufgrund von Gleichung (2.32) eine Konstante. Dieser Satz lässt sich beweisen, indem man Gleichung (2.32) nach der Zeit  $t'$  ableitet und dann Gleichung (2.34) benutzt [27].

Das Ziel ist es nun, ein sogenanntes Lax-Paar  $(L; A)$  zu finden, sodass Gleichung (2.35) die zu lösende Differentialgleichung, in unserem Fall die Kortweg-de-Vries-Gleichung, ist.

Für die Kortweg-de-Vries-Gleichung kann folgendes Lax-Paar [28] gefunden werden:

$$L = -\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \eta' \quad (2.36)$$

$$A = -4\frac{\partial^3}{\partial x'^3} + 3\left(\frac{\partial}{\partial x'}\eta' + \eta'\frac{\partial}{\partial x'}\right). \quad (2.37)$$

Setzt man nun die Gleichungen (2.36) und (2.37) in (2.35) ein, erhält man die Kortweg-de-Vries-Gleichung (2.31).

Nun ist es also möglich,  $\eta'(x', t')$  unter der Verwendung der Gleichung (2.32) zu berechnen. Aus den Gleichungen (2.32) und (2.36) ergibt sich die Schrödinger-Gleichung mit dem Potenzial  $\eta'(x', t')$ :

$$-\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\Psi(x', t') + \eta'(x', t')\Psi(x', t') = \lambda\Psi(x', t') \quad (2.38)$$

Für den Fall  $t' = 0$  erhalten wir:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \eta'_{t'=0}(x')\right)\Psi(x') = \lambda\Psi(x'). \quad (2.39)$$

Für eine bekannte Anfangsbedingung  $\eta'(x', t' = 0) = \eta'_{t'=0}(x')$  kann nun das Eigenwertproblem (2.39) gelöst werden.

### 2.4.1 Bedeutung der Streutheorie für das Lösen der Kortweg-de-Vries-Gleichung

Das Eigenwertproblem kann nun als Streuproblem mit dem Streupotenzial  $\eta'_{t'=0}(x')$  aufgefasst werden. Um den Reflexionskoeffizienten  $b(k)$  und den Transmissionskoeffizienten  $a(k)$  zu bestimmen, ist es möglich, folgenden Ansatz zu nehmen:

$$\Psi(x') = \exp(-ikx') + b(k) \exp(ikx') \quad x' \rightarrow +\infty \quad (2.40)$$

$$\Psi(x') = a(k) \exp(-ikx') \quad x' \rightarrow -\infty, \quad (2.41)$$

dabei bezeichnet  $k$  die Wellenzahl der Wellenfunktion.

Wenn die Streudaten  $b(k)$  und  $a(k)$  für ein bestimmtes Potential zum Zeitpunkt  $t' = 0$  berechnet wurden, lässt sich zeigen [29], dass zu einem späteren Zeitpunkt die Streudaten wie folgt ermittelt werden können:

$$b(k, t') = b(k, 0) \exp(8ik^3 t') \quad (2.42)$$

$$a(k, t') = a(k, 0). \quad (2.43)$$

Dem hinzuzufügen ist, dass die Eigenwerte  $\lambda_n$  aufgrund ihrer Konstruktion über das Lax-Paar ebenfalls zeitunabhängig sind, siehe Gleichung (2.33).

Zusammenfassend heißt dies, dass die Streudaten nur für die Anfangsbedingung bestimmt werden müssen, somit sind diese über die Gleichungen (2.42) und (2.43) für alle Zeiten bekannt.

### 2.4.2 Bedeutung der inversen Streutheorie für das Lösen der Kortweg-de-Vries-Gleichung

Die Streutheorie berechnet für ein bekanntes Potential die Streudaten. Die inverse Streutheorie hingegen bestimmt das Potential, wenn die Streudaten dafür bekannt sind. Genau dieser Fall liegt jetzt vor. Die Streudaten sind über die Gleichungen (2.42) und (2.43) bekannt. Unter der Verwendung der inversen Streutheorie kann nun das Potential  $\eta'(x', t')$  bestimmt werden und die Kortweg-de-Vries-Gleichung wäre somit gelöst [30].

Mathematisch wird nun wie folgt vorgegangen. Zunächst muss  $K(x', x', t')$  bestimmt werden, wobei  $K(x', x', t')$  über die Gel'fand-Levitan-Integral-Gleichung

definiert ist:

$$K(x', y, t') + B(x' + y) + \int_{x'}^{\infty} B(y + z, t') K(x', z, t') dz = 0, \quad (2.44)$$

wobei

$$B(\xi, t') = \sum_{m=1}^N c_m \exp(-\kappa_m \xi) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} b(k, t') \exp(ik\xi) dk \quad (2.45)$$

ist. Die Koeffizienten  $c_m$  ergeben sich aus der Wellenfunktion  $\Psi_m$  und den Eigenwerten  $\lambda_m$  der Gleichung (2.39), wobei gilt:

$$c_m(t') = \lim_{x' \rightarrow \infty} \Psi_m(x') \exp(\kappa_m x' + 4\kappa_m^3 t') \quad (2.46)$$

mit

$$\lambda_m = -\kappa_m^2. \quad (2.47)$$

Wurde nun  $K(x', x', t')$  über die Gleichung (2.45) bestimmt, so erfolgt die Berechnung [31] von  $\eta(x', t')$  mit

$$\eta'(x', t') = \frac{\partial}{\partial x'} K(x', x', t). \quad (2.48)$$

Zusammenfassend wurde die vollständige Vorgehensweise für das Lösen der Kortweg-de-Vries-Gleichung in Abbildung 2.2 dargestellt.

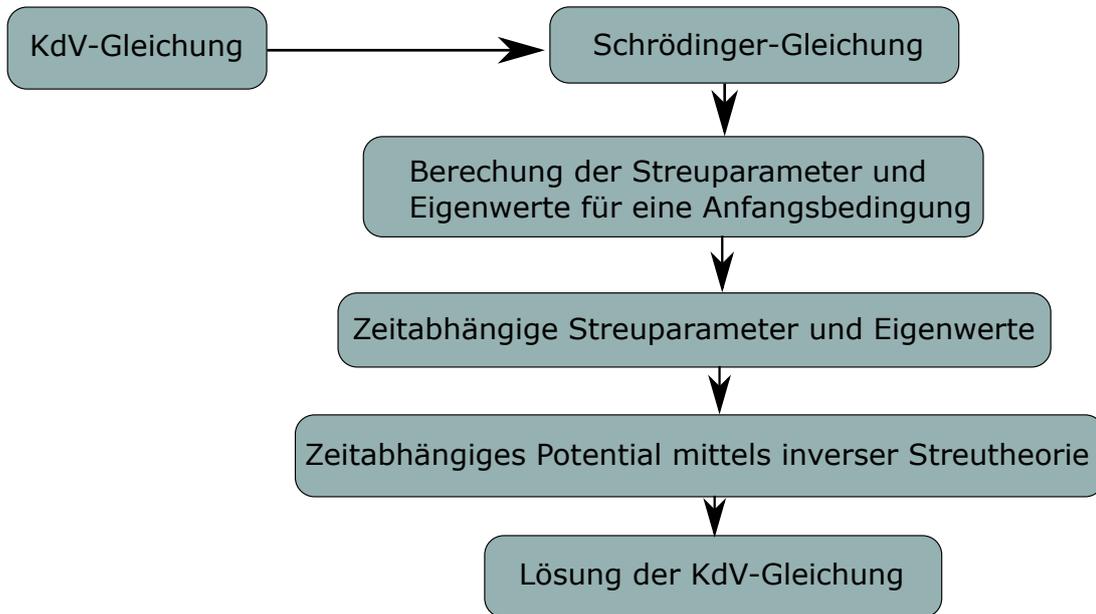


Abbildung 2.2: Übersicht für das Lösen der Kortweg-de-Vries-Gleichung (in der Abbildung mit KdV-Gleichung bezeichnet) unter der Zuhilfenahme der inversen Streutheorie.

### 2.4.3 Konkrete solitonische Lösung der Kortweg-de-Vries-Gleichung

Mit Hilfe der Streutheorie sowie der inversen Streutheorie kann gezeigt werden [30], dass das Dehnungsprofil eines Solitons direkt aus dem dazugehörigen Eigenwert der Schrödinger-Gleichung bestimmt werden kann:

$$\eta'_m(x', t') = -2\kappa_m^2 \operatorname{sech}^2(\kappa_m(x' - 4\kappa_m^2 t')). \quad (2.49)$$

Im nicht normierten Einheitensystem erhält man unter Verwendung der Gleichungen<sup>2</sup> (2.18), (2.28) und (2.29):

$$\eta_m(x, t) = A_m \operatorname{sech}^2\left(\frac{1}{w_m}(x - U_m t)\right) \quad (2.50)$$

mit der Amplitude

$$A_m = \frac{24\lambda_m \rho_0 c \gamma}{|C_3|}, \quad (2.51)$$

<sup>2</sup> Hierbei wurde  $n_1 = \frac{-12\lambda_m \rho_0 c \gamma}{|C_3|}$  verwendet.

der Solitongeschwindigkeit

$$U_m = c + 4\gamma|\lambda_m|, \quad (2.52)$$

und der Breite

$$w_m = \frac{1}{\sqrt{|\lambda_m|}}. \quad (2.53)$$

## 2.5 Zusammenfassung der wesentlichen Eigenschaften von Solitonen

Aus den Gleichungen (2.51-2.53) lassen sich wichtige Eigenschaften der Solitonen direkt bestimmen. Demzufolge ist ihre Geschwindigkeitsdifferenz zur Schallgeschwindigkeit proportional zu ihrer Amplitude.

Hingegen ist die wichtigste Eigenschaft von Solitonen, dass sie ein stabiles Wellenpaket beschreiben. Aus der nicht linearen Wellengleichung, siehe Gleichung (2.9), und der Dispersionsrelation eines Phonons, siehe Gleichung (2.10), ist direkt der Einfluss der nicht linearen Wechselwirkung zwischen den Gitteratomen und der Dispersion auf ein Soliton ersichtlich.

Betrachten wir die dispersions- und dämpfungs freie nicht lineare Wellengleichung

$$\rho_0 \ddot{u} = \left( C_1 + C_3 \frac{\partial}{\partial x} u \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} u \quad (2.54)$$

und vergleichen diese mit der dispersions- und dämpfungs freien linearen Wellengleichung

$$\ddot{u} = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u, \quad (2.55)$$

so kann man direkt erkennen, dass die Geschwindigkeit eines Wellenpakets mit einer negativen Dehnungsamplitude  $\eta = \frac{\partial}{\partial x} u < 0$  größer<sup>3</sup> als die Schallgeschwindigkeit  $c = \sqrt{C_1/\rho}$  ist.

Nun betrachten wir die Dispersionsrelation eines Phonons, siehe Gleichung (2.10). Ein Phonon der Kreisfrequenz  $\omega_p$  und der Wellenzahl  $q$  lässt sich dem-

---

<sup>3</sup> Hierbei wurde  $C_3 < 0$  angenommen.

nach eine Gruppengeschwindigkeit zuordnen:

$$c_g = \frac{\partial \omega_p}{\partial q} = c - 3\gamma q^2 + \mathcal{O}(q^4) \quad (2.56)$$

Demzufolge sinkt die Gruppengeschwindigkeit eines Phonons mit höherer Wellenzahl und somit auch mit höherer Kreisfrequenz.

Daraus lässt sich schlussfolgern, dass ein Wellenpaket mit einer negativen Dehnungsamplitude und einer geeigneten Kreisfrequenz stabil ist, da sich die nicht lineare Wechselwirkung zwischen den Gitteratomen und die Dispersion gerade kompensieren.

## 3 Die Erzeugung einer Hyperschallwelle in einem Kristall

Die Lösungen der im vorherigen Kapitel behandelten Differentialgleichungen werden durch die Anfangsbedingung bestimmt. Für die Experimente an Hyperschallwellen, die in dieser Arbeit beschrieben werden, muss man sich also den Erzeugungsprozess anschauen.

### 3.1 Kurzdarstellung

Die Voraussetzung für die Erzeugung einer sehr kurzen Schallwelle von wenigen Pikosekunden ist eine hierfür speziell hergestellte Probe. Diese setzt sich in der Regel aus mindestens zwei verschiedenen Materialien zusammen, wobei diese mit Transducer und Substrat bezeichnet werden. Der wenige Nanometer dicke Transducer wird mit einem kurzem Laserpuls stark erhitzt und dehnt sich aus, wobei dies eine zeitlich kurze Kompression in dem angrenzenden Substrat impliziert. Demzufolge breitet sich nun im Substrat eine Hyperschallwelle aus [32].

Dieser hier beschriebene Vorgang setzt voraus, dass der Transducer den Laserpuls gut absorbiert. Alternativ absorbiert das Substrat auch sehr kurzwelliges Licht, womit man auf den Transducer verzichten könnte. Ebenfalls sollte bei der Auswahl der Materialien darauf geachtet werden, dass deren akustische Impedanz sich nicht stark unterscheidet, damit die Reflexionen der Schallwelle an der Grenzfläche Transducer/Substrat minimal ist.

### 3.2 Form der induzierten Anfangsdehnung für einen Spezialfall

Nun wollen wir das im Substrat erzeugte Dehnungsprofil näher untersuchen, welches die relative Auslenkung jeder Einheitszelle in Abhängigkeit der Zeit formuliert. Dabei nehmen wir zunächst eine symmetrische Konfiguration an, in der der Transducer zwischen zwei Substraten eingebettet ist. Der Transducer wird gleichmäßig und unendlich schnell erhitzt. Ebenfalls soll sowohl die Dichte als auch die Schallgeschwindigkeit beider Kristalle identisch sein<sup>4</sup>. Diese Anfangsbedingung ist in der Abbildung 3.1 für  $t = 0$  dargestellt.

Weil ausschließlich der Transducer den Laserpuls absorbiert und es sich bei den Gitteratomen in einem Kristall um gekoppelte Oszillatoren handelt, kommt es

---

<sup>4</sup> Somit kann eine Reflexion der Schallwelle an der Grenzfläche Transducer/Substrat vernachlässigt werden.

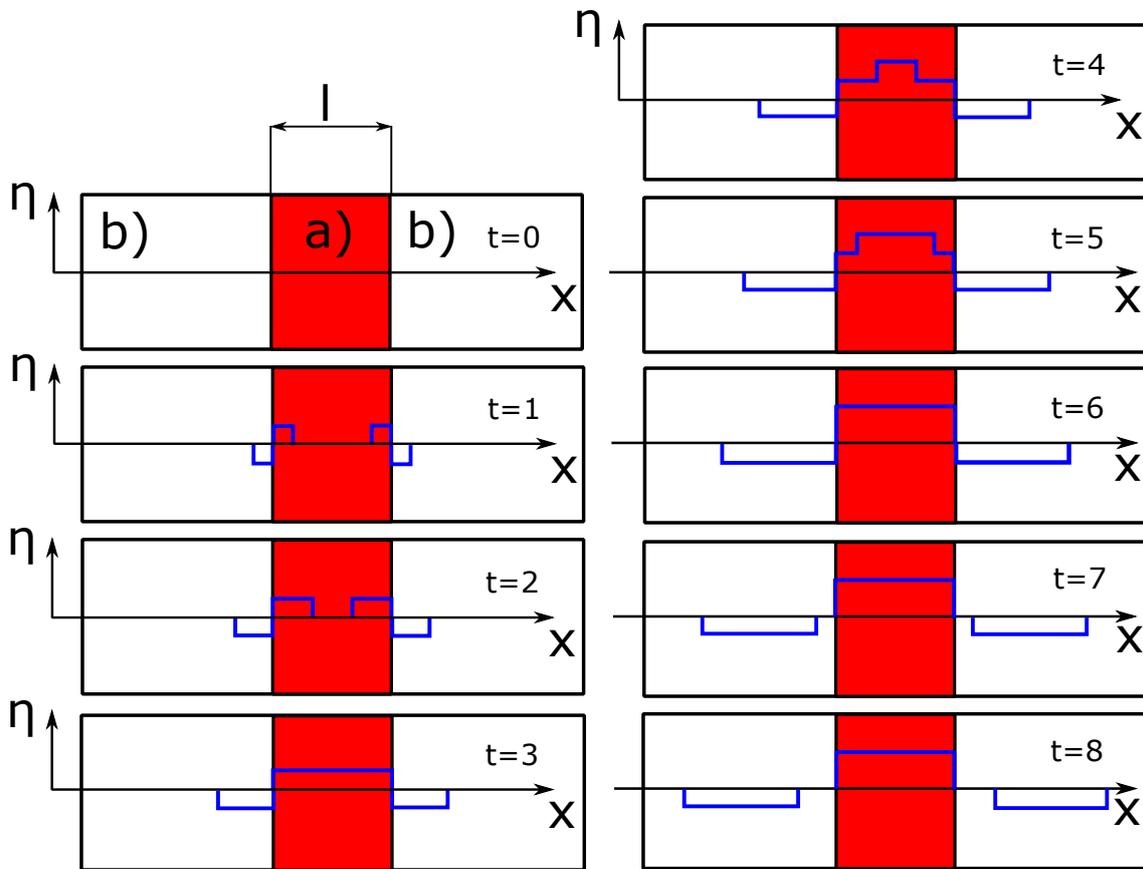


Abbildung 3.1: Detaillierte Darstellung der Erzeugung einer Hyperschallwelle in einem Substrat-Transducer-Substrat-System. Die hier blau gekennzeichnete Dehnung  $\eta(x,t)$  ist nur für  $\eta \neq 0$  dargestellt. Der Transducer (rot) der Länge  $l$  wurde mit a) und das Substrat mit b) bezeichnet. Ein Zeitschritt entspricht hier der Zeit  $l/(6v_1)$ , wobei  $v_1$  die Schallgeschwindigkeit im Transducer ist. Vorausgesetzt wird hier, dass der Transducer gleichmäßig und unendlich schnell erhitzt wurde. Ebenfalls ist hier die Dichte sowie die Schallgeschwindigkeit beider Kristalle identisch. Nachdem sich der Transducer vollständig ausgedehnt hat ( $t = 6$ ), entfernen sich zwei kompressive Dehnungsprofile der Länge  $l$  vom Transducer.

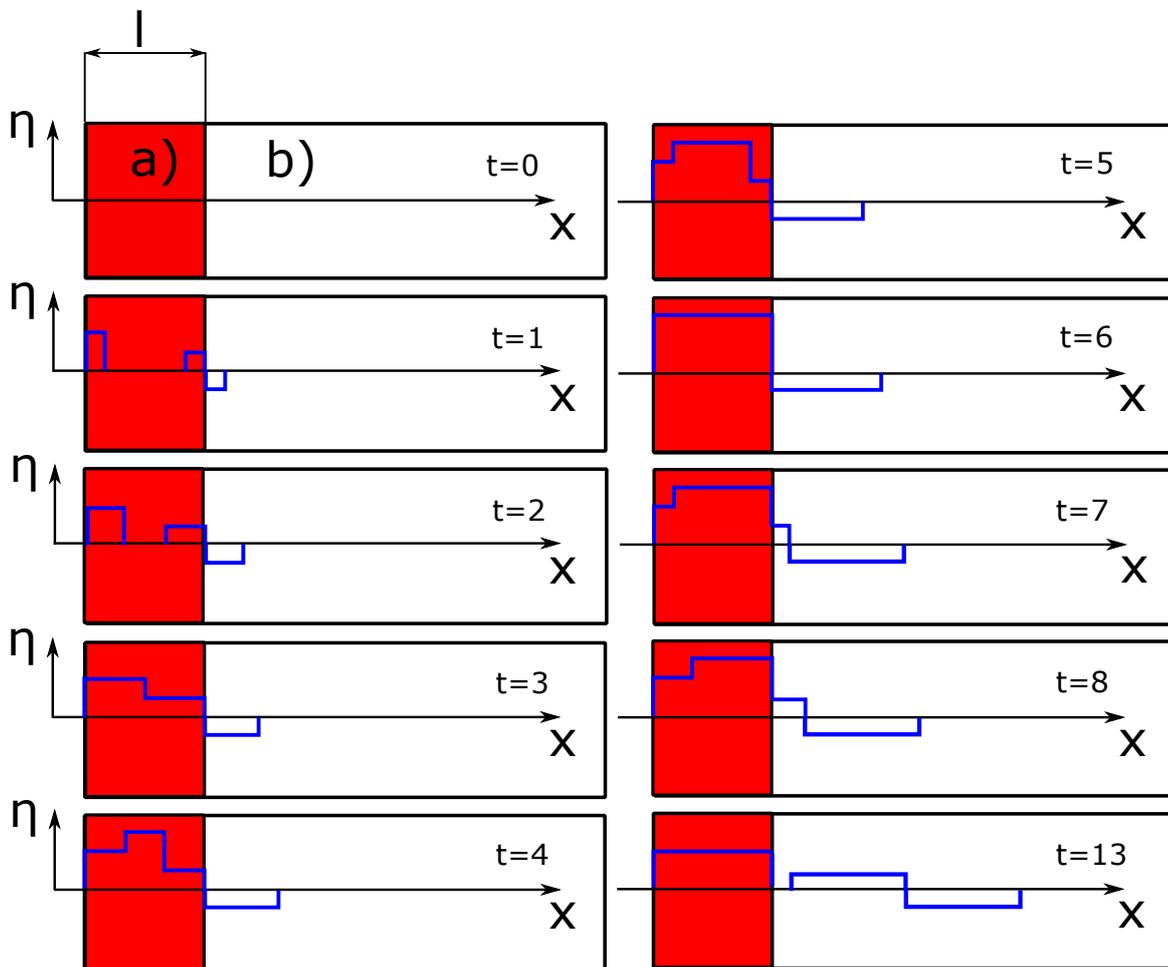


Abbildung 3.2: Detaillierte Darstellung der Erzeugung einer Hyperschallwelle in einem Transducer-Substrat-System. Die hier blau gekennzeichnete Dehnung  $\eta(x, t)$  ist nur für  $\eta \neq 0$  dargestellt. Der Transducer (rot) der Länge  $l$  ist mit a) und das Substrat mit b) bezeichnet. Ein Zeitschritt entspricht hier der Zeit  $l/(6v_1)$ , wobei  $v_1$  die Schallgeschwindigkeit im Transducer ist. Vorausgesetzt wird hier, dass der Transducer gleichmäßig und unendlich schnell erhitzt wurde. Ebenfalls ist hier die Dichte sowie die Schallgeschwindigkeit beider Kristalle identisch. Nachdem sich der Transducer vollständig ausgedehnt hat, siehe  $t = 12$ , entfernt sich sowohl eine expansiver als auch eine kompressiver Dehnung mit jeweiliger Länge  $l$  vom Transducer.

ausschließlich an der Grenzfläche Transducer/Substrat zu einer Verspannung (engl. stress): Eine kompressive Dehnung ( $\eta < 0$ ) breitet sich in Richtung

Substrat und eine expansive Dehnung ( $\eta > 0$ ) in Richtung Transducer aus, siehe Abbildung 3.1 für  $t = 1$ . Dadurch sind die in Abbildung 3.1 weiteren Zeitschritte ( $t > 1$ ) eindeutig festgelegt, wobei zu bemerken ist, dass die Dehnung additiv ist. Im Folgenden betrachten wir das im Experiment tatsächlich verwendete Transducer-Substrat-System, siehe Abbildung 3.2 für  $t = 0$ . Die Ausdehnung des Gitters erfolgt analog zur Abbildung 3.1. Die Dehnung wird an der Grenzfläche Luft/Transducer unter Umkehrung seines Vorzeichens reflektiert, was in der Abbildung 3.2 sowohl bei  $t = 1$  als auch bei  $t = 6$  erkennbar ist. Das in Abbildung 3.2 für  $t = 13$  im Substrat dargestellte Dehnungsprofil  $\eta(x, t_0) := \eta(x, t = 13)$  wird nachfolgend als Anfangsdehnung bezeichnet.

### 3.3 Allgemeine Form der induzierten Anfangsdehnung

Wir wollen die sogenannte Anfangsdehnung für den Fall einer nicht homogenen Anregung des Transducer betrachten. Hierbei nehmen wir an, dass sich das Anregungsprofil  $I(x)$  des Transducer aus dem Lambert-Beerschen Gesetz ergibt:

$$I(x) = I_0 e^{-x/d}, \quad (3.1)$$

wobei  $I_0$  die Intensität des einfallenden Laserpulses und  $d$  die Eindringtiefe ist. Das daraus resultierende Profil  $\eta(x, t_0)$  kann aus der Veranschaulichung in Abbildung 3.2 abgeleitet werden und ist in Abbildung 3.3 dargestellt.

