Name(n)/Matrikelnummer(n): Übungsgruppe:

Festkörperphysik, SoSe 2023

Übungsblatt 7

Prof. Dr. Thomas Michely
Dr. Wouter Jolie (wjolie@ph2.uni-koeln.de)
II. Physikalisches Institut, Universität zu Köln

Ausgabe: **Mittwoch, 24.05.2023**
Abgabe: **Mittwoch, 07.06.2023, bis 8 Uhr über ILIAS**

Aufgabe Nr.:	1	2	3	4	**Summe**
Points:	5	2	5	8	20
Punkte:					

Bitte Aufgaben zusammen mit Aufgabenblatt als PDF hochladen. Namen, Matrikelnummer und Gruppennummer deutlich lesbar eintragen (sonst Punktabzug). Abgabe in Gruppen zu 2, max. 3 Personen erwünscht. Die Teammitglieder müssen in der gleichen Übungsgruppe sein.

1. **[5 Punkte] Kurzfragen**
   Markieren Sie im folgenden die richtigen Satzenden (Mehrfachauswahl möglich).

   - Die einatomige Kette gekoppelter Oszillatoren
     - hat als Lösungen laufende Auslenkungswellen, die nur auf den Gitterpunkten definiert sind. ☐
     - besitzt physikalisch sinnvolle Wellenzahlen k nur in der 1. Brillouinzone des eindimensionalen reziproken Gitters. ☐
     - zeigt im Grenzfall $k \to 0$ eine stehende Welle. ☐
     - besitzt in der 1. Brillouinzone eine konstante Gruppengeschwindigkeit, die mit der Schallgeschwindigkeit identifiziert werden kann. ☐
     - besitzt an der Zonengrenze die maximale Phasengeschwindigkeit. ☐
   - Die zweiatomige Kette gekoppelter Oszillatoren
     - besitzt neben einem akustischen auch einen optischen Zweig in der Dispersionsrelation. ☐
     - zeigt in der Zonenmitte, für $k \to 0$ gegeneinander schwingende Basisatome, die als Teil gegenphasiger Wellen großer Wellenlänge betrachtet werden können. ☐
     - zeigt in der Zonenmitte für ionische Basisatome ein Dipolwechselfeld an das Infrarotwellen ankoppeln können. ☐

– besitzt am Zonenrand im optischen Zweig in einer Elementarzelle Atome, die in Gegenphase schwingen und Teile von stehenden Wellen sind. ☐

– besitzt im optischen Zweig immer größere Frequenzen als im akustischen Zweig. ☐

- Im 3D Fall führt die Betrachtung der Atome als harmonische Oszillatoren
  - zu $3j$ Zweigen in der Dispersionsrelation, wo j die Anzahl der Basisatome pro Elementarzelle ist. ☐
  - zu 3 optischen und $3j - 3$ akustischen Zweigen in der Dispersionsrelation. ☐
  - zu Dispersionsrelationen für die verschiedenen Zweige, bei denen in eine gegebene Richtung für einen gegebenen Wellenvektor $\vec{k}$ die transversal-akustischen Zweige höhere Frequenzen als die longitudinal-akustischen Zweige haben. ☐
  - häufig zu weniger als $3j$-Zweigen entlang von Hochsymmetrierichtungen, weil Entartung vorliegt. ☐
  - zu einer maximalen Gruppengeschwindigkeit am Zonenrand auf einer Hochsymmetrierichtung. ☐
- Randbedingungen für die gekoppelten Oszillatoren in 1D oder 3D
  - können aufgrund der kleinen Anzahl von Oberflächeneinheitszellen im Vergleich zur Anzahl von Einheitszellen im Inneren des Festkörpers unterschiedlich gewählt werden, ohne dass sich die physikalische Situation nennenswert verändert. ☐
  - werden üblicherweise als Born-Haber Kreisbedingungen festgelegt. ☐
  - erzwingen diskrete Wellenzahl- oder Wellenvektorwerte, und zwar einen pro Schwingungsfreiheitsgrad. ☐
  - führen zu einer konstanten Zustandsdichte im k-Raum. ☐
  - führen zu $3N$ Wellenvektoren, wobei N die Anzahl der Elementarzellen eines dreidimensionalen Kristalls ist. ☐
- Die Quantisierung der Gitterschwingungen
  - wird durch die Quantenmechanik erzwungen. ☐
  - führt zu einer charakteristischen Besetzungszahl n, wo n sich als Summe über alle Phononen der unterschiedlichen Frequenzen ω ergibt. ☐
  - führt zu einer Gesamtenergie $n(\hbar\omega + \frac{1}{2})$ der Gitterschwingungen. ☐
  - führt zu Phononen, den Quanten der Gitterschwingungen, die erzeugt und vernichtet werden können. ☐
  - ordnet diesen Phononen einen Kristallimpuls $\hbar n$ zu, wo n die Gesamtbesetzungszahl ist. ☐

