**WALTHER–MEISSNER–INSTITUT** 2. Dezember 2010
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 7**

Übungsaufgaben zur

# Festkörperphysik I, WS 2010/2011

## 5 Dynamik des Kristallgitters

### 5.2 Lineare monoatomare Kette (2)

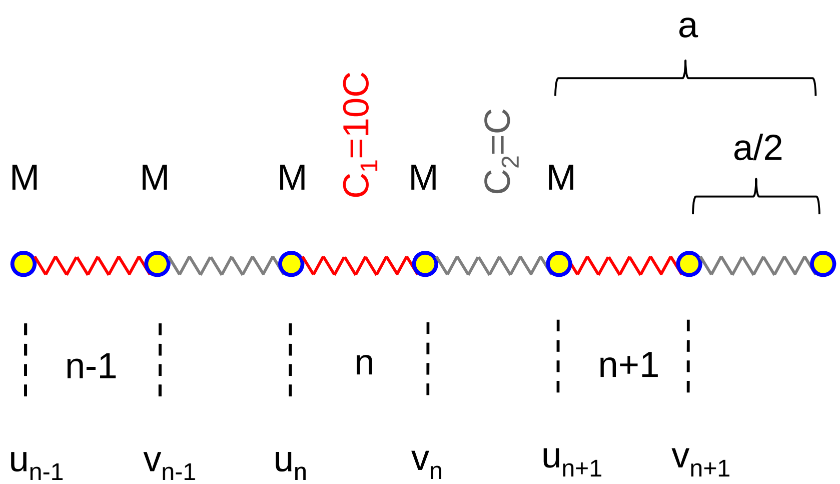
Betrachten Sie eine lineare monoatomare Kette aus äquidistanten Atomen der Masse $M$ im Abstand $a$, die um ihre Gleichgewichtslage kleine Schwingungen ausführen können (longitudinale Polarisation, harmonische Näherung). Eine Wechselwirkung bestehe ausschließlich zwischen nächsten Nachbarn und sei durch die Federkonstante $C$ charakterisiert. Die Position des $n$–ten Atoms sei durch $x_n(t) = na + u_n(t)$ beschrieben.

1. Zeigen Sie, dass die Auslenkung $u_n(t)$ des $n$–ten Atoms der Differentialgleichung
$$M\frac{d^2u_n(t)}{dt^2} = -C\left[2u_n(t) - u_{n+1}(t) - u_{n-1}(t)\right] \tag{1}$$
genügt.
2. Lösen Sie Gleichung (1) mit dem Ansatz $u_n(t) = u_0(t)\mathrm{e}^{iqna}$ und leiten Sie eine Dispersionsrelation zwischen Frequenz $\omega$ und der Wellenzahl $q$ ab.
3. Diskutieren Sie den langwelligen Limes $qa \ll 1$ und zeigen Sie insbesondere, dass sich aus (1) die (Schall–) Wellengeichung
$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} - v_\mathrm{s}^2\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = 0$$
ergibt, wenn man zur Kontinuumsbeschreibung $u_{n\pm1}(t) = u(x \pm a, t)$ übergeht.

### 5.3 Lineare Kette aus zweiatomigen Molekülen

Untersuchen Sie die Grundschwingungen einer linearen Kette aus zweiatomigen Molekülen, die aus gleichen Atomen der Masse $M$ bestehen. Der Abstand der Atome im Molekül und der Abstand zwischen den Molekülen soll gleich sein und $a/2$ betragen (siehe Abbildung). Die

Kraftkonstanten zwischen den Atomen desselben Moleküls soll $C_1 = 10 \cdot C$ und zwischen Atomen zweier benachbarter Moleküle $C_2 = C$ betragen. Die Kopplung mit übernächsten Nachbarn soll vernachlässigt werden. Wir erhalten so eine lineare Kette aus Atomen mit Masse $M$ und Abstand $a/2$, bei der die Federkonstante zwischen den einzelnen Atomen abwechselnd groß und klein ist. Diese Anordnung stellt ein einfaches Modell für einen Kristall aus zweiatomigen Molekülen wie z. B. $H_2$ dar.




