P3 WS 2011/2012

Gitterschwingungen

Thomas Keck und Marco A. Harrendorf
t.keck@online.de, marco.harrendorf@googlemail.com
Gruppe: 106
Karlsruhe Institut für Technologie, Bachelor Physik

Versuchstag: 09.01.2012

Inhaltsverzeichnis

1. Theoretische Grundlagen

1.1. Kristalle

Ein Kristall besteht aus einer periodischen Anordnung von Atomgruppen. Eine Atomgruppe, auch Basis genannt, besteht dabei aus einer Ansammlung von n Atomen. Die periodische Anordnung wird durch ein sogenanntes Gitter beschrieben. Um den Kristall theoretisch wie experimentell näher zu untersuchen, machen wir einige Näherungen und Annahmen:

- Die Wechselwirkungskräfte zwischen den Atomen können in erster Näherung als linear im Abstand der Atome zu ihrer Ruhelage betrachtet werden.
- Wir betrachten nur die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn, da die Wechselwirkungskräfte mit zunehmendem Abstand drastisch abfallen.
- Weiterhin nehmen wir an, dass die Kopplungskonstante zwischen allen benachbarten Atomen gleich ist.
- Wir beschränken uns auf den eindimensionalen Fall einer Kette. Mit $n = 1, 2$ Atomen in der Basis.
- Im realen Kristall gibt es drei verschiedene Polarisationen für die Schwingungsrichtung, zwei Transversale und eine Longitudinale. Wir beschränken uns auf die longitudinale Schwingungsrichtung.

Im Folgenden betrachten wir deshalb ein Modell von Atomen, die im Allgemeinen unterschiedliche Massen besitzen und sich in einem periodischen harmonischen Potential befinden. Im Versuch "Gitterschwingungen" sollen stehende longitudinale Wellen in einer Dimension anhand dieses Modells untersucht werden. Die Atome werden dabei von Gleitern auf einer Luftkissenbahn, die über Federn aneinander gekoppelt, sind dargestellt.

1.2. Eindimensionale einatomige Kette

Die Newtonsche Bewegungsgleichung für ein beliebiges, aber festes Atom s der Masse m in der Kette lautet:

$$m\ddot{x}_s = \underbrace{D}_{\text{Kopplungskonstante}} \left(\underbrace{x_{s-1} - x_s}_{\text{Abstand zum linken Nachbarn}} + \underbrace{x_{s+1} - x_s}_{\text{Abstand zum rechten Nachbarn}} \right) \tag{1}$$

Dabei ist x_s die Auslenkung des s-ten Atoms aus seiner Ruhelage und D die Kopplungskonstante zwischen zwei benachbarten Atomen.
Berücksichtigt man, dass die einzelnen Atome harmonische Schwingungen um ihre Ruhelagen ausführen, so kann man folgenden zeitabhängigen Ansatz wählen:

$$x_s(t) = u_s \cdot e^{-i\omega t}$$

Daraus erhält man:

$$-m\omega^2 u_s = D\left(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s\right)$$

Die DGL in $u(s)$ besitzt folgende Lösung, die einer laufenden Welle entspricht:

$$
\begin{aligned}
u_s &= u \cdot e^{isKa} \\
\Rightarrow x_s(t) &= u \cdot e^{isKa} \cdot e^{-i\omega t}
\end{aligned}
$$

Dabei ist a der Abstand zweier benachbarter Atome in der Ruhelage und K der Wellenvektor der laufenden Welle. Die Lösung für $x_s(t)$ setzen wir in Gleichung 1 ein und erhalten somit die Dispersionsrelation für $\omega(K)$.

$$
\begin{aligned}
-\omega^2 mu \cdot e^{isKa} &= Du \left(e^{iKa} + e^{-iKa} - 2\right) e^{isKa} \\
\Rightarrow \omega^2 &= 4\frac{D}{m} \sin^2\left(\frac{Ka}{2}\right) \qquad (2)
\end{aligned}
$$

Brillouin Zone Betrachtet man das Verhältnis der Auslenkung zweier benachbarter Atome, so ist dieses periodisch mit $K = \frac{2\pi}{a}$:

$$\frac{x_{s+1}(t)}{x_s(t)} = e^{iKa}$$

Folglich umfasst der Bereich von $-\frac{\pi}{a}$ bis $\frac{\pi}{a}$ alle unabhängigen Werte von K. Es genügt daher sich auf diesen Bereich zu beschränken, man nennt diesen Bereich die erste Brillouin Zone.