2. **[2 Punkte] Optische und akustische Schwingungsmodi**
   Skizzieren Sie jeweils einen transversalen akustischen, transversalen optischen, longitudinalen akustischen und longitudinalen optischen Schwingungsmodus. Nehmen Sie, wenn Sie wollen, das Gitterschwingungs-Applet auf der Homepage des II. Physikalischen Instituts zur Hilfe.

3. **[5 Punkte] Lineare Kette mit Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn**
   Betrachten Sie die in der Vorlesung behandelte lineare Kette mit Atomen der Masse M bei den Bravaisgitterpunkten $x_n = na$ (a ist die Gitterkonstante). Berücksichtigen Sie zusätzlich zu den Kräften durch die nächsten Nachbarn (Kraftkonstante f_1) auch Kräfte durch die übernächsten Nachbarn (Kraftkonstante $f_2 \neq f_1$).

   (a) Stellen Sie die zugehörige Differenzialgleichung auf und bestimmen Sie die Dispersionsrelation. Verwenden Sie für die Auslenkung des n-ten Atomes den Ansatz:

   $$u_n = Ae^{i(nka-\omega t)}. \tag{1}$$

   (b) Diskutieren Sie die Dispersionsrelation und die Gruppengeschwindigkeit in den Grenzfällen $k_a \ll 1$ sowie $k_a = \pm\pi$.

   (c) Diskutieren Sie die den (hypothetischen) Fall mit $f_2 \gg f_1$.

4. **[8 Punkte] Zustandsdichte der Wellenvektoren im k-Raum in 3D**
   In der Vorlesung wurde gezeigt, dass die Zustandsdichte der Gitterschwingungen in einer Dimension gegeben ist durch:

   $$Z(k) = \frac{L}{2\pi}.$$

   Hier ist $L = Na$ die Länge des Festkörpers.

   Zeigen Sie, dass in die Zustandsdichte in drei Dimensionen lautet:

   $$Z(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}.$$

   Jetzt ist V das Volumen des Festkörpers.

   Betrachten Sie zur Lösung der Aufgabe einen Kristall mit den Kantenlängen $N_1|\vec{a}_1|$, $N_2|\vec{a}_2|$ und $N_3|\vec{a}_3|$ (die $\vec{a}_i$ sind die primitiven Translationen, die N_i sind ganze Zahlen) und führen Sie folgende Schritte aus:

   (a) Stellen Sie analog zum Fall in einer Dimension die periodischen Randbedingungen (Born-von Karman Randbedingungen) im dreidimensionalen Fall auf.

   (b) Setzen Sie in diese Randbedingungen den dreidimensionalen Lösungsansatz

   $$\vec{u}(\vec{R}) = \vec{A} \cdot e^{i(\vec{k}\vec{R}-\omega t)}$$

   ein und leiten Sie mit diesem Ansatz eine Bedingung für die erlaubten Wellenvektoren $\vec{k}$ her.

   (c) Schreiben Sie $\vec{k}$ als Linearkombination reziproker Gittervektoren und beschränken Sie $\vec{k}$ auf die erste Brillouinzone. Damit erhalten Sie die Zahl der erlaubten $\vec{k}$-Vektoren.

(d) Zeigen Sie, dass zwischen dem Volumen der ersten Brillouinzone (Ω_{1BZ}) und dem der Wigner-Seitz-Zelle (V_{WS}) folgender Zusammenhang besteht:

$$\Omega_{\mathrm{1BZ}} = \frac{(2\pi)^3}{V_{\mathrm{WS}}}.$$

(e) Benutzen Sie das Ergebnis aus d) um die 3D-Zustandsdichte in der oben angegebenen Form zu erhalten.

Erreichbare Gesamtpunktzahl: 20