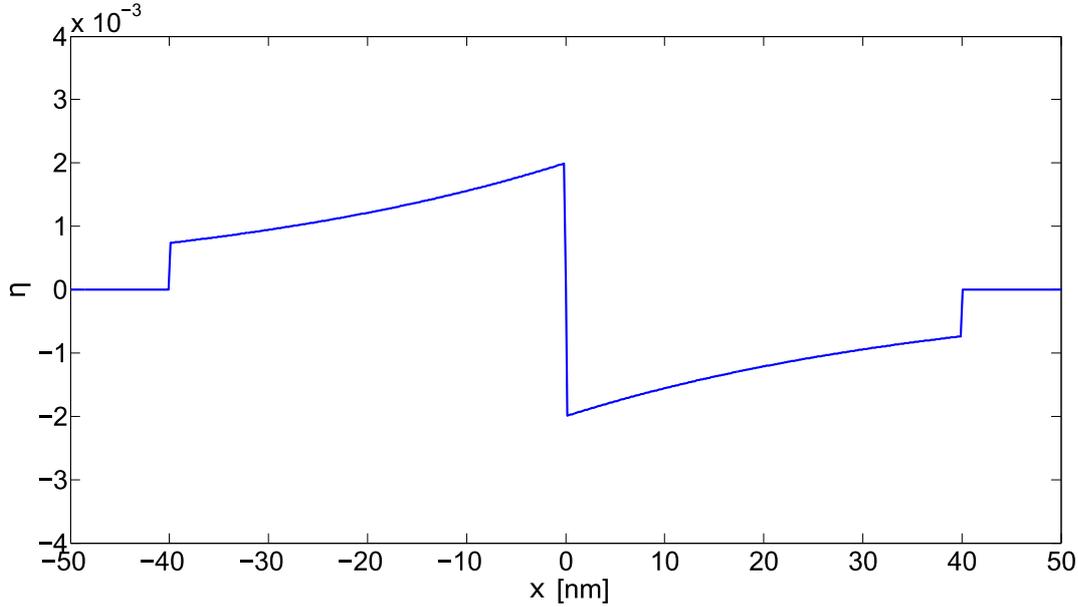


Abbildung 3.3: Darstellung des Anfang-Dehnungs-Profils, wobei die Anregung des Transducer sich aus Gleichung (3.1) ergibt. Für die Amplitude der Anfangsdehnung wird hier  $2 \cdot 10^{-3}$  und für die Eindringtiefe sowie die Länge des Transducer werden jeweils 40 nm angenommen. Vorausgesetzt wird hier, dass sowohl die Dichte als auch die Schallgeschwindigkeit beider Kristalle identisch sind. Die Ortsachse wurde auf das Dehnungsprofil zentriert.

Unter den in Abbildung 3.3 beschriebenen Voraussetzungen kann der Anfangsdehnung wie folgt formuliert werden:

$$\eta(x, t_0) = \begin{cases} 0 & (x < -l) \\ \eta_0 \cdot \exp(x/d) & (-l \leq x \leq 0) \\ -\eta_0 \cdot \exp(-x/d) & (0 < x \leq l) \\ 0 & (x > l), \end{cases} \quad (3.2)$$

wobei  $\eta_0$  die Amplitude der Anfangsdehnung bezeichnet und das Profil der Anfangsdehnung auf die x-Achse zentriert wurde.

Wird angenommen, dass die Schallgeschwindigkeit  $v_1$  im Transducer nicht identisch mit der Schallgeschwindigkeit  $c$  im Substrat ist, so kann die An-

fangsdehnung unter Berücksichtigung der Koordinatentransformation

$$x \rightarrow x \frac{v_1}{c} \quad (3.3)$$

$$\eta(x, t_0) \rightarrow \eta(x, t_0) \frac{c}{v_1} \quad (3.4)$$

mit der Gleichung (3.2) dargestellt werden.

Wird zusätzlich davon ausgegangen, dass für das normierte Intensitätsprofil  $I_\sigma(t)$  des Laserpulses

$$I_\sigma(t) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-t^2/(2\sigma^2)\right) \quad (3.5)$$

mit  $\sigma = \Delta t/(2\sqrt{2\ln 2})$  gilt und  $\Delta t$  die Halbwertsbreite des Laserpulses darstellt, dann transformiert sich das Profil der Anfangsdehnung unter einer Faltung zu

$$\eta(x, t_0) \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x - s, t_0) I_{v_1, \sigma}(s) ds. \quad (3.6)$$

Ein Beispiel für die daraus resultierende Anfangsdehnung wird in Abbildung (3.4) veranschaulicht.

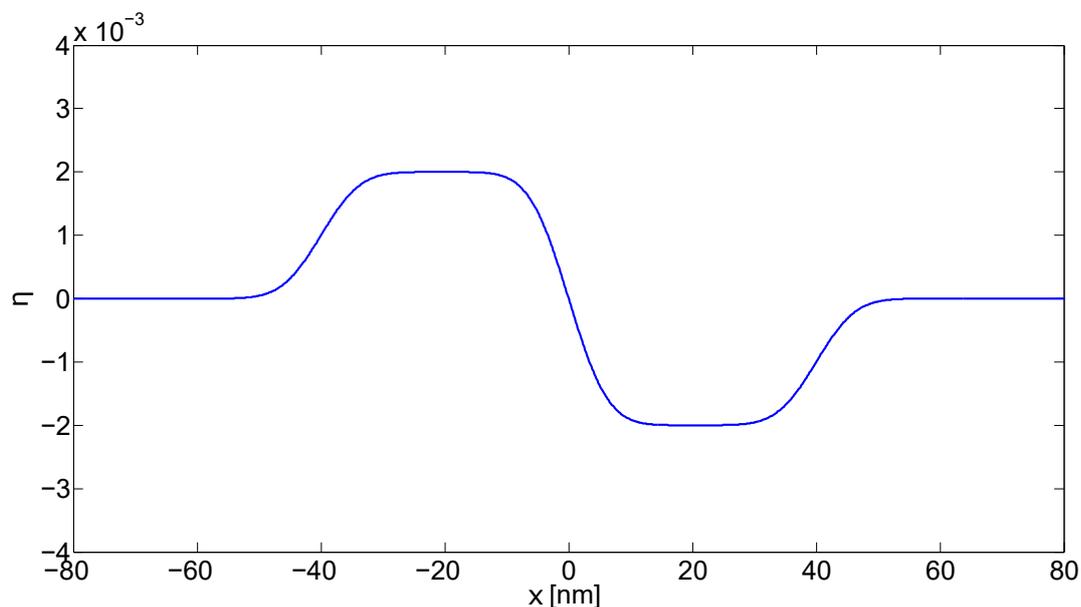


Abbildung 3.4: Darstellung des Profils der Anfangsdehnung unter der Annahme, dass die Halbwertsbreite  $\Delta t$  des Laserpulses 2 ps beträgt. Für die Amplitude der Anfangsdehnung wird hier  $2 \cdot 10^{-3}$  und für die Eindringtiefe sowie die Länge des Transducer werden jeweils 40 nm angenommen. Vorausgesetzt ist hier, dass sowohl die Dichte als auch die Schallgeschwindigkeit beider Kristalle identisch sind. Die Ortsachse wurde auf das Profil der Anfangsdehnung zentriert.

### 3.4 Amplitude der Anfangsdehnung

Um nun die Amplitude der Anfangsdehnung  $\eta_0$  zu berechnen, betrachten wir die relative Längenausdehnung eines Kristallstabs der Länge  $s$ . Erfährt dieser eine Temperaturänderung  $\Delta T$ , so kann ein Ausdruck für die relative Längenänderung wie folgt formuliert werden:

$$\frac{\Delta s}{s} = \alpha_T \Delta T \quad (3.7)$$

Hierbei bezeichnet  $\Delta s$  die Längenänderung und  $\alpha_T$  den thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Wird davon ausgegangen, dass die Temperaturänderung des Transducer  $\Delta T$  durch die Absorption eines Laserpulses hervorgerufen wurde, dann lässt sich diese Temperaturänderung über folgende Gleichung bestim-

men:

$$Q = \rho V c_W \Delta T = (1 - R)FA, \quad (3.8)$$

wobei  $Q$  die dem Kristall zugeführte Wärme,  $\rho$  die Dichte,  $c_W$  die Wärmekapazität,  $R$  dessen Refektivität und  $V$  das vom Laserpuls absorbierte Volumen ist. Die Fluenz des Laserpulses wurde mit  $F$  und dessen Querschnittsfläche mit  $A$  bezeichnet. Demzufolge kann Gleichung (3.7) erweitert werden zu:

$$\frac{\Delta s}{s} = \frac{(1 - R)F\alpha_T}{\rho c_W d}, \quad (3.9)$$

wobei hier  $d$  die Eindringtiefe des Transducer bezeichnet.

Berücksichtigt man, dass für den Radius  $r$  des Laserpulses und für die Länge  $l$  des Transducer  $r \gg l$  gilt, so kann man annehmen, dass auf der in Abbildung 3.2 dargestellten Zeitskala alle Gitteratome ausschließlich in  $x$ -Richtung ausgelenkt sind, was folgende Korrektur von Gleichung (3.9) zur Folge hat:

$$\frac{\Delta s}{s} = \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \frac{(1 - R)F\alpha_T}{\rho c_W d}, \quad (3.10)$$

wobei  $\nu$  die Poissonzahl bezeichnet. Der Korrekturfaktor wird im Kapitel 8 für isotrope Medien explizit hergeleitet. Die Gleichung (3.10) beschreibt nun die relative Ausdehnung des Transducer. Die Amplitude der Anfangsdehnung  $\eta_0$  ergibt sich nun aus Abbildung 3.2 zu

$$\eta_0 = \frac{1}{2} \frac{\Delta s}{s} \frac{v_1}{c} = \frac{(1 - R)F\alpha_T}{2\rho c_W d} \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \frac{v_1}{c}, \quad (3.11)$$

wobei hier bereits die Transformation aus Gleichung (3.4) berücksichtigt wurde.

Alternativ kann  $\frac{\Delta s}{s}$  auch über folgende Gleichung berechnet werden, falls die mittlere Ausdehnung  $\overline{\left(\frac{\Delta l'}{l'}\right)}$  eines Transducer der Länge  $l'$  aus demselben Material für eine Fluenz  $F_1$  bekannt ist:

$$\int_0^{l'} \frac{\Delta s}{s} \exp(-x/d) dx = l' \overline{\left(\frac{\Delta l'}{l'}\right)} \frac{F}{F_1} \quad (3.12)$$

Demzufolge berechnet sich die Amplitude der Anfangsdehnung folgendermaßen:

$$\eta_0 = \frac{1}{2} \frac{v_1}{c} l' \left( \frac{\Delta l'}{l'} \right) \frac{F}{F_1} \frac{1}{d(1 - \exp(-l'/d))} \quad (3.13)$$

### 3.5 Physikalischer Hintergrund

Um nun den Prozess der Anregung eines Transducer durch einen Laserpuls und die damit einhergehende Ausdehnung näher zu erläutern, setzen wir voraus, dass es sich bei dem Transducer um ein Metall handelt.

Zunächst einmal wollen wir darauf hinweisen, dass im nicht-Gleichgewicht ein Metall eine Temperatur  $T_p$  der Phononen und eine Temperatur  $T_e$  der Elektronen besitzt.

Absorbiert nun der Kristall einen Laserpuls, führt dies zu einer Erhöhung der Elektronentemperatur  $T_e$ . Aufgrund einer Kopplung von Elektronen und Phononen erhöht sich ebenfalls die Phononentemperatur, bis sich ein Gleichgewicht beider Systeme eingestellt hat.<sup>5</sup> Das Metall erfährt somit eine Temperaturerhöhung, wodurch es sich schließlich ausdehnt.

### 3.6 Erläuterungen zu den verwendeten Proben

In dieser Arbeit wurden zwei verschiedene Proben untersucht. In diesem Kapitel soll sowohl auf deren Aufbau als auch auf die für diese Arbeit relevanten physikalischen Eigenschaften eingegangen werden.

#### 3.6.1 Strontium-Ruthenat-Transducer und Dysprosium-Scandat-Substrat

Die Probe I setzt sich aus einem Strontium-Ruthenat-Transducer ( $\text{SrRuO}_3$ -Transducer) und Dysprosium-Scandat-Substrat ( $\text{DyScO}_3$ -Substrat) zusammen, siehe Abbildung 3.5.

---

<sup>5</sup> Die zeitliche Abhängigkeit von  $T_e$  und  $T_p$  kann mit Hilfe des Zwei-Temperaturen-Modells bestimmt werden [33].



Abbildung 3.5: Aufbau der Probe I. Als Transducer dient hier eine 40 nm breite Strontium-Ruthenat-Schicht (SRO) und als Substrat Dysprosiumscandat (DSO).

Beide Materialien haben eine Perowskit-Struktur. Die allgemeine chemische Formel für eine Perowskit-Verbindung ist  $ABX_3$ . In einer kubischen Einheitszelle befinden sich A-Atome auf den Ecken, das B-Atom im Zentrum und X-Atome auf den Flächen, siehe Abbildung 3.6. Bei einigen Materialien, welche eine Perowskit-Struktur aufweisen, ist die Einheitszelle leicht verzerrt. Dann spricht man auch oft von einer pseudokubischen Gestalt.

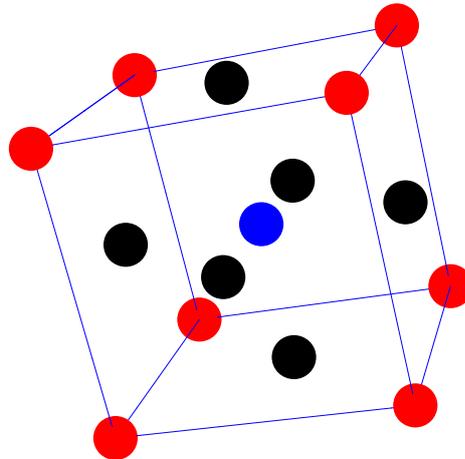


Abbildung 3.6: Aufbau der Einheitszelle einer Perowskit-Struktur  $ABX_3$ , wobei die A-Atome rot, das B-Atom blau und die X-Atome schwarz dargestellt sind.

### Strontium-Ruthenat

Der Perowskit Strontium-Ruthenat (SRO) eignet sich aufgrund vieler physikalischer Eigenschaften als Transducer. Die Reflexion von Licht der Wellenlänge

795 nm unter einem Winkel von  $45^\circ$  ist nahe Null<sup>6</sup>. Die Eindringtiefe des Lichtes dieser Wellenlänge beträgt 44 nm [34]. Somit wird eine maximale Menge Energie in einer sehr dünnen Schicht deponiert.

Obwohl Strontium-Ruthenat ein Metall ist, beträgt die mittlere freie Weglänge<sup>7</sup> eines Elektrons nur 0,5 nm und kann daher auch als "bad metal" bezeichnet werden. Dies hat zur Folge, dass die Anregungsenergiedichte erhalten bleibt und nicht durch Elektronen weitergegeben wird. Ebenfalls zeichnet sich das Material durch einen hohen Schmelzpunkt aus, was eine hohe Zerstörschwelle impliziert.

### Dysprosium-Scandat

Der Perowskit Dysprosium-Scandat (DSO) setzt sich aus den seltenen Erden Dysprosium und Scandium zusammen. Aufgrund der Tatsache, dass die akustischen Impedanzen von DSO und SRO sich unwesentlich unterscheiden, kann eine Reflexion der Schallwelle an der Grenzfläche SRO/DSO vernachlässigt werden. Die Bandlücke befindet sich bei 2,75 eV [35], aufgrund dessen sich sichtbares Licht für die Detektion einer Schallwelle in DSO eignet.

#### 3.6.2 Al-Transducer und GaAs-AlAs-GaAs-Substrat

Der Transducer in der Probe II besteht aus Aluminium. Das Substrat beinhaltet die Verbindungshalbleiter Galliumarsenid und Aluminiumarsenid. Der detaillierte Aufbau der Probe II ist in der Abbildung 3.7 dargestellt.

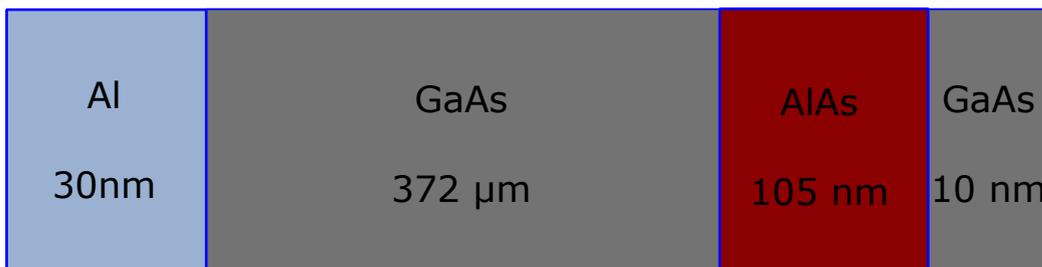


Abbildung 3.7: Aufbau der Probe II. Als Transducer dient hier eine 30 nm breite Aluminium-Schicht und als Substrat GaAs-AlAs-GaAs.

<sup>6</sup> Diese Eigenschaft ist sehr wichtig, da im Experiment der Laser eine Zentralwellenlänge von 795 aufweist und der Winkel zwischen Laserpuls und Probe  $45^\circ$  beträgt.

<sup>7</sup> Dies impliziert ebenfalls eine geringe elektrische Leitfähigkeit im Vergleich zu anderen Metallen.

## Aluminium

In der Probe II besteht der Transducer aus dem Metall Aluminium. Die Eindringtiefe von Licht einer Wellenlänge von 795 nm in Aluminium beträgt 8 nm [36]. Hierbei ist zu beachten, dass die mittlere freie Weglänge eines Elektrons in Aluminium etwa 25 nm beträgt und somit etwa der Länge des hier verwendeten Transducer entspricht [37]. Aufgrund dessen kann man davon ausgehen, dass, nachdem der Transducer einen Laserpuls absorbiert hat, die Temperatur der Elektronen  $T_e$  ortsunabhängig ist. Diese Tatsache hat unmittelbaren Einfluss auf die Form der Anfangsdehnung. In diesem Fall kann man den Transducer als homogen angeregt betrachten, womit die Form des Profils der Anfangsdehnung unter Verwendung der Gleichung (3.2) mit  $d \rightarrow \infty$  beschrieben werden kann.<sup>8</sup>

## Galliumarsenid und Aluminiumarsenid

Galliumarsenid und Aluminiumarsenid weisen die gleiche Kristallstruktur auf. Die Einheitszelle besteht aus zwei kubisch-flächenzentrierten Gittern, wobei das eine aus Gallium bzw. Aluminium und das andere aus Arsen besteht. Sie sind um ein Viertel der Raumdiagonalen der kubischen Elementarzelle gegeneinander verschoben, siehe Abbildung 3.8.

Die direkte Bandlücke in GaAs befindet sich bei 1,42 eV. Aufgrund dessen ist GaAs ausschließlich für infrarotes Licht transparent. Eine weitere wichtige Eigenschaft von GaAs ist, dass deren akustische Dämpfung für  $T = 20$  K vernachlässigbar klein ist [38]. AlAs hingegen ist ein indirekter Halbleiter, wobei dessen Bandübergang sich bei 2,12 eV [39] befindet.

Da sich die akustischen Impedanzen von GaAs und AlAs nur unwesentlich unterscheiden, kann eine Reflexion der Schallwelle an der Grenzfläche GaAs/AlAs vernachlässigt werden.

---

<sup>8</sup> Unter Berücksichtigung der Länge eines Laserpulses muss die mit Gleichung (3.6) dargestellte Transformation ebenfalls berücksichtigt werden.

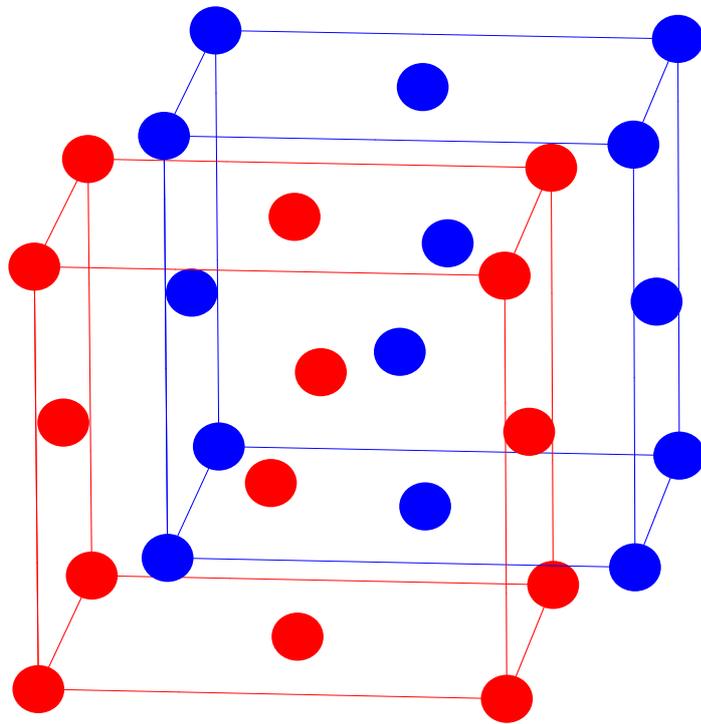


Abbildung 3.8: Darstellung der Gitterstruktur für GaAs bzw. AlAs. Die Ga- bzw. Al-Atome sind hier rot und die As-Atome blau abgebildet.

## 4 Analytische und numerische Untersuchungen

Der Gegenstand dieses Kapitels ist die numerische Lösung der dem Modell der linearen Kette zugrunde liegenden Differentialgleichung, und der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung. Zusätzlich wird eine analytische Lösung mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung beschrieben.

### 4.1 Numerische Lösung der linearen Kette für einen SRO-Transducer auf einem DSO-Substrat

Um nun eine numerische Simulation für einen SRO-Transducer auf einem DSO-Substrat zu realisieren, ist die Kenntnis der in Tabelle 4.1 aufgelisteten Größen notwendig.

Das Ergebnis ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Die Simulation wurde mit einem von GOHLKE (2013) geschriebenen Programm durchgeführt. Die hierfür zugrunde liegende Differentialgleichung bezieht sich, im Gegensatz zur Gleichung (2.1), auf ein Kristallgitter mit zweiatomiger Basis [40]. Zur numerischen Lösung dieser Differentialgleichung bietet sich aufgrund ihrer Beschaffenheit das Runge-Kutta-Nyström-Verfahren an, welches sich aus dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren ableiten lässt, siehe Kapitel 4.2.1. Zusätzlich wurde ein symplektischer Integrator benutzt, um zu gewährleisten, dass die Energie des Gesamtsystems eine Erhaltungsgröße ist [41, 42].

**Tabelle 4.1:** Wichtige Größen für die Bestimmung der Eingangsparameter für die Simulation einer linearen Kette. Hierbei bezeichnet  $u = 1,66 \cdot 10^{-27}$  kg die atomare Masseneinheit.

	Bedeutung	Symbol	Wert	Verweis
	Masse der Einheitszelle - DSO	$m_{DSO}$	$255,45 \cdot u$	[43]
	Masse der Einheitszelle - SRO	$m_{SRO}$	$236,69 \cdot u$	[43]
	Gitterkonstante - DSO <sup>1</sup>	$a_{DSO}$	0,394 nm	[44]
	Gitterkonstante - SRO	$a_{SRO}$	0,396 nm	[12]
	Schallgeschwindigkeit - SRO	$v_1$	6321 m/s	[45]
	Schallgeschwindigkeit - DSO	$c$	6600 m/s	[46]
	Nicht lin. elast. Konst. - DSO	$C_3$	$-3 \cdot 10^{12} \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}^2}$	2
	Fluenz	$F$	12 mJ/cm <sup>2</sup>	3
	Amplitude der Anfangsdehnung	$\eta_0$	$2,3 \cdot 10^{-3}$	4
	Länge des Transducer	$l$	40 nm	5
	Eindringtiefe von SRO bei 800 nm	$d$	44 nm	[34]
	Pulslänge des Lasers (zeitlich)	$\Delta t$	4000 fs	6

<sup>1</sup> Die effektive Gitterkonstante in (110)-Richtung berechnet sich hier aufgrund der Kristallstruktur über  $\sqrt{a^2 + b^2}/2$ , mit  $a = 0,544$  nm und  $b = 0,571$  nm.

<sup>2</sup> Für diese Simulation wurde eine nicht lineare elastische Konstante von  $C_3 = -3 \cdot 10^{12} \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}^2}$  verwendet. Im experimentellen Teil dieser Arbeit werden wir feststellen, dass die nicht lineare elastische Konstante von DSO  $C_3 = -2.4 \cdot 10^{12} \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}^2}$  beträgt, siehe Kapitel 5.3.1.

<sup>3</sup> Die Fluenz kann frei gewählt werden, siehe Kapitel 3.4.

<sup>4</sup> Die Amplitude der Anfangsdehnung wurde mit Hilfe der Gleichung (3.13) berechnet. Die hierfür erforderlichen Werte können der Literatur entnommen werden [32].

<sup>5</sup> Angabe vom Probenhersteller

<sup>6</sup> Hier wurde eine größere Pulslänge als im Experiment ( $\approx 100$  fs) angenommen. Eine zu geringe Pulslänge hätte, aufgrund der starken Krümmung der Anfangsdehnung, numerische Artefakte zur Folge.

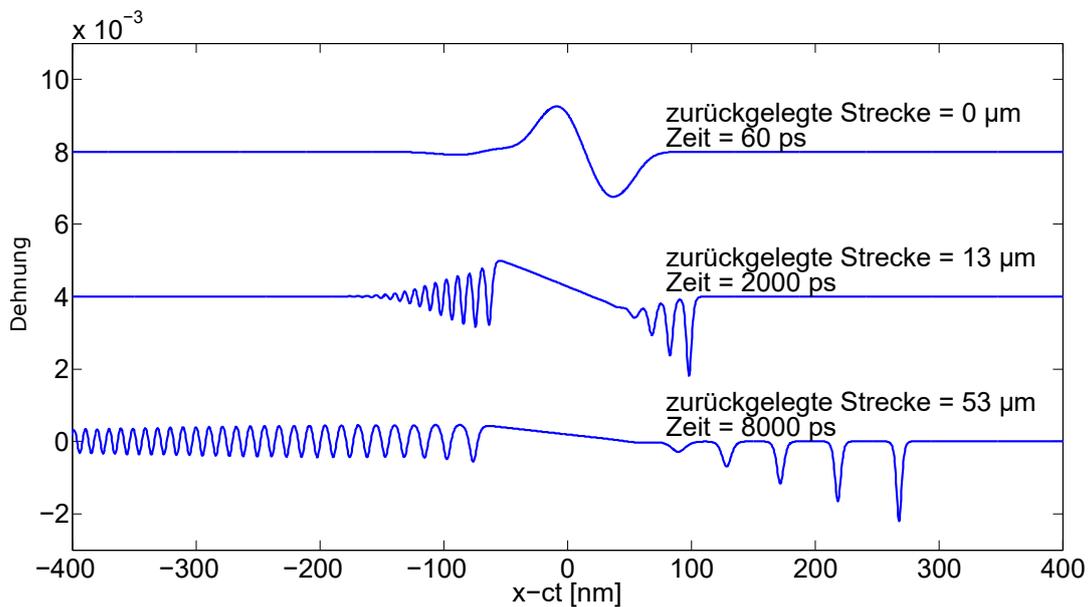


Abbildung 4.1: Numerische Lösung der linearen Kette für einen SRO-Transducer auf einem DSO-Substrat. Die dafür notwendigen Parameter sind der Tabelle 4.1 zu entnehmen. Aus der hier gewählten Anfangsdehnung gehen fünf Solitonen hervor. Die Berechnungszeit betrug etwa eine Stunde.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass mit der Simulation der linearen Kette die Dynamik eines Festkörpers besser beschrieben wird als mit der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung die Realität besser beschreiben sollte. Allerdings ist die numerische Berechnung der linearen Kette auch mit diversen Nachteilen verbunden:

- Die Dispersion ist über die Gitterkonstante, die Federkonstante und über die Masse der Einheitszelle bereits festgelegt, siehe Gleichung (2.10), und kann nicht separat eingestellt werden.
- Die Berechnungszeit ist sehr lang. Aufgrund eines begrenzten RAM-Speichers sind Simulationszeiten von mehr als 8000 ps schwer zu realisieren.
- Die Pulslänge des Lasers kann nicht beliebig kurz gewählt werden.

