

- Evaluation ab 21.5.

- Übungsgruppenaufnahme

- kovalente Bindung
 - Ladungsaufhäufung von Valenz e^- zwischen Atomen
 - Symmetrie der Ortswellenfunktionen (Coulomb - WW) bestimmt Symmetrie der Spinwellenfunktionen

- metallische Bindung - Delokalisierung der Valenz- e^- senkt E_{kin}

- Wasserstoffbrückenbindung - hauptsächlich elektrostatische Bindung zwischen genau 2 Gruppen/Molekülen durch H

- statisches Gitter reicht nicht! Gleichgewicht, Transport, WW

- adiabatische + harmonische Approximation ($V \sim r^2$)

1D - Kette:

$$m \ddot{u}(na) = F(na)$$

Kraftkonst. C zwischen n und $n+1$

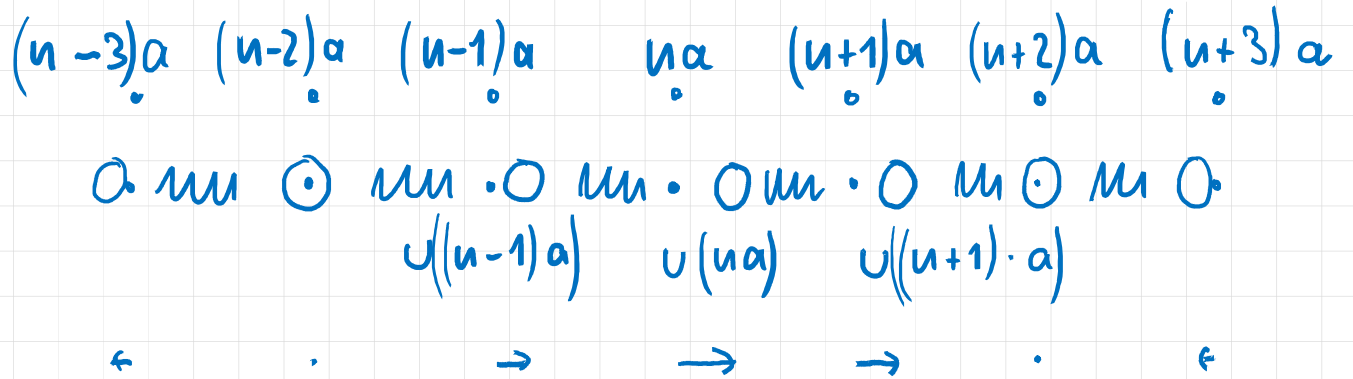
$$\text{Ansatz: } u(na, t) = A e^{i(kna - \omega t)}$$

$$\omega^2 = \frac{2C}{m} [1 - \cos ka]$$

$$\text{Da } \frac{1 - \cos(ka)}{2} = \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \Rightarrow \omega^2 = \frac{4C}{m} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

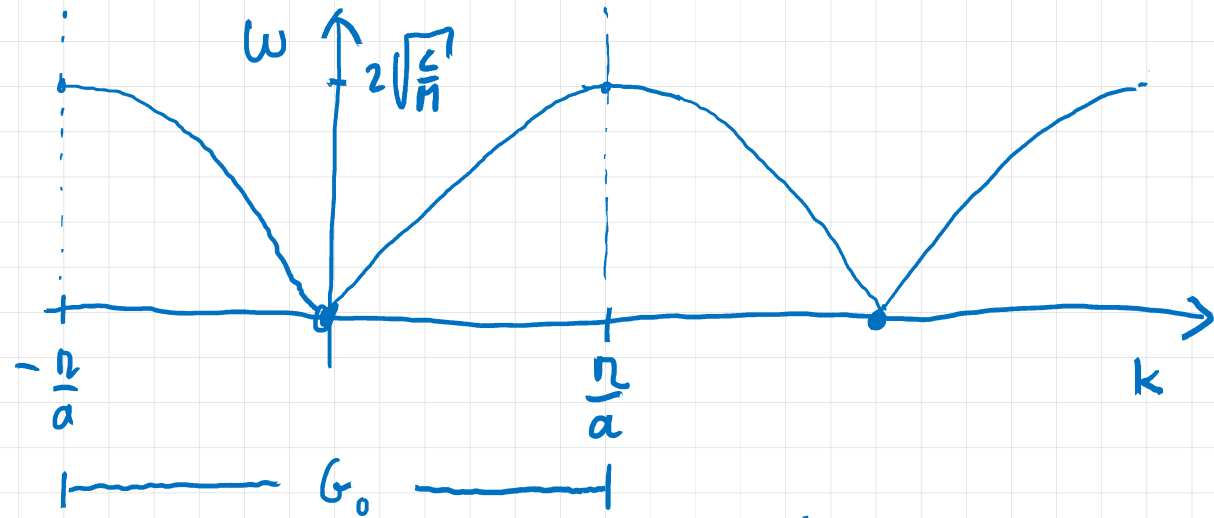
oder

$$\boxed{\omega = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|} \quad \text{Dispersions relation}$$