Bestimmen Sie $\omega(q)$ bei $q = 0$ und $q = \frac{\pi}{a}$. Fertigen Sie eine Skizze für die Dispersionsrelation an und diskutieren Sie diese.

### 5.4 Lineare Kette mit übernächster–Nachbar–Wechselwirkung

Betrachten Sie eine lineare Kette aus identischen Atomen bei den Positionen $x_n = na, \quad n = 1, 2, \ldots$. Die Wechselwirkung sei quasi-harmonisch. Die Kopplungskonstante zwischen übernächsten Nachbarn sei $(1/\nu)$ mal so groß ($\nu = 2, 3, \ldots$) wie die Kopplungskonstante zwischen den nächsten Nachbarn; zwischen weiter voneinander entfernten Atomen sei sie Null.

1. Bestimmen Sie die Dispersionsrelation $\omega(q)$ und skizzieren Sie diese.
2. Für welche ganzzahligen Werte $\nu$ liegt das Maximum in der Dispersionskurve bei Wellenzahlen $q < \pi/a$?
3. Wie groß ist die maximale Frequenz einer ungedämpften Welle?
4. Wie groß ist die Schallgeschwindigkeit?
5. Diskutieren Sie den Fall $\nu = 2$.

**WALTHER–MEISSNER–INSTITUT** 2. Dezember 2010
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 7**

Lösungen der Übungsaufgaben zur

# Festkörperphysik I, WS 2010/2011

## 5 Dynamik des Kristallgitters

### 5.2 Lineare monoatomare Kette (2)

Wir gehen bei unseren Rechnungen von der Position der Atome

$$x_n(t) = na + u_n(t)$$

aus, bei der $u_n(t)$ eine kleine Auslenkung aus der Gleichgewichtslage des $n$–ten Atoms bedeutet. Die Parameter dieser Beschreibung sind (i) die Masse $M$ der Atome und (ii) die Kraftkonstanten $C_p$, die die Hookesche Kraft $F_n$ zwischen den $n$–ten und dem $n+p$–ten Atom beschreibt

$$F_n = -\sum_{p\neq 0} C_p \left[u_n(t) - u_{n+p}(t)\right]$$

Die Newtonsche Bewegungsgleichung lautet dann für die Kette

$$M\frac{d^2u_n(t)}{dt^2} = F_n = \sum_{p\neq 0} C\left[u_{n+p}(t) - u_n(t)\right]$$

Unter der Annahme, dass $C_{-p} = C_p$ kann man die Summe über den Index $p$ wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_n(t) &= \sum_{p>0} C_p\left[u_{n+p} - u_n\right] - \underbrace{\sum_{p<0} C_p\left[u_{n+p} - u_n\right]}_{\sum_{p>0} C_{-p}[u_{n-p}-u_n]} \\ &= \sum_{p>0} C_p\left[2u_n - u_{n+p} - u_{n-p}\right] \end{aligned}$$

1. Für den Spezialfall nächster Nachbarn ($C_1 = C_{-1} = C$ und $C_p = C_{-p} = 0$ für $p > 1$) ergibt sich

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_n(t) &= C[u_{n+1}(t) - u_n(t)] + C[u_{n-1}(t) - u_n(t)] \\ &= C\left[u_{n+1}(t) + u_{n-1}(t) - 2u_n(t)\right] \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

2. Zur Lösung dieser DGL versuchen wir nun den folgenden Lösungsansatz

$$u_n(t) = u_0(t)e^{iqna}$$

Dies liefert sofort

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_0(t) &= -\sum_{p>0} C_p \left[2 - \mathrm{e}^{iqpa} - \mathrm{e}^{-iqpa}\right] u_0(t) \\ &= -2\sum_{p>0} C_p \left[1 - \cos(pqa)\right] u_0(t) \\ &= \underbrace{-4\sum_{p>0} C_p \sin^2\left(\frac{pqa}{2}\right)}_{=M\omega^2(q)} u_0(t) = -M\omega^2(q)u_0(t) \end{aligned}$$

