8.1

Dispersionsrelation von Phononen: $\omega = v \cdot k$

Dispersionsrelation für lineare Kette mit 2 Atomen:

$$\omega^2(k) = \frac{C(m_1+m_2)}{m_1 \cdot m_2}\left[1 \mp \sqrt{1 - \frac{4 m_1 m_2}{(m_1+m_2)^2}\sin^2(k \cdot d)}\right]$$

a) . sc- Struktur

. 2 Atomige Basis : 1 Alu, 1 Nickel → Basis besteht aus unterschiedlichen Atome, d.h., es gibt optische Äste.

→ wieviele optische Phononen~~zweige~~ Äste?

→ Die Anzahl der Phononenzweige hängt von der Kristallbasis ab. Besteht diese aus p-Atomen, gibt es 3p Phononenzweige.

Davon sind $\underbrace{3(p-1)}_{}$ optisch und 3 akustisch

$$\underbrace{\underbrace{3p}_{\text{gesamt}} - \underbrace{3}_{\text{akustisch}}}_{\text{optischen}}$$

$\Rightarrow p = 2 \Rightarrow 3(2-1) = \underline{\underline{3}}$ optische

und 3 akustischen → insgesamt 6 Phononenzweige

b)

Gold → . fcc

· einatomige Basis

· Kubische Gitterkonstante: $a = 4{,}08$ Å

· Betrachte nur Wellenausbreitung in [0 1 0] Richtung ~ Wellenvektor

· Frequenz der longitudinalen akustischen Phononen am Brillouinzonenrand: 3,2 THz

· Longitudinale Schallgeschwindigkeit: $1740 \frac{m}{s}$

Aufgabe: a) Skizzieren Sie mit diesen Zahlen die Dispersionsrelation für longitudinal akustische Phononen.

b) Qualitativ in die Skizze die Dispersionsrelation für transversal akustische Phononen.

c) Wann sind die transversalen Zweige in diesem Fall entartet?

↳ beiden Transversalkomponenten haben die gleiche Dispersionskurven, da fcc die Symmetrie hat, dass um 90° gedreht sieht der fcc Kristall gleich aus → vierzählige Symmetrie. und [0 1 0]

$F = k \cdot s$ $\Rightarrow \frac{N}{m}$

8.3 ~~Wärmekapazität der Edm. Kette~~

Man kann als lin. Kette annähern. 1atomige Basis und kubischen Gitter.

Dispersionsrelation für lineare Kette von Atom:

$$\omega(k) = 2\underbrace{\sqrt{\frac{c}{m}}}_{\omega_0} \cdot \left|\sin\left(\frac{k \cdot a}{2}\right)\right|$$

c = Federkonstante zwischen zwei benachbarten Ebenen

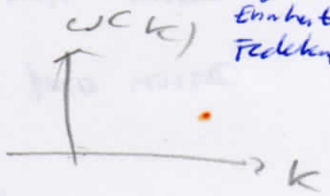
$[c] = \cancel{\frac{N}{kg}} = \cancel{\frac{kg \cdot m}{s^2} / kg}$

$\frac{N}{m} = \frac{kg \cdot \frac{m}{s^2}}{m} = \frac{kg}{s^2}$ Einheit einer Federkonstante

Für niedrige Werte von k ($ak \ll 1$) ~~gilt für den~~ kann der Ausdruck oben näherungsweise geschrieben werden als:

$$\omega(k) \approx a \cdot \sqrt{\frac{c}{m}} \cdot |k| = c_s \cdot |k|$$

c_s: Schallgeschw.



· An den Zonengrenzen gilt: $\omega = 2\sqrt{\frac{c}{m}} = const$

· Für Gruppengeschw. am Rand gilt: $v_g = 0 \rightarrow$ stehende Welle.

$$|\vec{k}| = k = \frac{\omega}{c_{Ph}} = \frac{2\pi}{\lambda} \rightsquigarrow k = \frac{\omega}{c} \Rightarrow \boxed{\omega = k \cdot c}$$

Betrag des Wellenvektors; Wellenzahl

für Schallphononen $c = c_s$

$\Rightarrow \omega = k \cdot c_s$

oder $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ mit λ = der Wellenlänge, die sich aus der Frequenz ergibt.

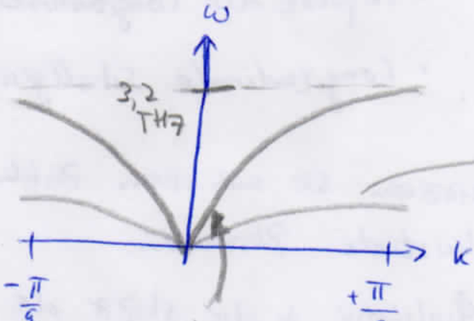
Für Teilchen z.B. Elektronen in einem Festkörper sind die Werte des Wellenvektors quantisiert.

$$k_i = \frac{n_i \cdot \pi}{a} \qquad i \in \{x, y, z\}; \; n_i \in \mathbb{N}$$

→ Für benachbarte Atome gilt $\boxed{k = \frac{\pi}{a}}$

$$\boxed{\omega(k) = 2\,\omega_0 \cdot \left|\sin\left(\frac{k \cdot a}{2}\right)\right|} \longrightarrow$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{c}{m}}$$



Steigung ist die Schallgeschw. in linearer Näherung.

