Physikalisches Fortgeschrittenenpraktikum

Gitterschwingungen

– Vorbereitung –

Armin Burgmeier Robert Schittny

1 Theoretische Grundlagen

Im Versuch Gitterschwingungen werden die Schwingungen von Atomen in einem Festkörper mit mit Federn verbundenen Gleitern auf einer Luftkissenbahn simuliert.

1.1 Lineare Kette

Betrachtet man eine an beiden Enden fest eingespannte Saite, so können nur stehende Wellen ausgebildet werden, mit Schwingungsknoten an den Enden. Aufgrund dieser Randbedingungen können auch nur Wellen mit diskreten Wellenlängen

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \tag{1}$$

bzw. diskreten Wellenzahlen

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \tag{2}$$

entstehen. L bezeichne die Gesamtlänge der Saite.

Wir gehen nun von einer kontinuirlichen Massenverteilung zu einer diskreten über. In diesem Fall ist die Zahl der möglichen Wellenlängen sogar beschränkt. Dies hängt damit zusammen, dass es zu jeder Auslenkung der endlich vielen Massepunkte mehrere mögliche Wellenlängen gibt, bei der die Welle das gleiche Auslenkungsmuster erzeugt. Sie beschreiben allerdings beide den gleichen physikalischen Sachverhalt, nämlich das Auslenkungsmuster der linearen Kette. Die verschiedenen Wellenlängen sind sozusagen äquivalent, daher einigt man sich darauf, immer die größte mögliche Wellenlänge anzugeben, die ein Auslenkungsmuster beschreibt. Man bezeichnet die verschiedenen Wellenlängen auch als Schwingungsmoden.

Man kann zeigen, dass die Anzahl der Schwingungsmoden der Anzahl der Massepunkten der linearen Kette entspricht. Die minimale Wellenlänge einer N-komponentigen Kette ist dann

$$\lambda_{min} = \frac{2L}{N} \tag{3}$$

Für die größtmögliche Wellenzahl folgt daraus

$$k_{max} = \frac{2\pi}{\lambda_{min}} = \frac{\pi}{a} \tag{4}$$

mit dem Abstand zweier Massenpunkten $a = \frac{L}{N}$.

Dieses Ergebnis bedeutet, dass sich sämtliche Physik der linearen Kette im k-Raum zwischen $-\frac{\pi}{a}$ und $\frac{\pi}{a}$ abspielt, die sogenannte 1. Brillouin-Zone. Alle anderen k-Werte können ohne Verlust von Information in diese Zone abgebildet werden.

1.2 Dispersionsrelation

Die Beziehung zwischen Wellenzahl k und Kreisfrequenz ω nennt man Dispersionsrelation $\omega(k)$. Sie definiert die Phasengeschwindigkeit

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} \tag{5}$$

und die Gruppengeschwindigkeit

$$v_{gr} = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} \tag{6}$$

Im *omega*-k-Diagramm kann man sich die Phasengeschwindigkeit an einem Punkt also als Steigung einer Geraden durch diesen Punkt und den Ursprung vorstellen, während die Gruppengeschwindigkeit der Steigung der Tangenten an diesen Punkt entspricht. Insbesondere fallen beide Geschwindigkeiten am Ursprung zusammen. Im Normalfall gilt weiter $v_{gr} < v_{ph}$, sodass die Geschwindigkeit am Ursprung auch die maximale ist.

2 Einatomige lineare Kette

Bei der einatomigen linearen Kette hat jeder Massenpunkt die gleiche Masse m. Die einzelnen Massenpunkte seien durch Hookesche Federn mit der Federkonstanten D verbunden und haben in der Ruhelage den Abstand a voneinander. Ein derartiges Modell ist für Gitterschwingungen im Rahmen diverser Näherungen praktikabel.

