**WALTHER–MEISSNER–INSTITUT** 9. Dezember 2010
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 8**

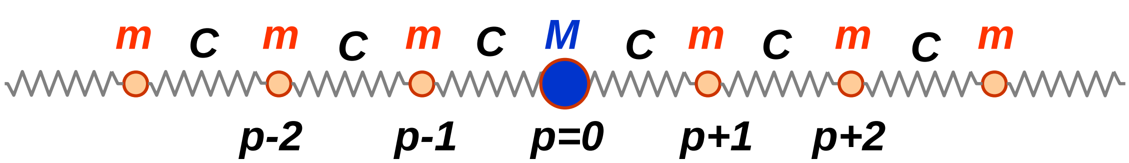
Übungsaufgaben zur

# Festkörperphysik I, WS 2010/2011

## 5 Dynamik des Kristallgitters

### 5.5 Massendefekt in linearer Atomkette

Wir betrachten eine lineare Atomkette aus Atomen der Masse $m$ und Gitterabstand $a$. Die Federkonstante zwischen allen Atomen sei gleich und betrage $C$. Die Kopplung der Atome soll durch nächste Nachbarwechselwirkungen beschrieben werden (siehe Abbildung). Wir nehmen an, dass ein Atom an der Position $p = 0$ durch ein anderes Atom der Masse $M$ ersetzt ist.




Berechnen Sie die Eigenfrequenz dieser linearen Kette und diskutieren Sie die Lösung. Gehen Sie dabei von dem Lösungsansatz

$$u_p = A\,\mathrm{e}^{-q|p|a - i\omega t}$$

für die Auslenkung $u_p$ des $p$-ten Atoms aus (lokalisierte Mode). Hierbei ist $p$ eine ganze Zahl.

### 5.6 Zustandsdichte der Phononen einer eindimensionalen Kette

Unter der Voraussetzung, dass nur Kräfte zwischen direkt benachbarten Atomen wirken, lautet die Dispersionsrelation einer linearen Kette von Atomen mit Abstand $a$ und Masse $M$

$$\omega = \omega_{\max}\left|\sin\frac{qa}{2}\right| \quad .$$

Hierbei ist $\omega_{\max}$ die maximale Frequenz im longitudinalen Phononenspektrum der Kette.

1. Berechnen Sie die Zustandsdichte $D(\omega)$ der longitudinalen Phononen. Skizzieren Sie den Verlauf der Funktion und vergleichen Sie das Ergebnis mit der Zustandsdichtefunktion, die wir im Fall der Debyeschen Kontinuumsnäherung erhalten.
2. Welcher Zusammenhang besteht zwischen der Maximalfrequenz $\omega_{\max}$ des Phononenspektrums und der oberen Grenzfreuqenz $\omega_D$, welche in der Debyeschen Kontinuumsnäherung angesetzt wird.

## 5.7 Singularität in der Zustandsdichte

Nehmen Sie an, dass ein optischer Phononenzweig im Dreidimensionalen nahe $\mathbf{q} = 0$ eine Dispersionsrelation der Form $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 - A\mathbf{q}^2$ hat. Zeigen Sie, dass dann gilt:

$$D(\omega_{\mathbf{q}}) \quad = \quad \begin{cases} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{2\pi}{A^{3/2}}(\omega_0 - \omega_{\mathbf{q}}^2)^{1/2} & \text{für } \omega_{\mathbf{q}} < \omega_0 \\ 0 & \text{für } \omega_{\mathbf{q}} > \omega_0 \end{cases} .$$

Diskutieren Sie, unter welchen Bedingungen Singularitäten in der Zustandsdichte auftauchen.

## 5.8 Kohn–Anomalie

Wir nehmen an, dass die interplanare Kraftkonstante $C_p$ zwischen zwei benachbarten Gitterebenen die Form

$$C_p = A_1 \frac{\sin pQa}{p}$$

hat. Hierbei ist $A_1$ eine (Feder–) Konstante, $Q$ eine (konstante) Wellenzahl und $p$ durchläuft alle ganzen Zahlen. Eine solche Form erwarten wir für Metalle. Verwenden Sie die Dispersionsrelation

$$\omega_q^2 = \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p(1 - \cos pqa)$$

um einen Ausdruck für $\omega_q^2$ und $\partial\omega_q^2/\partial q$ zu finden. Beweisen Sie, dass für $q = Q$ der Ausdruck $\partial\omega_q^2/\partial q$ unendlich wird. Trägt man $\omega_q^2$ oder $\omega_q$ gegen $q$ auf, so ergibt sich bei $Q$ eine vertikale Tangente: In der Phononendispersionsrelation $\omega_q$ tritt bei $Q$ ein Knick auf. Ein damit zusammenhängender Effekt wurde von W. Kohn vorhergesagt (Phys. Rev. Lett. **2**, 393 (1959)).