Wir haben somit eine DGL für einen harmonischen Oszillator mit einer wellenzahlabhängigen Frequenz $\omega(q)$ abgeleitet:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_0(t) &+ \omega^2(q)u_0(t) = 0 \\ \omega^2(q) &= \frac{4}{M}\sum_{p>0} C_p \sin^2\frac{pqa}{2} = \frac{2}{M}\sum_{p>0} C_p \left[1 - \cos(pqa)\right] \end{aligned}$$

Im Spezialfall nächster Nachbarn hat man dann mit $C_1 = C_{-1} = C$:

$$\omega^2(q) = \frac{4C}{M}\sin^2\frac{qa}{2} = \frac{2C}{M}\left[1 - \cos(qa)\right]$$

Eigenschaften von $\omega(q)$:

(a) Periodizität

$$\omega(q) = \omega\left(q + n\frac{2\pi}{a}\right) \quad ; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

(b) Parität bezüglich $q \to -q$

$$\omega(-q) = \omega(q)$$

(c) Maximum von $\omega(q)$

$$\omega_{\max} = \max\{\omega(q)\} = \sqrt{\frac{2}{M}\sum_{p>0} C_p \left[1 - (-1)\right]} \overset{\text{n.n.}}{=} 2\sqrt{\frac{C}{M}}$$

3. Verhalten im langwelligen Limes $qa \rightarrow 0$. In diesem Limes spielen sich räumliche Veränderungen auf Längenskalen ab, die groß gegen die Gitterkonstante $a$ sind. Als Folge davon ist eine Kontinuumsbeschreibung möglich. Die Dispersion lautet in diesem Limes

$$\begin{aligned}
\lim_{q\to 0}\omega(q) &= \sqrt{\frac{2}{M}\sum_{p>0} C_p\left[1-\left(1-\frac{(pqa)^2}{2}\right)\right]} \\
&= \underbrace{a\sqrt{\frac{1}{M}\sum_{p>0} C_p p^2}}_{v_\mathrm{s}} \cdot q = v_\mathrm{s} q \\
v_\mathrm{s} &= \sqrt{\frac{a^2}{M}\sum_{p>0} C_p p^2} \overset{C_1=C}{=} \sqrt{\frac{Ca^2}{M}}
\end{aligned}$$

Zur Ableitung einer Schall–Wellengleichung im langwelligen Limes kann $u_n(t)$ als kontinuierliche Funktion von einer reellen Variablen $x$ aufgefasst werden:

$$\begin{aligned}
u_n(t) &\rightarrow u(x,t) \\
u_{n\pm p}(t) &\rightarrow u(x+pa,t)
\end{aligned}$$

Eine Taylor–Entwicklung ergibt

$$u_{n\pm p}(t) = u(x \pm pa, t) = u(x,t) \pm pa\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + \frac{p^2a^2}{2!}\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \pm \ldots$$

Diese Taylor–Entwicklung kann man nun in die Hookesche Kraft einsetzen

$$\begin{aligned}
F_n &= -\sum_{p>0} C_p\left[2u_n(t) - u_{n+p}(t) - u_{n-p}(t)\right] \\
&= -\sum_{p>0} C_p\left[2u(x,t) - u(x+pa,t) - u(x-pa,t)\right] \\
&= -\sum_{p>0} C_p\left[-pa\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} - \frac{(pa)^2}{2}\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + pa\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} - \frac{(pa)^2}{2}\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + \ldots\right] \\
&= M\underbrace{\frac{a^2}{M}\sum_{p>0} C_p p^2}_{=v_\mathrm{s}^2}\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = M v_\mathrm{s}^2\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}
\end{aligned}$$

Wir haben somit im langwelligen Limes die eindimensionale Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = v_\mathrm{s}^2\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

für die lineare monoatomare Kette abgeleitet.