## 4.2 Numerische Lösung der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren

### 4.2.1 Klassisches Runge-Kutta-Verfahren

Das Näherungsverfahren von Runge und Kutta ist ein mehrstufiges Verfahren, mit dessen Hilfe für eine bestimmte Anfangsbedingung Differentialgleichungen numerisch gelöst werden können. Es basiert auf der numerischen Integration und wurde von Carl Runge 1895 eingeführt und von Martin Kutta im Jahr 1901 vervollständigt [47]. Das allgemeine Runge-Kutta-Verfahren beschreibt eine Familie von Lösungsmethoden von Differentialgleichungen, wobei wir hier auf ein bestimmtes Verfahren aus dieser Familie, das klassische Runge-Kutta-Verfahren, eingehen.

Um dieses Verfahren näher zu beschreiben, ist es sinnvoll, erst einmal die bereits 1768 von Leonhard Euler entdeckte Methode [48] vorzustellen.

Demzufolge berechnen sich die diskreten Zeitschritte für eine Differentialgleichung  $\dot{y} = f(y, t)$  unter der Anfangsbedingung  $y(t_0) = y_0$  mit dem expliziten Euler-Verfahren über

$$t_k = t_0 + hk \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1)$$

und die Funktionswerte mit

$$y_{k+1} = y_k + hf(t_k, y_k), \quad (4.2)$$

wobei  $h > 0$  als Schrittweite bezeichnet wird.

Um die Genauigkeit dieses Verfahrens abzuschätzen, führen wir die Konsistenzordnung  $p$  ein. Dabei gilt für den lokalen Fehler [49]:

$$E(h) = |y_k - y_{k-1} - (y(t_k) - y(t_{k-1}))| < \mathcal{O}(h^{p+1}). \quad (4.3)$$

Das explizite Euler-Verfahren hat somit die Konsistenzordnung 1. Wenn  $h < 1$  gewählt wird, steigt die Genauigkeit des Verfahrens daher mit höherer Konsistenzordnung  $p$ .

Die Konsistenzordnung des expliziten Euler-Verfahrens kann mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren verglichen werden.

Das allgemeine  $s$ -stufige Runge-Kutta-Verfahren [50] kann wie folgt formuliert

werden:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_j k_j \quad (4.4)$$

mit

$$k_j = f \left( t_n + hc_j, y_n + h \sum_{l=1}^s a_{jl} k_l \right) \quad (4.5)$$

Ein spezielles Runge-Kutta-Verfahren zeichnet sich somit durch die Vorgabe der Koeffizienten  $b_j$ ,  $c_j$  und  $a_{jl}$  aus und nur für den Fall, dass  $a_{jl} = 0$  für  $l \geq j$  gilt, ist das Verfahren ebenfalls explizit. Die Koeffizienten können in einem sogenannten Butcher-Tableau [51] dargestellt werden, siehe Tabelle 4.2.

**Tabelle 4.2:** Das allgemeine Butcher-Tableau

$c_1$	$a_{11}$	$a_{12}$	$\dots$	$a_{1s}$
$c_2$	$a_{21}$	$a_{22}$	$\dots$	$a_{2s}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$c_s$	$a_{s1}$	$a_{s2}$	$\dots$	$a_{ss}$
	$b_1$	$b_2$	$\dots$	$b_s$

Das klassische Runge-Kutta-Verfahren kann mit Hilfe des Butcher-Tableau angegeben werden, siehe Tabelle 4.3.

**Tabelle 4.3:** Das Butcher-Tableau für das klassische Runge-Kutta-Verfahren

0	0	0	0	0
1/2	1/2	0	0	0
1/2	0	1/2	0	0
1	0	0	1	0
	1/6	1/3	1/3	1/6

Das klassische Runge-Kutta-Verfahren ist somit ein vierstufiges, explizites Verfahren mit der Konsistenzordnung 4. Es wird wegen seiner Konsistenzordnung auch als Runge-Kutta-4-Verfahren bezeichnet und weist aufgrund der höheren Konsistenzordnung, bei derselben Schrittweite  $h$ , einen kleineren lokalen Fehler als das explizite Euler-Verfahren auf.

Dem hinzuzufügen ist, dass es auch Runge-Kutta-Verfahren mit Konsistenzordnungen  $> 4$  gibt. Der Nachteil dieser Verfahren ist, dass mit höherer Konsistenzordnung auch die Anzahl der Stufen  $s$  steigt und somit auch die Rechenzeit pro Zeitschritt. Dies bedeutet, dass die scheinbar gewonnene Rechenzeit, aufgrund einer größer gewählten Schrittweite bei einem Verfahren höherer Konsistenzordnung, durch die Berechnung einer Vielzahl von Stufen  $s$  pro Zeitschritt kompensiert wird. Zudem ist für Verfahren mit Konsistenzordnungen  $> 4$  die Stufenzahl immer größer als die Konsistenzordnung, was auf den sogenannten Butcher-Schranken beruht. Die bisher entdeckte minimale Stufenzahl für das Runge-Kutta-Verfahren der Konsistenzordnung 10 beispielsweise beträgt 17 [52] und ist im Guinnessbuch der Rekorde vermerkt [53].

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass das klassische Runge-Kutta-Verfahren einen guten Kompromiss aus geringer Stufenzahl  $s$  und hoher Konsistenzordnung  $p$  darstellt, was folgendes Zitat von Carl Runge (1905) unterstreicht: "Von den neueren Verfahren halte ich das folgende von Herrn Kutta angegebene für das beste", wobei er sich auf das Runge-Kutta-Verfahren der Konsistenzordnung 4 bezieht [54].

#### 4.2.2 Anwendung des klassischen Runge-Kutta-Verfahrens auf die Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung

Um nun die normierte Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren numerisch zu lösen, wenden wir den zentralen Differenzenquotienten [55] für die Ortsableitungen auf die rechte Seite der Gleichung (2.30) an:

$$f(\eta_k^i) = 6\eta_k^i \cdot \frac{\eta_k^{i+1} - \eta_k^{i-1}}{dx} - \frac{\eta_k^{i+2} - 2\eta_k^{i+1} + 2\eta_k^{i-1} - \eta_k^{i-2}}{2dx^3} + \frac{\epsilon' x_1}{\gamma} \frac{\eta_k^{i+1} + \eta_k^{i-1} - 2\eta_k^i}{dx^2}, \quad (4.6)$$

wobei wir in Gleichung (4.6) bereits den Übergang zu den diskreten Zeitkoordinaten  $k$  und Ortskoordinaten  $i$  mit der Diskretisierung  $dx$  vollzogen haben. Nun können die Koeffizienten  $k_1, k_2, k_3$  und  $k_4$  mit der Gleichung (4.5) berech-

net werden:

$$k_1 = f(\eta_k^i) \tag{4.7}$$

$$k_2 = f(\eta_k^i + hk_1/2) \tag{4.8}$$

$$k_3 = f(\eta_k^i + hk_2/2) \tag{4.9}$$

$$k_4 = f(\eta_k^i + hk_3) \tag{4.10}$$

Anschließend kann der nächste Zeitschritt ermittelt werden durch

$$\eta_{k+1}^i = \eta_k^i + h(k_1/6 + k_2/3 + k_3/3 + k_4/6), \tag{4.11}$$

wobei  $h$  die Schrittweite ist. Die Koeffizienten  $b_j$ ,  $c_j$  und  $a_{jl}$  wurden dem Butcher-Tableau, siehe Tabelle 4.3, entnommen.

### 4.2.3 Numerische Berechnung für einen Al-Transducer und auf GaAs-Substrat

Für eine numerische Simulation werden viele Materialparameter sowie auch die Pulslänge des Lasers benötigt, siehe Tabelle 4.4. Diese sind sowohl für die Anfangsdehnung als auch für die Skalierung der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung notwendig.

**Tabelle 4.4:** Werte für die Bestimmung der Eingangsparameter, wobei eine Temperatur von 20 K angenommen wurde.

Bedeutung	Symbol	Wert	Verweis
Nicht lin. elast. Kons. - GaAs	$C_3$	$-31,18 \cdot 10^{10} \frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}$	[56]
Dichte - GaAs	$\rho_0$	5310 kg/m <sup>3</sup>	[57]
Dispersion - GaAs	$\gamma$	$7,4 \cdot 10^{-18} \text{ m}^3/\text{s}$	[58]
Schallgeschwindigkeit - Al	$v_1$	6320 m/s	[59]
Schallgeschwindigkeit - GaAs	$c$	4778 m/s	[58]
Eindringtiefe von Al bei 800 nm	$d$	7,7 nm	[36]
Poissonzahl - Al	$\nu$	0,32	[60]
Reflektivität - Al	$R$	0,87	[36]
Wärmeausdehnungskoeffizient - Al	$\alpha_L$	$23,1 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	[60]
Dichte - Al	$\rho$	2700 kg/m <sup>3</sup>	[60]
Wärmekapazität - Al	$c_W$	$897 \text{ JK}^{-1} \text{ kg}^{-1}$	[60]
Dämpfung - GaAs	$\epsilon'$	$0 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	[38]
Länge des Transducer	$l$	30 nm	1
Fluenz	$F$	1 mJ/cm <sup>2</sup>	2
Amplitude der Anfangsdehnung	$\eta_0$	$2 \cdot 10^{-3}$	3
Pulslänge des Lasers (zeitlich)	$\Delta t$	1900 fs	4
räumliche Diskretisierung	$dx$	0,06	5
zeitliche Diskretisierung	$h$	$0,06^3 = 2,14 \cdot 10^{-4}$	5

<sup>1</sup> Angabe vom Probenhersteller

<sup>2</sup> kann frei gewählt werden, siehe Kapitel 3.4

<sup>3</sup> siehe Gleichung (3.11)

<sup>4</sup> Hier wurde eine größere Pulslänge als im Experiment ( $\approx 100$  fs) angenommen. Eine zu geringe Pulslänge hätte, aufgrund der starken Krümmung der Anfangsdehnung, numerische Artefakte zur Folge.

<sup>5</sup> Sowohl die räumliche als auch die zeitliche Diskretisierung wurden so angepasst, dass die Simulation stabil ist.

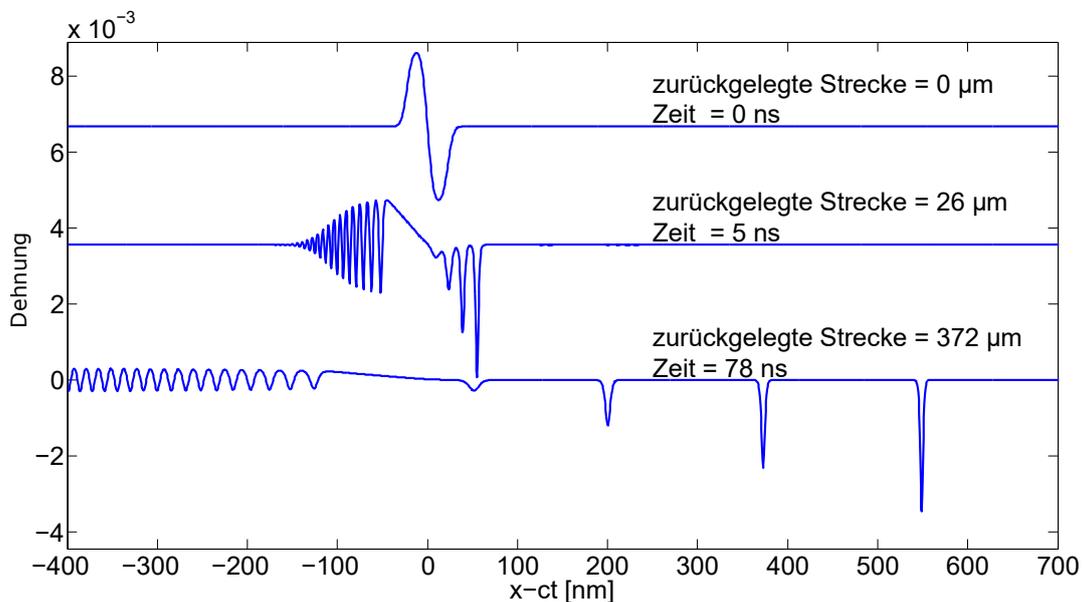


Abbildung 4.2: Numerische Lösung der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung für einen Al-Transducer und GaAs-Substrat. Die dafür notwendigen Parameter sind der Tabelle 4.4 zu entnehmen. Aus der hier gewählten Anfangsdehnung gehen vier Solitonen hervor. Die Beobachtung stabiler Solitonen lässt auf die Stabilität des Verfahrens rückschließen. Die Berechnungszeit betrug vier Sekunden.

Die Ergebnisse der Simulation sind in den Abbildungen 4.2 - 4.4 vorzufinden. Die Amplitude der Anfangsdehnung der in Abbildung 4.3 dargestellten Simulation wurde doppelt so groß gewählt wie diese in Abbildung 4.2. Dies hat zur Konsequenz, dass in der Simulation mit der höheren Amplitude der Anfangsdehnung auch mehr Solitonen generiert wurden.

Wenn man nun zusätzlich annimmt, dass das Substrat eine akustische Dämpfung aufweist, werden, je nach Stärke der Dämpfung, Solitonen mit geringeren Geschwindigkeiten generiert.

Zusammenfassend zeichnet sich diese numerische Berechnung dadurch aus, dass sie eine Variation aller Parameter zulässt und nur wenig Rechenzeit benötigt. Der Nachteil, dass die Pulslänge des Lasers nicht beliebig kurz gewählt werden kann, ist offensichtlich.

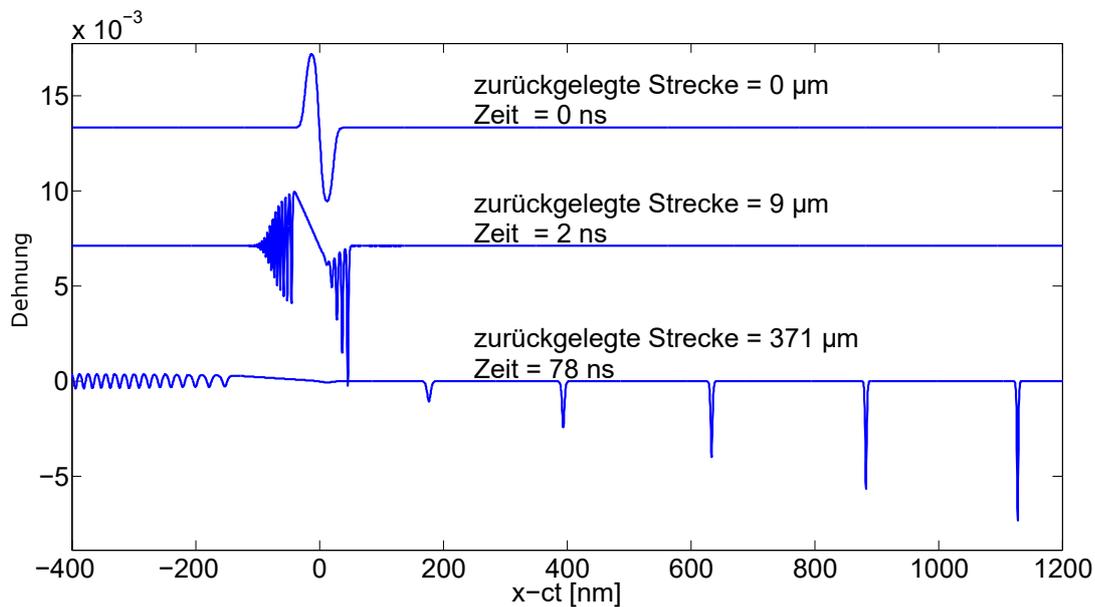


Abbildung 4.3: Numerische Lösung der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung. Die hierfür notwendigen Parameter sind, bis auf die Amplitude der Anfangsdehnung, der Tabelle 4.4 zu entnehmen. Die hier verwendete Amplitude der Anfangsdehnung beträgt  $4 \cdot 10^{-3}$ . Aufgrund der höheren Amplitude der Anfangsdehnung sind auch mehr Solitonen als in der Abbildung 4.2 dargestellten Simulation vorzufinden. Die Berechnungszeit betrug 39 Sekunden und ist somit etwa 10 mal so lang wie die Simulation aus der Abbildung 4.2. Die Ursache hierfür ist sowohl die gewählte Skalierung  $n_1 \propto n_0$ , siehe Gleichungen (2.28-2.29, 3.2), als auch ein größerer gewählter Rechenbereich (Gitter) auf der x-Achse.

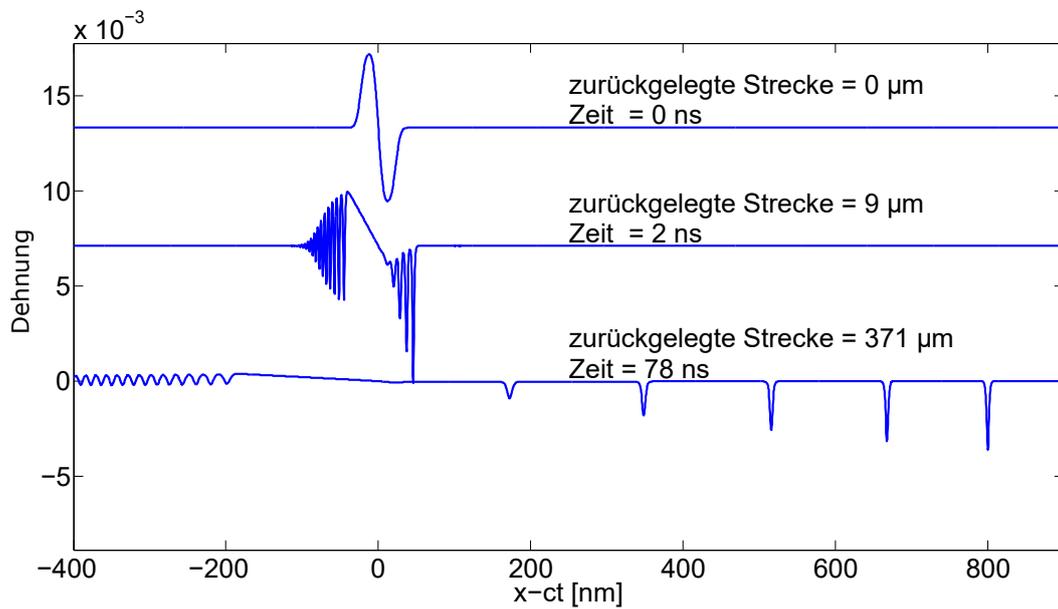


Abbildung 4.4: Numerische Lösung der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung. Die hierfür notwendigen Parameter sind der Tabelle 4.4 zu entnehmen. Die Amplitude der Anfangsdehnung beträgt, wie in Abbildung 4.3, wieder  $4 \cdot 10^{-3}$ . Für die Dämpfung  $\epsilon'$  wurde ein Wert von  $2,5 \cdot 10^{-11} \text{m/s}$  angenommen. Aufgrund der hier verwendeten Dämpfung ist zu beobachten, dass die Anzahl der Solitonen mit der in Abbildung 4.3 übereinstimmt, diese aber deutlich langsamer und somit auch eine geringere Amplitude vorzuweisen haben. Die Berechnungszeit betrug 39 Sekunden.

### 4.3 Lösung der assoziierten Schrödinger-Gleichung für eine bestimmte Anfangsbedingung

Wie bereits im Kapitel 2.4 ausführlich behandelt, besteht die Möglichkeit, das Solitonenproblem mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung zu berechnen. Dies ist möglich, da die Anzahl der Solitonen genau der Anzahl der gebunden Zustände der assoziierten Schrödinger-Gleichung entspricht, wobei die assoziierte Schrödinger-Gleichung folgende ist:

$$-\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (4.12)$$

wobei  $\Psi(x)$  die Wellenfunktion,  $V(x)$  das Potential und  $E$  der Eigenwert ist. Jedes Soliton wird dann genau einem Eigenwert zugeordnet. Aus dem Eigenwert wiederum kann die Solitonenbreite, Amplitude und Geschwindigkeit bestimmt werden. Das Potential  $V(x)$  ist proportional zur Anfangsdehnung  $\eta_0(x)$ :

$$V(x) = \frac{|C_3|}{12\rho_0 c \gamma} \cdot \eta_{t=0}(x), \quad (4.13)$$

wobei  $C_3$  eine nicht lineare elastische Konstante,  $\rho_0$  die Massendichte,  $c$  die Schallgeschwindigkeit und  $\gamma$  die Dispersion ist. Die Anfangsdehnung ist in Abbildung (4.5) dargestellt und wurde im Kapitel 3 eingeführt. Hierbei wurde vereinfacht angenommen, dass die Pulslänge des Lasers Null und die Eindringtiefe unendlich, bzw. der Transducer ein Metall mit guter Leitfähigkeit ist.

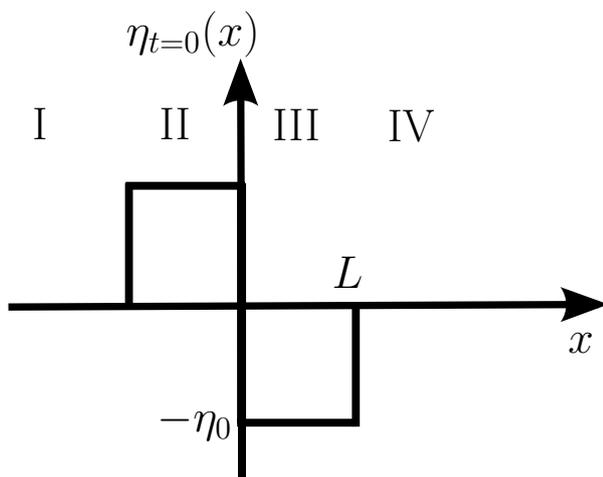


Abbildung 4.5: Profil der Anfangsdehnung, wobei diese in vier Intervalle unterteilt werden kann.

Es gilt somit

$$\eta_{t=0}(x) = \begin{cases} 0 & (x < -L) \\ \eta_0 & (-L \leq x \leq 0) \\ -\eta_0 & (0 < x \leq L) \\ 0 & (x > L), \end{cases} \quad (4.14)$$

mit

$$L = l \cdot \frac{c}{v_1}, \quad (4.15)$$

wobei  $l$  und  $v_1$  die Länge und Schallgeschwindigkeit des Transducer und  $c$  die Schallgeschwindigkeit im Substrat bezeichnet.

#### 4.3.1 Aufstellen der Wellenfunktion

Für die Wellenfunktion wählen wir nun folgenden Ansatz:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_I & (x < -L) \\ \Psi_{II} & (-L \leq x \leq 0) \\ \Psi_{III} & (0 < x \leq L) \\ \Psi_{IV} & (x > L), \end{cases} \quad (4.16)$$

mit

$$\Psi_I = A_I \exp(k_1 x) \quad (4.17)$$

$$\Psi_{II} = A_{II} \exp(ik'_2 x) + A_{II'} \exp(-ik'_2 x) \quad (4.18)$$

$$\Psi_{III} = A_{III} \exp(ik_3 x) + A_{III'} \exp(-ik_3 x) \quad (4.19)$$

$$\Psi_{IV} = A_{IV} \exp(-k_4 x). \quad (4.20)$$

Der Ansatz wurde so gewählt, dass im Bereich I und IV, siehe Abbildung 4.5, die Wellenfunktion exponentiell abklingt, damit diese quadratintegrabel ist. In den Bereichen II und III hingegen wurde die Wellenfunktion so konstruiert, dass alle Linearkombinationen einer nach links und rechts laufenden komplexen Welle berücksichtigt werden.

Nach dem Einsetzen von  $\Psi_I$  in Gleichung (4.13), wobei nach Gleichung (4.14)

gilt:

$$\eta_{t=0}(x < -L) = 0, \quad (4.21)$$

erhält man:

$$k_1 = \sqrt{-E}. \quad (4.22)$$

Analog dazu ergibt sich:

$$k'_2 = \sqrt{E - V_0} \quad (4.23)$$

$$k_3 = \sqrt{E + V_0} \quad (4.24)$$

$$k_4 = \sqrt{-E} = k_1. \quad (4.25)$$

mit

$$V_0 = \frac{|C_3|}{12\rho_0 c \gamma} \cdot \eta_0. \quad (4.26)$$

Da es offensichtlich nur gebundene Zustände mit:  $-V_0 < E < 0$  geben wird, definieren wir

$$k_2 := \sqrt{V_0 - E} \quad (4.27)$$

und somit gilt:

$$k'_2 = \sqrt{E - V_0} = i\sqrt{V_0 - E} = ik_2. \quad (4.28)$$

Daher ist sichergestellt, dass  $k_i \in \mathbb{R}$  gilt. Für die Wellenzahlen gelten nun folgende Beziehungen:

$$k_2^2 + k_3^2 = 2V_0 \quad (4.29)$$

$$k_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{k_2^2 - k_3^2}. \quad (4.30)$$

Zusammengefasst erhalten wir nun für die Wellenfunktion:

$$\Psi_I = A_I \exp(k_1 x) \quad (4.31)$$

$$\Psi_{II} = A_{II} \exp(-k_2 x) + A_{II'} \exp k_2 x \quad (4.32)$$

$$\Psi_{III} = A_{III} \exp(ik_3 x) + A_{III'} \exp(-ik_3 x) \quad (4.33)$$

$$\Psi_{IV} = A_{IV} \exp(-k_1 x). \quad (4.34)$$

### 4.3.2 Stetigkeitsbedingungen

Wir fordern nun, dass sowohl die Wellenfunktion selbst als auch ihre Ableitung überall stetig sein muss. Die daraus resultierenden Gleichungen sind in den Tabellen 4.5 und 4.6 zusammengefasst.