**WALTHER–MEISSNER–INSTITUT** 9. Dezember 2010
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 8**

Lösungen der Übungsaufgaben zur

# Festkörperphysik I, WS 2010/2011

## 5 Dynamik des Kristallgitters

### 5.5 Massendefekt in linearer Atomkette

Die Bewegungsgleichungen der Atome mit den Platznummern $p = -1, 0, 1$ lauten (vgl. Blatt 7, Augfgabe 5.2)

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_{-1} &= C\left[u_{-2} + u_0 - 2u_{-1}\right] \\ M\ddot{u}_0 &= C\left[u_{-1} + u_1 - 2u_0\right] \\ m\ddot{u}_1 &= C\left[u_0 + u_2 - 2u_1\right] \end{aligned}$$

Dies läßt sich für beliebige Indizes $p \neq 0$ verallgemeinern zu

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_p &= C\left[u_{p-1} + u_{p+1} - 2u_p\right] \\ M\ddot{u}_0 &= C\left[u_{-1} + u_1 - 2u_0\right] \end{aligned}$$

Zur Lösung dieser gekoppelten Gleichungen machen wir den Ansatz

$$u_p(t) = A\mathrm{e}^{-q|p|a - i\omega t}$$

welcher für positive Wellenzahlen $q > 0$ ein räumliches Abklingen der Amplitude mit der Entfernung vom Massendefekt antizipiert.
Für $p = 0$ erhält man

$$-M\omega^2 A = CA\left[\mathrm{e}^{-qa} + \mathrm{e}^{-qa} - 2\right] \quad \text{(i)}$$

Für $p > 0$ erhält man

$$\begin{aligned} -m\omega^2 A\mathrm{e}^{-q|p|a} &= CA\left[\mathrm{e}^{-q|p-1|a} + \mathrm{e}^{-q|p+1|a} - 2\mathrm{e}^{-q|p|a}\right] \\ -m\omega^2 &= C\left[\mathrm{e}^{qa} + \mathrm{e}^{-qa} - 2\right] \quad \text{(ii)} \end{aligned}$$

Für $p < 0$ erhält man

$$\begin{aligned} -m\omega^2 A\mathrm{e}^{-q|p|a} &= CA\left[\mathrm{e}^{-q|p+1|a} + \mathrm{e}^{-q|p-1|a} - 2\mathrm{e}^{-q|p|a}\right] \\ -m\omega^2 &= C\left[\mathrm{e}^{-qa} + \mathrm{e}^{+qa} - 2\right] \end{aligned}$$

also das gleiche Resultat (ii) wie im Fall $p > 0$. Die verbleibende Aufgabe ist somit die Lösung der gekoppelten Gleichungen (i) und (ii). Hierzu setzen wir $z = \mathrm{e}^{qa}$ und können schreiben

$$\begin{aligned} -\omega^2 &= 2\frac{C}{M}\left[\frac{1}{z} - 1\right] \quad \rightarrow \quad -\omega^2 z = 2\frac{C}{M}\left[1 - z\right] \quad \text{(i)} \\ -\omega^2 &= \frac{C}{m}\left[z + \frac{1}{z} - 2\right] \quad \rightarrow \quad -\omega^2 z = \frac{C}{m}\left[z^2 - 2z + 1\right] = \frac{C}{m}(1-z)^2 \quad \text{(ii)} \end{aligned}$$

Division von (ii) durch (i) ergibt dann sofort

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{2}\frac{M}{m}(1-z) \quad \rightarrow \quad z = 1 - 2\frac{m}{M} \\ qa &= \ln\left(1 - 2\frac{m}{M}\right) \end{aligned}$$