Gruppengeschwindigkeit und Stehende Wellen Die Gruppengeschwindigkeit einer laufenden Welle ist definiert über die Dispersionsrelation

$$
\begin{aligned}
v_g &= \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}K} \\
&= \sqrt{\frac{Da^2}{m}} \cos\left(\frac{Ka}{2}\right)
\end{aligned}
$$

und entspricht der Geschwindigkeit eines Wellenpakets der laufenden Welle. Für $v_g = 0$ spricht man von einer stehenden Welle, sie treten am Rand der ersten Brillouin Zone auf.

$$K = \pm\frac{\pi}{a}$$

Betrachtet man die stehende Welle mit Randbedingungen, wie z.B. in einem realen Kristall, so sind nur noch diskrete Wellenzahlen K erlaubt. Für den Fall der Kette lautet diese Bedingung:

$$
\begin{aligned}
N &= \frac{L}{a} \quad \text{Anzahl der Atome} \\
K &= \pm\frac{n2\pi}{L} \quad n <= N, n \in \mathbb{N}
\end{aligned}
$$

1.3. Eindimensionale zweiatomige Kette

Die Newtonsche Bewegungsgleichung für eine beliebige, aber feste Basis s aus zwei Atomen der Masse m_1 und m_2 mit den Auslenkungen $u_s(t)$ und $v_s(t)$, in der Kette lautet:

$$\begin{aligned} m_1\ddot{u_s} &= D(v_s + v_{s-1} - 2u_s) \\ m_2\ddot{v_s} &= D(u_{s+1} + u_s - 2v_s) \end{aligned} \tag{3}$$

Als Ansatz verwenden wir die Lösung der einatomigen Kette, jedoch mit verschiedenen Amplituden u und v.

$$\begin{aligned} u_s(t) &= u \cdot e^{isKa} \cdot e^{-i\omega t} \\ v_s(t) &= v \cdot e^{isKa} \cdot e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

Daraus folgt ein Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} -\omega^2 m_1 u &= Dv\left(1 + e^{-iKa}\right) - 2Du \\ -\omega^2 m_2 v &= Du\left(1 + e^{+iKa}\right) - 2Dv \end{aligned} \tag{4}$$

Aus der Bedingung der eindeutigen Lösbarkeit ergibt sich über die Determinante des Gleichungssystems somit die Dispersionsrelation:

$$\begin{aligned} \mu &= \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \\ \omega_\pm^2 &= D\mu \pm D\sqrt{\mu^2 - \frac{4}{m_1 \cdot m_2}\sin\left(\frac{Ka}{2}\right)^2} \end{aligned} \tag{5}$$

Es ergiben sich für jede Wellenzahl K zwei Lösungen aus der Dispersionsrelation, die durch eine Frequenzlücke getrennt sind.

Akustischer Zweig Für kleine K Werte ergibt sich eine lineare Dispersionsrelation und damit eine konstante Schallgeschwindigkeit.

$$\begin{aligned} \omega^2 &\approx \frac{D}{2(m_1 + m_2)}K^2a^2 \\ v_g &= \sqrt{\frac{Da^2}{2\left(m_1 + m_2\right)}} \end{aligned}$$

Setzt man die Dispersionsrelation für kleine K in eine der Gleichungen von 4 ein und wählt $K = 0$, so erkennt man am Verhältnis von $\frac{u}{v}$, dass beide Massen in Phase schwingen:

$$\frac{u}{v} = 1$$

Optischen Zweig Die beiden Massen schwingen gegenphasig. Dies erkennt man wenn man die Näherung für kleine K in eine der Gleichungen von 4 einsetzt, und das Verhältnis der Auslenkungen u und v betrachtet:

$$\omega^2 \approx 2D \cdot \mu$$
$$\frac{u}{v} = -\frac{m_2}{m_1}$$

1.4. Dreidimensionale n-atomige Kette

Befinden sich n Atome in der Basis, so liefert die Dispersionsrelation 3 akustische Zweige (jeweils zwei transversale und eine longitudinale Polarisation) und $3(n-1)$ optische Zweige. Insgesamt entspricht die Anzahl der Zweige somit der Anzahl der Freiheitsgrade des Systems.

