Anhang C
Zweiatomige Kette dargestellt als einatomig

Einatomige Kette Masse M, Gitterkonstante a_1, Federkonstante c

$$\omega = \sqrt{\frac{4\,c}{M}}\left|\sin\left(\frac{1}{2}\,k\,a_1\right)\right| \tag{C.1}$$

Zweiatomige Kette Gitterkonstante a_2, Federkonstante c, Massen M_1, M_2 und reduzierte Masse $\mu = M_1 M_2/(M_1 + M_2)$

$$\omega^2 = \frac{c}{\mu} \pm c\sqrt{\frac{1}{\mu^2} - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2\left(\frac{1}{2}k\,a_2\right)} \tag{C.2}$$

Annahme: beide Massen identisch, also $M_1 = M_2 = M$ und damit $\mu = M/2$, und $a_2 = 2a_1$

$$\begin{aligned}
\omega^2 &= \frac{2c}{M} \pm c\sqrt{\frac{4}{M^2} - \frac{4}{M^2}\sin^2\left(\frac{1}{2}k\,a_2\right)} && \text{(C.3)}\\
&= \frac{2c}{M} \pm \frac{2c}{M}\sqrt{1 - \sin^2\left(\frac{1}{2}k\,a_2\right)} && \text{(C.4)}\\
&= \frac{2c}{M} \pm \frac{2c}{M}\cos\left(\frac{1}{2}k\,a_2\right) && \text{(C.5)}\\
&= \frac{2c}{M}\left(1 \pm \cos\left(k\,a_1\right)\right) && \text{(C.6)}
\end{aligned}$$

Zuerst den Minus-Zweig (mit $\sin(x/2) = \sqrt{1-\cos(x)}/\sqrt{2}$)

$$\begin{aligned}
\omega_- &= \sqrt{\frac{2c}{M}}\,\sqrt{1 - \cos\left(k\,a_1\right)} && \text{(C.7)}\\
&= \sqrt{\frac{4c}{M}}\,\sin\left(\frac{1}{2}k\,a_1\right) && \text{(C.8)}
\end{aligned}$$

stimmt also mit einatomiger Kette überein (zzgl. Betrag wegen Wurzel-Ziehen)

Jetzt plus-Zweig (mit $\cos(x/2) = \sqrt{1+\cos(x)}/\sqrt{2}$)

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2c}{M}}\,\sqrt{1+\cos(k\,a_1)} \tag{C.9}$$

$$= \sqrt{\frac{4c}{M}}\,\cos\left(\frac{1}{2}k\,a_1\right) \tag{C.10}$$

$$= \sqrt{\frac{4c}{M}}\,\sin\left(\frac{1}{2}k\,a_1 + \frac{\pi}{2}\right) \tag{C.11}$$

$$= \sqrt{\frac{4c}{M}}\,\sin\left(\frac{1}{2}(k+G)\,a_1\right) \tag{C.12}$$

mit $G = \pi/a_1 = 2\pi/a_2$, also dem kürzesten reziproken Gittervektor der *zweiatomigen* Kette. Auch optischer Ast stimmt mit einatomiger Kette überein, ist aber um G verschoben (zzgl. Betrag wegen Wurzel-Ziehen).

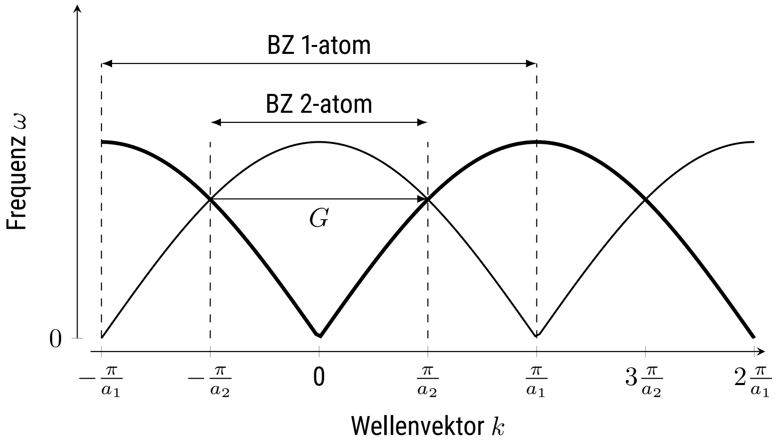

Abbildung C.1: Dispersionsrelationen ein- und zweiatomiger Ketten identischer Massen.

Die Dispersionsrelation der zweiatomigen Kette mit identischen Massen entsteht aus der einatomigen, indem man diese an der Grenze der BZ der zweiatomigen *zurückfaltet*. Dies spielt eine wichtige Rolle bei der Dispersionsrelation von Elektronen im Gitter (engl: folded zone scheme). Schon die Annahme eines Gitters hat einen Einfluss auf die Dispersionsrelation. Wenn man die einatomige Kette als zweiatomig betrachtet, nimmt man an, dass etwas periodisch in $a_2 = 2a_1$ ist. Man nimmt also ein Gitter an, das über dem einatomigen liegt. Es spielt dabei keine Rolle, dass es 'leer' ist, also sich nichts mit a_2 ändert. Bei den Elektronen wird dies 'empty lattice approximation' genannt und führt zur Bandlücke der Elektronen im Festkörper.