

Dr. Ermin Malic
 Dr. Marten Richter
 Dipl. Phys. Julia Kabuß

2. + 3. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I+II

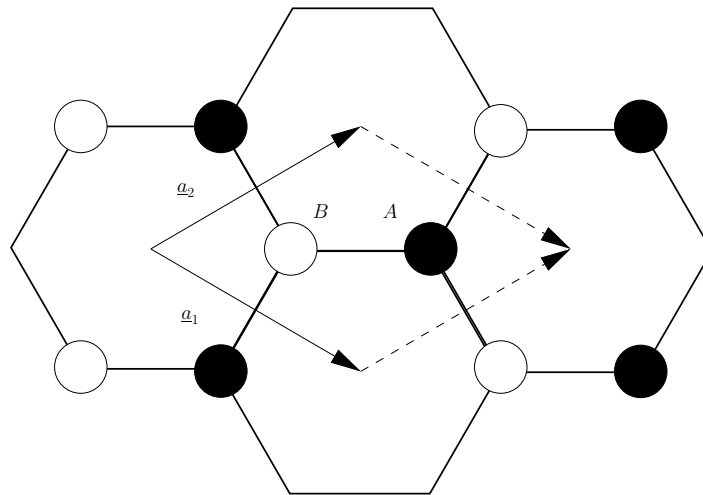
Abgabe: Mi. 08.05.2013 vor Beginn der Vorlesung im EW 203

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte Matrikelnummer auf dem Aufgabenzettel angeben! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Da die Übung am 1. Mai entfällt, wird am Di dem 30.04 kein weiterer Zettel ausgegeben. Dieses Übungsblatt enthält die Aufgaben von zwei Wochen.

Aufgabe 3 (15 Punkte): Bandstruktur von Graphen

1. Konstruieren Sie zunächst aus der Elementarzelle von Graphen (eine einzelne Lage Graphit) die erste Brillouin-Zone. Die Graphen-Elementarzelle wird von den Basisvektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2



aufgespannt wird und enthält zwei Kohlenstoffatome A (am Ort $\frac{2}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$) und B (am Ort $\frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$). Dabei ist

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

mit $|a_1| = |a_2| = 0.2461 \text{ nm}$ und folglich $\angle(\vec{a}_1, \vec{a}_2) = 60^\circ$. Hier entspricht c der Länge der Einheitszelle in z -Richtung, was für die Bandstrukturrechnung aber nicht weiter relevant ist, da wir annehmen, dass verschiedene Graphenlagen im Graphit nicht miteinander koppeln.

2. Um die Bandstruktur zu berechnen, stellen Sie zunächst die Matrix H_{ij} (Siehe VL+ÜB) des Hamiltonoperators bezüglich der Atomorbitalfunktionen auf. Die internen Summen laufen dabei über die ihre nächsten Nachbarn der Graphene Elementarzelle. Das heißt konkret, dass nur der Überlapp des p_z -Orbitals eines Kohlenstoffatoms $A(B)$ mit sich selbst $A(B)$ und zwischen sich und dem nächsten benachbarten Atomen $B(A)$ als relevant betrachtet wird. Machen Sie sich das anhand einer Skizze klar.
3. Bestimmen Sie nun die \vec{k} -abhängigen Energieeigenwerte $\varepsilon(\vec{k})$ (siehe VL).
4. Plotten Sie die Bandstruktur mithilfe eines Plotprogramms (Gnuplot, Mathematica, etc.). Setzen Sie dazu als Parameter für den Überlapp von $H_{AA} = 0 \text{ eV}$ and $H_{AB} = -2.84 \text{ eV}$.

Bitte Rückseite beachten! →

Dr. Ermin Malic
 Dr. Marten Richter
 Dipl. Phys. Julia Kabuß

2. + 3. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I+II

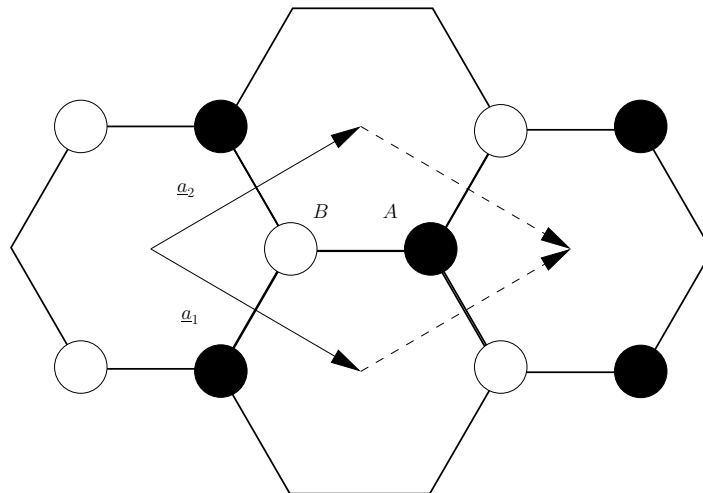
Abgabe: Mi. 08.05.2013 vor Beginn der Vorlesung im EW 203

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte Matrikelnummer auf dem Aufgabenzettel angeben! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Da die Übung am 1. Mai entfällt, wird am Di dem 30.04 kein weiterer Zettel ausgegeben. Dieses Übungsblatt enthält die Aufgaben von zwei Wochen.

