

## Übungsaufgaben zur Vorlesung

# Physik der Kondensierten Materie I

## WS 2017/2018

### 5 Dynamik des Kristallgitters

#### 5.1 Wellengleichung im Kontinuum

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.

- (a) Zeigen Sie, dass die Auslenkung  $u_n(t)$  des  $n$ -ten Atoms der Differentialgleichung

$$M \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} = -C [2u_n(t) - u_{n+1}(t) - u_{n-1}(t)]$$

genügt.

- (b) Lösen Sie diese Gleichung mit dem Ansatz  $u_n(t) = u_0(t)e^{iqna}$  und leiten Sie eine Dispersionsrelation zwischen Frequenz  $\omega$  und der Wellenzahl  $q$  ab.
- (c) Diskutieren Sie den langwelligen Limes  $qa \ll 1$  und zeigen Sie insbesondere, dass sich aus der obigen Differentialgleichung die Schall-Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} - v_s^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = 0$$

ergibt, wenn man zur Kontinuumsbeschreibung  $u_{n\pm 1}(t) = u(x \pm a, t)$  übergeht.

## 5.2 Lineare Kette aus gleichen Atomen

Gegeben sei eine lineare, quasi-elastische Kette aus Atomen der Masse  $M = 200$  amu. Der Abstand zwischen benachbarten Atomen sei  $a = 4 \text{ \AA}$ . Wechselwirkung herrsche nur zwischen den nächsten Nachbarn.

- Die Schallgeschwindigkeit sei  $v_s = 4000$  m/s. Wie groß ist die Kopplungskonstante  $C$  zwischen benachbarten Atomen?
- Wie groß ist die maximale Frequenz einer ungedämpften Welle?
- Skizzieren Sie die Auslenkung einiger Atome für eine Welle mit  $q = \frac{\pi}{a}$  und für eine Welle mit  $q = \frac{\pi}{2a}$ , jeweils für  $\omega t = 0$  und  $\omega t = \frac{\pi}{2}$ .

## 5.3 Lineare Kette aus zweiatomigen Molekülen

Untersuchen Sie die Grundschnwingungen 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 Abb. 1). 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.  $\text{H}_2$  dar.

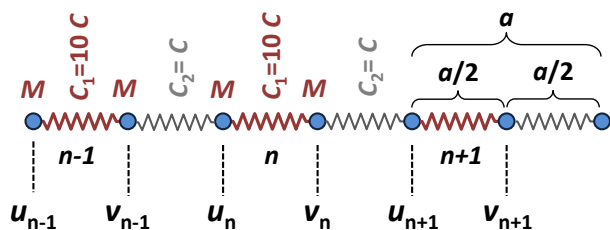


Abbildung 1: Lineare Kette aus zweiatomigen Molekülen.

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