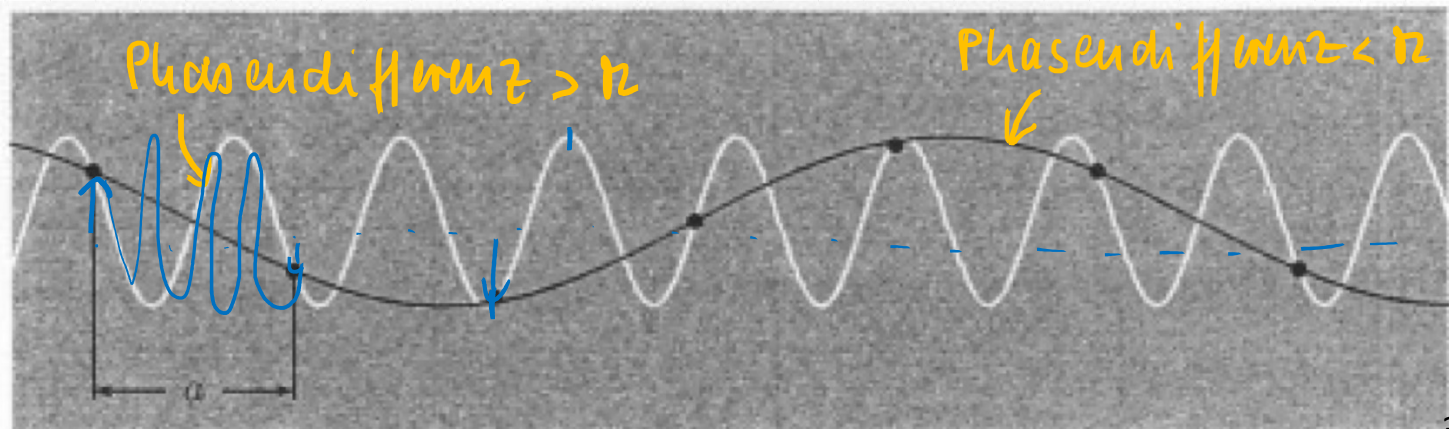


- ω ist periodisch mit $\frac{2\pi}{a}$
- k und k' und $k' = k + G$ beschreiben gleiche Situation wo $G = m \frac{2\pi}{a}$ per. Gittervektor des 1D Gitter

$$U(na, t)_{k'} = A e^{i((k+G)na - \omega t)} = A \underbrace{e^{iGna}}_{=1} \cdot e^{i(kna - \omega t)} = U(na, t)_k$$



- Phasendifferenzen von benachbarten Atomen $> \pi$ sind unphysikalisch
Also $\lambda = \frac{2\pi}{|k|} > 2a$
 $\Rightarrow |k| < \frac{\pi}{a}$



- Zulässige Werte von k sind also

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a} \quad \text{oder} \quad -\frac{G_0}{2} \leq k \leq \frac{G_0}{2}$$

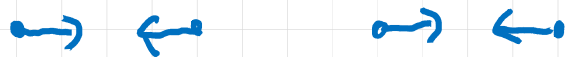
wo G_0 der kürzeste reziproke Gittervektor. Also muss k ein Wellenvektor sein, der aus der 1. Brillouinzone stammt.

- Beide Vorzeichen von k für links und rechts laufende Wellen

- An der Zonengrenze ist

$$u(na, t)_{\frac{\pi}{a}} = A e^{i\left(\frac{\pi}{a} na - \omega t\right)} = A e^{i n \pi} \cdot e^{-i \omega t} = A (-1)^n e^{-i \omega t}$$

Das ist eine stehende Welle von gegenphasig schwingenden Atomen



Analog zur Röntgenbeugung: ist die Bragg-Bedingung erfüllt, so kann sich eine laufende Welle durch hin- und her-Reflektion an den Netzebenen nicht mehr ausbreiten

- Frequenzen der Wellen sind beschränkt:

$$0 \leq \omega \leq 2 \sqrt{\frac{c}{n}}$$

- Für kleine ω wird

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{c}{n}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \approx 2 \sqrt{\frac{c}{n}} \frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{c}{n}} ka \quad k > 0$$

Die Gruppengeschwindigkeit $\frac{d\omega}{dk} = \sqrt{\frac{c}{n}} \cdot a$ ist konstant, unabhängig von λ
 $\sqrt{\frac{c}{n}} \cdot a = v_s$ Schallgeschwindigkeit der 1D-Kette