Aufgabe 3 (15 Punkte): Bandstruktur von Graphen

1. Konstruieren Sie zunächst aus der Elementarzelle von Graphen (eine einzelne Lage Graphit) die erste Brillouin-Zone. Die Graphen-Elementarzelle wird von den Basisvektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2



aufgespannt wird und enthält zwei Kohlenstoffatome A (am Ort $\frac{2}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$) und B (am Ort $\frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$). Dabei ist

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

mit $|a_1| = |a_2| = 0.2461 \text{ nm}$ und folglich $\angle(\vec{a}_1, \vec{a}_2) = 60^\circ$. Hier entspricht c der Länge der Einheitszelle in z -Richtung, was für die Bandstrukturrechnung aber nicht weiter relevant ist, da wir annehmen, dass verschiedene Graphenlagen im Graphit nicht miteinander koppeln.

2. Um die Bandstruktur zu berechnen, stellen Sie zunächst die Matrix H_{ij} (Siehe VL+ÜB) des Hamiltonoperators bezüglich der Atomorbitalfunktionen auf. Die internen Summen laufen dabei über die ihre nächsten Nachbarn der Graphene Elementarzelle. Das heißt konkret, dass nur der Überlapp des p_z -Orbitals eines Kohlenstoffatoms $A(B)$ mit sich selbst $A(B)$ und zwischen sich und dem nächsten benachbarten Atomen $B(A)$ als relevant betrachtet wird. Machen Sie sich das anhand einer Skizze klar.
3. Bestimmen Sie nun die \vec{k} -abhängigen Energieeigenwerte $\varepsilon(\vec{k})$ (siehe VL).
4. Plotten Sie die Bandstruktur mithilfe eines Plotprogramms (Gnuplot, Mathematica, etc.). Setzen Sie dazu als Parameter für den Überlapp von $H_{AA} = 0 \text{ eV}$ and $H_{AB} = -2.84 \text{ eV}$.

Bitte Rückseite beachten!→

2. Übung TFKP SS13

Aufgabe 4 (15 Punkte): Gitterschwingungen: Lineare Kette

Betrachten Sie eine lineare Atomkette aus zwei Atomsorten. Die erste Sorte habe die Masse m' und ihre Auslenkung aus der Ruhelage x_n sei u'_n . Die Größen der zweiten Atomsorte seien m'' , y_n und u''_n . Der Abstand von x_{n-1} zu x_n sei die Gitterkonstante a (Siehe VL). Da die Gleichgewichtslagen von benachbarten Atomen nicht gleich sein müssen nehmen wir unterschiedliche Kraftkonstanten an: Zwischen x_n und y_n sei sie β_1 und zwischen x_n und y_{n-1} betrage die Kraft β_2 .

1. Stellen Sie die Bewegungsgleichungen unter Berücksichtigung der harmonischen und nächsten-Nachbarn-Näherung auf.
2. Lösen Sie das Gleichungssystem mit einem Exponentialansatz und bestimmen Sie die Dispersionsrelation ω_q . Sind die Frequenzen immer reell? Warum?
3. Führen Sie eine Taylorentwicklung beider Moden für kleine q durch.
4. Plotten Sie mit einem Programm Ihrer Wahl (Gnuplot, Mathematica, Matlab, etc) sowohl die Dispersionsrelationen als auch deren Taylorentwicklung für eine Ga-As Kette mit einer Gitterkonstante von $a = 3,146$ nm und einem Verhältnis der Kraftkonstanten von $\beta_2 = 1,5\beta_1$.
5. Untersuchen Sie das Schwingungsverhalten der beiden Moden indem Sie das Amplitudenverhältnis des Exponentialansatzes betrachten. Wann spricht man von optischen, wann von akustischen Moden?
6. Überprüfen Sie Ihre Ergebnisse am Grenzfall der einfachen linearen Kette ($m' = m'' = m$ und $\beta_1 = \beta_2 = \beta$). Plotten Sie auch dieses Ergebnis.