Trockenmilch
↓
sieh Folie
Situation

· akustisch → in Phase

· optisch → gegenphasig

8.2 Zustandsdichte für 1dim Kette

Modell der 1dim Kette:

- N identische Atome ~~und~~ mit Masse M
- sind paarweise durch Federn mit Federkonstante C verbunden

- Schwingungen nur in Kettenrichtung erlaubt.
- berücksichtige nur WW mit nächstem Nachbar
- Für dieses Modell gilt dann die Dispersionrelation:

$$\omega(q) = 2 \cdot \sqrt{\frac{C}{M}} \cdot \sin\left(\frac{q \cdot a}{2}\right), \quad 0 \leq q \leq \frac{\pi}{a}$$

- Nehme periodische RB an
- Photonenzustandsdichte im q-Raum beträgt:

$$\rho q = \frac{L}{2\pi} \qquad (L = \text{Länge der Kette})$$

b) Berechne Phononenzustandsdichte $D(\omega)$ im Frequenzraum:

$$D(q)dq = \frac{1}{8} \rho q \; 4\pi q^2 \; dq$$

$$= \frac{1}{\cancel{8}_{4}} \frac{L}{\cancel{2\pi}} \cancel{4}^{2}\cancel{\pi} q^2 \; dq$$

$$\boxed{D(q)\,dq = \frac{1}{4} L q^2 \, dq}$$

Zustandsdichte im q-Raum beliebiger Teilchen.

Debye-Näherung: $\omega = v \cdot q$ (lineare Polarisation der Phonon)

$$\Rightarrow q = \frac{\omega}{v}$$

$$\frac{dq}{d\omega} = \frac{1}{v} \Rightarrow dq = \frac{1}{v} \cdot d\omega$$

hier bin ich mir nicht sicher

$$\Rightarrow D(\omega)\,d\omega = \frac{1}{4} L \frac{\omega^2}{v^2} \cdot \frac{1}{v} \cdot d\omega$$

$$\boxed{D(\omega)\,d\omega = \frac{1}{4} L \frac{\omega^2}{v^3} d\omega}$$

Debye-Zustandsdichte.

8.2

a)

$$\omega(q) = 2 \cdot \sqrt{\frac{c}{M}} \cdot \sin\left(\frac{q \cdot a}{2}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{\omega}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{c}{M}}} = \sin\left(\frac{q \cdot a}{2}\right)$$

$$\Rightarrow \arcsin\left(\frac{\omega}{2} \cdot \sqrt{\frac{M}{c}}\right) = \frac{q \cdot a}{2}$$

$$\Rightarrow \boxed{q = \frac{2 \arcsin\left(\frac{\omega}{2} \cdot \sqrt{\frac{M}{c}}\right)}{a}}$$

$$\frac{dq}{d\omega} = \frac{2}{a} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\omega^2}{4} \frac{M}{c}}}$$

$\Rightarrow$

$$D(q)\, dq = \frac{1}{4} L\, q^2\, dq$$

$$\Rightarrow D(\omega)\, d\omega = \frac{1}{4} L \frac{4}{a^2} \arcsin^2\left(\frac{\omega}{2} \sqrt{\frac{M}{c}}\right) dq$$

$$\boxed{D(\omega)\, d\omega = \frac{1}{4} L \frac{4}{a^2} \arcsin^2\left(\frac{\omega}{2} \sqrt{\frac{M}{c}}\right) \cdot \frac{2}{a} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\omega^2}{4} \frac{M}{c}}}\, d\omega}$$

b) Debye Näherung: $\omega(q) = 2 \cdot \sqrt{\frac{c}{M}} \frac{q \cdot a}{2} = q a \sqrt{\frac{c}{M}}$

Lineare Polarisation $\longrightarrow$ $\boxed{\omega(q) = v \cdot q}$ $\quad v = a \cdot \sqrt{\frac{c}{M}}$

$$q = \frac{\omega}{v}$$

$$\frac{dq}{d\omega} = \frac{1}{v} \Rightarrow dq = \frac{1}{v} \cdot d\omega$$

wie vorhin

$$\rightsquigarrow D(\omega)\, d\omega = \frac{1}{4} L \frac{\omega^2}{v^3}\, d\omega$$

$$N = \int_0^{\omega_D} D(\omega)\, d\omega$$

$$= \int_0^{\omega_D} \frac{1}{4} L \cdot \frac{\omega^2}{v^3}\, d\omega$$

$$= \frac{1}{4} L \frac{1}{v^3} \int_0^{\omega_D} \omega^2\, d\omega$$

$$L = N \cdot a$$

$$\boxed{N = \frac{1}{12} L \frac{1}{v^3}\, \omega_D^3} \Rightarrow v^3 = \frac{L \cdot \omega_D^3}{12 N} = \frac{\cancel{N} \cdot a \cdot \omega_D^3}{12 \cancel{N}}$$

