

# Übung 5

Ausgabe: 25.11.2024      Abgabe: 02.12.2024      Besprechung: 09.12.2024

## Verständnisfragen und Vorlesungswiederholung:

(keine schriftliche Beantwortung; mündliche Diskussion in der Übung)

1. Was ist die mikroskopische Ursache der thermischen Ausdehnung von Festkörpern?
2. Beschreiben Sie die Dispersionsrelation  $w(k)$  einer einatomigen linearen Kette. Warum verläuft die Dispersion nur für kleine  $k$  linear, und wie groß ist die Periode?
3. Interpretieren Sie die Steigung von  $w(k)$  an den Punkten  $k = 0$  sowie  $k = \pm \frac{\pi}{a}$ !
4. Warum ist die Dispersionsrelation einer linearen Kette periodisch im  $k$ -Raum?
5. Wie ändert sich die Dispersionsrelation einer linearen Kette, wenn  $M$  unterschiedliche Atomsorten in der Einheitszelle vorhanden sind?

## 1. Aufgabe: Thermische Ausdehnung (7 P)

Betrachten Sie noch einmal das Lennard-Jones-Potential aus Übung 4:

$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

mit den atomspezifischen Konstanten  $\epsilon$  und  $\sigma$ :

- a) Entwickeln Sie das obige Potential nun in eine Taylorreihe um den Gleichgewichtsabstand  $r_0$  bis zum ersten anharmonischen Term, und drücken Sie die Federkonstante  $D_3$  (s. Vorlesung) durch die Lennard-Jones-Parameter  $\epsilon$  und  $\sigma$  aus! (1 P)
- b) Berechnen Sie den thermischen Ausdehnungskoeffizienten, und drücken Sie diesen ebenfalls durch die Lennard-Jones-Parameter aus! (5 P)

*Anleitung: Verwenden Sie den Erwartungswert*

$$\langle x \rangle = \frac{\int x' e^{-\frac{1}{k_B T} V(x')} dx'}{\int e^{-\frac{1}{k_B T} V(x')} dx'}$$

*und führen Sie relative Koordinaten bzgl. des Gleichgewichtsabstandes  $r_0$  ein. Nutzen Sie die Näherung für  $e^{-\frac{1}{k_B T} V(x')}$  aus der Vorlesung, und lösen Sie die Integrale analytisch durch geeignete Ausweitung der Grenzen.*

- c) Bestimmen Sie auf der Grundlage von Teilaufgabe b) den thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Argon ( $\epsilon = 10$  meV und  $\sigma = 3,4$  Å), und kommentieren Sie den Zahlenwert. (1 P)

## 2. Aufgabe: Zweiatomige vs. einatomige lineare Kette (4 P)

Für die lineare Kette mit Gitterkonstante  $a$  gelten bei Kopplung nur nächster Nachbarn folgende Dispersionsrelationen:

$$\omega^2 = \frac{4D}{M} \sin^2 \left( \frac{ka}{2} \right),$$

(eiatomig)

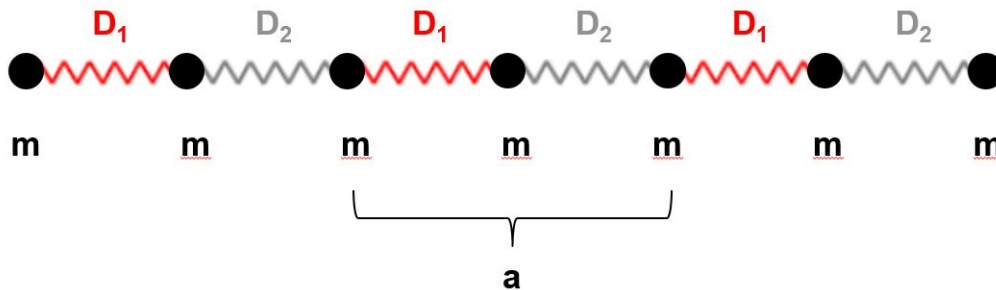
$$\omega^2 = D \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right) \pm D \sqrt{\left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right)^2 - \frac{4}{Mm} \sin^2 \left( \frac{ka}{2} \right)},$$

(zweiatomig mit unterschiedlichen Massen, aber gleicher Kopplungskonstante  $D$ ).

- Skizzieren Sie beide Dispersionsrelationen, und beschreiben Sie kurz die wesentlichen Unterschiede und Gemeinsamkeiten. (1 P)
- Diskutieren Sie den Übergang von der zweiatomigen zur einatomigen linearen Kette für  $m \rightarrow M$ . Was wird aus dem optischen Zweig sowie der Frequenzlücke? (3 P)

## 3. Aufgabe: Kette mit verschiedenen Federn (3 P)

Betrachten Sie eine zweiatomige lineare Kette für den Sonderfall gleicher Massen  $m_1 = m_2 = m$  und verschiedener Federkonstanten  $D_1$  und  $D_2$ :



- Zeigen Sie, dass sich für die Schallgeschwindigkeit folgender Ausdruck ergibt: (2 P)

$$v = \sqrt{\frac{a^2 D_1 D_2}{2m(D_1 + D_2)}}$$

- Interpretieren Sie den Term  $\frac{D_1 D_2}{D_1 + D_2}$  physikalisch! (1 P)

#### 4. Aufgabe: Phononen in Cu (3 P)

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit longitudinaler Schallwellen beträgt in kristallinem Kupfer in bestimmten Richtungen  $v = 4300$  m/s.

- Verwenden Sie das Modell der linearen Kette, um hieraus die maximale Kreisfrequenz  $\omega_{max}$  der longitudinalen Gitterschwingungen abzuschätzen! (2 P)
- Welche Energie besitzen die zugehörigen Phononen? (1 P)

*Hinweis: Gehen Sie von einer Gitterkonstanten  $a = 3,61$  Å aus.*

#### 5. Aufgabe: Streuung von Licht an Schallwellen (Brillouin-Streuung) (3 P)

Ein Laserstrahl der Wellenlänge  $\lambda = 694$  nm trifft auf einen Quarzkristall (Brechzahl  $n = 1,54$ ), in welchem das Licht an Schallwellen der Ausbreitungsgeschwindigkeit  $v = 6000$  m/s gestreut wird. Betrachten Sie eine inelastische Wechselwirkung zwischen Photonen und Phononen, bei der kein Rückstoß an das Gitter abgegeben wird:

- Welcher Impulsübertrag ist maximal bei der Lichtstreuung möglich? (1 P)
- Welche Frequenz besitzt in diesem Fall die angeregte Gitterschwingung? (1 P)
- Wie groß ist die relative Frequenzverschiebung  $\Delta E/E$  des Lichtes infolge des Streuprozesses? (1 P)

*Anleitung: Stellen Sie Bilanzgleichungen für Energie und Impuls auf!*

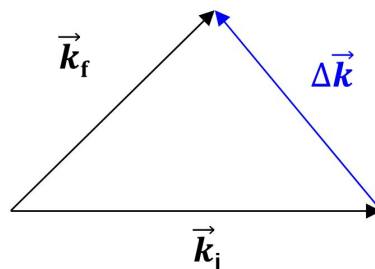


Abbildung 1: Streudreieck