1.5. Anregung der Kette im Versuch

Der Versuchsaufbau besteht aus einer 12 gliedrigen Kette mit festen Enden. Wie zuvor beschrieben gibt es 12 erlaubte unabhängige K-Vektoren und damit 12 verschiedene Eigenfrequenzen im Fall der einatomigen Kette. Im Fall der zweiatomigen Kette gibt es 6 erlaubte unabhängige K Vektoren mit jeweils 2 zugehörigen Frequenzen, also ebenfalls 12. Die Anzahl der Eigenfrequenzen des Systems ist gleich der Anzahl der Freiheitsgrade. Durch Aufnahme der Schwingungsamplitude $x(t)$ eines Atoms (im Versuch durch einen Luftkissenwaagen dargestellt) und einer anschließenden Fouriertransformation können diese 12 Eigenfrequenzen ermittelt werden.

$$x(\omega) = \int x(t) \cdot e^{-i\omega t}$$

Im ersten Versuchsteil werden alle Eigenfrequenzen angeregt, indem einer der Waagen einen kurzen Stoß erhält. Betrachtet man den Stoß als deltaförmig, so ist das Frequenzspektrum der Anregung durch deren Fouriertransformation gegeben:

$$\delta(\omega) = \int \delta(t) \cdot e^{-i\omega t} = 1$$

Alle Frequenzen werden also gleichermaßen angeregt, deshalb sind nach dem Einschwingvorgang alle Eigenfrequenzen im Spektrum der Schwingung enthalten und können gemessen werden.

Im zweiten Versuchteil werden die Eigenfrequenzen über einen Motor einzeln angeregt. Die harmonische Anregung ist dabei von der Form $cos(\omega_i t)$ Dabei ist ω_i die i-te Eigenfrequenz des Systems. Das Frequenzspektrum der Anregung enthält offensichtlich nur die i-te Eigenfrequenz und regt deshalb das System auch nur in dieser Mode an:

$$\int cos(\omega_i t) \cdot e^{-i\omega t} = \frac{1}{2}\left(\delta(\omega - \omega_i) + \delta(\omega + \omega_i)\right)$$

2. Versuchauswertung

2.1. Vorbemerkung zu den Unsicherheiten

Die Unsicherheit wurde für die Länge der Kette auf $L = 5.40 \pm 0.01\mathrm{m}$ abgeschätzt. Für die restlichen Unsicherheiten wurde die mittlere Abweichung des Mittelwertes vom wahren Wert über die Standardabweichung σ der einzelnen Messreihen (mit N Messwerten) abgeschätzt.

$$\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

Es wurde durchgehend die Gauß'sche Fehlerfortpflanzung verwendet.

2.2. Dispersionsrelationen

Die gemessenen Dispersionsrelationen sind in den folgenden Grafiken für die Messung bei Auslenkung des 7. Gleiters dargestellt. Für die nachfolgenden Berechnungen wurde der arithmetische Mittelwert aus den vier Messungen gebildet.

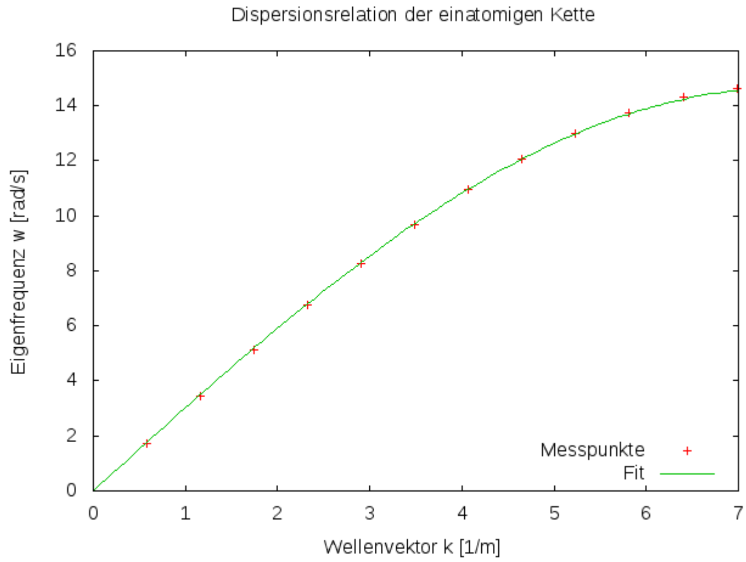

Abbildung 1: Dispersionsrelation der einatomigen Kette. Mit $D = 27.1045 \pm 0.08794 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2}$

Die Gitterkonstante und der zugehörige Zonenrand der einatomigen Kette betrug:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{L}{13} \\ &= 0.415 \pm 7.692 \cdot 10^{-04} \mathrm{m} \\ \frac{\pi}{a_1} &= 7.563 \pm 0.014 \frac{1}{\mathrm{m}} \end{aligned}$$