Vorlesung:	<ul style="list-style-type: none">• Dienstag 10:15 Uhr – 12:45 Uhr im EW 203.
Webseite:	<ul style="list-style-type: none">• Mittwoch 10:15 Uhr – 12:45 Uhr im EW 203.• Details zur Vorlesung, Vorlesungsmitschrift und aktuelle Informationen sowie Sprechzeiten auf der Webseite unter http://www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ss13/wahlpflichtveranstaltungen/theoretische_festkoerperphysik_i_ii/
Scheinkriterien:	<ul style="list-style-type: none">• Mindestens 60% der Übungspunkte.• Regelmäßige und aktive Teilnahme in den Tutorien.

Bemerkung: Bei den Übungsaufgaben werden nur dokumentenechte, handschriftliche Originale akzeptiert. Es werden keine Kopien oder elektronischen Abgaben akzeptiert.

Literatur zur Lehrveranstaltung:

Alle Bücher stehen der Physikbibliothek zur Verfügung.

- Czocholl: Theoretische Festkörperphysik, Springer
- Haken, Quantenfeldtheorie des Festkörpers, Teubner
- Haug, Koch, Quantum, Theory of the optical and electronic properties of semiconductors, World Scientific
- Scheck, Theoretische Physik, Springer
- Scherz, Quantenmechanik, Teubner
- Madelung, Festkörpertheorie, Springer

2. Übung TFKP SS13

Aufgabe 4 (15 Punkte): Gitterschwingungen: Lineare Kette

Betrachten Sie eine lineare Atomkette aus zwei Atomsorten. Die erste Sorte habe die Masse m' und ihre Auslenkung aus der Ruhelage x_n sei u'_n . Die Größen der zweiten Atomsorte seien m'' , y_n und u''_n . Der Abstand von x_{n-1} zu x_n sei die Gitterkonstante a (Siehe VL). Da die Gleichgewichtslagen von benachbarten Atomen nicht gleich sein müssen nehmen wir unterschiedliche Kraftkonstanten an: Zwischen x_n und y_n sei sie β_1 und zwischen x_n und y_{n-1} betrage die Kraft β_2 .

1. Stellen Sie die Bewegungsgleichungen unter Berücksichtigung der harmonischen und nächsten-Nachbarn-Näherung auf.
2. Lösen Sie das Gleichungssystem mit einem Exponentialansatz und bestimmen Sie die Dispersionsrelation ω_q . Sind die Frequenzen immer reell? Warum?
3. Führen Sie eine Taylorentwicklung beider Moden für kleine q durch.
4. Plotten Sie mit einem Programm Ihrer Wahl (Gnuplot, Mathematica, Matlab, etc) sowohl die Dispersionsrelationen als auch deren Taylorentwicklung für eine Ga-As Kette mit einer Gitterkonstante von $a = 3,146$ nm und einem Verhältnis der Kraftkonstanten von $\beta_2 = 1,5\beta_1$.
5. Untersuchen Sie das Schwingungsverhalten der beiden Moden indem Sie das Amplitudenverhältnis des Exponentialansatzes betrachten. Wann spricht man von optischen, wann von akustischen Moden?
6. Überprüfen Sie Ihre Ergebnisse am Grenzfall der einfachen linearen Kette ($m' = m'' = m$ und $\beta_1 = \beta_2 = \beta$). Plotten Sie auch dieses Ergebnis.

Vorlesung:	<ul style="list-style-type: none">• Dienstag 10:15 Uhr – 12:45 Uhr im EW 203.• Mittwoch 10:15 Uhr – 12:45 Uhr im EW 203.
Webseite:	<ul style="list-style-type: none">• Details zur Vorlesung, Vorlesungsmitschrift und aktuelle Informationen sowie Sprechzeiten auf der Webseite unter http://www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ss13/wahlpflichtveranstaltungen/theoretische_festkoerperphysik_i_ii/
Scheinkriterien:	<ul style="list-style-type: none">• Mindestens 60% der Übungspunkte.• Regelmäßige und aktive Teilnahme in den Tutorien.

Bemerkung: Bei den Übungsaufgaben werden nur dokumentenechte, handschriftliche Originale akzeptiert. Es werden keine Kopien oder elektronischen Abgaben akzeptiert.

Literatur zur Lehrveranstaltung:

Alle Bücher stehen der Physikbibliothek zur Verfügung.

- Czycholl: Theoretische Festkörperphysik, Springer
- Haken, Quantenfeldtheorie des Festkörpers, Teubner
- Haug, Koch, Quantum, Theory of the optical and electronic properties of semiconductors, World Scientific
- Scheck, Theoretische Physik, Springer
- Scherz, Quantenmechanik, Teubner
- Madelung, Festkörpertheorie, Springer