**Tabelle 4.5:** Stetigkeits-Bedingungen

Stelle	Bedingung aufgrund der Stetigkeit der Wellenfkt.
$x = -L$	$A_I \exp(-k_1 L) = A_{II} \exp(k_2 L) + A_{II'} \exp(-k_2 L)$
$x = 0$	$A_{II} + A_{II'} = A_{III} + A_{III'}$
$x = L$	$A_{III} \exp(ik_3 L) + A_{III'} \exp(-ik_3 L) = A_{IV} \exp(-k_1 L)$

**Tabelle 4.6:** Stetig-Differenzierbarkeits-Bedingungen

Stelle	Bed. aufgrund der Stetig-Differenzierbarkeit der Wellenfkt.
$x = -L$	$k_1 A_I \exp(-k_1 L) = -k_2 A_{II} \exp(k_2 L) + k_2 A_{II'} \exp(-k_2 L)$
$x = 0$	$-k_2 A_{II} + k_2 A_{II'} = ik_3 A_{III} - ik_3 A_{III'}$
$x = L$	$ik_3 A_{III} \exp(ik_3 L) - ik_3 A_{III'} \exp(-ik_3 L) = -k_1 A_{IV} \exp(-k_1 L)$

Dieses Gleichungssystem kann auch wie folgt formuliert werden:

$$M \cdot a = 0, \quad (4.35)$$

mit der Matrix

$$M = \begin{pmatrix} e^{-k_1 L} & -e^{k_2 L} & -e^{-k_2 L} & 0 & 0 & 0 \\ k_1 e^{-k_1 L} & k_2 e^{k_2 L} & -k_2 e^{-k_2 L} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -k_2 & k_2 & -ik_3 & ik_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_3 L} & e^{-ik_3 L} & -e^{-k_1 L} \\ 0 & 0 & 0 & ik_3 e^{ik_3 L} & -ik_3 e^{-ik_3 L} & k_1 e^{-k_1 L} \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

und dem Vektor

$$a = \begin{pmatrix} A_I \\ A_{II} \\ A_{II'} \\ A_{III} \\ A_{III'} \\ A_{IV} \end{pmatrix}. \quad (4.37)$$

Die Lösungsmenge des homogenen linearen Gleichungssystems (4.35) ist genau dann nicht trivial, falls gilt:

$$\det(M) = 0 \quad (4.38)$$

Die Determinante der Matrix  $M$  wurde mit Hilfe der Software Mathematica<sup>®</sup> 9 berechnet. Die Gleichung (4.38) wurde nun mit (4.30) wie folgt vereinfacht:

$$\begin{aligned} 0 = & \sinh(k_2 L) \\ & \cdot \left( \sqrt{2} (k_2^2 - k_3^2)^{3/2} \sin(k_3 L) - k_3 (k_3^2 - 3k_2^2) \cos(k_3 L) \right) \\ & + k_2 \cosh(k_2 L) \\ & \cdot \left( (k_2^2 - 3k_3^2) \sin(k_3 L) + 2\sqrt{2} k_3 \sqrt{(k_2^2 - k_3^2)} \cos(k_3 L) \right). \end{aligned} \quad (4.39)$$

Nun können  $k_2$  und  $k_3$  unter der Verwendung von Gleichungen (4.29) und (4.39) grafisch bzw. numerisch bestimmt werden.

### 4.3.3 Beispielrechnung für einen Al-Transducer und GaAs-Substrat

Um folglich eine konkrete Berechnung für einen Al-Transducer und GaAs-Substrat durchzuführen, sind die Eingangsparameter  $V_0$  und  $L$  Voraussetzung, siehe Gleichungen (4.26) und (4.15). Diese werden über bestimmte Materialkonstanten, die Amplitude der Anfangsdehnung und die Länge des Transducer bestimmt, siehe Tabelle 4.4, wobei bei dieser Rechnung die Amplitude der Anfangsdehnung mit  $3 \cdot 10^{-3}$  verwendet wurde.

Somit ist es möglich, die Gleichungen (4.29) und (4.39) grafisch darzustellen, siehe Abbildung 4.6. Der blaue Kreisausschnitt wurde mit der Gleichung (4.26) erstellt. Die roten Konturlinien erfüllen die Gleichung (4.39). Jeder Schnittpunkt der beiden Graphen widerspiegelt einen Eigenwert der Schrödingergleichung, wobei dieser auch numerisch bestimmt werden kann.

Aus den so bestimmten Wellenzahlen  $k_2$  lassen sich nun die dazugehörigen Eigenwerte  $E$  über die Gleichung (4.27) ermitteln. Aus der Gleichung (2.52) erfolgt nun direkt die Geschwindigkeit der Solitonen. Mit der Gleichung (4.24) kann der Eigenwert ebenso über  $k_3$  bestimmt werden. Unter Zuhilfenahme des relativen Eigenwerts  $|\frac{E}{V_0}|$  besteht die Möglichkeit, diesen über die Solitongeschwindigkeit abzutragen, siehe Abbildung 4.7.

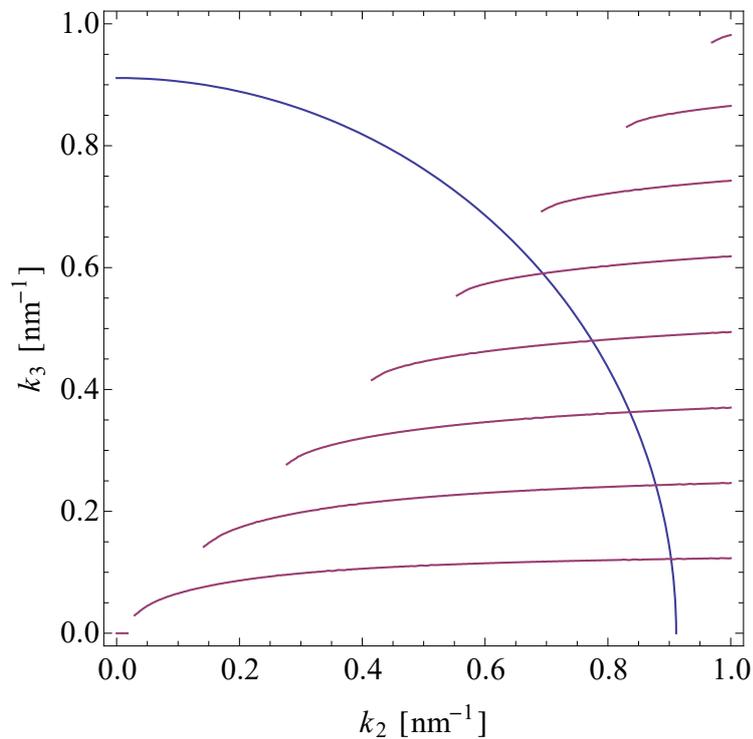


Abbildung 4.6: Grafische Lösung der Schrödingergleichung für einen Al-Transducer und GaAs-Substrat. Der blaue Kreis ist die Darstellung von Gleichung (4.29). Die roten Konturlinien sind Lösungen der Gleichung (4.39). Jeder gemeinsame Punkt der beiden Mengen entspricht einer Lösung der Schrödingergleichung

Da die Amplitude der Anfangsdehnung  $\eta_0$  proportional zur Fluenz ist, siehe Gleichung 3.11, kann somit auch die Solitonengeschwindigkeit direkt über der Fluenz dargestellt werden, siehe Abbildung 4.8.

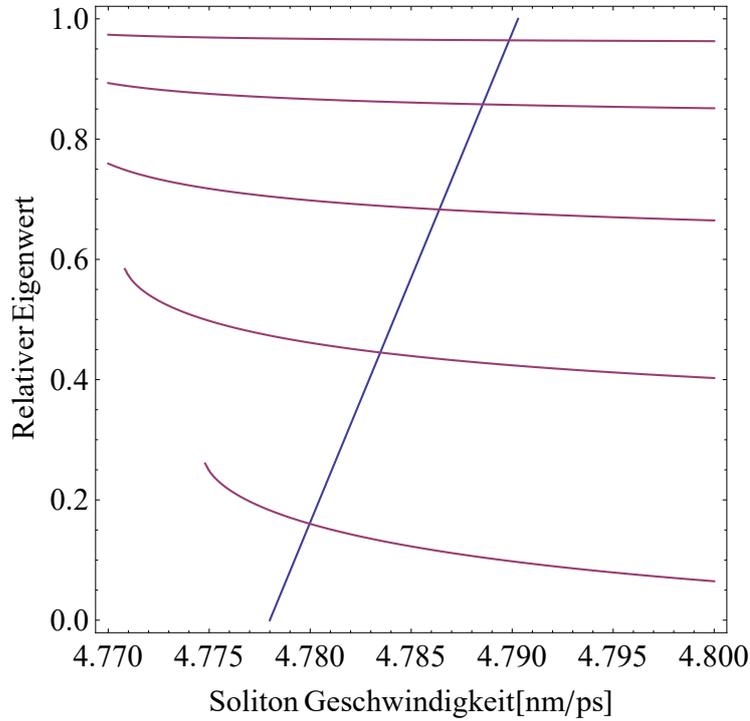


Abbildung 4.7: Grafische Lösung der Schrödingergleichung für einen Al-Transducer und GaAs-Substrat, wobei in dieser Abbildung die Solitonengeschwindigkeit direkt ersichtlich ist. Die blaue Gerade ist die Darstellung von Gleichung (4.29). Die roten Konturlinien sind Lösungen der Gleichung (4.39). Die Wellenzahl  $k_2$  wurde unter der Verwendung von Gleichung (4.27) und (2.52) direkt in die Solitonengeschwindigkeit umgerechnet. Der relative Eigenwert  $|\frac{E}{V_0}|$  ergibt sich mit der Gleichung (4.24) aus der Wellenzahl  $k_3$ . Jeder gemeinsame Punkt der beiden Mengen entspricht einer Lösung der Schrödingergleichung.

Bei der analytischen Berechnung ist, wie in der Simulation der Korteweg-de-Vries-Gleichung, siehe Kapitel 4.2.2, die Rechenzeit sehr gering. Die analytische Berechnung ist anzuwenden, falls das Substrat dämpfungsfrei ( $\epsilon \approx 0$ ) und die Pulslänge des Lasers sehr kurz ( $\approx 100$  fs) ist. Ebenfalls sollte der Transducer eine hohe<sup>9</sup> Eindringtiefe aufweisen, bzw. ein Metall mit hoher Leitfähigkeit sein. Ergänzend hinzuzufügen, bezieht sich die analytische Variante ausschließlich auf die Solitonen und berechnet nicht den zeitlichen Verlauf des vollständigen Dehnungsprofils.

<sup>9</sup> Die Eindringtiefe sollte somit um ein Vielfaches größer sein als die Länge des Transducers

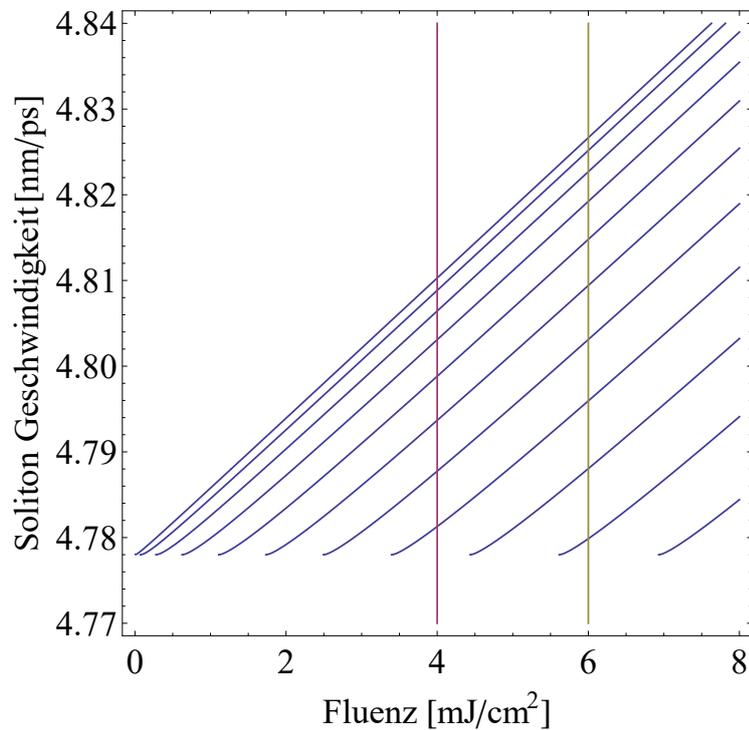


Abbildung 4.8: Grafische Lösung der Schrödingergleichung für einen Al-Transducer und GaAs-Substrat. Aus dieser Abbildung geht die Anzahl der Solitonen mit den jeweiligen Geschwindigkeiten direkt für eine beliebige Fluenz hervor. Die vertikalen Linien sollen dies verdeutlichen. Bei einer Anregungsfluenz von  $4 \text{ mJ/cm}^2$  entstehen somit 8 Solitonen, wobei das schnellste eine Geschwindigkeit  $4,810 \text{ m/s}$  aufweist. Dahingegen werden bei einer Anregungsfluenz von  $6 \text{ mJ/cm}^2$  10 Solitonen erwartet, wobei das schnellste eine Geschwindigkeit von  $4,827 \text{ m/s}$  hat.

#### 4.4 Vergleich der verschiedenen Methoden für die Beschreibung einer Dynamik in einem Kristall

In diesem Kapitel sollen die in den Kapiteln 4.1 bis 4.3 erläuterten Berechnungsmethoden miteinander verglichen werden. Ziel soll es sein, einen sogenannten Leitfaden zu erstellen. Aus diesem kann dann abgeleitet werden, welche Berechnungsmethode unter einer bestimmten Voraussetzung die meisten Vorteile aufweist. Diesbezüglich werden hier noch einmal Vor- und Nachteile der drei Varianten zusammengefasst.

Der folgende Punkt ist ein wesentlicher Vorteil bei der Beschreibung einer Gitterdynamik mit Hilfe einer linearen Kette:

- Unter der Annahme, dass ein Kristall aus Punktmassen besteht, welche durch Federn miteinander gekoppelt sind, die eindimensionale Beschreibung dessen ausreichend ist und die Gitteratome ausschließlich mit ihren unmittelbaren Nachbarn wechselwirken, beschreibt das Modell der linearen Kette, siehe Gleichung (2.1), das System vollständig.

Damit ergeben sich aber auch folgende Einschränkungen:

- Die Dispersion  $\gamma$  kann nicht separat angepasst werden und ist über die Gleichung (2.10) festgelegt.
- Die Pulslänge kann nicht beliebig kurz gewählt werden. Eine zu kurze Pulslänge  $\Delta t \approx 100$  fs hat eine starke Krümmung des Profils der Anfangsdehnung zur Folge, welche numerische Artefakte in der Simulation verursachen.
- Die Berechnung ist sehr zeitaufwendig. Simulation mit Propagationszeiten von über 8000 ps sind schwer zu realisieren.

Zusammenfassend eignet sich die Simulation einer hier beschriebenen linearen Kette, falls die Dispersion aus der Gleichung (2.10) experimentell bestätigt wurde und für die Pulslänge des Laser  $\Delta t > 790$  fs gilt, sowie die Propagationszeit  $< 8000$  ps ist.

Nun fokussieren wir uns auf die numerische Simulation der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung. Die entscheidenden Vorteile dieser Berechnungsmethode sind folgende:

- Die Rechenzeit dieser Simulation ist sehr kurz. Somit sind Propagationszeiten von über 80 ns möglich.

- Die Dispersion kann im Gegensatz zur Simulation der linearen-Kette frei gewählt werden.

Dem gegenüber ist die Simulation der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung mit dem folgenden Nachteil verbunden:

- Die Pulslänge des Lasers kann nicht beliebig kurz gewählt werden.

Der Fakt, dass die Berechnungszeit der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung im Vergleich zur linearen-Kette deutlich kürzer ist, kann im Wesentlichen mit der Substitution, siehe Gleichung (2.18), begründet werden. Demnach ist es bei dieser Simulation ausreichend, wenn die Berechnung des Dehnungsprofils sich ausschließlich auf ein Intervall um  $c \cdot t$  beschränkt.

Dem hinzuzufügen wollen wir noch die Berechnung der Solitonen mit Hilfe der assoziierten Schrödinger-Gleichung zusammenfassen:

- Die Rechenzeit dieser Simulation ist sehr kurz und beträgt weniger als eine Minute.
- Die Berechnung bezieht sich auf einen sehr schmalen Laserpuls  $\Delta t = 100$  fs.

Demgegenüber sind folgende Nachteile zu nennen:

- Die hier angenommene Anfangsdehnung beschreibt nur die Realität hinreichend genau, falls für die Endringtiefe  $d$  und die Transducerlänge  $l$  gilt:  $d \gg l$ , bzw. der Transducer ein Metall mit hoher Leitfähigkeit ist.
- Die Berechnung bezieht sich ausschließlich auf die Solitonen und beschreibt nicht vollständig die zeitliche Entwicklung des Dehnungsprofils.
- Die akustische Dämpfung des Substrats wird vernachlässigt.

Die folgende Übersicht stellt nun den am Anfang des Kapitels erwähnten Leitfaden dar.

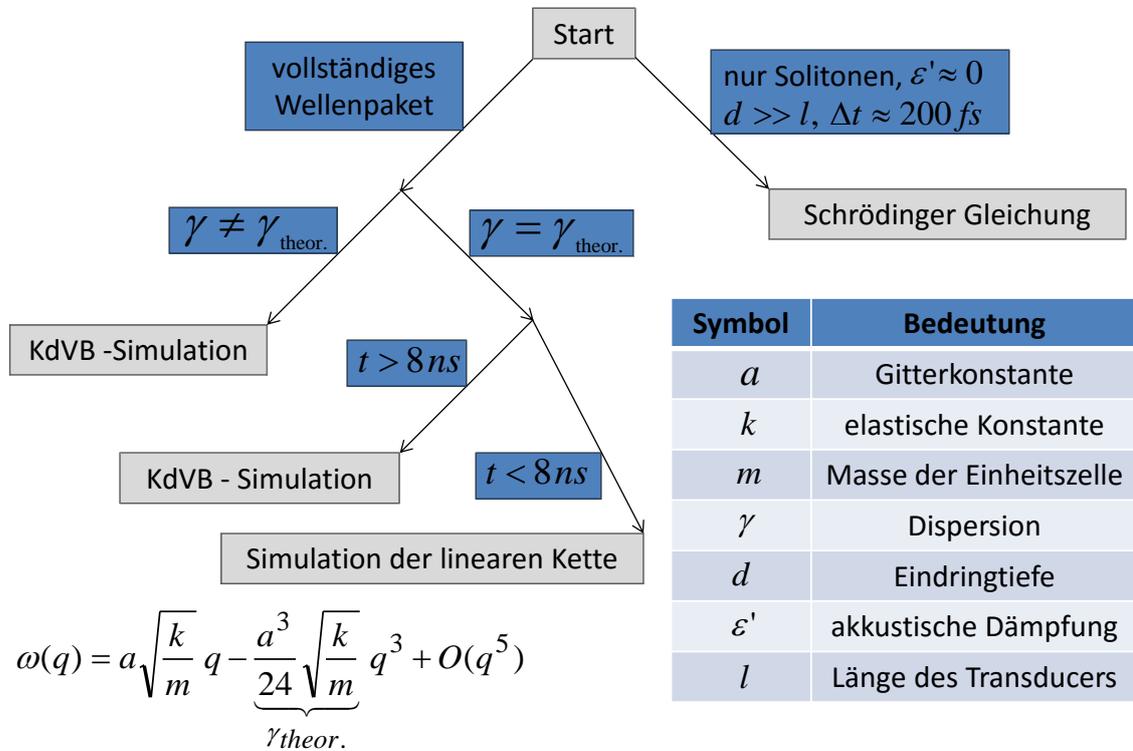


Abbildung 4.9: Leitfaden der verschiedenen Berechnungsmethoden um die Dynamik eines Kristalls, für ein in Kapitel 3 erzeugte Hyperschallwelle, zu simulieren. Hieraus geht hervor, dass die Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung (in der Abbildung mit KdVB bezeichnet) wohl in den meisten Fällen Anwendung finden wird.

Es bietet sich eine Darstellung an, welche alle drei Methoden für die selben Eingangsparameter beinhaltet, siehe Abbildung 4.10. Demnach stimmt das Modell der linearen Kette sehr gut mit der Simulation der Korteweg-de-Vries-Gleichung überein.

Der Grund für die hohe Übereinstimmung dieser beiden Simulationen ist die Anpassung der Dispersion der Korteweg-de-Vries-Gleichung an die Dispersion, welche das Modell der linearen Kette beinhaltet. Hier ist festzustellen, dass sowohl die Anzahl, als auch die Form der Solitonen fast identisch erscheint.

Der minimale Unterschied beider Simulation ist vor allem im Bereich  $x - c \cdot t < -100 \text{ nm}$  erkennbar. Hierfür sind folgende Ursachen zu nennen. Die

Korteweg-de-Vries-Gleichung kann nicht exakt aus dem Modell der linearen Kette hergeleitet werden. Dabei wurden unter anderem Terme weggelassen, welche höhere Ordnungen der Dispersion berücksichtigen, siehe Gleichungen (2.6) und (2.7).

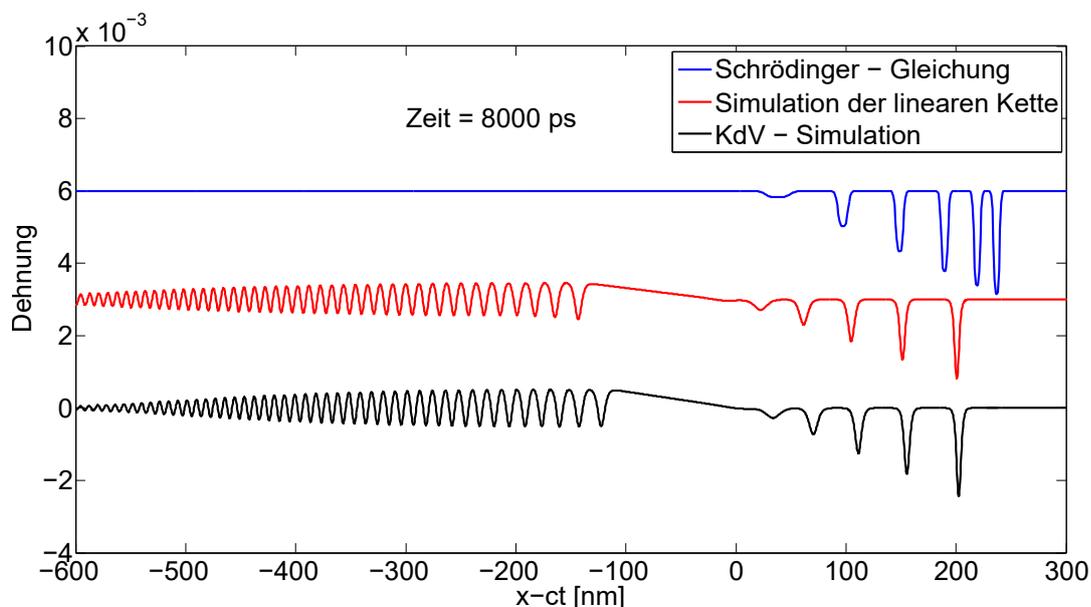


Abbildung 4.10: Übersicht der verschiedenen Berechnungsmethoden um die Dynamik eines Kristalls für ein in Kapitel 3 erzeugte Hypererschallwelle zu simulieren. Die Eingangsgrößen wurden aus der Tabelle 4.1 entnommen. Die Dispersion wurde über die Gleichung (2.10) mit  $\gamma = \frac{a_{DSO}^2}{24} c = 0,04 \cdot 10^{-15} \frac{m^3}{s}$  ermittelt.

Ebenfalls lässt sich feststellen, dass die Berechnung der Solitonen mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung unzureichend mit den Ergebnissen der Simulationen übereinstimmt. Der Grund hierfür ist die geringe Eindringtiefe des Transducer und die angenommen Pulsbreite des Anregepulses von 4000 fs. Demnach stimmt das Dehnungsprofil aus der Abbildung 4.5 nicht mit dem Profil der Anfangsdehnung, welcher für die Simulationen verwendet wurde, überein.

Abschließend vergleichen wir nun die Berechnung der Solitonen mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung mit der Simulation der Kortweg-de-Vries-Gleichung, wobei eine kürzere Pulsbreite (740 fs) und eine größere Eindringtiefe des Transducer (50 m) angenommen wurden, siehe Abbildung 4.11. Somit ist eine höhere Übereinstimmung beider Berechnungsmethoden festzustellen.

