

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I
WS 2020/2021**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 ω 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 mit übernächster Nachbarwechselwirkung

Betrachten Sie eine lineare Kette aus identischen Atomen bei den Positionen $x_p = pa$ mit $p = 1, 2, \dots$. Die Wechselwirkung sei harmonisch und die Kopplungskonstante zwischen übernächsten Nachbarn sei $1/\nu$ ($\nu = 2, 3, \dots$) mal so groß wie die Kopplungskonstante zwischen den nächsten Nachbarn. Nehmen Sie an, dass die Kopplung zu weiter voneinander entfernten Atomen vernachlässigbar ist.

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

6 Thermische Eigenschaften des Kristallgitters

6.1 Spezifische Wärmekapazität

Die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen, c_V , eines (dreidimensionalen) Kristalls ist gegeben durch

$$c_V = \frac{C_V}{V} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, r} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar\omega_r(\mathbf{q})}{e^{\frac{\hbar\omega_r(\mathbf{q})}{k_B T}} - 1}.$$

Hierbei ist r die Zahl der Phononenzweige und $k_B = 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ die Boltzmann-Konstante.

- Berechnen Sie den Hochtemperaturlimes ($\hbar\omega_r(\mathbf{q}) \ll k_B T$) von c_V für ein Gitter mit einer einatomigen Basis.
- Wie hängt $c_V(T)$ in einem Isolator bei tiefen Temperaturen von T ab? Was bedeutet "tiefe Temperatur" in diesem Zusammenhang? Was ist in einem Metall anders?
- Was besagt die Debyesche Näherung?
- Wie hängt die phononische Zustandsdichte $D(\omega)$ im Debye-Modell bei kleinen Energien (im dreidimensionalen Fall) von ω ab? Begründen Sie Ihre Antwort.
- Schätzen Sie die Debye-Wellenzahl q_D , die Debye-Frequenz ω_D und die Debye-Temperatur Θ_D für Silber ab. Hinweis: Silber hat eine kubisch flächenzentrierte Kristallstruktur mit Gitterkonstante $a = 4.09 \text{ \AA}$ und eine mittlere Schallgeschwindigkeit von 2600 m/s ($\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$).