Dieses Resultat kann man nun in (ii) einsetzen um die Dispersion $\omega$ zu erhalten

$$\begin{aligned} -\omega^2 &= \frac{C}{m}\frac{(1-z)^2}{z} \quad \rightarrow \quad \omega^2 = 4\frac{C}{m}\frac{\frac{m}{M}}{2 - \frac{M}{m}} \\ \omega &= 2\sqrt{\frac{C}{m}}\sqrt{\frac{\frac{m}{M}}{2 - \frac{M}{m}}} \end{aligned}$$

Zur weiteren Diskussion des physikalischen Gehalts dieser Dispersionsrelation definieren wir das Massenverhältnis $x = M/m$ und erhalten

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2\sqrt{C/m}}{\sqrt{x(2-x)}} \\ qa &= \ln\frac{x-2}{x} \end{aligned}$$

Für die Variable $x$ kann man nun eine Aufteilung in verschiedene Bereiche vornehmen:

1. $M > 2m$ oder $x > 2$: In diesem Fall ist

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2\sqrt{C/m}}{i\sqrt{x(x-2)}} = -i\Omega \\ qa &= \ln\frac{x-2}{x} = -|q|a \end{aligned}$$

und man erhält für die Amplitude $u_p$

$$u_p = A\mathrm{e}^{|qp|a - \Omega t}$$

Dies bedeutet ein Anwachsen der Amplitude mit der Entfernung vom Massendefekt und ein exponentielles Abklingen mit der Zeit.

2. $m < M < 2M$ oder $1 < x < 2$: In diesem Fall kann man schreiben

$$\begin{aligned}\omega &= \frac{2\sqrt{C/m}}{\sqrt{x(2-x)}} \\ qa &= \ln\left[-\frac{2-x}{x}\right] = i\pi + \ln\frac{2-x}{x} = i\pi - |Q|a\end{aligned}$$

und man erhält für die Amplitude $u_p$

$$u_p = A\mathrm{e}^{-i\pi|p|+|Qp|a-i\omega t}$$

Dies bedeutet erneut ein Anwachsen der Amplitude mit der Entfernung vom Massendefekt und eine harmonische Zeitabhängigkeit.

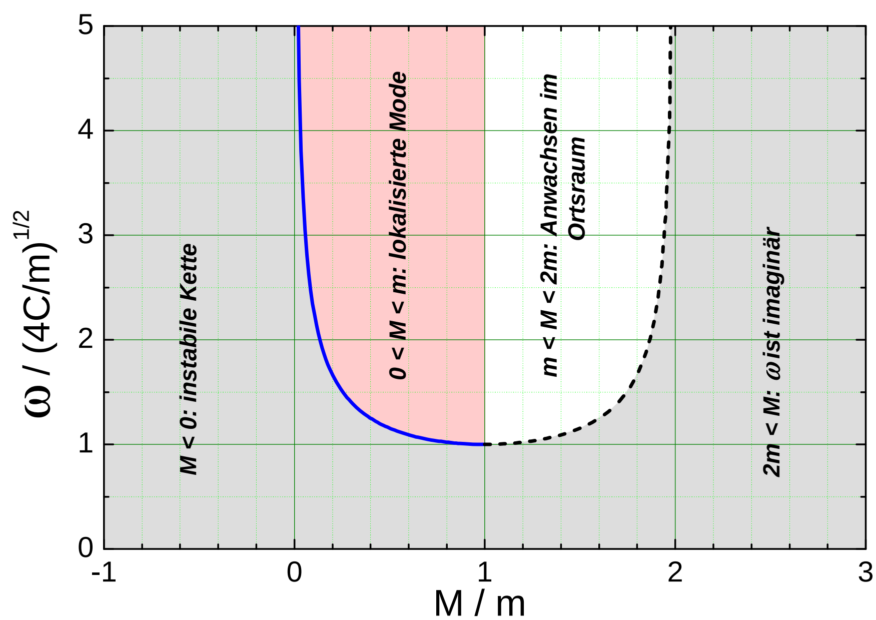
3. $0 < M < m$ oder $0 < x < 1$: In diesem Fall gilt

$$\begin{aligned}\omega &= \frac{2\sqrt{C/m}}{\sqrt{x(2-x)}} \\ qa &= \ln\frac{2-x}{x} > 0\end{aligned}$$