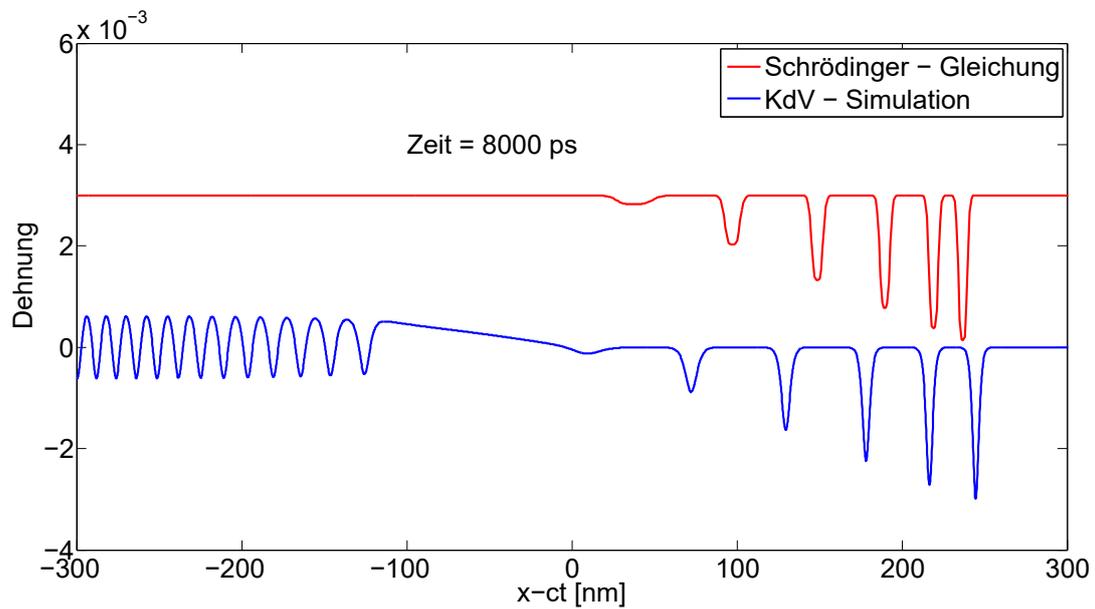


Abbildung 4.11: Übersicht der verschiedenen Berechnungsmethoden um die Dynamik eines Kristalls für ein in Kapitel 3 erzeugte Hypererschallwelle zu simulieren. Die Eingangsgrößen wurden aus der Tabelle 4.1 entnommen. Aufgrund der hier angenommenen Pulsbreite von 740 fs und einer Eindringtiefe des Transducer von 50 m ist eine höhere Übereinstimmung der hier dargestellten Berechnungsmethoden zu beobachten.

## 5 Experimentelle Untersuchungen

In diesem Kapitel werden die im theoretischen Teil dieser Arbeit gewonnenen Erkenntnisse experimentell überprüft. Sowohl der dazu verwendete Versuchsaufbau als auch die Messergebnisse werden ausführlich erläutert und diskutiert.

### 5.1 Detektion einer Hyperschallwelle in einem Kristall

Im Kapitel 3 wurde bereits ausführlich beschrieben, wie mit Hilfe eines Laserpulses und einer geeigneten Probe eine Hyperschallwelle erzeugt werden kann. In diesem Kapitel soll nun auf die Detektion dieser Schallwelle eingegangen werden, welche ebenfalls mit einem Laserpuls, dem sogenannten Abfragepuls, erfolgt.

Um eine Schallwelle mit Licht zu detektieren, macht man sich folgenden Sachverhalt zu Nutzen. Propagiert eine Schallwelle durch ein Material, so verändert das damit einhergehende Dehnungsprofil die dielektrische Funktion des Materials lokal. Aufgrund dieser Tatsache, kann Licht an der Schallwelle reflektiert werden [61]. Zusätzlich wird Licht ebenfalls an an der Grenzfläche Transducer/Substrat reflektiert, siehe Abbildung 5.1.

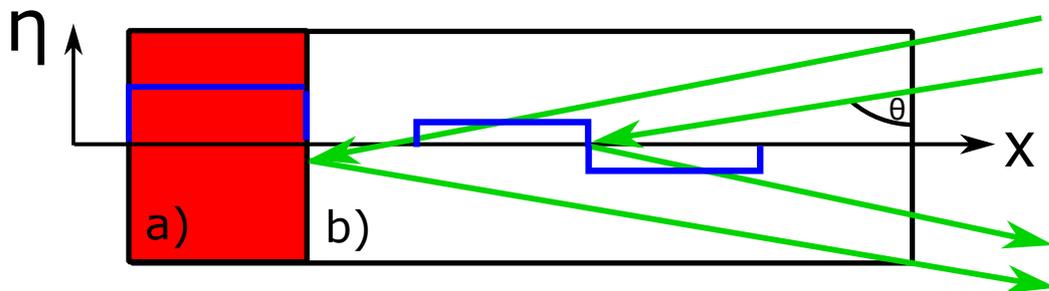


Abbildung 5.1: Detektion einer Schallwelle mit einem Laserpuls, welcher hier grün gekennzeichnet ist. Die Dehnung  $\eta(x, t)$  ist hier blau eingezeichnet, wobei dieser nur für  $\eta \neq 0$  dargestellt ist. Der Transducer (rot) wurde mit a) und das Substrat mit b) gekennzeichnet, vgl. Abbildung 3.2. Es findet sowohl eine Reflexion am Dehnungsprofil, als auch an der Grenzfläche Transducer/Substrat statt. Weitere Reflexionen wurden hier vernachlässigt.

Dabei kommt es je nach Abstand zwischen der Schallwelle und der Grenzfläche Transducer/Substrat zur konstruktiven und destruktiven Interferenz zwischen

den beiden reflektierten Strahlen. Detektiert man diese beiden Strahlen in Abhängigkeit der Zeit  $t$ , wobei  $t$  hier die Zeit zwischen den Anrege- und Abfragepuls bezeichnet, so erwartet man ein oszillierendes Signal, welches charakteristisch für die zeitaufgelöste Brillouin-Streuung (TDBS) - engl. time-domain brillouin scatterin - ist.

Anschließend wird nicht die Reflektion der angeregten Probe direkt gemessen, sondern die relative Intensitätsänderung

$$\frac{R - R_0}{R_0}, \quad (5.1)$$

wobei  $R$  die Intensität des reflektierten Lichts der angeregten Probe und  $R_0$  die der nicht angeregten Probe angibt. Bezeichnet nun  $r_s$  die Reflektivität der Schallwelle,  $r'$  und  $r$  die Reflektivität der Substrat-Transducer-Grenzfläche im angeregten bzw. nicht angeregten Zustand, so gilt

$$\frac{R - R_0}{R_0} = \frac{|r'|^2 - |r|^2}{|r|^2} + \frac{2|r_s||r'| \cos(\phi)}{|r|^2} + \frac{|r_s|^2}{|r|^2}, \quad (5.2)$$

hierbei ist  $\phi$  die Phase zwischen dem am Transducer reflektierten Licht und dem reflektierten Licht der Schallwelle. Der erste Summand der rechten Seite der Gleichung (5.2) beschreibt die Reflektionsänderung eines angeregten Transducer aufgrund seiner Temperaturänderung. Für diesen Summanden erwarten wir, dass er exponentiell mit der Zeit abklingt. Der zweite Summand beschreibt die bereits erwähnte Oszillation aufgrund der Tatsache, dass  $\phi$  linear in der Zeit ist. Der letzte Summand ist aufgrund der geringen Reflektivität der Schallwelle vernachlässigbar.

Zunächst möchten wir die Phase  $\phi$  näher betrachten. Die Bedingung für konstruktive Interferenz der beiden Strahlen kann über die Bragg-Gleichung angegeben werden:

$$m \frac{\lambda}{n} = 2s \sin(\theta). \quad (5.3)$$

Hierbei ist  $m \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ ,  $\lambda$  die Wellenlänge des Lichtes,  $n$  der Brechungsindex des Substrats,  $s$  der Abstand zwischen der Schallwelle und der Grenzfläche Transducer/Substrat und  $\theta$  der Einfallswinkel im Substrat, siehe Abbildung 5.1. Wählt man nun für die Distanz den Ausdruck  $s = ct$ , wobei  $c$  die Schallgeschwindigkeit im Substrat und  $t$  die Propagationszeit der Schallwelle bezeichnet, so kann mit Hilfe von Gleichung (5.3) folgender Zusammenhang formuliert

werden:

$$t = \underbrace{\frac{\lambda}{2cn \sin(\theta)}}_{\tau} \cdot m, \quad (5.4)$$

wobei  $\tau$  die Periodendauer der Oszillation bezeichnet. Somit gilt dementsprechend für die Phase

$$\phi = \omega \cdot t = 2\pi f \cdot t = 2\pi \frac{1}{\tau} \cdot t. \quad (5.5)$$

Als nächstes möchten wir auf die direkte Detektion der longitudinalen akustischen Phononen eingehen. Dem Profil der Anfangsdehnung  $\eta(x, t_0)$  lässt sich nämlich eine Fourier-Amplitude  $A(q)$  über folgende Transformation zuordnen:

$$A(q) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x, t_0) e^{-iqx} dx \right|, \quad (5.6)$$

wobei  $q$  die Wellenzahl eines Phonons beschreibt. Nimmt man nun an, dass die Anfangsdehnung  $\eta(x, t_0)$  mit der Abbildung 5.1 dargestellt werden kann, so beträgt die Fourier-Amplitude

$$A(q) = \frac{4\eta_0}{q} \sin(Lq/2), \quad (5.7)$$

wobei  $L$  über die Gleichung (4.15) eingeführt wurde.

Da sich nun jeder Wellenzahl eines Phonons eine Wellenlänge  $\lambda_p$  zuordnen lässt, kann man annehmen, dass mit jedem Phonon eine periodische Streudichte der Periodizität  $\lambda_p$  einhergeht [62]. Für diesen Sachverhalt ergibt sich nun folgende Bragg-Gleichung:

$$\frac{\lambda}{n} = 2\lambda_p \sin(\theta). \quad (5.8)$$

Demzufolge kann man schlussfolgern, dass es einen direkten Zusammenhang zwischen der Wellenlänge des Abfragepulses  $\lambda$  und der Phononwellenzahl  $q$  gibt:

$$q = n \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta), \quad (5.9)$$

Dem Phonon lässt sich ebenfalls eine Kreisfrequenz  $\omega_p$  zuordnen:

$$\omega_p = c \cdot q = c \cdot n \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta). \quad (5.10)$$

Vergleichen wir die Gleichung (5.10) mit der Gleichung (5.5) so stellen wir fest, dass  $\omega = \omega_p$  gilt. Dementsprechend oszilliert das Messsignal  $\frac{R-R_0}{R_0}$  mit der Frequenz des detektierten Phonons.

## 5.2 Aufbau des pump-probe-Experiments

Sowohl die Erzeugung, siehe Kapitel 3, als auch die Detektion, siehe Kapitel 5.1, einer Hyperschallwelle kann mit dem Versuchsaufbau, welcher in der Abbildung 5.2 dargestellt ist, realisiert werden. Das verwendete Lasersystem erzeugte 100 fs breite Pulse mit einer Zentralwellenlänge von 795 nm in einem Abstand von 0,2 ms. Die Ausgangsleistung beträgt 1,5 W. Als Erstes wird ein Laserpuls in zwei separate Pulse getrennt, wobei ein Puls für die Anregung, im Folgenden pump, und der andere für die Abfrage, im Folgenden probe genannt, dient.

Die vom pump-Puls zurückgelegte Strecke kann nun über einen motorisierten Verschiebungstisch, mit dessen Hilfe Spiegel parallel zur Propagationsrichtung der Laserpulse verschoben werden können, eingestellt werden. Danach erreicht der pump-Puls einen Chopper, der exakt 20 Pulse passieren lässt und die nächsten 20 Pulse absorbiert. Dementsprechend ist er 4 ms geöffnet und 4 ms geschlossen. Abschließend wird der pump-Puls auf den Transducer der Probe fokussiert.

Der probe-Puls hingegen wird zuerst auf einen Saphir-Kristall fokussiert, wodurch ein Superkontinuum bzw. Weißlicht erzeugt wird. Hierbei spielt die Selbstfokussierung und die Selbstphasenmodulation eine wichtige Rolle [63], wobei diese Effekte nicht linear sind. Das Spektrum des somit erzeugten Weißlichts enthält Photonen von 480 – 795 nm mit annähernd gleich verteilter Intensität. Danach wird der probe-Puls auf das Substrat der Probe fokussiert und wird anschließend mit einem Spektrometer detektiert.

Der bereits erwähnte Chopper gewährleistet nun, dass die Reflexion der Probe regelmäßig sowohl im nicht angeregten, als auch im angeregten Zustand gemessen werden kann, womit die Messgröße  $\frac{R-R_0}{R_0}$  ermittelt wird. Alternativ könnte man auch die Probe ausschließlich im angeregten Zustand vermessen und danach die pump-Pulse manuell blockieren, um den nicht angeregten Zustand der Probe zu vermessen. Dies hätte aber den entscheidenden Nachteil, dass eine Schwankung des Weißlichtspektrums zu einem erheblichen Fehler führen würde. Durch die Verwendung des Choppers wird dieser Fehler folglich minimiert.

Mit Hilfe eines motorisierten Verschiebungstisches kann nun ein beliebiger Zeitversatz zwischen pump- und probe-Puls eingestellt werden.

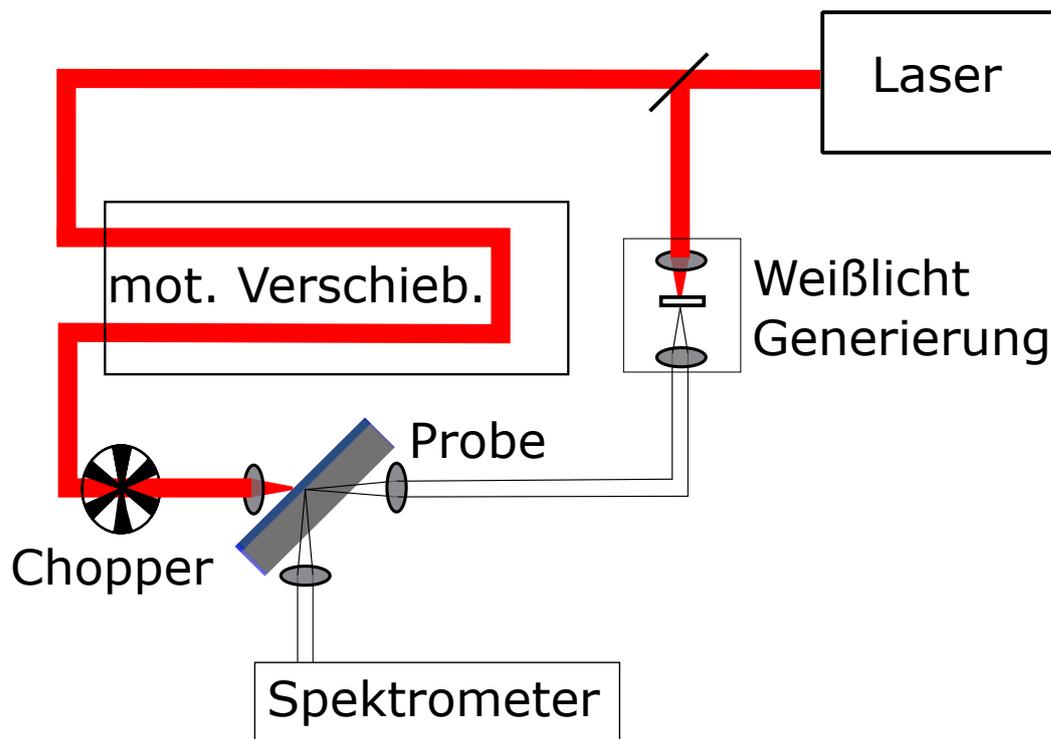


Abbildung 5.2: Aufbau eines pump-probe-Experiments. Der Laser erzeugt Pulse mit einer Zentralwellenlänge von 795 nm, welche hier rot eingezeichnet sind. Nach der Aufteilung eines Pulses in einen pump- und einen probe-Puls, kann der Zeitversatz zwischen diesen beiden Pulsen mit Hilfe eines motorisierten Verschiebungstisch eingestellt werden. Der probe-Puls wird in einen Saphir-Kristall fokussiert, bevor er die Probe erreicht. Somit wird ein Superkontinuum bzw. Weißlicht generiert, welches mit einem weißen Strahlengang gekennzeichnet ist. Anschließend wird dieser ebenfalls auf die Probe fokussiert und abschließend mit einem Spektrometer analysiert. Der Chopper dient dazu, mögliche Intensitätsschwankungen des probe-Pulses zu minimieren. Weitere Details sind dem Kapitel 5.2 zu entnehmen.

### 5.3 Auswertung der Messergebnisse für die Dysprosium-Scandat-Probe

In diesem Kapitel werden nun die Messergebnisse der Probe I, welche aus einen SRO-Transducer ( $\text{SrRuO}_3$ -Transducer) auf einem Dysprosium-Scandat-Substrat ( $\text{DyScO}_3$ -Substrat) besteht, dargestellt. Sowohl der Aufbau dieser

Probe als auch die physikalischen Eigenschaften der hier verwendeten Materialien wurden im Kapitel 3.6.1 erläutert.

Das Messsignal für eine probe-Wellenlänge von  $\lambda = 610$  nm ist in Abbildung 5.3 dargestellt. Die Fluenz des pump-Pulses betrug  $20 \text{ mJ/cm}^2$ . Hierbei ist ein deutlicher Anstieg des Messsignals bei  $t = 0$  ps zu erkennen, danach ist eine Oszillation und ein exponentielles Abklingen dessen zu beobachten. Diese Beobachtung ist in Übereinstimmung mit der Interpretation des Messsignals, siehe Gleichung (5.2).

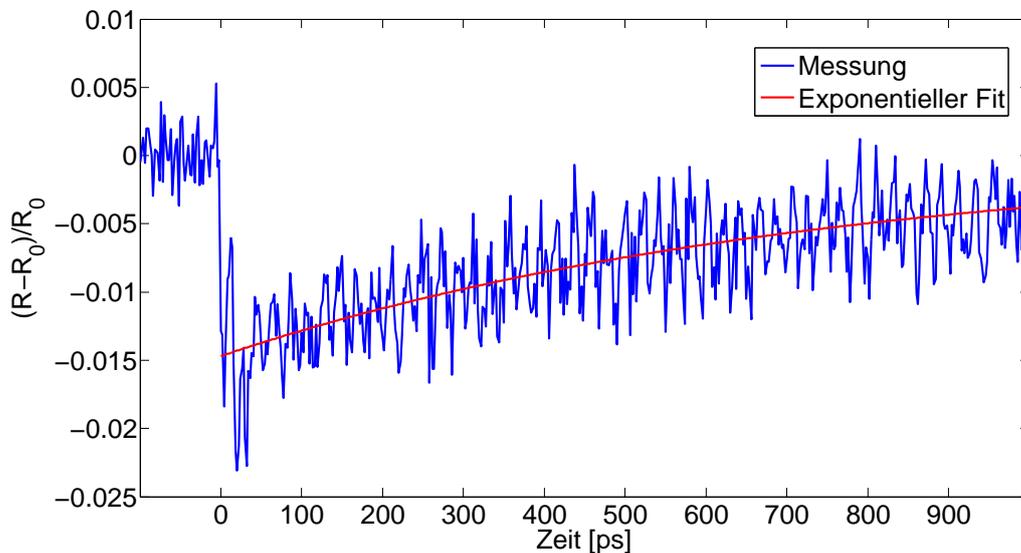


Abbildung 5.3: Darstellung des Messsignals für eine probe-Wellenlänge von 550 nm. Die Fluenz des pump-Pulses betrug  $5 \text{ mJ/cm}^2$ . Es ist sowohl eine Oszillation als auch ein exponentielles Abklingen des Messsignals zu beobachten, wobei diese Beobachtungen im Einklang mit der Interpretation des Messsignals ist, siehe Gleichung (5.2).

In der Abbildung 5.4 ist nun das Messsignal über das gesamte Spektrum des vom Saphir-Kristall generierten Lichts dargestellt. Hierbei ist zu erkennen, dass die Periodendauer des Messsignals direkt proportional zur probe-Wellenlänge  $\tau$  ist. Dieses Phänomen kann mit der Gleichung (5.4) erklärt werden.

Ermittelt man nun die Periodendauer  $\tau$ , so lässt sich über die folgende Gleichung

chung die Schallgeschwindigkeit  $c$  des Substrats berechnen:

$$c = \frac{\lambda}{2n\tau \sin(\theta)}. \quad (5.11)$$

Die Periodendauer  $\tau$  kann nun beispielsweise über eine Schnelle-Fourier-Transformation [64] bestimmt werden. Die somit über alle probe-Wellenlängen  $\lambda$  gemittelte Schallgeschwindigkeit ist in der Abbildung (5.5) dargestellt und wurde mit  $6,83 \frac{\text{nm}}{\text{ps}}$  ermittelt.

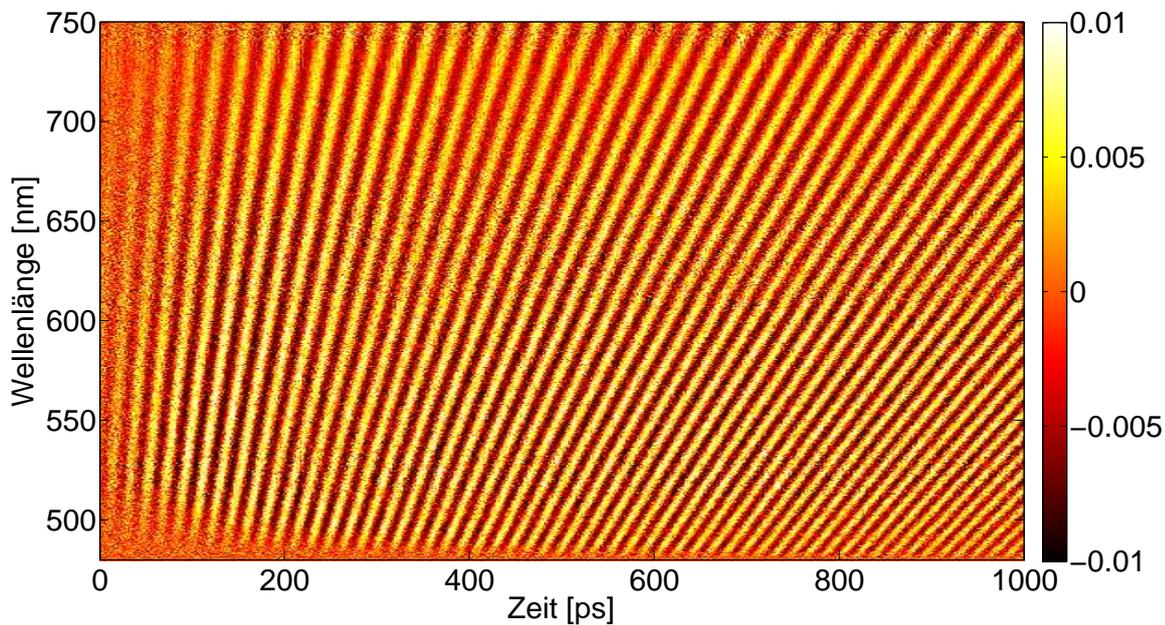


Abbildung 5.4: Darstellung des Messsignals für eine probe-Wellenlänge von 480 - 750 nm. Die Fluenz des pump-Pulses betrug  $5 \text{ mJ/cm}^2$ . Die Oszillations-Periode  $\tau$  ist, wie erwartet, direkt proportional zur probe-Wellenlänge  $\lambda$ , siehe dazu Gleichung (5.4). In dieser Abbildung wurde die Reflektionsänderung des angeregten Transducers subtrahiert, sodass das hier dargestellte Messsignal mit dem zweiten Summand der Gleichung (5.2) beschrieben werden kann.

Hierbei wurde der Brechungsindex von DSO in der Arbeitsgruppe Bargheer

mit Hilfe eines Ellipsometers zu

$$n(\lambda) = 1,997 + \frac{16350}{(\lambda \cdot z)^2} + \frac{0,5949}{(\lambda \cdot z)^4} \quad (5.12)$$

bestimmt, wobei  $z = 10^9 \text{ m}^{-1}$  ist. Der Winkel<sup>10</sup>  $\theta(\lambda)$  wurde mit Hilfe des Brechungsgesetzes ermittelt. Die hier gemessene Schallgeschwindigkeit ist im Einklang mit dem von Janovska *et al.* gemessenen Wert [46].

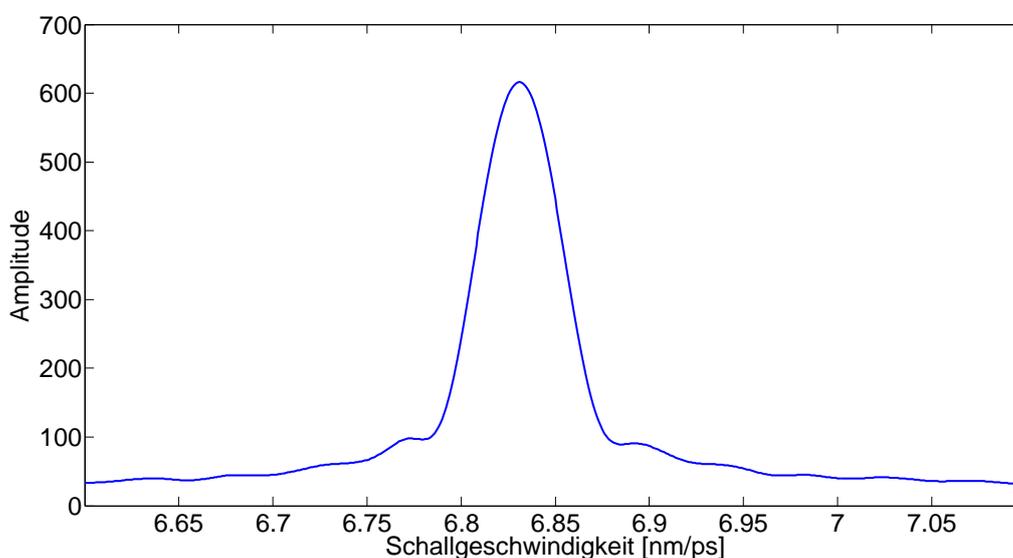


Abbildung 5.5: Berechnung der Schallgeschwindigkeit in DSO. Hierfür wurde aus den Messergebnissen, siehe Abbildung 5.4, für jede probe-Wellenlänge  $\lambda$  die Periodendauer  $\tau$  bestimmt. Die Schallgeschwindigkeit konnte somit über die Gleichung (5.11) ermittelt werden.

