

Prof. Dr. Kathy Lüdge
Dr. Alexander Carmele

2. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

Abgabe: Mo. 06.05.2019 zum Vorlesungsbeginn

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

Aufgabe 4 (12 Punkte): Gitterschwingungen

Betrachten Sie ein einatomiges fcc-Gitter mit der Gitterkonstanten a , bei dem jedes Atom mit Masse M nur mit seinen direkten Nachbarn über das zentralsymmetrische Potential $V(|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}|)$ wechselwirkt. Betrachten Sie in Folgendem die Wechselwirkung für ein Atom n , das in Ursprung des Koordinatensystems liegt, so dass $\mathbf{R}_n = (0, 0, 0)$.

- (a) Zeigen Sie, dass die Frequenzquadrate der drei Moden (warum drei?) für gegebenen Wellenvektor \mathbf{q} die Eigenwerte folgender Matrix ("dynamische Matrix") sind:

$$D_{ij} = \frac{1}{M} \sum_n \sin^2 \left(\frac{1}{2} \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n \right) (A \delta_{ij} + B R_{ni} R_{nj}).$$

Die Summe läuft über die nächsten Nachbarn von $\mathbf{R} = 0$. Ermitteln Sie per Skizze wieviele es für ein fcc-Gitter gibt und welchen Abstand die nächsten Nachbarn haben. Verwenden Sie die Abkürzung: $A = 2V'(d)/d$, $B = 2(V''(d)/d^2 - V'(d)/d^3)$ mit dem Abstand d zum nächsten Nachbarn. Außerdem wurde die Symmetrie genutzt, dass es für jeden $\mathbf{R}_n = -\mathbf{R}_n$ gibt.

- (b) Stellen Sie die dynamische Matrix explizit für $\mathbf{q} = (q, 0, 0)$ und $\mathbf{q} = (q, q, 0)/\sqrt{2}$ auf und diskutieren sie die Anzahl von Schwingungsmoden.

Aufgabe 5 (5 Punkte): Dulong-Petitsches Gesetz

Leiten Sie den Gleichverteilungssatz für ein Ensemble klassischer harmonischer Oszillatoren her: $H(\{p_i, q_i\}) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i \omega_i^2 q_i^2}{2}$. Verwenden Sie dafür den klassischen kanonischen statistischen Operator: $\rho(\{p_i, q_i\}) = \exp[-\beta H(\{p_i, q_i\})]/Z$ mit $1/\beta = k_B T$. Mitteln Sie hierzu über alle Freiheitsgrade

$$U = \int_{-\infty}^{\infty} d^{3N} q \int_{-\infty}^{\infty} d^{3N} p H(\{p_i, q_i\}) \rho(\{p_i, q_i\}).$$

Leiten Sie nun das Dulong-Petitsche Gesetz für die spezifische Wärme ungekoppelter harmonischer Oszillatoren her.

Aufgabe 6 (3 Punkte): Zustandsdichte

Für (dreidimensionale) Phononen ergibt sich für die Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{q})$ folgende Zustandsdichte $z(\omega)$:

$$z(\omega) d\omega = \left(\frac{V_g}{(2\pi)^3} \int_{\omega(\mathbf{q})=\omega} \frac{df_\omega}{|\nabla_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q})|} \right) d\omega.$$

Dabei ist df_ω das Flächenelement auf $\omega(\mathbf{q}) = \omega = \text{const}$ im \mathbf{q} -Raum. Berechnen Sie $z(\omega)$ für akustische Phononen, für welche in einem isotropen Kristall für kleine $|\mathbf{q}|$ gilt: $\omega_{L/T} = v_{L/T} |\mathbf{q}|$ ($v_{L/T}$: longitudinale bzw. transversale Schallgeschwindigkeit).

2. Übung TFP SS19

- Vorlesung:**
- Montags 10–12 Uhr im EW 202
 - Mittwochs 10–12 Uhr im EW 202

- Übungen:**
- Mi 16–18 Uhr im EW 229

- Scheinkriterien:**
- Mindestens 60% der Übungspunkte
 - Regelmäßige und aktive Teilnahme in den Übungen

Literatur zur Lehrveranstaltung:

- Ashcroft, Mermin, *Festkörperphysik* (Oldenbourg)
- Kittel, *Quantentheorie der Festkörper* (Oldenbourg)
- Czucholl, *Theoretische Festkörperphysik* (Springer)
- Ibach, Lüth, *Festkörperphysik* (Springer)
- Jäger, Valenta, *Festkörpertheorie* (Wiley)
- U. Rössler, *Solid State Theory* (Springer)
- Haug, Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific)
- Haken, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers* (Teubner)
- Scherz, *Quantenmechanik* (Teubner)

Sprechzeiten:	Name	Tag	Zeit	Raum
	Prof. Dr. K. Lüdge	Mi	13-14 Uhr	EW 741
	Dr. A. Carmele	Di	11-12 Uhr	EW 704

Hinweise:

Die Übungsblätter werden in der Regel am Montag in der Vorlesung ausgegeben. Die Abgabe erfolgt dann 14 Tage später Montags zu Vorlesungsbeginn.