## 5.3 Lineare Kette aus zweiatomigen Molekülen

Wir betrachten eine Kette mit zwei unterschiedlichen Atomen, die allerdings gleiche Masse ($M$) haben sollen. Dabei sei $u_n$ die Verschiebung des $n$-ten Atoms der einen Sorte und $v_n$ die

Verschiebung des $n$-ten Atoms der anderen Sorte. Die Bewegungsgleichung können wir dann wie folgt angeben:

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_n &= C_1\,(v_n - u_n) + C_2\,(v_{n-1} - u_n) \\ M\ddot{v}_n &= C_1\,(u_n - v_n) + C_2\,(u_{n+1} - v_n) \end{aligned}$$

Zur Lösung dieses Differentialgleichungssystems machen wir den Ansatz

$$\begin{aligned} u_n(t) &= u_0 \mathrm{e}^{i(qna-\omega t)} \\ v_n(t) &= v_0 \mathrm{e}^{i(qna-\omega t)} \end{aligned}$$

Einsetzen ergibt das folgende algebraische Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} C_1\,(v_0 - u_0) + C_2\left(v_0 \mathrm{e}^{-iqa} - u_0\right) + M\omega^2 u_0 &= 0 \\ C_1\,(u_0 - v_0) + C_2\left(u_0 \mathrm{e}^{iqa} - v_0\right) + M\omega^2 v_0 &= 0 \end{aligned}$$

Dies ist ein homogenes, lineares Gleichungssystem, für das eine nicht–triviale Lösung existiert, wenn die Koeffizienten–Determinante verschwindet, also

$$\begin{vmatrix} (C_1 + C_2) - M\omega^2 & -(C_1 + C_2 \mathrm{e}^{-iqa}) \\ -(C_1 + C_2 \mathrm{e}^{iqa}) & (C_1 + C_2) - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

Dies können wir ausmultiplizieren und erhalten

$$\begin{aligned} [M\omega^2 - (C_1 + C_2)]^2 &= (C_1 + C_2 \mathrm{e}^{-iqa})(C_1 + C_2 \mathrm{e}^{iqa}) \;=\; C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2 \cos qa \\ &= C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2 - 2C_1C_2\,(1 - \cos qa) = (C_1 + C_2)^2 - 4C_1C_2 \sin^2 \frac{qa}{2} \end{aligned}$$

Die beiden Lösungen dieser quadratischen Gleichung lauten

$$\begin{aligned} \omega_\pm^2 &= \frac{C_1 + C_2}{M} \pm \frac{1}{M}\sqrt{C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2 \cos qa} \\ &= \frac{C_1 + C_2}{M} \pm \frac{1}{M}\sqrt{(C_1 + C_2)^2 - 4C_1C_2 \sin^2 \frac{qa}{2}} \end{aligned}$$

1. Wir untersuchen zunächst den langwelligen Limes $q \to 0$. In diesem Fall kann man die Wurzel und den Sinus (Taylor–) entwickeln

$$\begin{aligned} \sqrt{(C_1 + C_2)^2 - 4C_1C_2 \sin^2 \frac{qa}{2}} &= (C_1 + C_2)\sqrt{1 - 4\frac{C_1C_2}{(C_1 + C_2)^2} \sin^2 \frac{qa}{2}} \\ &= (C_1 + C_2)\left[1 - \frac{q^2a^2}{2}\frac{C_1C_2}{(C_1 + C_2)^2}\right] \end{aligned}$$

