6. Übung (Abgabe Di. 5. Dezember zu Beginn der Übung bzw. Vorlesung)

---

23. Phononen im quadratischen Gitter

Wir betrachten transversale harmonische Schwingungen im quadratischen Gitter mit identischen Atomen der Masse *M* im Abstand *a*, die als nächste Nachbarn durch identische transversale Kraftkonstanten *f* verbunden sind (die transversale Auslenkung verhalte sich gemäß dem Hook'schen Gesetz). Es sei $u_{l,m}$ die Auslenkung des Atoms in der *l*. Kolonne und der *m*. Zeile.

(a) Man zeige, dass die Bewegungsgleichung gegeben ist durch:

$$M\frac{d^2u_{l,m}}{dt^2} = f\left[\left(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2u_{l,m}\right) + \left(u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2u_{l,m}\right)\right]$$

(b) Zeigen Sie dass die Dispersionsrelation gegeben ist durch:

$$\omega^2 M = 2f\left(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)\right)$$

(c) Berechnen Sie den langwelligen Grenzwert ($ka << 1$).

(3 Punkte)

24. Zustandsdichte

(a) Zeigen Sie, dass die Zustandsdichte einer monoatomaren Kette mit *N* Atomen im Abstand *a* mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung *f* gegeben ist durch

$$D(\omega) = \frac{2N}{\pi}\frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}}, \quad \omega_{max} = \text{maximale Frequenz}.$$

(b) Es sei der optische Phononenast in drei Dimensionen gegeben durch $\omega(k) = \omega_0 - Ak^2$. Zeigen Sie, dass die Zustandsdichte $D(\omega)$ gegeben ist durch:

$$D(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{2\pi}{A^{3/2}}\sqrt{\omega_0 - \omega}, \quad \omega < \omega_0 \quad \text{und} \quad D(\omega) = 0, \quad \omega > \omega_0,$$

(2 Punkte)

25. Thermische Ausdehnung des Festkörpers

Zeigen Sie mit Hilfe eines einfachen Modells, welches auch anharmonische Effekte berücksichtigt, dass die thermische Ausdehnung $\langle x \rangle$ proportional zur Temperatur ist.

Das Bindungspotential der Atome sei bis zur vierten Ordnung gegeben durch: $U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4$ ($c, g, f > 0$). Der Term prop. zu x^3 repräsentiert die Asymmetrie aufgrund der Abstoßung der Atome bei sehr kleinen Abständen, der Term prop. zu x^4 beschreibt die Abflachung des Potentials bei großen Abständen.

Hinweis: *Berechnen Sie die mittlere Verschiebung $\langle x \rangle$ mit Hilfe der Boltzmann-Verteilung, wobei die anharmonischen Terme sehr klein gegenüber kT sein sollen:*

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\, e^{-\frac{U(x)}{kT}} \Big/ \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\frac{U(x)}{kT}}$$

(3 Punkte)