Dem hinzuzufügen betrachten wir nun das Messsignal für eine Fluenz von  $F = 20 \text{ mJ/cm}^2$ , siehe Abbildung 5.6. Hierbei ist zu erkennen, dass die Oszillations-Amplitude ein Minimum aufweist, dessen Zeitpunkt von der probe-Wellenlänge  $\lambda$  abhängt. Dieses ist beispielsweise für die probe-Wellenlänge  $\lambda = 550 \text{ nm}$  bei  $2000 \text{ ps}$  zu beobachten.

<sup>10</sup> Der Winkel zwischen der Propagationsrichtung des probe-Pulses und der Oberfläche des Substrats betrug  $\alpha_{probe} = 45^\circ$ . Daraus berechnete sich der Winkel  $\theta(\lambda)$  über das Snelliussches Gesetz  $\frac{\sin(\alpha_{probe})}{\sin(90^\circ - \theta(\lambda))} = n(\lambda)$ .

Dieser hier auftretende Effekt kann wie folgt erklärt werden: Wie in der Simulation des Dehnungsprofils, siehe Abbildung 4.1, erkennbar ist, verändert sich das Dehnungsprofil mit zunehmender Zeit. Der Grund hierfür ist sowohl die Dispersion als auch die nicht lineare Wechselwirkung zwischen den Gitteratomen. Zu einem bestimmten Zeitpunkt interferiert nun der am Dehnungsprofil reflektierte probe-Puls destruktiv. Daher reflektiert in diesem Fall das Dehnungsprofil kein Licht einer bestimmten Wellenlänge  $\lambda$  [12].

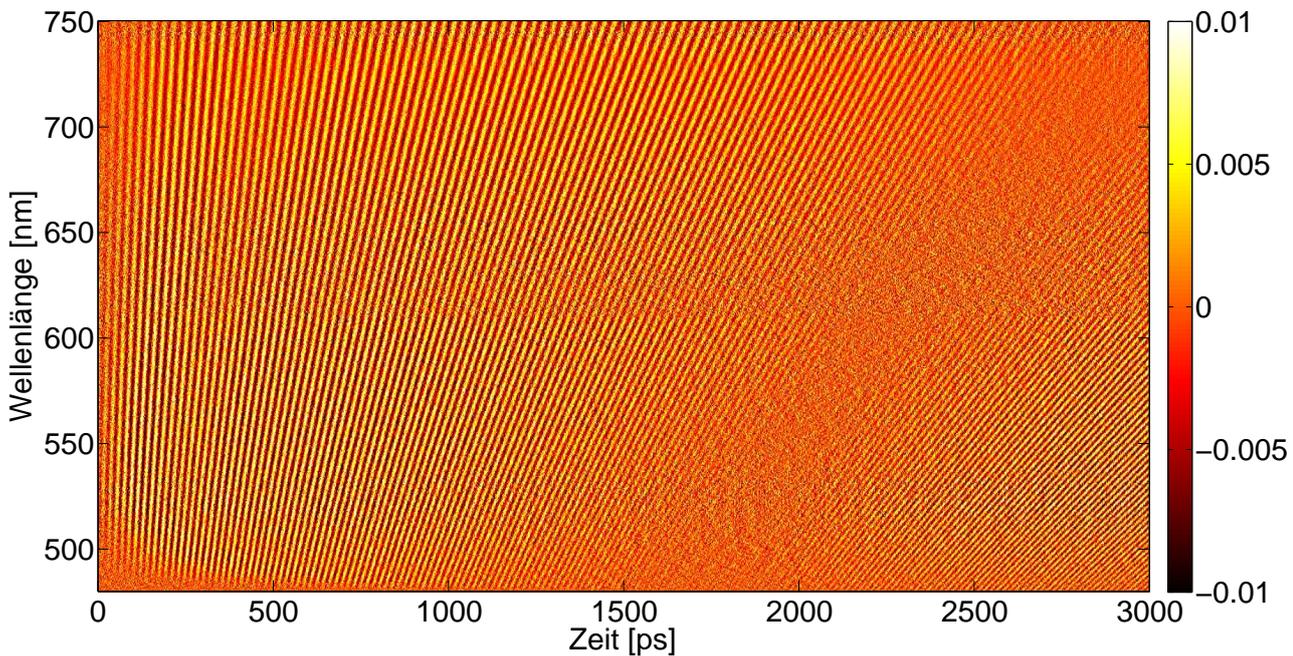


Abbildung 5.6: Darstellung des Messsignals für eine probe-Wellenlänge von 480 – 750 nm. Die Fluenz des pump-Pulses betrug  $20 \text{ mJ/cm}^2$ . Hierbei ist ein von der Wellenlänge abhängiges Minimum der Oszillations-Amplitude zu erkennen. In dieser Abbildung wurde die Reflektionsänderung des angeregten Transducers subtrahiert, sodass das hier dargestellte Messsignal mit dem zweiten Summand der Gleichung (5.2) beschrieben werden kann.

Wie bereits erwähnt, ist unter anderem die nicht lineare Wechselwirkung zwischen den Gitteratomen dafür verantwortlich, dass sich die kompressive und expansive Dehnung des Dehnungsprofils mit zunehmender Zeit voneinander entfernen. Diese ist auch bei der Berechnung der Schallgeschwindigkeit der Daten aus Abbildung 5.6 erkennbar. Demzufolge sind der Abbildung 5.7 auch zwei Peaks erkennbar.

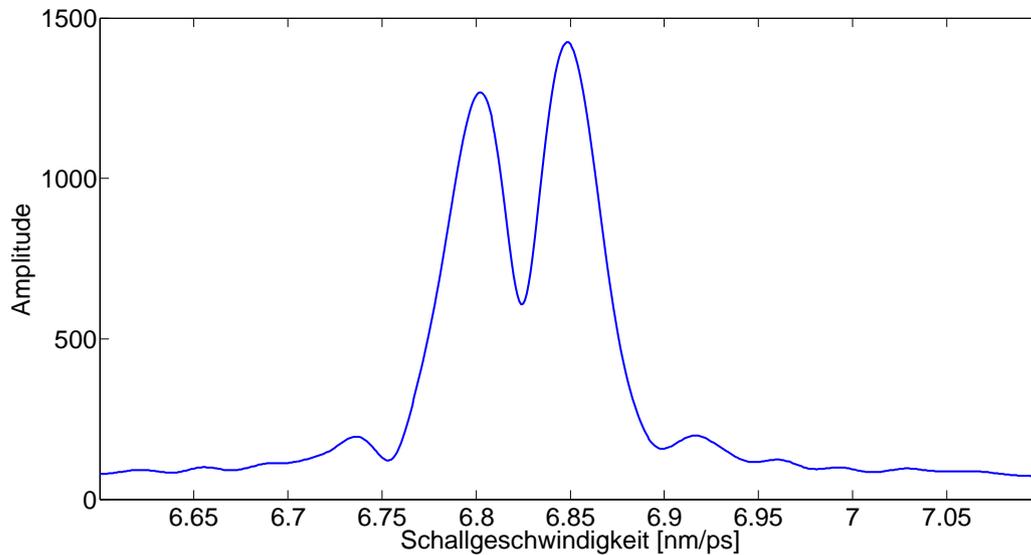


Abbildung 5.7: Berechnung der Schallgeschwindigkeit in DSO. Hierfür wurde aus den Messergebnissen, siehe Abbildung 5.4, für jede probe-Wellenlänge  $\lambda$  die Periodendauer  $\tau$  bestimmt. Die Schallgeschwindigkeit konnte somit über die Gleichung (5.11) ermittelt werden. Die Ursache für das Auftreten von zwei Peaks ist Geschwindigkeitsdifferenz zwischen der kompressiven und expansiven Dehnung des Dehnungsprofils. Unterschiedlichen Geschwindigkeit

Wählt man nun für die Fluenz  $F = 5 \text{ mJ/cm}^2$ , was eine kleinere Amplitude der Anfangsdehnung impliziert, so erwartet man, dass das Minimum der Oszillations-Amplitude zu einem späteren Zeitpunkt erfolgt, bzw. in dem hier dargestellten Zeitintervall überhaupt nicht mehr ersichtlich ist, siehe Abbildung 5.8.

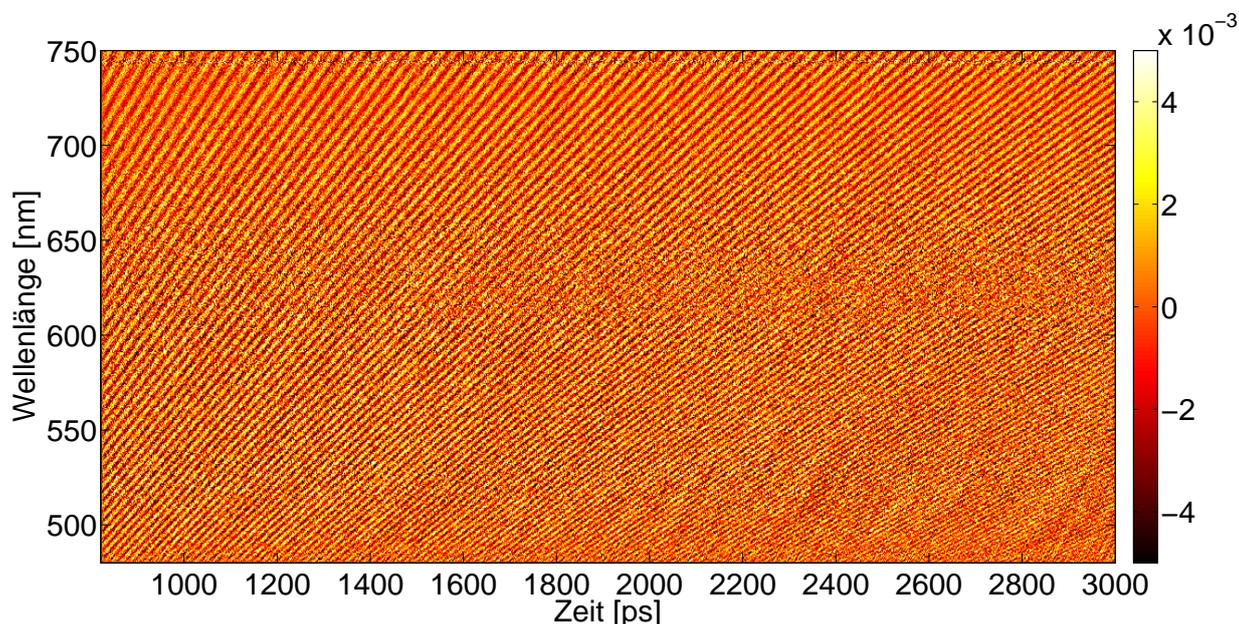


Abbildung 5.8: Darstellung des Messsignals für eine probe-Wellenlänge von 480 - 750 nm. Die Fluenz des pump-Pulses betrug  $5 \text{ mJ/cm}^2$ . Ein Minimum der Oszillations-Amplitude ist nicht zu erkennen, vgl. Abbildung 5.6. In dieser Abbildung wurde die Reflektionsänderung des angeregten Transducers subtrahiert, sodass das hier dargestellte Messsignal mit dem zweiten Summand der Gleichung (5.2) beschrieben werden kann.

### 5.3.1 Vergleich der Simulation mit den Messdaten

Ein quantitativer Vergleich der Messdaten mit einer Simulation, siehe Kapitel 4.1 und 4.2, kann über die Berechnung der Fourier-Amplitude  $A(q, t)$  vollzogen werden.

Mit Hilfe der folgenden Transformation kann aus dem in der Simulation errechnete Dehnungsprofil  $\eta(x, t)$  direkt die Fourier-Amplitude bestimmt werden:

$$A(q, t) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x, t) e^{-iqx} dx \right|. \quad (5.13)$$

Für die Bestimmung der Fourier-Amplitude des Dehnungsprofils aus den Messdaten setzen wir voraus, dass die mit jeder probe-Wellenlänge detektierte Oszillationsamplitude ein Maß für die dazugehörige Fourier-Amplitude ist. Multiplizieren wir die Oszillationsamplitude mit der dazugehörigen probe-

Wellenlänge  $\lambda$ , so kann diese direkt mit der Fourier-Amplitude des Dehnungsprofils verglichen werden [65, 66].

Um nun aus den Messdaten die Oszillationsamplitude zu ermitteln, werden wir die zeitdiskrete Kurzzeit-Fourier-Transformation anwenden. Mit dieser Transformation ist es möglich, jeder in einem Signal  $x(t_1)$  enthaltene Frequenzkomponente einen Zeitpunkt und eine Amplitude zuzuordnen. Dies wird realisiert, indem bei einer diskreten Fourier-Transformation das Signal  $x(t_1)$  mit einer Fensterfunktion<sup>11</sup>  $w(t - t_1)$  multipliziert wird. Für die Anwendung einer zeitdiskreten Kurzzeit-Fourier-Transformation verwenden wir anschließend die Notation:

$$X(t, \omega) = \mathbf{KFT}(x(t_1), t_1 \rightarrow t). \quad (5.14)$$

Für die Frequenzamplitude  $A'$  gilt schließlich  $A'(t, \omega) = |X(t, \omega)|$ .

Die Oszillations-Amplitude  $A'(q, t)$  kann nun wie folgt<sup>12</sup> berechnet werden:

$$A'(q, t) = \sum_{\omega} \left| \mathbf{KFT} \left( \frac{R - R_0}{R_0}(q, t_1), t_1 \rightarrow t \right) \right| \quad (5.15)$$

und ist in Abbildung 5.9 dargestellt.

---

<sup>11</sup> Hierbei wurde das Kosinusfenster verwendet.

<sup>12</sup> Die hier verwendete Größe  $\frac{R-R_0}{R_0}(q, t_1)$  kann direkt aus dem Messsignal  $\frac{R-R_0}{R_0}(\lambda, t_1)$  über die Gleichung (5.9) ermittelt werden.

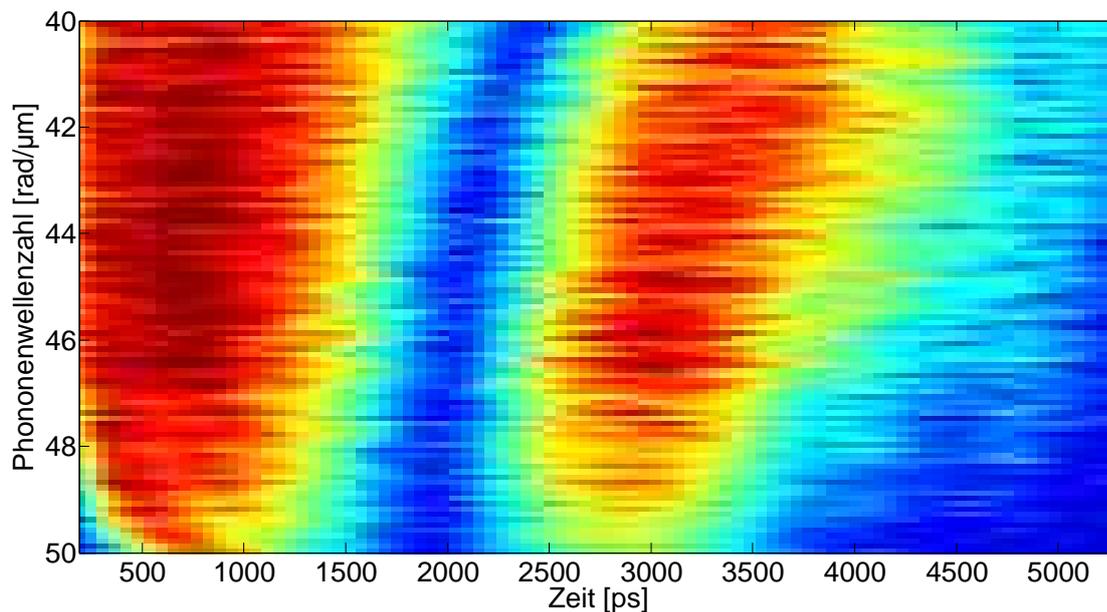


Abbildung 5.9: Darstellung der Oszillations-Amplitude, welche mit einer Kurzzeit-Fourier-Transformation aus dem Messsignals  $\frac{R-R_0}{R_0}$  ermittelt wurde, siehe Gleichung (5.15). Die Fluenz des pump-Pulses betrug  $20 \text{ mJ/cm}^2$ .

Zum Vergleich ist nun die auf die probe-Wellenlänge normierte Fourier-Amplitude in der Abbildung 5.10 dargestellt. Das für die Berechnung der Fourier-Amplitude zugrunde liegende Dehnungsprofil  $\eta(x, t)$  wurde numerisch mit Hilfe der Kortwegde-Vries-Gleichung bestimmt. Die hierfür notwendigen Parameter können dem Kapitel 4 entnommen werden. Aufgrund der Tatsache, dass die nicht lineare elastische Konstante  $C_3$  für DSO nicht in der Literatur aufgeführt ist, konnte dieser Wert mit einem Vergleich von  $A'(q, t)$  und  $A(q, t) \cdot \lambda$  bestimmt werden. Die nicht lineare elastische Konstante  $C_3$  wurde folglich zu  $C_3 = -2,4 \cdot 10^{12} \frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}$  ermittelt.

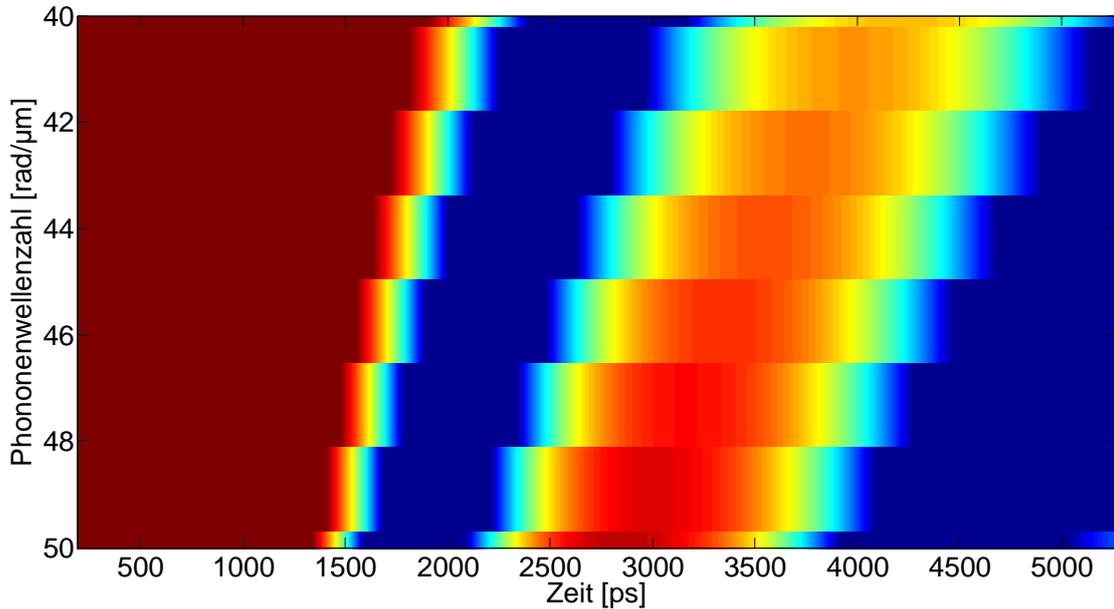


Abbildung 5.10: Darstellung der auf die probe-Wellenlänge normierten Fourier-Amplitude. Hierzu wurde das Dehnungsprofil  $\eta(x, t)$  mit Hilfe einer Simulation der Korteweg-de-Vries-Gleichung ermittelt. Die Berechnung der Fourier-Amplitude erfolgte über die Gleichung (5.13).

Mit einem Vergleich von Abbildung 5.9 und 5.10 lässt sich feststellen, dass, bei einer Wahl für die nicht lineare Konstante von  $C_3 = -2,4 \cdot 10^{12} \frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}$ , die Theorie zur Beschreibung einer Hyperschallwelle mit den experimentellen Daten konform ist. Alternativ wird diese Übereinstimmung mit der Abbildung 5.11 verdeutlicht. Für die Berechnung der Fourier-Amplitude, siehe Abbildung 5.10, wurde die akustische Dämpfung in Dysprosium-Scandat vernachlässigt. Die hohe Übereinstimmung dieser Simulation mit der Abbildung 5.9 ist bereits ein Indiz für eine sehr geringe akustische Dämpfung in Dysprosium-Scandat. Wählt man daher für die akustische Dämpfung einen Wert, sodass keine Solitonen entstehen, dann stimmen  $A'(q, t)$  und  $A(q, t) \cdot \lambda$  unzureichend überein.

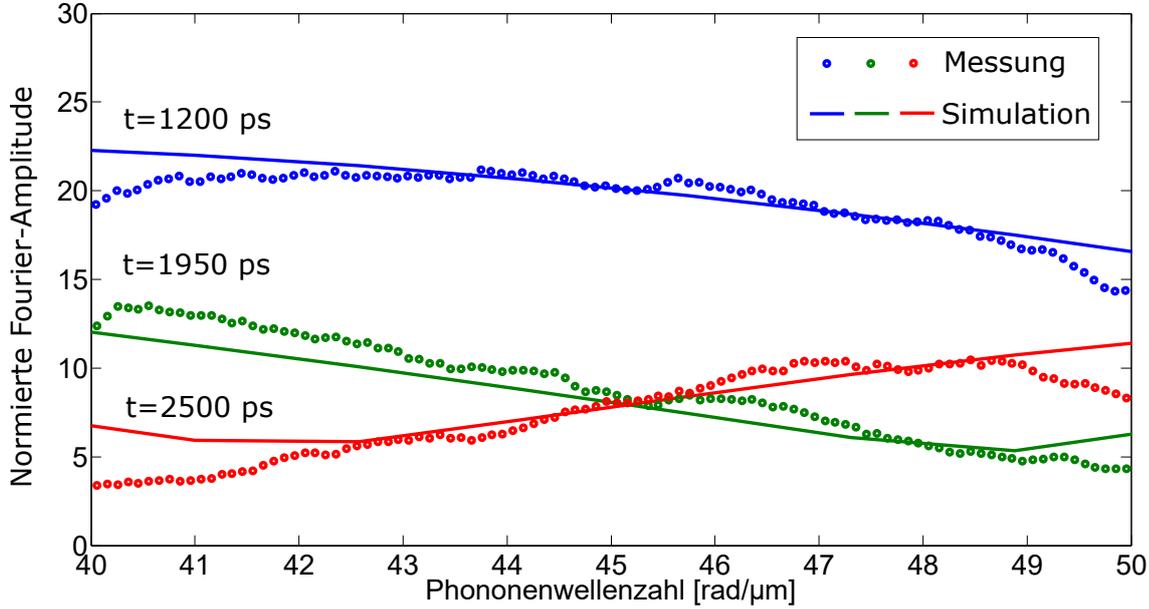


Abbildung 5.11: Darstellung der auf die probe-Wellenlänge normierten Fourier-Amplitude für verschiedene Zeitpunkte. Hierzu wurde das Dehnungsprofil  $\eta(x, t)$  mit Hilfe einer Simulation der Korteweg-de-Vries-Gleichung ermittelt. Die Berechnung der Fourier-Amplitude erfolgte über die Gleichung (5.13). Die hier dargestellten Messpunkte wurden mit der Gleichung (5.9) bestimmt. Der Grund für die nicht perfekte Übereinstimmung liegt im Wesentlichen an der Vielzahl von Annahmen, welche notwendig waren, um die Dynamik einer Hyperschallwelle mit Hilfe der Korteweg-de-Vries-Gleichung zu beschreiben.

### 5.3.2 Detektion von Solitonen in Dysprosium-Scandat

Wenn man nun speziell Solitonen in DSO detektieren möchte, so kann man davon ausgehen, dass mit dem Verfahren zur Berechnung der Schallgeschwindigkeit in DSO ebenfalls die Geschwindigkeiten der Solitonen in Erscheinung treten sollten, siehe Abbildung 5.5. Das dies nicht der Fall ist, kann über die Peak-Breite der berechneten Daten  $A(c)$  abgeschätzt werden. Demnach gilt für die Frequenzbreite  $\Delta f$  folgende Gleichung:

$$T \cdot \Delta f = 1, \quad (5.16)$$

wobei hier  $T$  die Messdauer bezeichnet [67]. Für die Peak-Breite  $\Delta c$  gilt aufgrund von Gleichung 5.11 somit:

$$\Delta c = \frac{\lambda}{2Tn \sin(\theta)}. \quad (5.17)$$

Nimmt man nun für die Messzeit  $T = 8$  ns bei einer probe-Wellenlänge von  $\lambda = 650$  nm an, so berechnet sich die Peak-Breite zu  $\Delta c = 33 \cdot 10^{-3}$  nm/ps. Berechnet man die Geschwindigkeits-Differenz der Solitonen  $\Delta c_{Sol}$  aus einer Simulation der Korteweg-de-Vries-Burgers-Gleichung, siehe Abbildung (4.2), so ergibt diese  $\Delta c_{Sol} = 6,1 \cdot 10^{-3}$  nm/ps, bei einer Fluenz von  $F = 20 \frac{\text{mJ}}{\text{cm}^2}$ . Demnach ist es nicht möglich, die Solitonen mit Hilfe der diskreten Kurzzeit-Fourier-Transformation, unter den hier angegebenen Parametern, aufzulösen. Alternativ könnte die Messzeit  $T$  um ein Vielfaches vergrößert werden, wobei man aber voraussetzen muss, dass die akustische Dämpfung in DSO vernachlässigt werden kann.