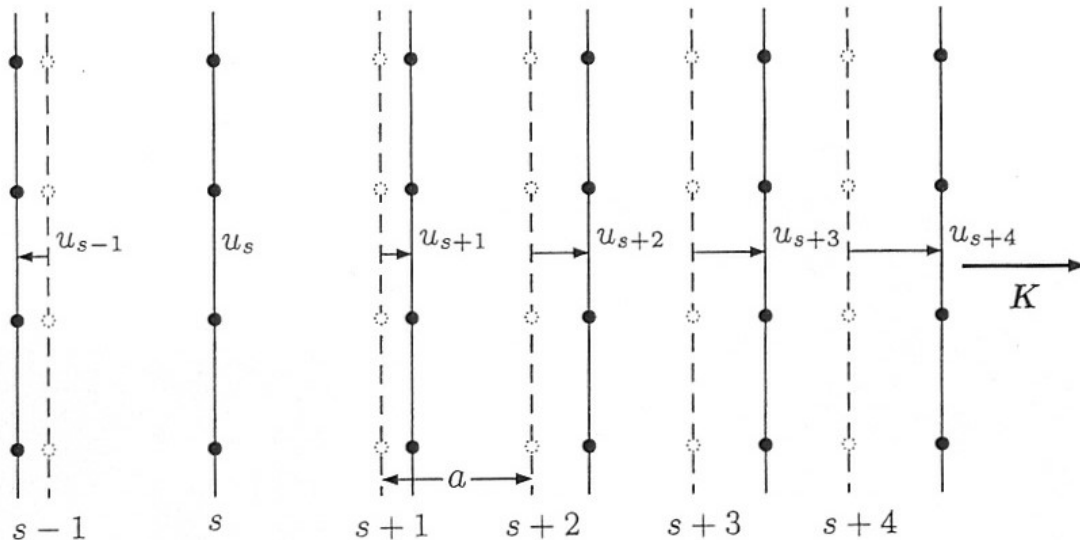
• i. H ist

$$v_{gr} = \left| \frac{dw}{dk} \right| = \frac{d}{dk} \left(2 \sqrt{\frac{c}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \right) = \frac{a}{2} 2 \sqrt{\frac{c}{m}} \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = v_s \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

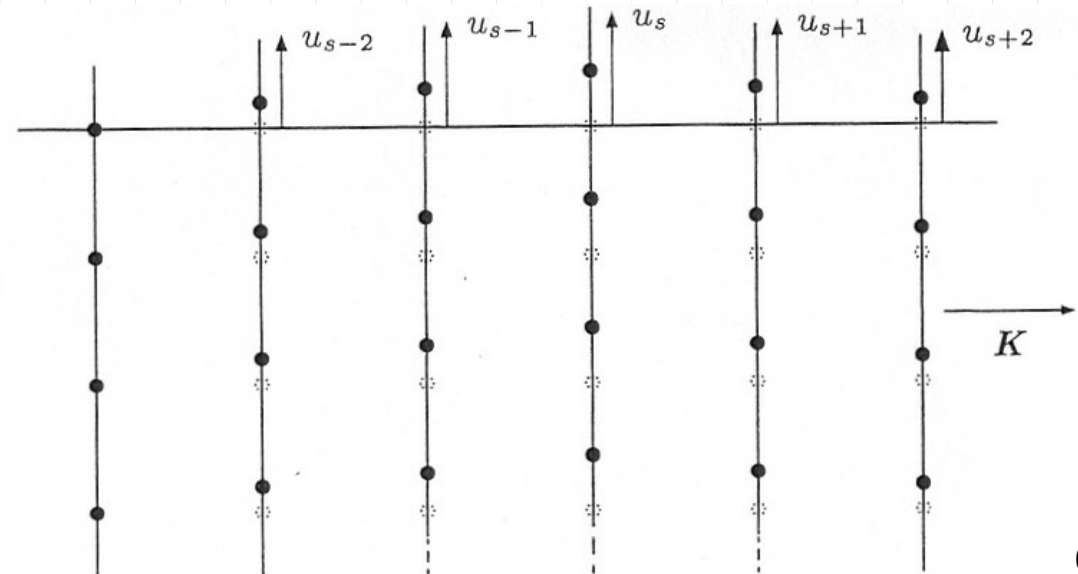
Wieder ist für $k = \frac{\pi}{a}$ $v_{gr} = 0$, d.h. stehende Wellen.

- Die Ausbreitung von elastischen Wellen in Hochsymmetrie-Richtungen wie $[100]$ oder $[111]$ werden bereits durch die 1D-Kette beschrieben, wenn sich Netzebenen statt Atomen bewegen. Man hat 1 long. und 2 trans. Moden.

1D-Kette als Schwingung von Netzebenen: Longitudinalwelle



1D-Kette als Schwingung von Netzebenen: Transversalwellen



Die Kraftkonstanten der Noden unterscheiden sich, aber sonst gleiche Dispersionsrelationen.

Spielen mit Gitterwellen: <https://ph2.uni-koeln.de/lehre/applets-solid-state-physics/phonons>