   und man erhält die beiden Lösungen

$$\begin{aligned} \omega_+^2 &= 2\frac{C_1 + C_2}{M} - \frac{q^2a^2}{2M}\frac{C_1C_2}{C_1 + C_2} && \text{(optischer Zweig)} \\ \omega_-^2 &= \frac{q^2a^2}{2M}\frac{C_1C_2}{C_1 + C_2} && \text{(akustischer Zweig)} \end{aligned}$$

   und damit für $q \to 0$

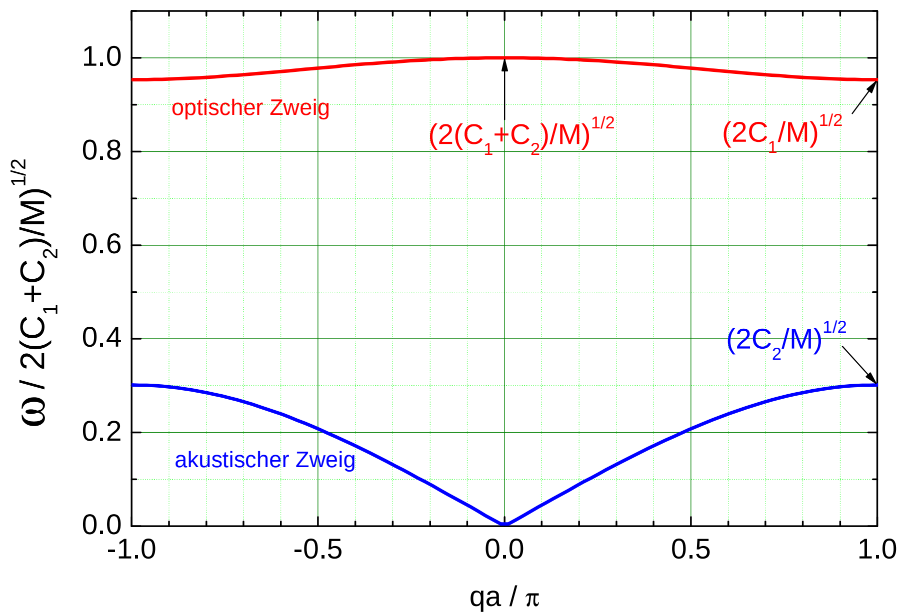
$$\begin{aligned} \omega_+ &= \sqrt{\frac{2(C_1 + C_2)}{M}} = \sqrt{\frac{22C}{M}} && \text{(optischer Zweig)} \\ \omega_- &= \sqrt{\frac{C_1C_2a^2}{2M(C_1 + C_2)}}\, q = \sqrt{\frac{10Ca^2}{22M}}\, q && \text{(akustischer Zweig)} \end{aligned}$$

2. Im Fall $q = \pi/a$ gilt $\sin^2(qa/2) = 1$ und man erhält

$$\sqrt{(C_1+C_2)^2 - 4C_1C_2\sin^2\frac{qa}{2}} = \sqrt{(C_1+C_2)^2 - 4C_1C_2} = C_1 - C_2$$
$$\omega_\pm^2 = \frac{C_1+C_2}{M} \pm \frac{C_1-C_2}{M}$$

und somit

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2C_1}{M}} = \sqrt{\frac{20C}{M}} \qquad \text{(optischer Zweig)}$$
$$\omega_- = \sqrt{\frac{2C_2}{M}} = \sqrt{\frac{2C}{M}} \qquad \text{(akustischer Zweig)}$$




In der Abbildung sieht man den ungefähren Verlauf der Dispersionsrelation. Für die eindimensionale Anordnung gibt es genau einen optischen und einen akustischen Zweig, zwischen denen bei $q = \pm\pi/a$ eine Frequenzlücke existiert. Die Bezeichnungen "akustisch" und "optisch" kommen daher, dass bei akustischen Schwingungen großer Wellenlänge auch alle Atome in Phase mitschwingen. Bei der optischen Schwingung ist die Auslenkung der beiden Atome dagegen gegenphasig, wobei der Schwerpunkt sich nicht bewegt. Bei Ionenkristallen (z.B. NaCl) koppeln optische Moden gut an elektromagnetische Wellen an, weshalb man sie optisch gut anregen kann.