Bezeichnet $x_j(t)$ die Position des j-ten Massepunkts, so kann man dies zerlegen in

$$x_j(t) = x_{0,j} + s_j(t) \tag{7}$$

mit der Gleichgewichtsposition $x_{0,j} = j \cdot a$ und der Auslenkung $s_j(t)$. Die Newtonsche Bewegungsgleichung für den j-ten Massepunkt lautet dann

$$m\ddot{x}_j(t) = F_{j,j+1}(t) + F_{j,j-1}(t) \tag{8}$$

mit

$$F_{j,j+1}(t) = -Ds_j(t) + Ds_{j-1} \tag{9}$$

Mit einem Ebene-Wellen-Ansatz

$$s_j(t) = s_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx_{0,j} - \omega t)} \tag{10}$$

folgt durch Einsetzen in die Bewegungsgleichung die Dispersionsrelation zu

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4D}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \tag{11}$$

$\omega(k)$ ist $\frac{2\pi}{a}$-periodisch in k. Dieses Ergebnis bestätigt also den zuvor erwähnten Sachverhalt, dass sich alle Wellenzahlen außerhalb der 1. Brillouin-Zone in diese zurückführen lassen: Für $k > \frac{\pi}{a}$ findet man die gleichen ω-Werte auch im k-Intervall $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$.

Da es bei einer Kette aus N Massenpunkten nur N mögliche k-Werte (innerhalb der 1. Brillouin-Zone) gibt, gibt es auch nur N zugehörige Kreisfrequenzen. In Atomen ist N allerdings meist so groß, dass die Dispersionskurve als kontinuierlich angenommen werden kann.

Für kleine k-Werte ergibt sich eine lineare Dispersionsrelation mit der Phasen- und Gruppengeschwindigkeit

$$v_{gr,1} = v_{ph,1} = \sqrt{\frac{Da^2}{m}} \tag{12}$$

Schallgeschwindigkeit Man kann zeigen dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit elastischer Longitudinalwellen mit dieser Geschwindigkeit stattfindet. Man bezeichnet sie daher auch als Schallgeschwindigkeit. Von allen möglichen Wellen besitzen sie die geringste Energie (ω geht gegen 0) und werden daher leicht angeregt.

3 Lineare zweiatomige Kette

Wir betrachten nun ein eindimensionales Atomgitter mit zwei Atomen pro Basis, wobei die Masse des leichten Atoms m, die des schweren Atoms M sei. Die Gitterkonstante ist wie bei der einatomigen Kette a, weshalb der Abstand zwischen je zwei Atomen und somit die Länge der Hookeschen Federn $a/2$ beträgt.

3.1 Bewegungsgleichungen

Die Bewegungsgleichungen können nach demselben Prinzip aufgestellt werden, wie es schon bei der linearen einatomigen Kette verwendet wurde, weshalb wieder nur die relativen Positionen s_j der Atome betrachtet werden.

Auf den Massenpunkt j mit der kleineren Masse m wirkt die Kraft

$$F_j = m\ddot{s}_j = -D(s_j - s_{j+1}) - D(s_j - s_{j-1}) = D(s_{j+1} + s_{j-1} - 2s_j)\ , \tag{13}$$

auf den benachbarten Massenpunkt $j+1$ mit der Masse M entsprechend

$$F_{j+1} = M\ddot{s}_{j+1} = -D(s_{j+1} - s_{j+2}) - D(s_{j+1} - s_j) = D(s_{j+2} + s_j - 2s_{j+1})\ . \tag{14}$$

Da diese beiden Newtonschen Bewegungsgleichungen jeweils s_j und s_{j+1} enthalten, sind sie gekoppelt. Zur Lösung setzen wir wieder harmonische ebene Wellen an, allerdings mit verschiedenen Amplituden $s_{0,m}$ und $s_{0,M}$ für die verschiedenen Massen der Atome:

$$s_{j-1}(k,\omega,t) = s_{0,M} \cdot \exp\left(i\left(k\cdot(j-1)\frac{a}{2} - \omega t\right)\right) \tag{15}$$

$$s_j(k,\omega,t) = s_{0,m} \cdot \exp\left(i\left(k\cdot(j)\frac{a}{2} - \omega t\right)\right) \tag{16}$$

$$s_{j+1}(k,\omega,t) = s_{0,M} \cdot \exp\left(i\left(k\cdot(j+1)\frac{a}{2} - \omega t\right)\right) \tag{17}$$

$$s_{j+2}(k,\omega,t) = s_{0,m} \cdot \exp\left(i\left(k\cdot(j+2)\frac{a}{2} - \omega t\right)\right) \tag{18}$$