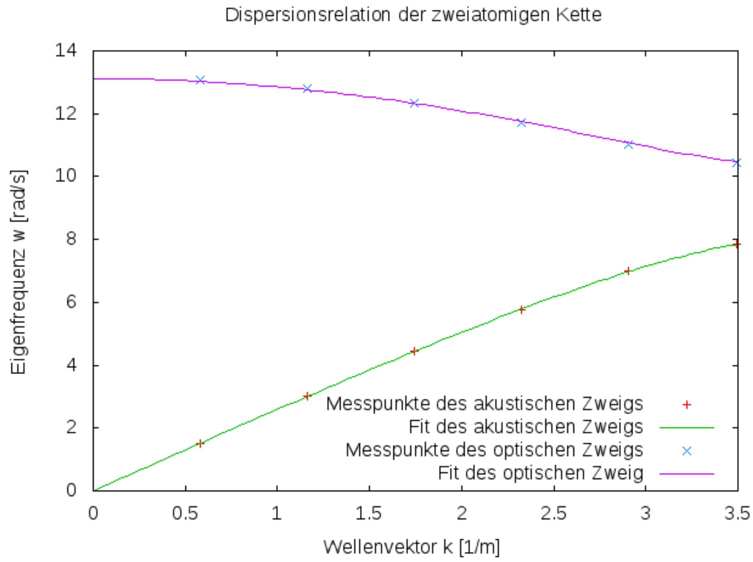

Abbildung 2: Dispersionsrelation der zweiatomigen Kette. Mit $D_a = 26.6456 \pm 0.05152 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2}$ für den akustischen und $D_o = 27.0945 \pm 0.06927 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2}$ für den optischen Zweig. Für m_2 wurde das weiter unten bestimmte Massenverhältnis verwendet.

Die Gitterkonstante und der zugehörige Zonenrand der zweiatomigen Kette betrug:

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{L}{13} \cdot 2 \\ &= 0.831 \pm 0.002\mathrm{m} \\ \frac{\pi}{a_1} &= 3.782 \pm 0.007 \frac{1}{\mathrm{m}} \end{aligned}$$

2.3. Schallgeschwindigkeit

Die Schallgeschwindigkeit der einatomigen Kette wurde aus dem arithmetischen Mittelwert der gemessenen niedrigsten Eigenfrequenzen in jedem Datensatz bestimmt.

$$\begin{aligned} \omega_1 &= 1.741 \pm 0.001 \frac{\mathrm{rad}}{\mathrm{s}} \\ k_1 &= 0.582 \pm 0.001 \frac{1}{\mathrm{m}} \\ v_{s,1} &= \frac{\omega_1 - 0}{k_1 - 0} \\ &= 2.993 \pm 0.006 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \end{aligned}$$

Die Schallgeschwindigkeit der zweiatomigen Kette beträgt:

$$\begin{aligned}
\omega_1 &= 1.509 \pm 2.593 \cdot 10^{-4} \frac{\mathrm{rad}}{\mathrm{s}} \\
k_1 &= 0.582 \pm 0.001 \frac{1}{\mathrm{m}} \\
v_{s,2} &= \frac{\omega_1 - 0}{k_1 - 0} \\
&= 2.593 \pm 0.005 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}
\end{aligned}$$

Für die Fehler von ω_1 wurde wie bereits erwähnt jeweils der Fehler des Mittelwertes benutzt. Beide Ergebnisse entsprechen den Erwartungen, da eine Schallgeschwindigkeit von einigen $\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$ auch bereits durch reines Beobachten der Wagen beim Anstoßen abgeschätzt wurde.

2.4. Bestimmung des Massenverhältnisses

Mithilfe der für die Gruppengeschwindigkeit der ein bzw. zweiatomigen Kette bestimmten Ausdrücke im vorherigen Kapitel, kann bei bekannter Gruppengeschwindigkeit das Massenverhältnis berechnet werden. Dabei muss beachtet werden, dass die Gitterkonstante a_2 für die zweiatomige Kette doppelt so groß ist wie für die einatomige $a_1 = \frac{a_2}{2}$.

$$\begin{aligned}
\frac{v_{s,1}}{v_{s,2}} &= \frac{\sqrt{\frac{Da_1^2}{m_1}}}{\sqrt{\frac{Da_2^2}{2(m_1+m_2)}}} \\
&= \sqrt{\frac{m_1 + m_2}{2m_1}} \\
\frac{m_2}{m_1} &= 2\frac{v_{s,1}}{v_{s,2}} - 1 \\
&= 1.665 \pm 0.014
\end{aligned}$$

Dieses Massenverhältnis liegt in der richtigen Größenordnung und ist plausibel.