und man bekommt für die Amplitude $u_p$

$$u_p = A\mathrm{e}^{-|qp|a-i\omega t}$$

Wir sehen, dass unser Ansatz nur für $0 < M < m$ sinnvoll ist. Die Zeitabhängigkeit ist hierbei harmonisch und die Ortsabhängigkeit eine abklingende Welle. Es sei darauf hingewiesen, dass die Oszillationsfrequenz $\omega \geq \sqrt{4C/m}$ ist, wohingegen für eine Kette ohne Defektatom $\omega = \sqrt{4C/m}$ gilt. Das heißt, die Oszillationsfrequenz der lokalisierten Mode liegt oberhalb der maximalen Frequenz der Schwingungsmoden des idealen Gitters. Dies ist zu erwarten, da eine kleinere Masse zu einer größeren Schwingungsfrequenz führen sollte. Anschaulich kann man sagen, dass das Gitter lokal aufgrund von $M < m$ mit einer höheren Frequenz schwingen kann, sich diese Mode aber nicht im Gitter ausbreiten kann. Somit kommt es zu einer lokalisierten Mode.



Hinweis: Um das Problem für andere Werte von $M$ zu lösen, muss ein anderer Ansatz gewählt werden (siehe hierzu ***Principles of the Theory of Solids***, J. M. Ziman, Cambridge University Press, Cambridge (1972) und *Solid State Theory*, W. A. Harrison, McGraw-Hill, New York (1970)).

## 5.6 Zustandsdichte der Phononen einer eindimensionalen Kette

Zu Beginn sei an dieser Stelle wiederholt, dass die Moden in einer linearen Kette der Länge $L = Na$ (bei Annahme periodischer Randbedingungen) gegeben sind durch

$$q = \frac{n}{N}\frac{2\pi}{a} \quad ; \quad -\frac{N}{2} \leq n \leq \frac{N}{2}$$

Die Zahl der Moden zwischen den Wellenzahlen $q$ und $q + dq$ beträgt dann

$$dq = \frac{2\pi}{Na}dn = \frac{2\pi}{L}dn \quad \rightarrow \quad dn = \underbrace{\frac{L}{2\pi}}_{Z(q)} dq = Z(q)dq$$

Dieser Sachverhalt kann bei der Berechnung von Summen über Wellenzahlen

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \sum_q F(q) = \sum_n F(n) \rightarrow \int_{-N/2}^{N/2} dnF(n) \\ &= \frac{L}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dqF(q) = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dqZ(q)F(q) = 2\int_0^{\pi/a} dqZ(q)F(q) \end{aligned}$$

benutzt werden. Als Spezialfall ergibt sich

$$\langle 1 \rangle = \frac{Na}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq = \frac{Na}{2\pi}\left[\frac{\pi}{a} - \left(-\frac{\pi}{a}\right)\right] = \frac{L}{a} = N$$

Wir betrachten nun Phononen in dieser linearen Kette mit den Dispersionsrelationen

1. Allgemeine Dispersion (vgl. Übungsblatt 7, Aufgabe 5.2)

   $$\omega_q = \omega(q) = \omega_{\mathrm{max}}|\sin\frac{qa}{2}|$$

   Für diese Dispersion erhält man im langwelligen Limes

   $$\omega_q \overset{q\rightarrow 0}{=} v_{\mathrm{s}} \cdot q \quad ; \quad v_{\mathrm{s}} = \frac{a}{2}\omega_{\mathrm{max}}$$

   mit $v_{\mathrm{s}}$ der Schallgeschwindigkeit.

2. Schalldispersion in der Debyeschen Kontinuumsnäherung

   $$\omega_q = v_{\mathrm{s}} \cdot q\ \Theta(\omega_{\mathrm{D}} - v_{\mathrm{s}} \cdot q) \quad ; \quad \omega_{\mathrm{D}} = \frac{\pi}{2}\omega_{\mathrm{max}}$$

   mit $\omega_{\mathrm{D}}$ der Debye– (Abschneide–) Frequenz und $\Theta$ der Heaviside–Sprungfunktion.

