Prof. Dr. Eckehard Schöll, Dr. Kathy Lüdge
Dr. Carsten Weber

2. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

Abgabe: Mo. 02.05.2011 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 4 (10 Punkte): *Schwingungen eines eindimensionalen Kristalls*

Ein eindimensionaler Kristall sei durch ein Gitter mit Basisvektor $\mathbf{a} = a\mathbf{e}_x$ (a: Gitterkonstante) und eine zweiatomige Basis gegeben. Die Basis bestehe aus einem Atom der Masse M_1 mit Auslenkung X_{n1} aus der Ruhelage R_{n1}^0 und einem Atom der Masse M_2 mit Auslenkung X_{n2} aus der Ruhelage R_{n2}^0. Der Abstand von $X_{n-1,1}$ zu X_{n1} ist demensprechend gerade die Gitterkonstante a. Da die Differenzen der Gleichgewichtslagen von benachbarten Atomen nicht gleich sein müssen, nehmen wir unterschiedliche Kraftkonstanten an: Zwischen X_{n1} und X_{n2} sei sie K_1 und zwischen $X_{n-1,2}$ und X_{n1} betrage sie K_2.

(a) Stellen Sie die Bewegungsgleichungen unter Berücksichtigung der harmonischen und nächsten-Nachbarn-Näherung auf.

(b) Lösen Sie das Gleichungssystem mit einem Exponentialansatz und bestimmen Sie die Dispersionsrelation $\omega(q)$. Sind die Frequenzen immer reell? Warum?

(c) Untersuchen Sie das Schwingungsverhalten der beiden Moden indem Sie das Amplitudenverhältnis des Exponentialansatzes betrachten. Wann spricht man von optischen, wann von akustischen Moden?

(d) Plotten Sie mit einem Programm Ihrer Wahl (Gnuplot, Mathematica, Matlab, etc) sowohl die Dispersionsrelationen als auch deren Taylorentwicklung für kleine q für eine Ga-As-Kette mit einer Gitterkonstante von $a = 3,146$ nm und einem Verhältnis der Kraftkonstanten von $K_2 = 1,5K_1$.

(e) Überprüfen Sie Ihre Ergebnisse am Grenzfall $M_1 = M_2 = M$ und $K_1 = K_2 = K$. Ist dies ein Widerspruch zum Ergebnis der einatomigen linearen Kette (vgl. VL)? (Erklärung!)

Aufgabe 5 (7 Punkte): *Fourier-Transformation*

Gegeben seien die folgenden Funktionen im dreidimensionalen Ortsraum:

(a) $f(\mathbf{r}) = \frac{e^{-\alpha r}}{r}(\alpha > 0)$

(b) $f(\mathbf{r}) = \left(x^4 - \frac{a^2}{2}x^2\right)\left(y^4 - \frac{a^2}{2}y^2\right)\left(z^4 - \frac{a^2}{2}z^2\right) + \left(\frac{7a^4}{15\cdot 16}\right)^3$ für $-\frac{a}{2} < x, y, z \le \frac{a}{2}$
und a-periodisch in alle drei Raumrichtungen fortgesetzt.

Geben Sie jeweils die Formel für die Hin- und Rücktransformation an und berechnen Sie die Fourierdarstellung.

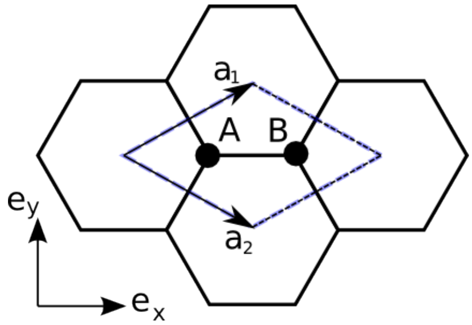
Bitte Rückseite beachten!⟶

Aufgabe 6 (3 Punkte): *Hexagonales Gitter von Graphen*

Eine Elementarzelle von Graphen (eine einzelne Lage Graphit), welche von den Basisvektoren $\mathbf{a}_1$ und $\mathbf{a}_2$ aufgespannt wird, enthält zwei Kohlenstoffatome A (am Ort $\frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$) und B (am Ort $\frac{2}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$). Dabei ist

$$\mathbf{a}_1 = \frac{3a_0}{2}\mathbf{e}_x + \frac{\sqrt{3}a_0}{2}\mathbf{e}_y \quad , \quad \mathbf{a}_2 = \frac{3a_0}{2}\mathbf{e}_x - \frac{\sqrt{3}a_0}{2}\mathbf{e}_y \quad \text{und} \quad \mathbf{a}_3 = l_z\mathbf{e}_z$$

und folglich $\measuredangle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = 60°$. Hier entspricht l_z der Länge der Elementarzelle in z-Richtung, was aber nicht weiter relevant ist, da wir annehmen, dass verschiedene Graphenlagen im Graphit nicht miteinander koppeln.



(a) Konstruieren Sie aus der Elementarzelle von Graphen die 1. Brillouin-Zone.

(b) Handelt es sich bei obigem Honigwabengitter um ein Bravais-Gitter? (Erklärung!)