2.5. Bestimmung der Federkonstanten

Mithilfe der berechneten Schallgeschwindigkeiten kann mithilfe der gleichen Ausdrücke die Federkonstante bestimmt werden:

$$\begin{aligned}
D_1 &= m \cdot \left(\frac{v_{s,1}}{a_1}\right)^2 \\
&= 26.169 \pm 0.143 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2} \\
D_2 &= 2\left(m_1 + m_2\right) \cdot \left(\frac{v_{s,2}}{a_2}\right)^2 \\
&= 26.169 \pm 0.198 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2}
\end{aligned}$$

Dabei wurde m_2 mithilfe des zuvor bestimmten Massenverhältnisses aus $m_1 = 0.504\mathrm{kg}$ berechnet.

Anstatt die Federkonstanten aus einem einzelnen Wert der Dispersionsrelation zu bestimmen, geben wir an dieser Stelle den Wert für D an, den wir durch den Fit über alle Werte der Dispersionsrelation im ersten Aufgabenteil erhalten haben. Dieses Ergebnis ist genauer, da alle Messdaten mit einbezogen werden. Außerdem erhalten wir so sowohl für den Fit des akustischen, wie auch für den Fit des optischen Zweigs bei der zweiatomigen Kette jeweils einen Wert. Die Unsicherheitsangaben von Gnuplot (Freies Fit und Plotprogramm) sind sehr gering, der Unterschied zwischen den Fits des akustischen und optischen Zweigs, gibt daher eine bessere Abschätzung des wahren Fehlers.

$$D_1 = 27.1045 \pm 0.08794 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2}$$
$$D_{2,a} = 26.6456 \pm 0.05152 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2}$$
$$D_{2,o} = 27.0945 \pm 0.06927 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2}$$
$$\Delta D = D_{2,o} - D_{2,a} = 0.4489 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2}$$

Für die endgültige Angabe mitteln wir über die drei Werte, und schätzen den Fehler mit ΔD ab.

$$D = 26.9482 \pm 0.4489 \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s}^2}$$

Dieses Ergebnis stimmt im Rahmen der Unsicherheiten nicht mit der Bestimmung der Federkonstanten über die Schallgeschwindigkeiten überein. Es ist daher anzunehmen, dass im Experiment auftretende Unsicherheitsquellen nicht beachtet wurden, diese werden im folgenden Abschnitt noch diskutiert.

2.6. Mögliche weitere Unsicherheitsquellen

In dem Experiment verstecken sich viele weitere Quellen von Unsicherheiten, die jedoch im Rahmen des Praktikums schwer zu erfassen und abzuschätzen waren:

- Die Messung der Auslenkung der Wagen erfolgte über eine Video-Kamera. Bei der Kamera handelte es sich lediglich um ein Ersatzgerät, welches noch am Morgen des Versuches mit der Post geliefert wurde und erst über längere Zeit kalibriert werden musste. Bereits bei der Kalibrierung zeigte sich wie empfindlich und störanfällig das Gerät ist. Zufällige Reflexionen könnten das Messergebnis verfälschen. Eine Angabe für die Ortsauflösung der Kamera stand ebenfalls nicht zur Verfügung, sodass deren Unsicherheit unbekannt ist.

- Die über den PC aufgenommenen Daten beinhalteten lediglich die gemessen Frequenzen und Amplituden, Nicht jedoch die zugehörigen Unsicherheiten, die z.B. für die Frequenzen, deren Peaks am Ende der Messzeit eine endliche Breite hatten, leicht zu bestimmten gewesen wäre. Würde die Software diese Daten bereitstellen, wäre eine bessere Unsicherheitsabschätzung möglich gewesen.

- Für den zweiten Aufgabenteil wurde das System mit einem Motor harmonisch getrieben, die Frequenzstabilität und die Abweichung der eingestellten Frequenz zur wahren Eigenfrequenz ist dabei nicht bekannt. Diese Unsicherheit kann aber als klein gegenüber den anderen Quellen betrachtet werden.