Bei gegebener Dispersionsrelation $\omega_q$ ist es nun von Vorteil, die Wellenzahl–Summen $\langle F\rangle$ wie folgt in ein Integral über $\omega_q$ umzuschreiben:

$$\langle F\rangle \;=\; 2\int_0^{\pi/a} dq Z(q)F(q) = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega_q \underbrace{\frac{dq}{d\omega_q}2Z(q)}_{=D(\omega_q)} F(\omega_q) = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega_q D(\omega_q)F(\omega_q)$$

wobei wir die Zustandsdichte im Frequenzraum

$$D(\omega) = 2Z(q)\frac{dq}{d\omega} = \frac{L}{\pi}\frac{dq}{d\omega}$$

definiert haben. Beispiele für $D(\omega)$ sind

1. allgemeine Dispersion (vgl. Übungsblatt 7, Aufgabe 5.2)

$$\begin{aligned}\omega_q &= \omega_{\max}|\sin\frac{qa}{2}| \quad\rightarrow\quad q = \frac{2}{a}\arcsin\frac{\omega_q}{\omega_{\max}}\\ \frac{dq}{d\omega_q} &= \frac{2}{a}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2-\omega_q^2}} \quad\rightarrow\quad D(\omega_q) = \frac{2L}{\pi a}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2-\omega_q^2}}\end{aligned}$$

   Zur Kontrolle berechnen wir für diesen Fall

$$\langle 1\rangle \;=\; \int_0^{\omega_{\max}} d\omega_q D(\omega_q) = \frac{2L}{\pi a}\int_0^{\omega_{\max}}\frac{d\omega_q}{\sqrt{\omega_{\max}^2-\omega_q^2}} \overset{\omega=\omega_{\max}\cdot x}{=} \frac{2L}{\pi a}\underbrace{\int_0^1\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}}_{=\pi/2} = \frac{L}{a} = N$$

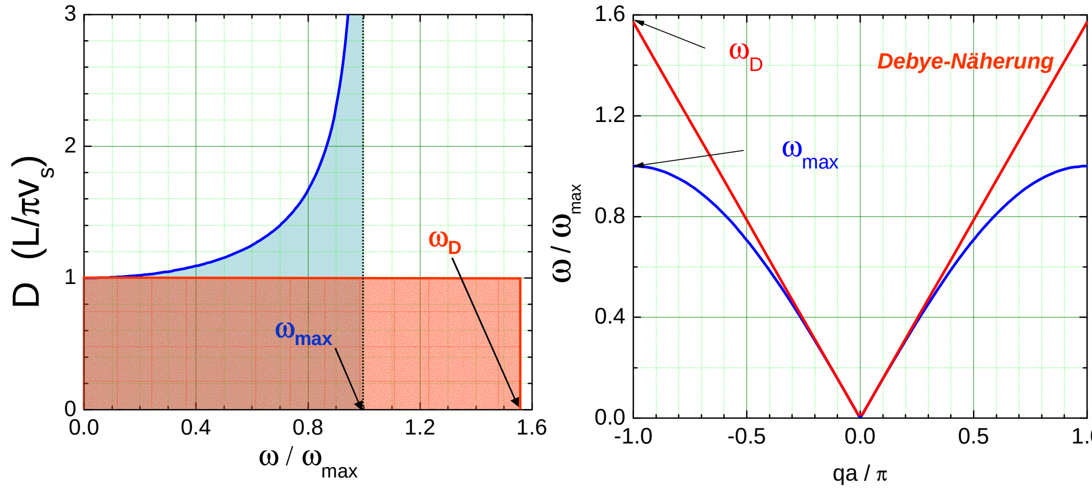
2. Schalldispersion in der Debyeschen Kontinuumsnäherung

$$\begin{aligned}\omega_q &= v_{\mathrm{s}}q \quad\rightarrow\quad q = \frac{\omega_q}{v_{\mathrm{s}}}\\ \frac{dq}{d\omega_q} &= \frac{1}{v_{\mathrm{s}}} \quad\rightarrow\quad D(\omega_q) = \frac{L}{\pi v_{\mathrm{s}}}\end{aligned}$$

   Zur Kontrolle berechnen wir auch hier

$$\langle 1\rangle \;=\; \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} d\omega_q D(\omega_q) = \frac{L\omega_{\mathrm{D}}}{\pi v_{\mathrm{s}}} = \frac{Na\omega_{\mathrm{D}}}{\pi\frac{a}{2}\omega_{\max}} = N\underbrace{\frac{2}{\pi}\frac{\omega_{\mathrm{D}}}{\omega_{\max}}}_{=1} = N$$

   Der Verlauf der Zustandsdichtefunktionen in diesen beiden Fällen ist in der Abbildung skizziert. Im Grenzfall $q\rightarrow 0$ müssen natürlich beide Funktionen übereinstimmen, da die beiden zugrundeliegenden Dispersionsrelationen in diesem Grenzfall identisch sind.