Dass es ausgeschlossen ist, die Solitonen mit dem hier beschriebenen Experiment und der dazugehörigen Probe I zu messen, wird von der Abbildung 5.12 unterstrichen. Demzufolge lässt sich der Abstand zwischen zwei Solitonen mit  $\approx 80$  nm nach 8 ns abschätzen, wobei hier  $F = 20 \text{ mJ/cm}^2$  gewählt wurde. Mit der Bragg-Gleichung lässt sich nun die minimale Distanz  $d_{min}$  berechnen, welche mit Licht der Wellenlänge  $\lambda$  aufgelöst werden kann:

$$d_{min} = \frac{\lambda}{2n \sin(\theta)} = 159 \text{ nm}, \quad (5.18)$$

für  $\lambda = 650$  nm,  $n = 2,16$  und  $\theta = 70,9^\circ$ . Demnach ist der Abstand der Solitonen zu gering, als dass sie mit der hier verwendeten probe-Wellenlänge aufgelöst werden können.

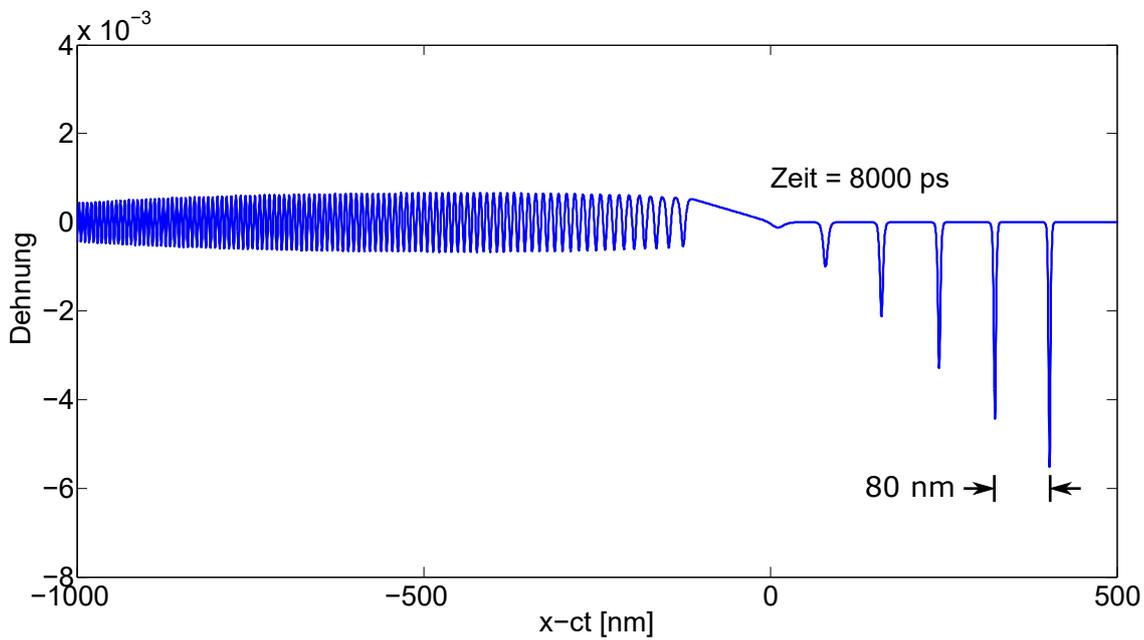


Abbildung 5.12: Darstellung des Dehnungsprofils nach 8000 ps, welches mit der Kortweg-de-Vries-Gleichung numerisch berechnet wurde. Die Fluenz des pump-Pulses wurde mit  $20 \text{ mJ/cm}^2$  angenommen. Demzufolge lässt sich der Abstand zwischen zwei Solitonen mit  $\approx 80 \text{ nm}$  abschätzen.

## 5.4 Aufbau des Experiments und Auswertung der Messergebnisse für die Galliumarsenid-Probe

In diesem Kapitel werden die Messergebnisse der Probe II, welche aus einem Al-Transducer und GaAs/AlAs/GaAs-Substrat besteht, dargestellt. Sowohl der Aufbau dieser Probe als auch die physikalischen Eigenschaften der hier verwendeten Materialien wurden im Kapitel 3.6.2 erläutert.

Aufgrund der Tatsache, dass die Bandlücke von GaAs sich bei 1,42 eV befindet, ist diese Verbindung nur für Licht der Wellenlänge  $\lambda > 873$  nm transparent. Demzufolge scheint es unmöglich, die Hyperschallwelle, wie bei der Probe II, nur wenige Nanosekunden nach deren Erzeugung mit Licht der Wellenlänge  $480 \text{ nm} < \lambda < 780 \text{ nm}$  zu detektieren. Beispielsweise beträgt die Eindringtiefe von GaAs nur 290 nm für Licht der Wellenlänge  $\lambda = 650 \text{ nm}$  [68].

Um nun die Hyperschallwelle trotz dessen mit dem im Saphir erzeugten Superkontinuum zu detektieren, ist es notwendig, den zeitlichen Abstand zwischen den pump- und probe-Puls so zu vergrößern, bis die Hyperschallwelle die Rückseite der Probe II erreicht. Diese Möglichkeit besteht durchaus, da die akustische Dämpfung in GaAs vernachlässigt werden kann. Der Zeitversatz beträgt somit 78 ns. Demnach muss die Propagationsstrecke der probe-Pulse 23,4 m länger sein als die der pump-Pulse. Der mit Hilfe von zwei parallelen Spiegeln realisierte Zeitversatz wurde mit einer Photodiode vermessen.

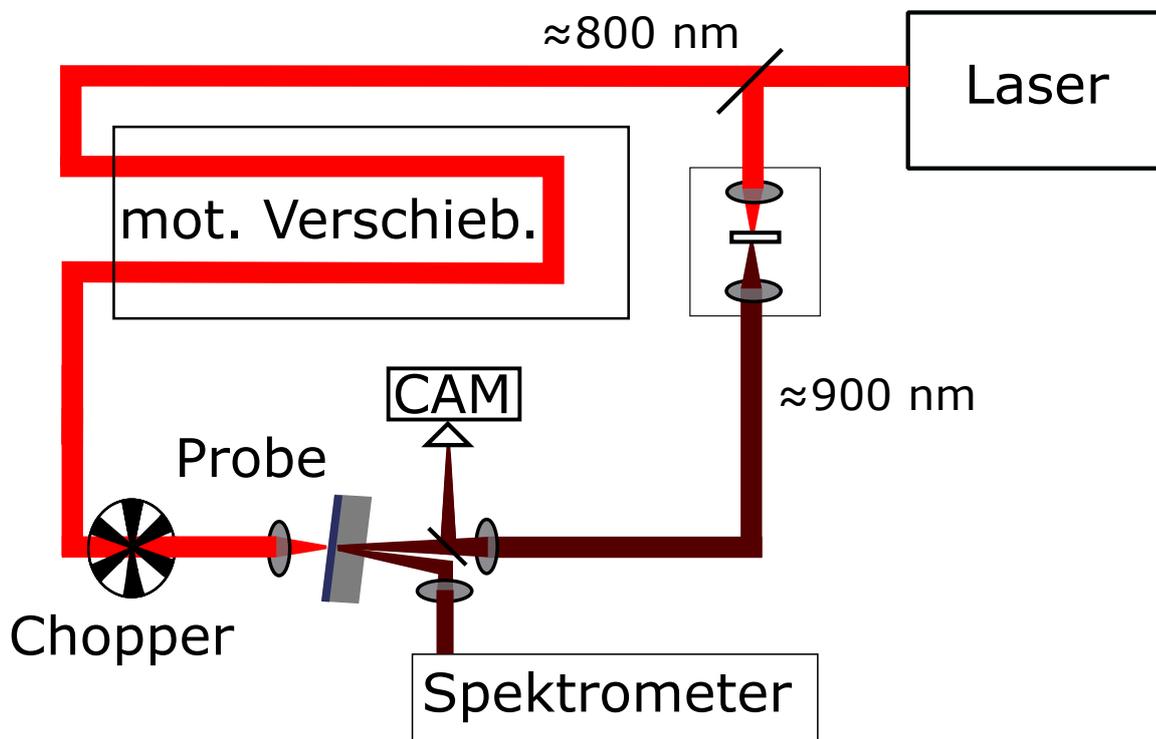


Abbildung 5.13: Aufbau des pump-probe- Experiments zur Ermittlung des räumlichen Überlapps zwischen den pump- und probe-Puls. Hierfür wurde Licht mit einer Wellenlänge von  $\lambda = 900 \text{ nm}$  im Saphire-Kristall generiert. Die Position der pump-Pulse auf dem Transducer der Probe II wurde über das maximale Messsignal  $\left| \frac{R-R_0}{R_0} \right|$  ermittelt. Die Position der probe-Pulse auf der Rückseite der Probe II wurde mit Hilfe einer Kamera (CAM) registriert.

Um zu gewährleisten, dass der probe-Puls auf die Stelle der Probe fokussiert ist, an der die Hyperschallwelle die Rückseite der Probe erreicht, gingen wir wie folgt vor: Als Erstes wurde die Probe so positioniert, dass die Propagationsrichtung des probe-Pulses fast orthogonal zur Probenoberfläche ist. Dann wurde der probe auf die Weise auf den Saphir-Kristall fokussiert, dass er infrarotes Licht generiert<sup>13</sup>, wobei der Zeitversatz zwischen dem pump- und probe-Puls so eingestellt wurde, dass diese gleichzeitig die Probe erreichen. Die Position des pump-Pulses auf der Probe wurde nun so eingestellt, bis das Messsignal  $\left| \frac{R-R_0}{R_0} \right|$  maximal war. Dieses Messsignal beschreibt die Reflektionsänderung des

<sup>13</sup> Bei einer geeigneten Wahl von Strahl-Durchmesser, Intensität und Position des Fokusses im Saphir-Kristall, kann infrarotes Licht  $\lambda \approx 900 \text{ nm}$  generieren werden [69].

angeregten Transducer aufgrund seiner Temperaturänderung. Demnach ist sichergestellt, dass sich probe- und der pump-Puls räumlich überlappen, woraufhin die Position der probe-Pulse auf der Probe mit einer Kamera registriert wurde, siehe dazu Abbildung 5.13.

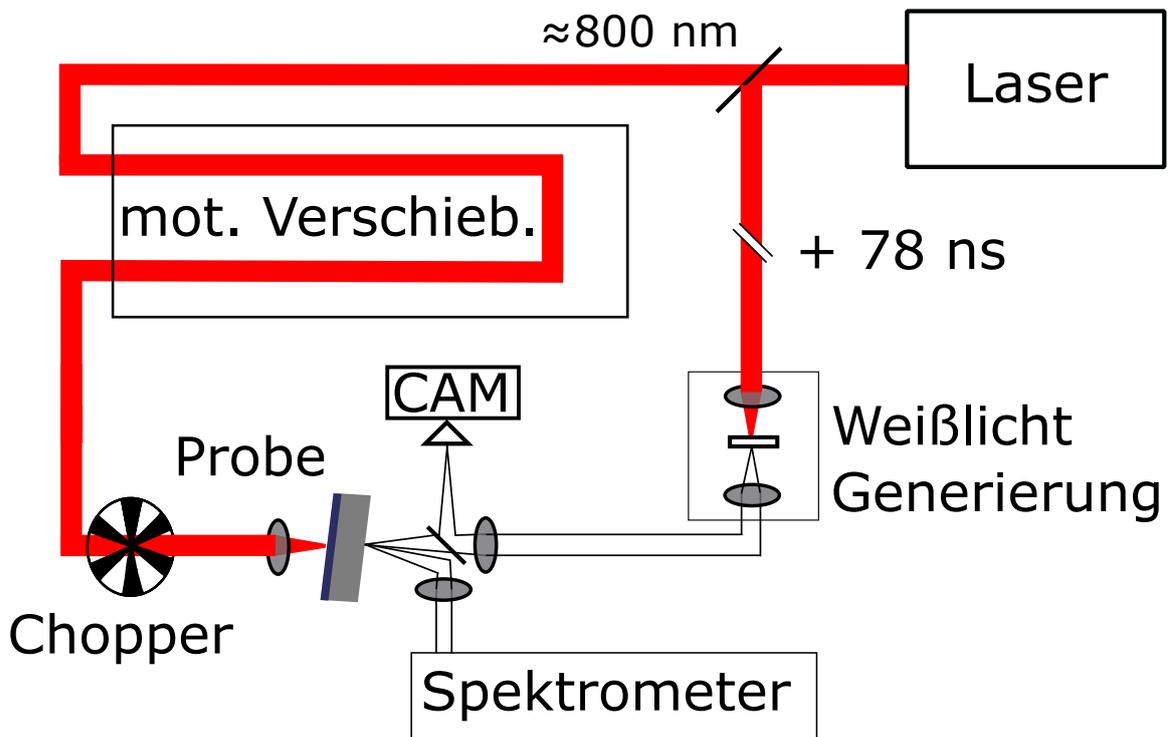


Abbildung 5.14: Aufbau des pump- probe-Experiments zur Messung der Hyperschallwelle in der Probe II, nachdem diese ein Strecke von  $372 \mu\text{m}$  zurückgelegt hatte. Die Position des probe-Pulses wurde mit Hilfe der Kamera justiert, siehe Abbildung dazu 5.13

Danach wurde nun der Zeitversatz zwischen dem pump- und probe-Puls auf 78 ns eingestellt und der probe-Puls wurde so auf den Saphir-Kristall fokussiert, dass er Weißlicht generiert. Die Position der probe-Pulse auf der Probe konnte nun mit Hilfe der Kamera exakt wie im vorherigen Aufbau eingestellt werden. Somit ist sichergestellt, dass der probe-Puls auf die Stelle fokussiert ist, an der die Hyperschallwelle die Rückseite der Probe erreicht, siehe Abbildung 5.14.

Das mit diesem Setup erhaltende Messsignal ist in der Abbildung 5.15 dargestellt. Bezeichnen wir die Zeitskala hier mit  $t - t_{ges}$ , so ist eines Oszillation auf dem Intervall  $-100 \text{ ps} < t - t_{ges} < 100 \text{ ps}$  zu erkennen, welches als TDBS

gedeutete werden kann. Ergänzend dazu ist ebenfalls eine Oszillation mit der Periodendauer  $\approx 200$  ps zu erkennen, welche wir mit OSZ1 bezeichnen.

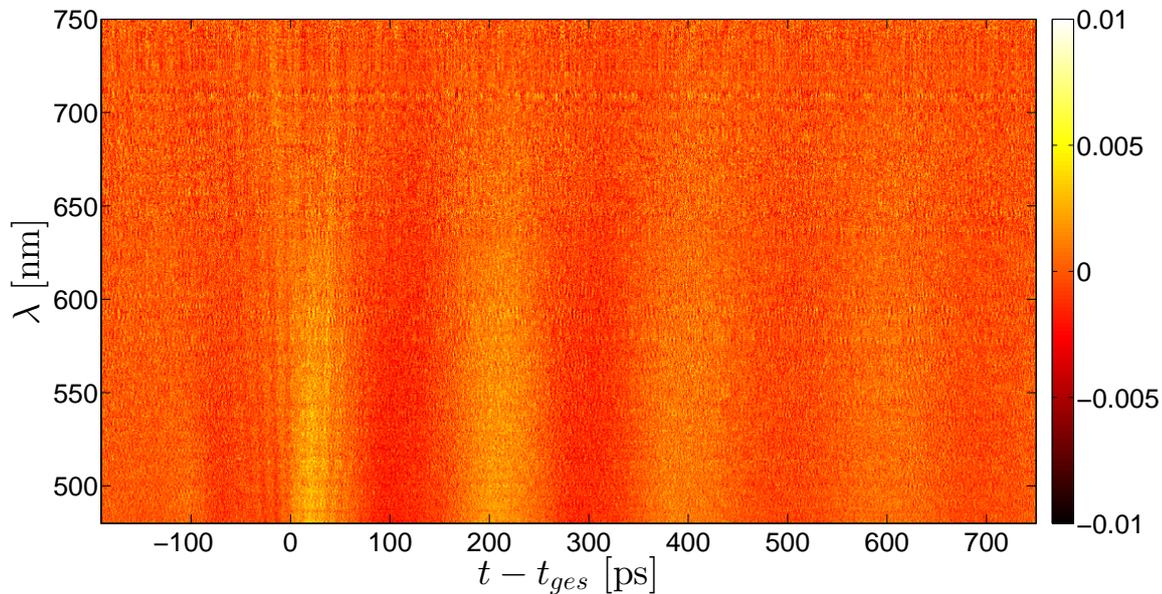


Abbildung 5.15: Darstellung des Messsignals für eine probe-Wellenlänge von 480 – 750 nm. Die Fluenz der pump-Pulse betrug  $10 \text{ mJ/cm}^2$ . Hierbei ist eine Oszillation auf der hier abgetragenen Zeitskala in dem Intervall  $-100 \text{ ps} < t - t_{ges} < 100 \text{ ps}$  zu erkennen, welche auf die Reflexion eines Dehnungsprofils rückschließen lässt. Zusätzlich ist ebenfalls eine Oszillation mit der Periodendauer  $\approx 200$  ps zu erkennen.

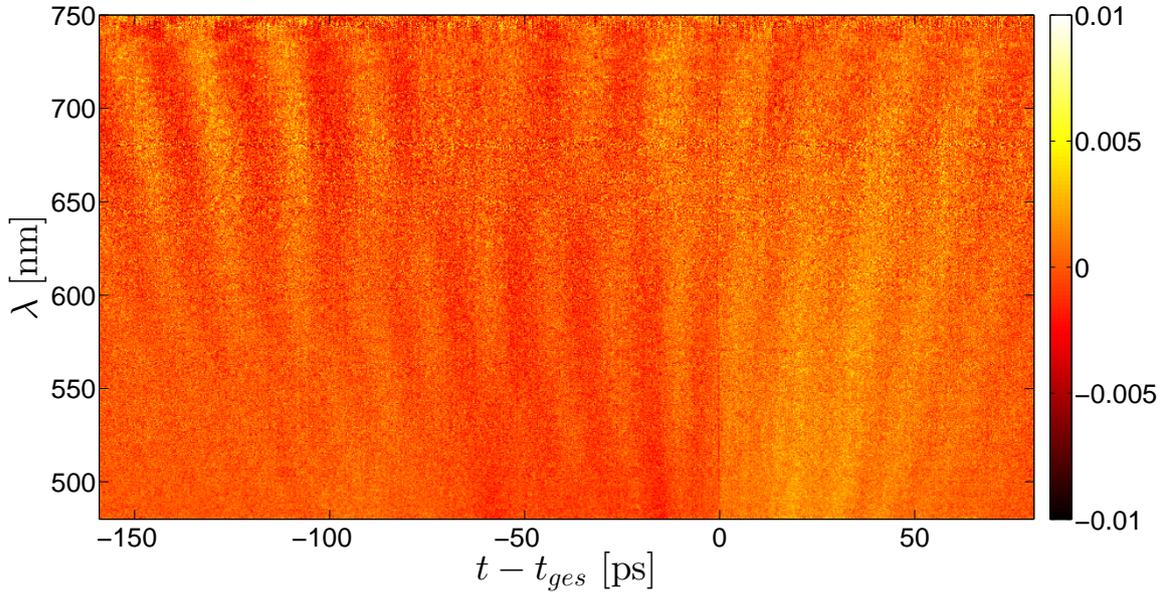


Abbildung 5.16: Darstellung des Messsignals für eine probe-Wellenlänge von 480 – 750 nm. Die Fluenz des pump-Pulses betrug  $10 \text{ mJ/cm}^2$ . Hierbei ist das TDBS Signal zu erkennen, welche auf die Reflexion eines Dehnungsprofils rückschließen lässt, siehe Gleichung (5.20).

Das bereits erwähnte TDBS ist ebenfalls in der Abbildung 5.16 dargestellt und kann wie folgt erklärt werden: Aufgrund der verwendeten Probe wird hier der probe-Puls nicht an der Grenzfläche Transducer/Substrat reflektiert, wie es bei der Messung an der Probe II der Fall war, siehe Abbildung 5.1. Im Gegensatz dazu resultiert die hier beobachtete TDBS aufgrund der Reflexion des probe-Pulses an der Hyperschallwelle und der Grenzfläche Substrat/Luft, siehe Abbildung 5.17.

Demzufolge gilt für die Distanz  $s$  in der Gleichung (5.3):

$$s(t) = \begin{cases} s_0 - ct & (t < s_0/c) \\ ct & (t > s_0/c), \end{cases} \quad (5.19)$$

wobei  $s_0 = 372 \mu\text{m}$  ist. Hieraus lässt sich nun eine Funktion  $\lambda(t)$  für den Fall ableiten, falls die in der Abbildung 5.17 eingezeichneten reflektierenden

Strahlen konstruktiv interferieren:

$$\lambda(t) = \begin{cases} -\frac{2nc}{m}t + \frac{2ns_0}{m} & (t < s_0/c) \\ +\frac{2nc}{m}t & (t > s_0/c). \end{cases} \quad (5.20)$$

Die Gleichung (5.20) ist somit im Einklang mit der in Abbildung 5.16 beobachteten TDBS.

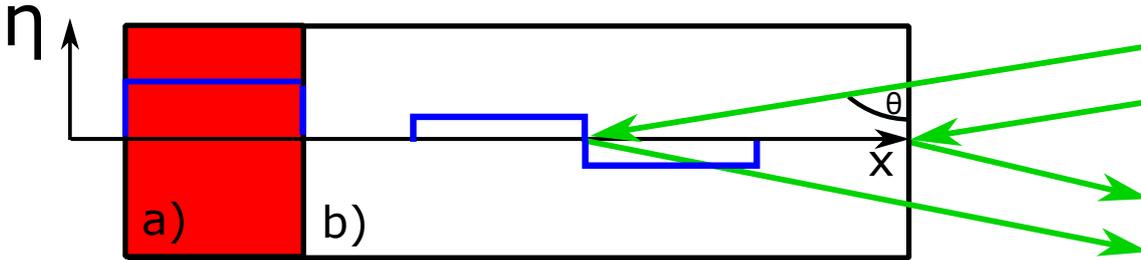


Abbildung 5.17: Detektion einer Schallwelle mit einem Laserpuls, welcher hier grün gekennzeichnet ist. Die Dehnung  $\eta(x, t)$  ist hier blau eingezeichnet, wobei dieser nur für  $\eta \neq 0$  dargestellt ist. Der Transducer (rot) wurde mit a) und das Substrat mit b) gekennzeichnet, vgl. Abbildung 3.2. Es findet sowohl eine Reflexion am Dehnungsprofil, als auch an der Grenzfläche Substrat/Luft statt. Weitere Reflexionen wurden hier vernachlässigt.

Betrachten wir nun die relative Reflektionsänderung der Probe für eine pump-Fluenz von  $6,5 \text{ mJ/cm}^2$ , siehe Abbildung 5.18, kann man feststellen, dass die Oszillationsperiode der Oszillation OSZ1 hier in etwa  $250 \text{ ps}$  beträgt. Weil in der Abbildung 5.18, im Vergleich zur Abbildung 5.15, nur die Fluenz verändert wurde, handelt sich dabei vermutlich um eine nicht lineare Schwingung der Oberfläche der Probenrückseite.

Zusätzlich lässt sich hier ein periodisches Signal mit einem zeitlichen Abstand von etwa  $\approx 80 \text{ ps}$  in dem Intervall  $500 \text{ nm} < \lambda < 570 \text{ nm}$  beobachten. Wird dieses Signal mit der Ankunftszeit der Solitonen auf der Rückseite der Probe verglichen, so stellt man fest, dass diese sehr gut übereinstimmen, siehe Abbildung 5.19. Hierbei bezeichnet  $\eta_A(x_{ges}, t)$  die Ankunftszeit des Dehnungsprofils nach einer Strecke von  $x_{ges} = 372 \text{ nm}$ . Das Messsignal  $\frac{(R-R_0)}{R_0}(\lambda, t)$  wurde dazu über das Intervall  $500 \text{ nm} < \lambda < 570 \text{ nm}$  gemittelt und mit  $\left(\frac{(R-R_0)}{R_0}\right)$  bezeichnet. Die Zeit  $t_{ges}$  wurde so gewählt, dass die Zeitachse auf das schnellste Soliton zentriert ist.

Die Detektion der Solitonen erfolgt hier in der AlAs - Schicht, in der sich jedes Soliton etwa 20 ps aufhält, bis es in der 10 nm GaAs - Schicht reflektiert wird. Diese Zeit entspricht somit ebenfalls der Halbwertsbreite eines Peaks.

Die Ursache dafür, dass die Solitonen nicht bei einer Fluenz des pump-Pulses von  $10 \text{ mJ/cm}^2$  detektiert wurden, siehe Abbildung 5.15, liegt vermutlich an der größeren Oszillations-Amplitude der Oszillation OSZ1. Somit wurde das Signal, welches in der Abbildung 5.18 charakteristisch für die Solitonen ist, unterdrückt.

