

# Übungen zur theoretischen Festkörperphysik I - Zettel 2

Wintersemester 11/12

Abgabe: 15.11.

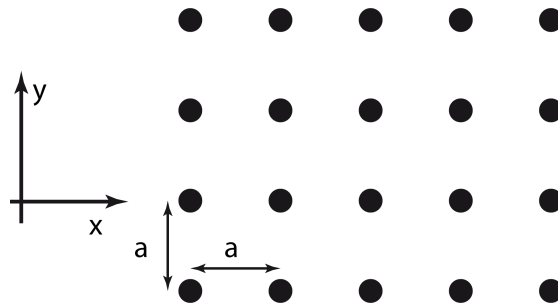
## Aufgabe 6: Harmonische Näherung (5P)

Mit Hilfe des Lennard-Jones Potential kann man die Wechselwirkung zwischen Atomen beschreiben

$$V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right].$$

Berechnen Sie Lage und Tiefe des Potentialminimums. Ermitteln Sie die typische Schwingungsdauer in harmonischer Näherung.

## Aufgabe 7: Phononen im quadratischen Gitter (15P)



Wir betrachten ein 2-dimensionales, quadratisches Gitter mit Atomen der Masse  $M$  und der Gitterkonstanten  $a$ . Zwischen nächsten Nachbarn gibt es eine Kopplung der Stärke  $k_1$  und zwischen übernächsten Nachbarn eine Kopplung der Stärke  $k_2$ .

- Identifizieren Sie nächste und übernächste Nachbarn und skizzieren Sie die Kopplung als Federn im Gitter. Wie viele und was für Phonon-Zweige erwarten Sie?
- Stellen Sie die Kraftkonstanten  $\Phi_{x,x}(\Delta R_x^0, \Delta R_y^0)$  und  $\Phi_{x,y}(\Delta R_x^0, \Delta R_y^0)$  auf, wobei  $\Delta R_{x/y}^0$  der Abstand zwischen zwei Atomen in  $x/y$ -Richtung ist.
- Berechnen Sie die fouriertransformierte dynamische Matrix  $D_{\alpha,\alpha'}(\vec{q})$  zunächst für  $x, x$  und  $x, y$  und überlegen Sie wie die anderen Matrixelemente daraus folgen.
- Berechnen Sie allgemein die Phonon-Dispersion für das 2D-Gitter.
- Betrachten Sie den Fall  $k_1 = 2k_2$ . Berechnen und zeichnen Sie die Phonon-Dispersionsrelation entlang den Linien  $(0, 0) \rightarrow (\frac{\pi}{a}, 0)$ ;  $(\frac{\pi}{a}, 0) \rightarrow (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$  und  $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}) \rightarrow (0, 0)$ . Benutzen Sie zum Zeichnen ein geeignetes Plot-Programm.