Während der Verlauf beider Zustandsdichtefunktionen für $\omega \ll \omega_{\text{max}}$ gut übereinstimmt, gibt es bei $\omega \simeq \omega_{\text{max}}$ starke Abweichungen. Insbesondere weist die exakte Zustandsdichtefunktion bei $\omega = \omega_{\text{max}}$ eine Singularität auf, wodurch sie sich von der Debye-Näherung grundlegend unterscheidet.

## 5.7 Singularität in der Zustandsdichte

Gegeben ist eine Dispersionsrelation in $D = 3$ von der Form

$$\omega_{\mathbf{q}} \quad = \quad \omega_0 - A\mathbf{q}^2$$

Auflösen nach $q = ||\mathbf{q}||$ liefert

$$q = \sqrt{\frac{\omega_0 - \omega_{\mathbf{q}}}{A}} \quad \rightarrow \quad \left|\frac{dq}{d\omega_{\mathbf{q}}}\right| = \frac{1}{2\sqrt{A}} \frac{1}{\sqrt{\omega_0 - \omega_{\mathbf{q}}}}$$

Die Zustandsdichte $D(\omega_q)$ erhält man aus der Betrachtung

$$\begin{aligned} D(\omega_{\mathbf{q}})d\omega_{\mathbf{q}} \quad &= \quad d^3qZ(\mathbf{q}) = d^3q\frac{V}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}4\pi q^2 dq = \underbrace{\frac{V}{(2\pi)^3}4\pi q^2\left|\frac{dq}{d\omega_{\mathbf{q}}}\right|}_{D(\omega_{\mathbf{q}})} d\omega_{\mathbf{q}} \\ D(\omega_{\mathbf{q}}) \quad &= \quad \frac{V}{(2\pi)^3}4\pi q^2\left|\frac{dq}{d\omega_{\mathbf{q}}}\right| \end{aligned}$$

Nach Einsetzen von $dq/d\omega_{\mathbf{q}}$ erhält man die Zustandsdichte für den Fall $\omega_{\mathbf{q}} < \omega_0$ in der Form

$$D(\omega_{\mathbf{q}}) \quad = \quad \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{2\pi}{A^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\omega_0 - \omega_{\mathbf{q}}}$$

Für den umgekehrten Fall $\omega_{\mathbf{q}} > \omega_0$ verschwindet $D(\omega)$ für alle $\omega$. Dann ist die Zustandsdichte nämlich rein imaginär. Wir erhalten somit einen Sprung in der Zustandsdichte bei $\omega = \omega_0$.

### 5.8 Kohn–Anomalie

Wir gehen von einer Kraftkonstante der Form

$$C_{\mathbf{p}} = C_0 \frac{\sin Qpa}{Q_0 pa} = A_1 \frac{\sin Qpa}{p} \quad ; \quad A_1 := \frac{C_0}{Q_0 a}$$

aus. Hier sind $C_0$, $Q_0$ und $A$ Konstanten. Einsetzen in die Dispersionsrelation (vgl. Übungsblatt 7, Aufgabe 5.2)

$$\omega_q^2 \quad = \quad \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p \left[1 - \cos qpa\right]$$