## 5.4 Lineare Kette mit übernächster–Nachbar–Wechselwirkung

Wir setzen unser Bezugsatom auf den Gitterplatz $x_n = na = 0$, die Atome mit der Federkonstanten $C$ auf die Plätze $-a$ und $+a$ und die Atome mit der Federkonstanten $C/\nu$ auf die Plätze $-2a$ und $+2a$ usw. Als Bewegungsgleichung für die Auslenkungen $u_n(t)$ ergibt sich dann unter

Annahme eines harmonischen Potentials

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_p &= C\,[u_{n-1} - u_n] + C\,[u_{n+1} - u_n] \\ &+ \frac{C}{\nu}\,[u_{n-2} - u_n] + \frac{C}{\nu}\,[u_{n+2} - u_n] \\ &= \frac{C}{\nu}\,[u_{n+2} + u_{n-2} - 2u_n] + C\,[u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n] \end{aligned}$$

1. Mit dem Ansatz

$$u_n(t) = u_0 \mathrm{e}^{i(qna-\omega t)}$$

erhält man hieraus

$$\begin{aligned} -M\omega^2 u_0 &= \frac{C}{\nu}\left[\mathrm{e}^{2iqa} + \mathrm{e}^{-2iqa} - 2\right] u_0 \\ &+ C\left[\mathrm{e}^{iqa} + \mathrm{e}^{-iqa} - 2\right] u_0 \\ M\omega^2 &= 2\frac{C}{\nu}\,[1 - \cos 2qa] + 2C\,[1 - \cos qa] \\ \omega^2 &= \frac{4C}{\nu M}\sin^2 qa + \frac{4C}{M}\sin^2\frac{qa}{2} \end{aligned}$$

wobei wir die Identität $1 - \cos z = 2\sin^2 z/2$ benutzt haben. Die gesuchte Dispersionsrelation lautet somit

$$\omega^2(q) = \frac{4C}{M}\left[\sin^2\frac{qa}{2} + \frac{1}{\nu}\sin^2 qa\right]$$

Schließlich verwenden wir noch

$$\sin z = 2\sin\frac{z}{2}\cos\frac{z}{2} \quad \leftrightarrow \quad \sin^2 z = 4\sin^2\frac{z}{2}\cos^2\frac{z}{2}$$

und erhalten als Dispersionsrelation

$$\begin{aligned} \omega^2(q) &= \frac{4C}{M}\sin^2\frac{qa}{2}\left[1 + \frac{4}{\nu}\cos^2\frac{qa}{2}\right] \\ \omega(q) &= 2\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|\sqrt{\left[1 + \frac{4}{\nu}\cos^2\frac{qa}{2}\right]} \\ &\overset{\nu\to\infty}{=} 2\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right| \end{aligned}$$

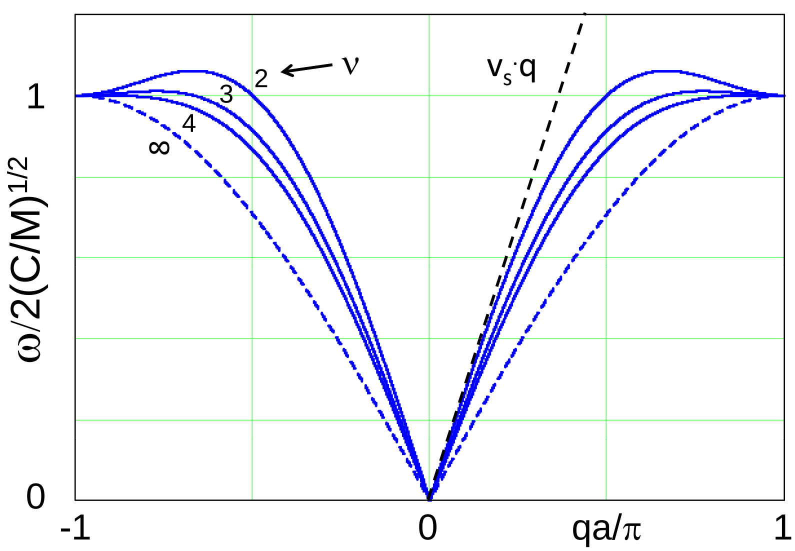
2. Das Maximum von $\omega^2(q)$ folgt aus der Gleichung ($x = qa/2$)

