1. Übung zur Festkörpertheorie II (SS 2014) **Prof. Krüger**

Ausgabedatum: 10.04.2014 Abgabedatum: 22.04.2014

Aufgabe 1: Phononen der linearen Kette (4 Punkte)

Der Hamiltonoperator einer linearen Kette mit Atomen der Masse M im Abstand a habe die Form

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_j \frac{\hat{P}_j^2}{M} + \frac{1}{2} K \sum_j (u_j - u_{j-1})^2 \, .$$

a) Berechnen Sie die Kraftkonstanten $\phi(j, j')$ und bestimmen Sie die Eigenfrequenzen $\omega(q)$.

b) Zeigen Sie, dass sich mit Hilfe der in der Vorlesung diskutierten Transformation

$$u_j = \sqrt{\frac{\hbar}{N M}} \sum_q \frac{1}{\sqrt{2\,\omega(q)}} \left(\hat{a}(q) + \hat{a}^+(-q)\right) \mathrm{e}^{i\,q\,R_j} \, ,$$

$$\hat{P}_j = \sqrt{\frac{\hbar\, M}{N}} \sum_q \sqrt{\frac{\omega(q)}{2}} \frac{1}{i} \left(\hat{a}(q) - \hat{a}^+(-q)\right) \mathrm{e}^{-i\,q\,R_j}$$

mit $R_j = j \cdot a$, der Hamiltonoperator als Summe von Hamiltonoperatoren harmonischer Oszillatoren darstellen lässt. Benutzen Sie dabei die explizite Form der Dispersionsrelation $\omega(q)$ der linearen Kette.

Aufgabe 2: Phononen im hexagonalen Gitter (6 Punkte)

Ein zweidimensionales Gitter werde durch die Vektoren

$$\vec{a}_1 = (1, 0)\, a \qquad \text{und} \qquad \vec{a}_2 = \left(-1, \sqrt{3}\right) \frac{a}{2}$$

aufgespannt. Die Atome des Gitters werden durch Zentralkräfte mit Federkonstanten K zwischen erstnächsten Nachbarn zusammengehalten. Die potentielle Energie dieses Systems hat die Form:

$$E^{\mathrm{el}} = \frac{1}{2} \sum_j \sum_{j'} \frac{K}{2} \left[\left| \vec{R}_j + \vec{u}_j - \vec{R}_{j'} - \vec{u}_{j'} \right| - \left| \vec{R}_j - \vec{R}_{j'} \right| \right]^2 \, .$$

Dabei läuft die Summe über j' nur über die erstnächsten Nachbarn von $\vec{R}_j$.

Die Kraftkonstanten ergeben sich in diesem Fall durch Ableitung nach den Auslenkungen $\vec{u}_j$, $\vec{u}_{j'}$ für $j \neq j'$ zu

$$\Phi_{\alpha\alpha'}\left(\vec{R}_j, \vec{R}_{j'}\right) = \begin{cases} -K \dfrac{\left(\vec{R}_j - \vec{R}_{j'}\right)_\alpha \left(\vec{R}_j - \vec{R}_{j'}\right)_{\alpha'}}{|\vec{R}_j - \vec{R}_{j'}|^2} & \text{für} \quad |\vec{R}_j - \vec{R}_{j'}| = \text{1. n. N.-Abstand} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \, .$$

Die Kraftkonstanten für $j = j'$ können mit Hilfe der akustischen Summenregel berechnet werden.

a) Zeichnen Sie das Gitter im Ortsraum. Markieren Sie eine Einheitszelle. Geben Sie an, welche Symmetrieoperationen das Gitter invariant lassen.

b) Berechnen Sie die Vektoren $\vec{b}_i$, die das reziproke Gitter aufspannen, und konstruieren Sie die 1. Brillouinzone. Bestimmen Sie den irreduziblen Teil der Brillouinzone.

c) Bestimmen Sie die Kraftkonstanten $\Phi_{\alpha\alpha'}\left(\vec{R}_j, \vec{0}\right)$ für $\vec{R}_j = \vec{0}$ und die $\vec{R}_j$ der sechs erstnächsten Nachbarn.

d) Stellen Sie die dynamische Matrix auf.

e) Berechnen Sie die Eigenfrequenzen an den Hochsymmetriepunkten

$$\vec{q} = (0,\, 0)\,\frac{2\,\pi}{a} \qquad (\Gamma\text{-Punkt})\ , \qquad\qquad \vec{q} = \left(0,\, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\frac{2\,\pi}{a} \qquad (M\text{-Punkt})\ ,$$

$$\vec{q} = \left(\frac{1}{3},\, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\frac{2\,\pi}{a} \qquad (K\text{-Punkt})\ , \qquad\qquad \vec{q} = \left(\frac{2}{3},\, 0\right)\frac{2\,\pi}{a} \qquad (K'\text{-Punkt})$$

und entlang der Randlinien des irreduziblen Teils der Brillouinzone.

Skizzieren Sie die Dispersionskurven.