Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie WS 13/14

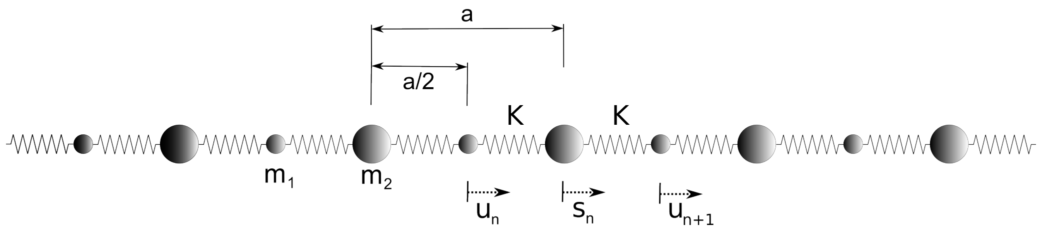
Prof. Dr. G. Schön
Dr. M. Marthaler

Blatt 1
Besprechung, 04.11.13

---

1. Zweiatomige harmonische Kette (3 + 5 + 2 = 10 Punkte)

Wie in der Abbildung dargestellt, betrachten wir eine eindimensionale Kette mit Gitterkonstante a. Die Einheitszelle dieses Gitters besteht dabei aus zwei unterschiedlichen Atomen der Masse m_1 und m_2 mit einem Gleichgewichtsabstand $a/2$. Die $2N$ Atome können sich auf der x-Achse dämpfungsfrei bewegen, die Kopplung der Atome wird durch identische Federn mit der Federkonstante K beschrieben.



Es sollen die klassischen Bewegungsgleichungen

$$m_1 \ddot{u}_n = K(s_n - 2u_n + s_{n-1})$$
$$m_2 \ddot{s}_n = K(u_n - 2s_n + u_{n+1})$$

für kleine Auslenkungen u_n und s_n aus den jeweiligen Ruhelagen bei $x = na$ und $x = (na + a/2)$ gelöst werden.

(a) Zeigen Sie für den Ansatz

$$u_n(t) = u\, e^{i(kx-\omega t)}, \quad s_n(t) = s\, e^{i(kx-\omega t)}, \quad x = na,$$

dass durch die periodische Randbedingungen

$$u_{n+N}(t) = u_n(t) \quad \text{und} \quad s_{n+N}(t) = s_n(t)$$

die Wellenzahlen k nur die diskreten Werte

$$k = \frac{2\pi}{a}\frac{m}{N}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

annehmen können, und sie ferner für eine eindeutige Lösung auf $-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$ beschränkt sind.

(b) Schreiben Sie die Bewegungsgleichungen als 2×2–Matrix und bestimmen Sie nun die Frequenzen $\omega_+(k)$, $\omega_-(k)$ der Eigenmoden dieser Kette. Geben Sie dabei jeweils auch das Verhältnis s/u an. Wie verhalten sich $\omega_\pm(k)$ und s/u für kleine $|k| \ll \pi/a$, und was bedeutet das Ergebnis anschaulich ? Skizzieren Sie $\omega_\pm(k)$ für alle erlaubten k . Wie viele akustische ($-$) und optische ($+$) Eigenmoden besitzt die Kette ?

(c) Die bisher berechneten Gitterschwingungen einer linearen Kette haben die Form harmonischer Oszillatoren und können somit, wie aus der Quantenmechanik bekannt, quantisiert werden. Geben Sie den Hamilton-Operator für die $2N$ Oszillationsmoden ($\lambda \equiv (k, \pm)$) der harmonischen Kette an ($\pm$ steht für optisch/akustisch).

2. Zustandsdichte (10 Punkte)

Betrachten Sie freie Teilchen mit Dispersion $\epsilon_{\vec{p}} = \vec{p}^2/2m$. Die Summe $\sum_{\vec{p}}$ über eine Funktion $F(\epsilon_{\vec{p}})$ kann geschrieben werden als

$$\sum_{\vec{p}} F(\epsilon_{\vec{p}}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) F(\epsilon),$$

wobei

$$D(\epsilon) = \sum_{\vec{p}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{p}})$$

die Zustandsdichte bezeichnet. Berechnen Sie die Zustandsdichte $D(\epsilon)$ für freie Teilchen in ein, zwei und drei Raumdimensionen. Ersetzen Sie dazu die Summe über die Impulse durch ein Impulsintegral, so wie Sie es aus der Vorlesung gewohnt sind. Skizzieren Sie $D(\epsilon)$ für diese drei Fälle.

3. Tight-Binding Model **Extra**

Wir betrachten die Tight-Binding Form der Energie des s-Bands eines kubisch flächenzentrierten Gitters. Entlang der in Abb. 1 gezeigten Richtungen inerhalb der ersten Brillouin Zone hat die Energie verschiedene Formen.

(a) Zeigen sie, dass entlang der Richtung ΓX ($k_y = k_z = 0$, $k_x = 2\pi\mu/a$, $0 \leq \mu \leq 1$) die Energie des s-Bandes gegeben ist durch

$$\epsilon = E_s - \beta - 4\gamma(1 + 2\cos \pi\mu)\,. \tag{1}$$

(b) Zeigen sie, dass entlang der Richtung ΓL ($k_x = k_y = k_z = 2\pi\mu/a$, $0 \leq \mu \leq 1/2$) die Energie des s-Bandes gegeben ist durch

$$\epsilon = E_s - \beta - 12\gamma \cos^2 \mu\pi\,. \tag{2}$$

(c) Zeigen sie, dass entlang der Richtung ΓK ($k_z = 0$, $k_x = k_y = 2\pi\mu/a$, $0 \leq \mu \leq 3/4$) die Energie des s-Bandes gegeben ist durch

$$\epsilon = E_s - \beta - 4\gamma(\cos^2 \mu\pi + 2\cos \mu\pi)\,. \tag{3}$$

Die Überlappintegrale sind gegeben durch,

$$\beta = -\int d\mathbf{r} \Delta U(x,y,z) |\phi(x,y,z)|^2\,, \tag{4}$$

$$\gamma = -\int d\mathbf{r} \phi^*(x,y,z) \Delta U(x,y,z) \phi(x - a/2, y - a/2, z)\,. \tag{5}$$

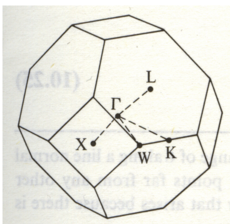


Abbildung 1: Die erste Brillouin-Zone eines kubisch flächenzentrierten Gitters. Der Punkt Γ ist die Mitte der Zone. Die Bezeichungen K, L, W, und X werden für Punkte mit hoher Symmetrie verwendet.