$$\begin{aligned} f(x) &= \sin^2 x\left[1 + \frac{4}{\nu}\cos^2 x\right] \\ f'(x) &= 2\sin x\cos x\left[1 + \frac{4}{\nu}\cos^2 x\right] - \sin^2 x\frac{4}{\nu}2\sin x\cos x \\ &= 2\sin x\cos x\left[1 + \frac{4}{\nu}\cos^2 x - \frac{4}{\nu}\sin^2 x\right] \\ &= 2\sin x\cos x\left[1 + \frac{4}{\nu}\left(1 - 2\sin^2 x\right)\right] = 0 \end{aligned}$$

daraus folgt sofort

$$\sin^2 x \;=\; \frac{\nu}{8}\left(1+\frac{4}{\nu}\right) = \frac{4+\nu}{8}$$

Man beachte, dass die obigen Gleichungen eine Schlussfolgerung über die Existenz eines Maximums in der Dispersionskurve $\omega(q)$ für $q \leq \pi/a$ zulassen: aus $\max\{\sin^2 x\} = 1$ folgt nämlich dass $\nu$ nur die Werte $\nu = 2, 3, 4$ annehmen kann. Für $\nu = 5$ liegt das Maximum bei $q = \pi/a$, wie im Fall $\nu \to \infty$.




3. Für die maximale Frequenz haben wir somit das Resultat erhalten:

$$\omega_{\mathrm{max}}^2 = \max\left\{\omega^2(q)\right\} \;=\; 4\frac{C}{M}\frac{4+\nu}{8}\left[1+\frac{4}{\nu}\frac{4-\nu}{8}\right] = 4\frac{C}{M}\frac{(4+\nu)^2}{16\nu}$$

und man erkennt, dass für die Fälle $\nu = 2, 3, 4$ das Maximum bei Wellenzahlen $q < \pi/a$ liegt. Im Spezialfall $\nu = 2$ ergibt sich:

$$\omega_{\mathrm{max}} = \max\left\{\omega(q)\right\} = \frac{3}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{C}{M}}$$

4. Die Schallgeschwindigkeit $v_{\mathrm{s}}$ erhalten wir als Steigung der Dispersionskurve für $q \to 0$:

$$\begin{aligned} \omega(q) &= 2\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|\sqrt{1+\frac{4}{\nu}\cos^2\frac{qa}{2}} \\ v_{\mathrm{s}} &= \left\{\frac{\partial\omega(q)}{\partial q}\right\}_{\mathbf{q}\to 0} \end{aligned}$$

In diesem Limes kann man schreiben

$$\sin\frac{qa}{2} \approx \frac{qa}{2} \quad \text{und} \quad \cos\frac{qa}{2} \approx 1$$

und man bekommt als Resultat

$$\begin{aligned} \omega(q) &= 2\sqrt{\frac{C}{M}}\frac{qa}{2}\sqrt{1+\frac{4}{\nu}} = \sqrt{\frac{4+\nu}{\nu}}\sqrt{\frac{Ca^2}{M}}q \\ v_{\mathrm{s}} &= \sqrt{\frac{4+\nu}{\nu}}\sqrt{\frac{Ca^2}{M}} \overset{\nu=2}{=} \sqrt{3\frac{Ca^2}{M}} \end{aligned}$$