10. Übung zur Struktur der Materie WS 2018/19

Ausgabe: 14.12.2018 — Prof. Dr. D. Suter
Abgabe: bis 21.12.2018 12:00 Uhr — Dr. J. Weingarten

Aufgabe 1: Lineare zwei-atomige Kette — 5 Punkte

Betrachten Sie eine lineare Kette von Atomen mit einer zwei-atomigen Basis. Die Kopplungskonstante sei C und das Verhältnis der Massen sei $M_2 = 3M_1 = 3m$. Dieses Beispiel haben Sie allgemein in der Vorlesung betrachtet. Berechnen Sie nun die jeweiligen Amplituden U_0 und V_0 für dieses Massenverhältnis für die drei Fälle $k = 0$, $k = \pi/(2a)$ und $k = \pi/a$, wobei a die Gitterkonstante ist. Skizzieren Sie abschließend die Auslenkungen der Atome.

Aufgabe 2: Regel von Dulong–Petit und Phononenfrequenzen — 5 Punkte

Ein monoatomarer Kristall hat eine einfach kubische Struktur und eine Dichte von $\rho = 10\,\mathrm{g/cm^3}$. In [111]-Richtung messen Sie eine Schallgeschwindigkeit von $v = 3000\,\mathrm{m/s}$. Außerdem messen Sie für nicht zu tiefe Temperaturen eine spezifische Wärmekapazität von $c = 500\,\mathrm{J/(K\,kg)}$.

a) Wie groß ist das Atomgewicht der Substanz?

b) Wie groß ist die Kantenlänge der kubischen Einheitszelle?

c) Wie groß ist die Phononenfrequenz $\omega_{\max}$ an der Brillouinzonengrenze in [111]-Richtung? Nehmen Sie dazu an, dass die Phononenfrequenz die aus der linearen Kette bekannte Form $\omega \propto \sin\left|\frac{\pi k}{2k_{\max}}\right|$ mit der Wellenzahl $k_{\max}$ an der Brillouinzonengrenze besitzt.

Aufgabe 3: Gesamtenergie — 5 Punkte

Es soll die Gesamtenergie der longitudinalen Phononen aus Aufgabe 1 von Übung 9 berechnet werden ($s \in \{1, ..., N\}$), jedoch nur mit Wechselwirkungen zu nächsten Nachbarn, also $C_2 = 0$.

a) Leiten Sie ausgehend von der Gesamtenergie eines harmonischen Oszillators einen Ausdruck für die Gesamtenergie E_g der longitudinalen Phononen ab.

b) Berechnen Sie das zeitliche Mittel $\langle E_g \rangle$ der Gesamtenergie aus Aufgabenteil 1 unter Verwendung des Lösungsansatzes

$$u_s = u_0 \cos(\omega t - ska)$$

mit $N \gg 1$. Benutzen Sie dafür auch die Dispersionsrelation $\omega(k) = \sqrt{\frac{4C}{M}} \sin\left|\frac{ka}{2}\right|$

Aufgabe 4: Zustandsdichte der Phononen einer eindimensionalen linearen Kette 5 Punkte

Wirken Kräfte nur zwischen direkt benachbarten Massenpunkten, dann lautet die Disperionsrelation einer linearen Kette von im Abstand a angeordneten Massenpunkten

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

Dabei entspricht $\omega_{\max}$ der Maximalfrequenz von Phononen im longutidinalen Phononenspektrum der linearen Kette.

a) Berechnen Sie für die lineare Kette identischer Massenpunkte die Zustandsdichtefunktion $D(\omega)$ longitudinaler Phononen. Skizzieren Sie den Verlauf dieser Funktion und vergleichen Sie das Ergebnis mit der Zustandsdichtefunktion, welche sich im Fall der Debyeschen Kontinuumsnäherung ergibt.

b) Welcher Zusammenhang besteht zwischen der Maximalfrequenz ω_{max} des Phonenenspektrums und der oberen Grenzfrequenz ω_{D}, welche in der Debyeschen Kontinuumsnäherung angesetzt wird?