3.2 Dispersionsrelation

Einsetzen des Ansatzes in die Bewegungsgleichungen führt zur charakteristischen Gleichung für ω, die folgende Dispersionsrelation liefert:

$$\omega_+^2 = D\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) + D\sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{m\cdot M}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)} \tag{19}$$

$$\omega_-^2 = D\left(\frac{1}{m} - \frac{1}{M}\right) + D\sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{m\cdot M}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)} \tag{20}$$

Offensichtlich gibt es zu jedem k-Wert die *zwei* Lösungen ω_+ und ω_-. Die Dispersionsrelation ist wie schon bei der einatomigen Kette $2\pi/a$-periodisch.

Optischer Ast Der ω_+-Ast heißt *optisch*, da hier die leichten und schweren Massen gegeneinander schwingen. Haben diese nun unterschiedliche elektrische Ladungen, bilden die leichten und schweren Atome einen schwingenden Dipol, der somit optisch aktiv ist (er kann an elekromagnetische Strahlung ankoppeln bzw. diese emittieren).

Akustischer Ast Der ω_--Ast heißt *akustisch*, da er für $k \to 0$ die größte Gruppengeschwindigkeit aufweist, also die akustische Schallgeschwindigkeit.

Frequenzlücke Zwischen den beiden Ästen existiert ein Frequenzbereich, der nie erreicht wird. Das Frequenzspektrum der linearen zweiatomigen Kette weißt also eine *Frequenzlücke* auf.

3.3 Charakteristische Frequenzen

Die charakteristischen Frequenzen der Dispersionsrelation sind die, die im Zentrum oder am Rand der 1. Brillouin-Zone auftreten:

Zonenzentrum Für $k \to 0$ erhalten wir durch Entwickeln von $\sin x$ in erster Ordnung die Schallgewschwindigkeit

$$v_s = v_{gr,2} = v_{ph,2} = \sqrt{\frac{Da^2}{2(m+M)}} \tag{21}$$

sowie für den optischen Ast

$$\omega_+^2(k \to 0) = 2d\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \ . \tag{22}$$

Zonenrand Einsetzen von $k = \pi/a$ in die Dispersionsrelation liefert

$$\omega_+^2(k \to \pi/a) = \frac{2D}{m} \tag{23}$$

für den optischen sowie

$$\omega_-^2(k \to \pi/a) = \frac{2D}{M} \tag{24}$$

für den akustischen Ast.

4 Bestimmung des Massenverhältnisses

Misst man die Schallgeschwindigkeit von sowohl der einatomigen als auch der zweiatomigen Kette, so lässt sich das Massenverhältnis $\frac{m}{M}$ bestimmen. Dabei ist lediglich darauf zu achten, dass die Gitterkonstante a in der Beschreibung der einatomigen Kette der Abstand zwischen zwei Massenpunkten bezeichnet hat, in der zweiatomigen Kette aber der Abstand von einem Massenpunkt zum übernächsten Massenpunkt, da dazwischen noch einer mit einer unterschiedlichen Masse ist. Im folgenden sei a wie bei der zweiatomigen Kette. Beim Verwenden von Formeln der einatomigen Kette muss daher a durch $\frac{a}{2}$ ersetzt werden.

Aus dem Verhältnis der beiden Schallgeschwindigkeiten $v_{gr,1}$ und $v_{gr,2}$ kann man das Massenverhältnis $\gamma = \frac{M}{m}$ bestimmen:

$$\begin{aligned} \frac{v_{gr,1}}{v_{gr,2}} &= \frac{\sqrt{\frac{Da^2}{4m}}}{\sqrt{\frac{Da^2}{2(m+M)}}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{M}{m}\right)} \\ \Rightarrow \quad \frac{M}{m} &= 2\left(\frac{v_{gr,1}}{v_{gr,2}}\right)^2 - 1 \end{aligned} \tag{25}$$