- Aus der Vorbereitungsmappe war nur das mittlere Gewicht der Wagen bekannt. Wie stark das Gewicht streut, und welchen Einfluss dies auf unsere Messung hatte kann an dieser Stelle nicht abgeschätzt werden. Ähnliches gilt für die Federn zwischen den Wagen, deren Federkonstante als gleich angenommen wurde. Über die Streuung der Federkonstanten sind ebenfalls keine Informationen verfügbar. Hier wären weitere Untersuchungen des Versuchaufbaus nötig gewesen.

A. Quellcode zur Auswertung

Alle Aufgabenteile wurden mit dem Programmpaket ScienceValue-1.0.bearbeitet. Das Auswerteskript ist hier angehängt. Die nötige Software kann von den Autoren bezogen werden. Im Quellcode enthalten sind die zur Berechnung verwendeten Messdaten.

```python
#!/usr/bin/python
#-*- coding: utf-8 -*-
# gitterschwingung.py
# Thomas Keck 2011

from __future__ import print_function
import sys
sys.path.append('../../ScienceValue-1.0/')

import textGenerator as tg
import systemInternational as si
import physicalConstants as pc
from vector import *
from value import *
import utils


L = Value(5.40, error=0.01, name="t_M",unit=si.Meter, description="Laenge␣der␣Kette")

# Schallgeschwindigkeit der einatomigen Kette
omega = Vector([0.277439,0.277440,0.277726,0.277728,0.276766,0.276767,0.276646,0.276647],
        name="Eigenfrequenz", unit=si.Radian/si.Second,
        description="Gemessene␣erste␣Eigenfrequenz")*2*pc.pi
print(omega)
print(tg.Latex(omega))
k     = Value.Name( 1.0*pc.pi/L, name="Wellenvektor",
        description="Zugehoeriger␣erlaubter␣Wellenvektor")
print(k)
print(tg.Latex(k))
c1    = Value.Name( omega.getValue()/k, name="Schallgeschwindigkeit",
        description="Schallgeschwindigkeit␣der␣einatomigen␣Kette")
print(c1)
print(tg.Latex(c1))

# Schallgeschwindigkeit der  zweiatomigen Kette
omega = Vector([0.240241,0.240241,0.240114,0.240115,0.239936,0.239937,0.240131,0.240132],
        name="Eigenfrequenz", unit=si.Radian/si.Second,
        description="Gemessene␣erste␣Eigenfrequenz")*2*pc.pi
print(omega)
print(tg.Latex(omega))
k     = Value.Name( 1.0*pc.pi/L, name="Wellenvektor",
        description="Zugehoeriger␣erlaubter␣Wellenvektor")
print(k)
print(tg.Latex(k))
c2    = Value.Name( omega.getValue()/k, name="Schallgeschwindigkeit",
        description="Schallgeschwindigkeit␣der␣zweiatomigen␣Kette")
print(c2)
print(tg.Latex(c2))
```

```
# Massenverhaeltnis
v       = Value.Name( 2.0*(c1/c2)**2 -1, name="Massenverhaeltnis",
          description="Massenverhaeltnis aus Schallgeschwindigkeiten")
print(v)
print(tg.Latex(v))

# Federkonstante der einatomigen Kette aus der Schallgeschwindigkeit
m       = Value( 0.504, error=utils.Percent(0.1), name="Masse m", unit=si.Kilogram,
          description="Masse des leichten Gleiters")
a       = Value.Name( L/13.0, name="Gitterkonstante", description="Abstand der Gleiter")
print(a)
print(tg.Latex(a))
print(tg.Latex(pc.pi/a))
D       = Value.Name( m * (c1/a)**2, name="Federkonstante",
          description="Federkonstante der einatomigen Kette aus der Schallgeschw.")
print(D)
print(tg.Latex(D))

# Masse des schweren Gleiters
M     = Value.Name( m*v , name="Masse M", description="Masse des schweren Gleiters")
print(M)
print(tg.Latex(M))

a       = Value.Name( L/13.0*2, name="Gitterkonstante", description="Abstand der Basen")
print(a)
print(tg.Latex(a))
print(tg.Latex(pc.pi/a))

# Federkonstante der zweiatomigen Kette aus der Schallgeschwindigkeit
D       = Value.Name( 2*(m+M) * (c2/a)**2, name="Federkonstante",
          description="Federkonstante der zweiatomigen Kette aus der Schallgeschw.")
print(D)
print(tg.Latex(D))
```

Literatur

[Vorbereitungsmappe] Vorbereitungsmappe Gitterschwingungen