liefert

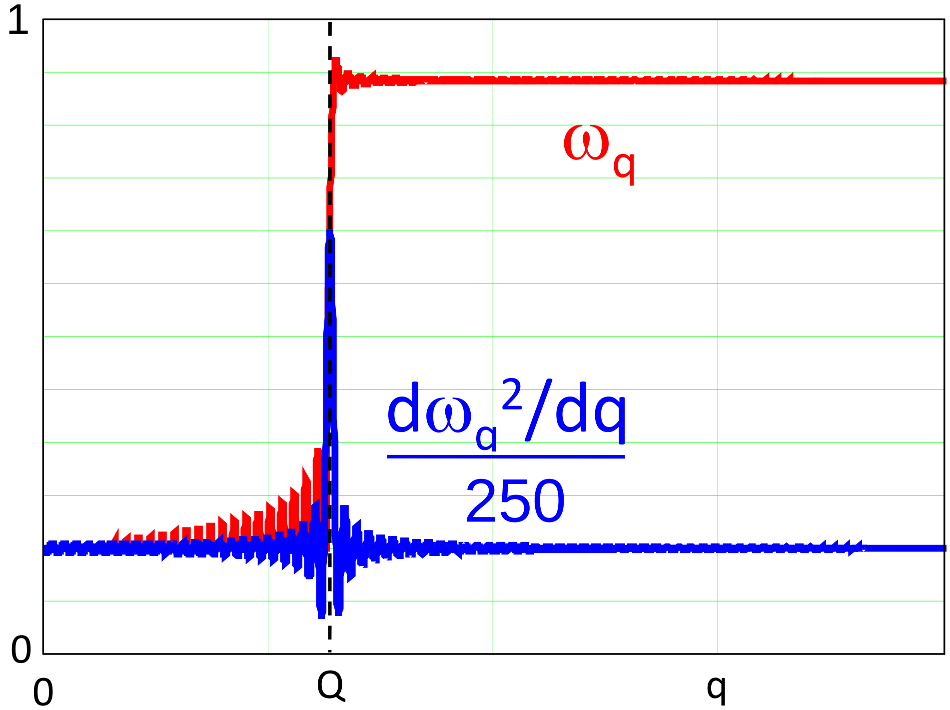
$$\omega_q^2 \quad = \quad \frac{2A_1}{M} \sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p} \left[1 - \cos qpa\right]$$

Differenzieren nach der Wellenzahl $q$ ergibt

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \omega_q^2}{\partial q} &= \frac{2A_1}{M} \sum_{p>0} \frac{\sin Qpa}{p} pa \sin qpa \\
&= \frac{2A_1}{M} a \sum_{p>0} \sin Qpa \sin qpa \\
&= \frac{2A_1}{M} a \sum_{p>0} \frac{\mathrm{e}^{iQpa} - \mathrm{e}^{-iQpa}}{2i} \frac{\mathrm{e}^{iqpa} - \mathrm{e}^{-iqpa}}{2i} \\
&= -\frac{A_1}{2M} a \sum_{p>0} \left[\mathrm{e}^{i(Q+q)pa} - \mathrm{e}^{i(Q-q)pa} - \mathrm{e}^{i(-Q+q)pa} + \mathrm{e}^{-i(Q+q)pa}\right] \\
&= -\frac{A_1}{M} a \sum_{p>0} \left[\cos(Q+q)pa - \cos(Q-q)pa\right] \\
&= \frac{A_1}{M} a \sum_{p>0} \left[\cos(Q-q)pa - \cos(Q+q)pa\right]
\end{aligned}$$

Man erkennt sofort dass

$$\begin{aligned}
\lim_{q \to Q} \frac{\partial \omega_q^2}{\partial q} &= \frac{A_1}{M} a \sum_{p>0} \underbrace{\left[1 - \cos 2Qpa\right]}_{2 \sin^2 Qpa} \\
&= \frac{2A_1}{M} a \sum_{p>0} \sin^2 Qpa
\end{aligned}$$




und dass diese Summe bei $q = Q$ divergiert (siehe auch die obige Abbildung). Dies ist gerade die sogenannte Kohn–Anomalie.

**Zusatz (für besonders Interessierte)**: Um diesen Sachverhalt besser verstehen zu können, betrachten wir noch den folgenden allgemeineren Ansatz für die $p$–Abhängigkeit der Kraftkonstanten $C_p$:

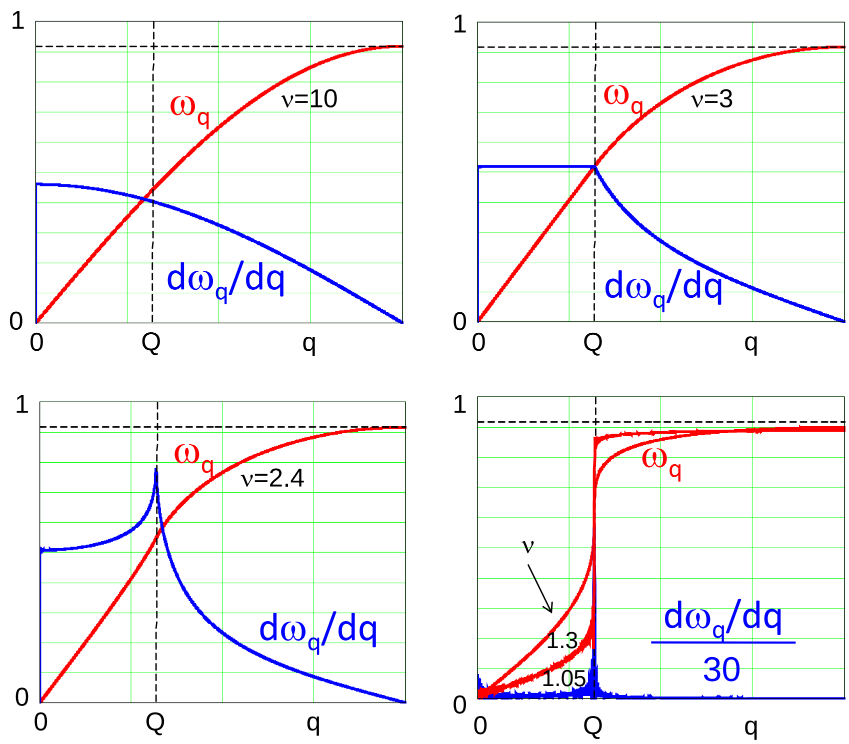
$$C_{p\nu} \;=\; C_0 \frac{\sin pQa}{(pQ_0 a)^\nu} = A_\nu \frac{\sin pQa}{p^\nu} \quad ; \quad A_\nu = \frac{C_0}{(Q_0 a)^\nu}$$

Die obige Rechnung behandelt somit nur den exotischen langreichweitigen Grenzfall $\nu = 1$. Mit diesem Modell–Ansatz für Kraftkonstante lautet die Dispersionsrelation für longitudinale Phononen (vgl. Übungsblatt 7, Aufgabe 5.2)

$$\begin{aligned}
\omega_q^2 &= \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_{p\nu} \left[1 - \cos pqa\right] \\
&= 4 \frac{A_\nu}{M} \sum_{p>0} \frac{\sin pQa}{p^\nu} \sin^2 \frac{pqa}{2} \\
\omega_q &= 2 \sqrt{\frac{A_\nu}{M}} \sqrt{\sum_{p>0} \frac{\sin pQa}{p^\nu} \sin^2 \frac{pqa}{2}}
\end{aligned}$$

Die Ableitung der Dispersion nach der Wellenzahl lautet

$$
\begin{aligned}
\frac{d\omega_q}{dq} &= 2\sqrt{\frac{A_\nu}{M}}\frac{1}{2}\frac{\frac{d}{dq}\left[\sum_{p>0}\frac{\sin pQa}{p^\nu}\sin^2\frac{pqa}{2}\right]}{\sqrt{\sum_{p>0}\frac{\sin pQa}{p^\nu}\sin^2\frac{pqa}{2}}} \\
&= \sqrt{\frac{A_\nu}{M}}\frac{\sum_{p>0}\frac{\sin pQa}{p^{\nu-1}}2\sin\frac{pqa}{2}\cos\frac{pqa}{2}\frac{pa}{2}}{\sqrt{\sum_{p>0}\frac{\sin pQa}{p^\nu}\sin^2\frac{pqa}{2}}} \\
&= \frac{a}{2}\sqrt{\frac{A_\nu}{M}}\frac{\sum_{p>0}\frac{\sin pQa}{p^{\nu-1}}\sin pqa}{\sqrt{\sum_{p>0}\frac{\sin pQa}{p^\nu}\sin^2\frac{pqa}{2}}}
\end{aligned}
$$




Die obige Abbildung verdeutlicht die qualitativen Veränderungen (das *Weichwerden*) der Phononendispersion mit fallender Potenz $\nu$. Offensichtlich markiert $\nu = 3$ den Grenzfall einer konstanten Gruppengeschwindigkeit für $0 \leq q \leq Q$. Für $\nu \leq 3$ wächst die Gruppengeschwindigkeit im Bereich $0 \leq q \leq Q$ monoton an, um schließlich bei $q = Q$ eine Spitze zu entwickeln. Für $\nu = 1$ hat die Dispersion $\omega_q$ die Form einer Stufe, und die Gruppengeschwindigkeit divergiert bei $q = Q$.