

Aufgabe 5: Phononen im hexagonalen Gitter**(10 Punkte)**

Ein zweidimensionales Gitter werde durch die Vektoren

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

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

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

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

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

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

- Zeichnen Sie das Gitter im Ortsraum. Markieren Sie eine Einheitszelle. Geben Sie an, welche Symmetrieoperationen das Gitter invariant lassen.
- 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.
- Bestimmen Sie die Kraftkonstanten $\Phi_{\alpha\alpha'}(\vec{R}_j, \vec{0})$ für $\vec{R}_j = \vec{0}$ und die \vec{R}_j der sechs erstnächsten Nachbarn.
- Stellen Sie die dynamische Matrix auf.
- Berechnen Sie die Eigenfrequenzen an den Hochsymmetriepunkten

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

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

und entlang der Randlinien des irreduziblen Teils der Brillouinzone.

Skizzieren Sie die Dispersionskurven.