$$\Rightarrow \omega_D = \sqrt[3]{\frac{12 \cdot N \cdot v^3}{L}}$$

$$= v \sqrt[3]{\frac{12 \cdot N}{L}} \qquad L = N \cdot a$$

$$= v \sqrt[3]{\frac{12 \cdot \cancel{N}}{\cancel{N} \cdot a}}$$

in $D(\omega)\, d\omega = \frac{1}{4} \cdot L \cdot \frac{\omega^2}{L \cdot \omega_D^3} \cdot 12 N\, d\omega$

einsetzen

$$\boxed{D(\omega)\, d\omega = \frac{3 \omega^2 N}{\omega_D^3}\, d\omega}$$

$\rightarrow$ ~~Int...~~ $\int$ $\quad N = \int D(\omega)\, d\omega$ passt.

8.3

~~$E = h \cdot f$~~

$\boxed{\cancel{E_{ges}}}$

N = Teilchenzahl (auch bei A 8.2)

$$U = \int_0^{\hbar\omega_D} \hbar\omega \, \frac{3\omega^2 N}{\omega_D^3} \cdot \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} + \frac{1}{2} \right) d\hbar\omega$$

$$U = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\hbar^3 \omega^3 N \cdot 3}{\omega_D^3} \cdot \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} + \frac{1}{2} \right) d\hbar\omega$$

~~vernachlässigbar~~

~~$\frac{1}{e^x} \to \infty$~~

~~Taylor entwickeln~~

~~um 0, wenn $x_D \to 0$~~

$$\cancel{U = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\hbar\omega^3 \, N \cdot 3}{\omega_D^3} \left(\frac{1}{\frac{\hbar\omega}{kT} - 1} \right)}$$

~~geht~~

~~$d\omega$~~

$$x_D = \frac{\hbar\omega_D}{kT} \qquad \frac{x}{x_D} = \frac{\omega}{\omega_D}$$

$$\cancel{U = \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta}{T} \right)^3}$$

$$\frac{dU}{dT} = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\hbar^3 \omega^3 N \cdot 3}{\omega_D^3} \; \underbrace{\frac{d}{dT} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}} + \underbrace{\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\right)}_{=0} \; d\hbar\omega$$

Ableitung reinziehen

$$= \frac{1}{\cancel{\hbar^2}} \cancel{\hbar^2} N \cdot 3 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{x^3}{x_D^3}$$

$$\frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \; ; \; x = \frac{\hbar\omega}{kT}$$

$$\frac{dx}{dT} = -\frac{\hbar\omega_D}{kT^2} = -\frac{x}{T}$$

für innere Ableitung

$\frac{18 \cdot 8}{10}$

$$= \frac{\cancel{\hbar^2} \cdot 3N}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{k_B T}{\cancel{\hbar}} dx \, \frac{x^4}{\cancel{T}} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2}$$

$$= \frac{3Nk_B}{x_D^3} \int_0^{x_D} dx \, \frac{x^4 \cdot 1}{(1 + x - 1)^2} = \frac{3Nk_B}{x_D^3} \int_0^{x_D} dx \, x^2$$

$$= \frac{3Nk_B}{\cancel{x_D^3}} \cdot \frac{1}{3} \cancel{x_D^3} = Nk_B = R$$

8.4

$$\omega_D = \omega_{max} = v_D \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}} = v_D \sqrt[3]{6\pi^2 n}$$ $n = \frac{N}{V}$ = Teilchenkonzentration

$$k_B\, \Theta = \hbar\, \omega_D$$

$$\Rightarrow \boxed{\Theta = \frac{\hbar}{k_B} \cdot v_D \sqrt[3]{6\pi^2 n}}$$

$[n] = \frac{1}{cm^3}$ $\boxed{\rho = m \cdot n}$

$[\rho] = \frac{g}{cm^3}$

$$= \frac{\hbar}{k_B} \cdot v_D \sqrt[3]{6\pi^2 \frac{\rho}{m}}$$

$$\boxed{\Theta = v_D \cdot \underbrace{\frac{\hbar}{k_B} \cdot \sqrt[3]{6\pi^2}}_{\gamma} \cdot \sqrt[3]{\frac{\rho}{m}}}$$

$n = \frac{\rho}{m}$

$$\boxed{\Theta = v_D \cdot \gamma \cdot \sqrt[3]{\frac{\rho}{m}}}$$

m = Masse eines Atoms von Gold und Diamant

$\Theta_{Au} = 161,3\ K$

$m\,(1\ Au\text{-}Atom) = 3,27 \cdot 10^{-22}\ g$

$m\,(1\ C\text{-}Atom) =$

$\Theta_C = 2204\ K$