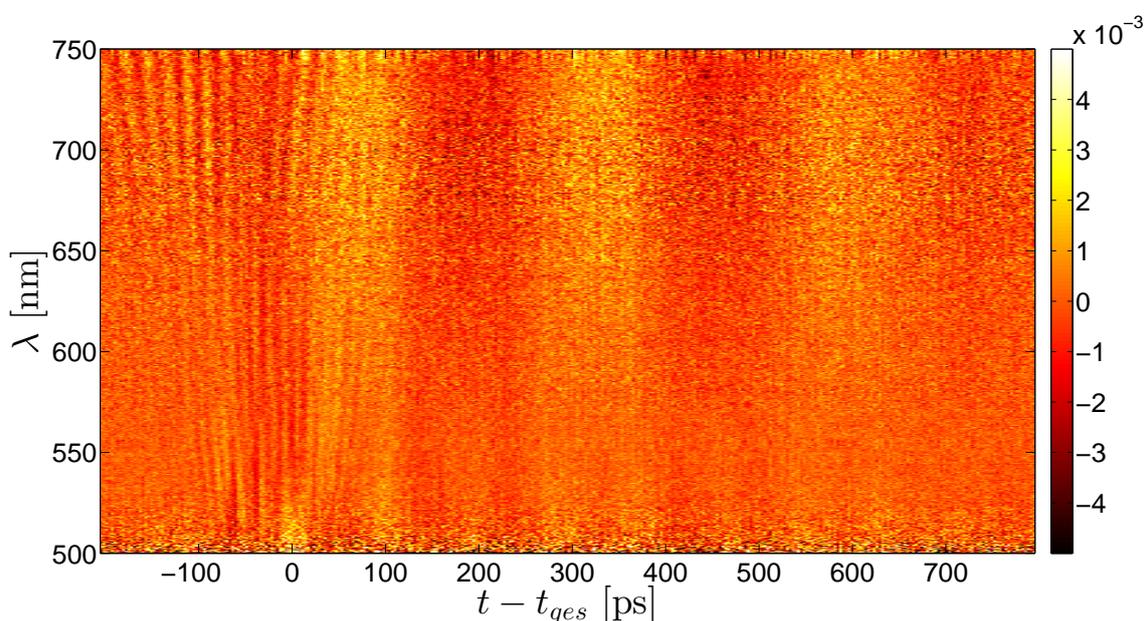


Abbildung 5.18: Darstellung des Messsignals für eine probe-Wellenlänge von 500 – 750 nm. Die Fluenz des pump-Pulses betrug  $6,5 \text{ mJ/cm}^2$ . Hierbei ist das TDBS Signal auf der hier abgetragenen Zeitskala in dem Intervall  $-100 \text{ ps} < t - t_{ges} < 100 \text{ ps}$  zu erkennen, welche auf die Reflexion eines Solitons schließen lässt. Dem hinzuzufügen ist ebenfalls die Oszillation OSZ1 zu erkennen, wobei die Oszillationsperiode bei dieser Messung  $\approx 250 \text{ ps}$  beträgt. Zusätzlich kann ein weiteres periodisches Signal mit der Periodendauer  $\approx 80 \text{ ps}$  in dem Intervall  $500 \text{ nm} < \lambda < 550 \text{ nm}$  beobachtet werden, wobei es sich um die Solitonen handelt. Die Zeitachse wurde hierbei auf das schnellste Soliton zentriert.

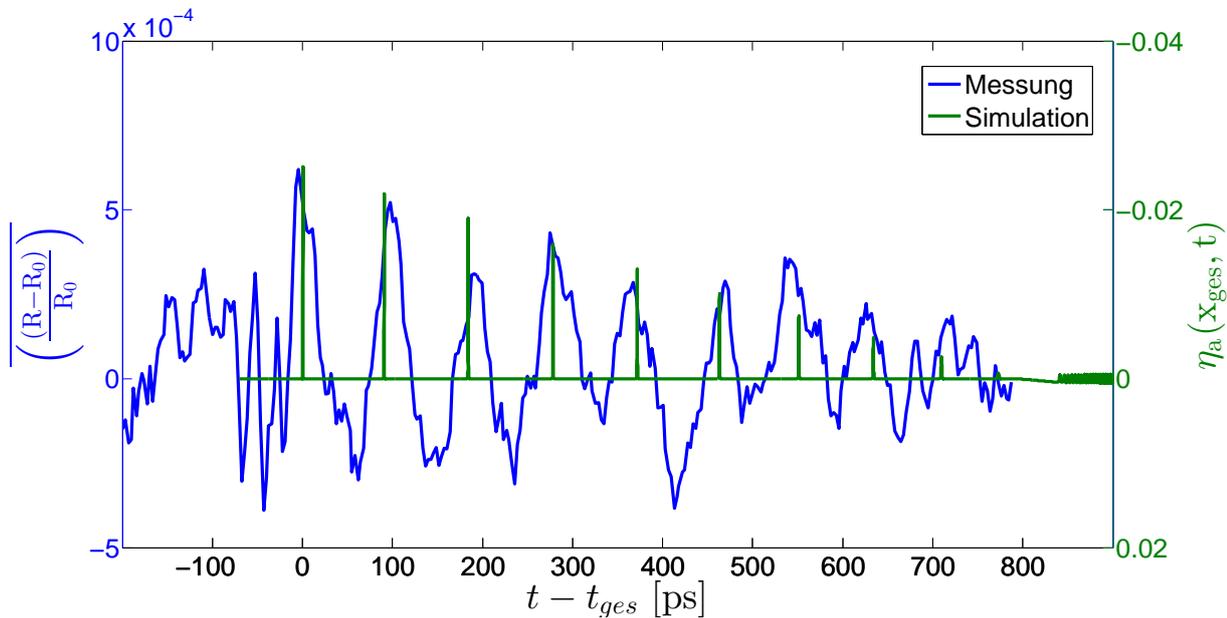


Abbildung 5.19: Darstellung der über das Intervall  $500 \text{ nm} < \lambda < 570 \text{ nm}$  gemittelten relativen Reflexionsänderung. Die Fluenz des pump-Pulses betrug  $6,5 \text{ mJ/cm}^2$ . Ebenfalls ist die Ankunftszeit der Solitonen  $\eta_A(x_{ges}, t)$  für diese Fluenz abgebildet. Die Zeitachse wurde hierbei auf das schnellste Soliton zentriert. Die Simulation erfolgte hier mit der Korteweg-de-Vries-Gleichung.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit gibt einen umfassenden theoretischen und experimentellen Einblick in die Auswirkung der Dispersion und der nicht linearen Wechselwirkung zwischen den Gitteratomen auf eine Hyperschallwelle.

Dabei wurde zu Beginn dieser Arbeit der Zusammenhang zwischen dem Modell der linearen Kette, der Kortweg-de-Vries-Burgers-Gleichung und der Schrödinger Gleichung verdeutlicht. Im theoretischen Teil der Arbeit wurden die drei Differentialgleichungen numerisch bzw. analytisch untersucht und die Ergebnisse miteinander verglichen. Dabei wurden sowohl Vor- als auch Nachteile der verschiedenen Modelle ausführlich diskutiert und ein Leitfaden erstellt, welcher einen Überblick darüber gibt, unter welcher Voraussetzung welche Differentialgleichung die Realität am besten beschreibt. Es wurde deutlich, dass die Kortweg-de-Vries-Burgers-Gleichung in den meisten Fällen Anwendung finden wird.

Im experimentellen Teil dieser Arbeit wurden Hyperschallwellen in DSO und Galliumarsenid untersucht. Erzeugt wurden diese, indem ein dünner, metallischer Film und so als opto-akustischer Transducer wirkt mit Hilfe eines kurzen Laserpulses erhitzt wurde. Die somit erzeugte Hyperschallwelle wurde mit einem breitbandigen Laserpuls detektiert. Damit konnte die Anharmonizität, bzw. die nicht lineare elastische Konstante  $C_3$  in DSO ermittelt werden. Sie ist 15x kleiner als in Strontiumtitanat [12]. Die Messung erfolgte aufgrund der Grundlage der Simulation einer Hyperschallwelle mit Hilfe der Kortweg-de-Vries-Burgers-Gleichung. Der räumliche Abstand der Solitonen war hierbei noch zu gering, um sie mit dem hier verwendeten Aufbau zu detektieren. Falls bei tiefen Temperaturen die akustische Dämpfung in DSO klein genug ist, wäre es möglich, die Solitonen zu einem deutlich späteren Zeitpunkt zu messen. Die experimentellen Untersuchungen in Galliumarsenid ermöglichte die direkte Detektion von Solitonen. Somit konnten Solitonen in Galliumarsenid ohne die Verwendung eines Interferometers direkt beobachtet werden. Die Simulation der Kortweg-de-Vries-Burgers-Gleichung und der damit berechneten Solitonen stimmt sehr gut mit den optischen Experimenten überein. Das ist ein wichtiger Schritt für weitere Experimente bzgl. Solitonen in der Arbeitsgruppe Bargheer.

Darüber hinaus konnte in diesen Messdaten eine Oszillation beobachtet werden, welche nicht mit den hier verwendeten Differentialgleichungen beschrieben werden kann. Dabei handelt es sich vermutlich um Oberflächenphononen. Um dies zu verifizieren, könnte man die Oszillationsperiode in Abhängigkeit des pump-Durchmessers bestimmen. Zusätzlich konnte man das Experiment mit

einer Probe durchführen, dessen Substrat ausschließlich aus Galliumarsenid besteht, um den Einfluss der dünnen Aluminiumarsenid-Schicht zu bewerten. Im Falle von DSO wäre es von großen Interessen, wenn die akustische Dämpfung des Materials bekannt wäre. Die Messung der akustischen Dämpfung könnte beispielsweise mit der Erzeugung eines schmalbandigen Phonons realisiert werden. Ebenfalls wäre es möglich, die Gitterverzerrung anstelle von Weißlicht, mit ultrakurzen Röntgenpulsen zu detektieren, um eine strukturelle Auflösung zu erhalten. Somit könnten Solitonen in DSO schon wenige Nanosekunden nach ihrer Entstehung detektiert werden.

## 7 Literaturverzeichnis

- [1] K. Kopitzki and P. Herzog, *Einführung in die Festkörperphysik*. Vieweg+Teubner, 2009.
- [2] J. Scott Russell, “Report on waves,” *Fourteenth meeting of the British Association for the Advancement of Science*, 1844.
- [3] D. J. Korteweg and G. de Vries, “On the change of form of long waves advancing in a rectangular canal, and on a new type of long stationary waves,” *Philosophical Magazine Series 5*, vol. 39, no. 240, pp. 422–443, 1895.
- [4] J. Boussinesq, *Essai sur la theorie des eaux courantes*. Paris, Imprimerie Nationale, 1877.
- [5] C. S. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal, and R. M. Miura, “Method for solving the korteweg-devries equation,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 19, pp. 1095–1097, Nov 1967.
- [6] A. Scott, *Encyclopedia of Nonlinear Science*. Fitzroy Dearborn Publishers, 2004. pp. 639–643.
- [7] C. Tagg, “Soliton theory in optical communications.,” *Annual Review of Broadband Communication. International Engineering Consortium*, 2006.
- [8] A. M. Kosevich, “Magnetic soliton motion in a nonuniform magnetic field,” *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 87, pp. 401–407, 1998.
- [9] S. Bonetti, R. Kukreja, Z. Chen, F. Macia, J. M. Hernandez, A. Eklund, D. Backes, J. Frisch, J. Katine, G. Malm, S. Urazhdin, A. D. Kent, J. Stohr, H. Ohldag, and H. A. Durr, “Direct observation and imaging of a spin-wave soliton with p-like symmetry,” *Nat Commun*, vol. 6, Nov. 2015.
- [10] H.-Y. Hao and H. J. Maris, “Experiments with acoustic solitons in crystalline solids,” *Phys. Rev. B*, vol. 64, p. 064302, Jul 2001.
- [11] E. Peronne and B. Perrin, “Generation and detection of acoustic solitons in crystalline slabs by laser ultrasonics,” *Ultrasonics*, vol. 44, Supplement, pp. e1203 – e1207, 2006.

- [12] A. Bojahr, M. Herzog, D. Schick, I. Vrejoiu, and M. Bargheer, “Calibrated real-time detection of nonlinearly propagating strain waves,” *Phys. Rev. B*, vol. 86, p. 144306, Oct 2012.
- [13] U. Fermi, Pasta, “Studies of nonlinear problems,” *Los Alamos Scientific Lab. Rep. LA-1940*, 1955.
- [14] B. Gershgorin, *Characterization of Thermalized Fermi-Pasta-Ulam Chains*. PhD thesis, Rensselaer Polytechnic Institute, 2007.
- [15] M. A. Porter, N. J. Zabusky, B. Hu, and D. K. Campbell, “Fermi, Pasta, Ulam and the birth of experimental mathematics: a numerical experiment that Enrico Fermi, John Pasta, and Stanisław Ulam reported 54 years ago continues to inspire discovery,” *j-AM-SCI*, vol. 97, no. 3, pp. 214–221, 2009.
- [16] T. Dauxois and S. Ruffo, “Fermi-pasta-ulam nonlinear lattice oscillations,” *Scholarpedia*, vol. 3, p. 5538, 2008.
- [17] D. Speiser, *Discovering the Principles of Mechanics 1600-1800: Essays by David Speiser*. Birkhäuser verlag AG, 2008.
- [18] J. H. Cantrell and K. Salama, “Acoustoelastic characterisation of materials,” *International Materials Reviews*, vol. 36, no. 1, pp. 125–145, 1991.
- [19] D. C. Wallace, “Thermoelastic theory of stressed crystals and higher-order elastic constants\*,” vol. 25 of *Solid State Physics*, pp. 301 – 404, Academic Press, 1970.
- [20] N. J. Zabusky and M. D. Kruskal, “Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 15, pp. 240–243, Aug 1965.
- [21] M. Toda, “Studies of a non-linear lattice,” *Physics Reports*, vol. 18, no. 1, pp. 1 – 123, 1975.
- [22] R. S. Palais, “The symmetries of solitons,” *Bull. Amer. Math. Soc.*, vol. 34, pp. 339–403, 1997.
- [23] P. Blanchard, R. L. Devaney, and R. Glen, *Differential Equations*. Brooks/Coll, 2002.
- [24] M. S. Richard P. Feynman, Robert B. Leighton, *The Feynman Lectures on Physics I*. 1963/1965.

- [25] A. Jeffrey and J. Engelbrecht, *Nonlinear Waves in Solids*. Springer-Verlag-Wien, 1994.
- [26] P. D. Lax, “Integrals of nonlinear equations of evolution and solitary waves,” *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 21, no. 5, pp. 467–490, 1968.
- [27] M. Ablowitz and H. Segur, *Solitons and the Inverse Scattering Transform*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1981.
- [28] S. Kichenassamy, *Nonlinear Wave Equations*. CRC Press, 1995.
- [29] R. M. Miura, “An introduction to solitons and the inverse scattering method via the korteweg de vries equation,” in *Solutions in Action* (K. L. Scott, ed.), pp. 1 – 19, Academic Press, 1978.
- [30] C. S. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal, and R. M. Miura, “Korteweg-devries equation and generalizations. vi. methods for exact solution,” *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 27, no. 1, pp. 97–133, 1974.
- [31] K. Lonngren and K. . C. Scott, *Solitons in Action*. Academic Press, 1978.
- [32] D. Schick, M. Herzog, A. Bojahr, W. Leitenberger, A. Hertwig, R. Shayduk, and M. Bargheer, “Ultrafast lattice response of photoexcited thin films studied by x-ray diffraction,” *Structural Dynamics*, vol. 1, no. 6, 2014.
- [33] B. T. Wong and P. M. Mengüç, *Thermal Transport for Applications in Micro/Nanomachining*. Springer-Verlag-Berlin, 2008.
- [34] M. Herzog, *Structural Dynamics of Photoexcited Nanolayered Perovskites Studied by Ultrafast X-ray Diffraction*. PhD thesis, Universität Potsdam, 2012.
- [35] C. Himcinschi, I. Vrejoiu, M. Friedrich, E. Nikulina, L. Ding, C. Cobet, N. Esser, M. Alexe, D. Rafaja, and D. R. T. Zahn, “Substrate influence on the optical and structural properties of pulsed laser deposited bifeo<sub>3</sub> epitaxial films,” *Journal of Applied Physics*, vol. 107, no. 12, 2010.
- [36] A. D. Rakić, A. B. Djurišić, J. M. Elazar, and M. L. Majewski, “Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices,” *Appl. Opt.*, vol. 37, pp. 5271–5283, Aug 1998.

- [37] P. Cotti, E. M. Fryer, and J. L. Olsen, “On the electronic mean free path in aluminum,” *Helvetica Physica Acta*, vol. 37, no. 6, p. 585, 1964.
- [38] P. van Capel, E. Péronne, and J. Dijkhuis, “Nonlinear ultrafast acoustics at the nano scale,” *Ultrasonics*, vol. 56, pp. 36–51, 2015.
- [39] H. W. Werner Martienssen, *Springer Handbook of Condensed Matter and Materials*. Springer Verlag Berlin Heidelberg New York, 2005.
- [40] M. Gohlke, “One-dimensional model for phonon wavepacket propagation in ferroelectric solids,” Master’s thesis, Universität Potsdam, 2013.
- [41] S. Blanes and P. Moan, “Practical symplectic partitioned runge kutta and runge kutta nyström methods,” *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 142, no. 2, pp. 313 – 330, 2002.
- [42] B. Leimkuhler and S. Reich, *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge University Press, 2005.
- [43] S. Slade, *Elements and the Periodic Table*. The Rosen Publishing Group, 2007.
- [44] M. Schmidbauer, A. Kwasniewski, and J. Schwarzkopf, “High-precision absolute lattice parameter determination of SrTiO<sub>3</sub>, DyScO<sub>3</sub> and NdGaO<sub>3</sub> single crystals,” *Acta Crystallographica Section B*, vol. 68, pp. 8–14, Feb 2012.
- [45] S. Yamanaka, T. Maekawa, H. Muta, T. Matsuda, S. ichi Kobayashi, and K. Kurosaki, “Thermophysical properties of srhfo3 and srruo3,” *Journal of Solid State Chemistry*, vol. 177, no. 10, pp. 3484 – 3489, 2004.
- [46] M. Janovska, P. Sedlak, H. Seiner, M. Landa, P. Marton, P. Ondrejko, and J. Hlinka, “Anisotropic elasticity of dysco 3 substrates,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 24, no. 38, p. 385404, 2012.
- [47] H. Heuser, *Gewöhnliche Differentialgleichungen: Einführung in Lehre und Gebrauch*. B. G. Teubner verlag, 2004.
- [48] V. Rajaraman, *Computer Oriented Numerical Methods*. Prentice-Hall of India Pvt.Ltd, 2004.
- [49] J. C. Butcher, *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*. Wiley-Interscience, 1987.

- [50] E. Süli and D. F. Mayers, *An Introduction to Numerical Analysis*. Cambridge University Press, 2003.
- [51] S. E. Hairer and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I*. Springer-Verlag-Berlin, 1987.
- [52] E. Hairer, “A Runge-Kutta method of order 10,” *J. Inst. Maths. Applics.* 21, pp. 47–59, 1978.
- [53] F. B. Peter Deuffhard, *Numerische Mathematik II*. Walter de Gruyter, 2002.
- [54] C. Runge *Nachr. K. Ges. Wiss. Goettingen*, pp. 252–257, 1905.
- [55] B. S. W. Schröder, *A Workbook for Differential Equations*. Wil, 2010.
- [56] M. Łopuszyński and J. A. Majewski, “*Ab initio* calculations of third-order elastic constants and related properties for selected semiconductors,” *Phys. Rev. B*, vol. 76, p. 045202, Jul 2007.
- [57] J. S. Blakemore, “Semiconducting and other major properties of gallium arsenide,” *Journal of Applied Physics*, vol. 53, no. 10, pp. R123–R181, 1982.
- [58] H.-Y. Hao and H. J. Maris, “Dispersion of the long-wavelength phonons in Ge, Si, GaAs, quartz, and sapphire,” *Phys. Rev. B*, vol. 63, p. 224301, May 2001.
- [59] J. L. Rose, *Ultrasonic Waves in Solid Media*. Cambridge University Press, 2004.
- [60] W. M. Haynes, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. Taylor & Francis Ltd., 96 ed., 2015.
- [61] K. Sokolowski-Tinten, C. Blome, C. Dietrich, A. Tarasevitch, M. Horn von Hoegen, D. von der Linde, A. Cavalleri, J. Squier, and M. Kammler, “Femtosecond x-ray measurement of ultrafast melting and large acoustic transients,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 87, p. 225701, Nov 2001.
- [62] R. Gross and A. Marx, *Festkörperphysik*. Festkörperphysik, De Gruyter, 2012.
- [63] K. Beckwitt, F. W. Wise, L. Qian, L. A. Walker, and E. Canto-Said, “Compensation for self-focusing by use of cascade quadratic nonlinearity,” *Opt. Lett.*, vol. 26, pp. 1696–1698, Nov 2001.

- [64] E. O. Brigham, *FFT. Schnelle Fourier-Transformation*. R. Oldenbourg Verlag, München/Wien, 1995.
- [65] O. Matsuda, M. C. Larciprete, R. L. Voti, and O. B. Wright, “Fundamentals of picosecond laser ultrasonics,” *Ultrasonics*, vol. 56, pp. 3 – 20, 2015.
- [66] C. Thomsen, H. T. Grahn, H. J. Maris, and J. Tauc, “Surface generation and detection of phonons by picosecond light pulses,” *Phys. Rev. B*, vol. 34, pp. 4129–4138, Sep 1986.
- [67] G. New, *Introduction to Nonlinear Optics*. Cambridge University Press, 2011.
- [68] G. Jellison, “Optical functions of GaAs, GaP, and Ge determined by two-channel polarization modulation ellipsometry ,” *Optical Materials*, vol. 1, no. 3, pp. 151 – 160, 1992.
- [69] M. Bradler, P. Baum, and E. Riedle, “Femtosecond continuum generation in bulk laser host materials with sub- $\mu$ J pump pulses,” *Applied Physics B*, vol. 97, p. 561, 2009.
- [70] W. S. Slaughter, *The Linearized Theory of Elasticity*. Birkhäuser Verlag AG, 2002.

## 8 Anhang

### Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung einer P-Welle

Um eine mechanische Spannung in einem Kristall zu beschreiben, ist hierzu die Einführung des Spannungstensor  $\sigma_{ij}$  notwendig:

$$\sigma_{ij} = \frac{\text{Kraftkomponente in } i \text{ - Richtung}}{\text{Fläche mit Normalkomponente in } j \text{ -Richtung}}. \quad (8.1)$$

Analog hierzu kann auch die Dehnung  $\eta_{ij}$  allgemeinen definiert werden [62]:

$$\eta_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (8.2)$$

siehe hierzu auch Kapitel 2.3.

Der Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung kann nun mit Hilfe des Elastizitätstensors  $C_{ijkl}$  wie folgt formuliert werden:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_{11} \\ \eta_{22} \\ \eta_{33} \\ \eta_{23} \\ \eta_{13} \\ \eta_{12} \end{bmatrix}, \quad (8.3)$$

wobei hier aus Symmetriegründen  $ij = ji$  verwendet wurde.

Wie können nun vereinfacht ein isotropes Medium annehmen, demnach ergibt sich die Gleichung (8.3) zu [70]:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\mu_{is} + \lambda_{is} & \lambda_{is} & \lambda_{is} & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_{is} & 2\mu_{is} + \lambda_{is} & \lambda_{is} & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_{is} & \lambda_{is} & 2\mu_{is} + \lambda_{is} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu_{is} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu_{is} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu_{is} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_{11} \\ \eta_{22} \\ \eta_{33} \\ \eta_{23} \\ \eta_{13} \\ \eta_{12} \end{bmatrix}, \quad (8.4)$$

wobei  $\lambda_{is}$  die erste und  $\mu_{is}$  die zweite Lamé-Konstante sind.

Nachdem der Transducer durch einen Laserpuls angeregt wurde, erfährt dieser nun einen thermalen Stress, welcher auf der Annahme beruht, dass das Material ein Bestreben hat, sich in alle drei Raumrichtungen gleichmäßig auszudehnen. Der Stress in x - Richtung kann nun wie folgt berechnet werden:

$$\sigma_{11} = (2\mu_{is} + 3\lambda_{is})\alpha_T\Delta T, \quad (8.5)$$

wobei  $\eta_{11} = \eta_{22} = \eta_{33} = \alpha_T\Delta T$ , siehe Gleichung (3.7), verwendet wurde.

Nun wollen wir annehmen, dass sich das Material nur in x -Richtung ausdehnen kann. Die sich unter dieser Annahme ausbreitenden Wellen werden als P-Welle bezeichnet. Für diesen Fall bezeichnen wir die Dehnung mit  $\eta'_{ij}$  bezeichnen. Somit gilt dann  $\eta'_{22} = \eta'_{33} = \eta'_{23} = \eta'_{13} = \eta'_{12} = 0$ . Die Dehnung  $\eta'_{11}$  errechnet sich dann über:

$$\sigma_{11} = (2\mu_{is} + \lambda_{is})\eta'_{11}, \quad (8.6)$$

bzw. mit Hilfe von Gleichung (8.5) zu:

$$\eta'_{11} = \frac{(2\mu_{is} + 3\lambda_{is})}{(2\mu_{is} + \lambda_{is})}\alpha_T\Delta T. \quad (8.7)$$

Unter der Verwendung der Poissonzahl  $\nu$  für ein isotropes Medium [70]:

$$\nu = \frac{\lambda_{is}}{2(\lambda_{is} + \mu_{is})}, \quad (8.8)$$

ergibt sich Gleichung (8.7) zu:

$$\eta'_{11} = \underbrace{\frac{(1 + \nu)}{(1 - \nu)}}_{\text{Korrekturfaktor}} \alpha_T\Delta T, \quad (8.9)$$

und somit auch der in Gleichung (3.10) verwendete Korrekturfaktor<sup>14</sup>.

---

<sup>14</sup> Wobei mit  $\frac{\Delta s}{s} = \eta'_{11}$  die Gleichung (8.9) direkt mit der Gleichung (3.10) verglichen werden kann.

## **Selbständigkeitserklärung**

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Masterarbeit selbstständig und ohne Hilfe Dritter verfasst habe. Andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel wurden nicht verwendet. Die den benutzten Quellen wörtlich oder inhaltlich entnommenen Abschnitte sind als solche kenntlich gemacht.

Ich erkläre hiermit weiterhin, dass die vorgelegte Arbeit zuvor weder von mir noch – soweit mir bekannt ist – von einer anderen Person an dieser oder einer anderen Hochschule eingereicht wurde.

Potsdam, den 24. Mai 2016