INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. Ch. Jurecka

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK SS 1999

7. Übungsblatt

14. **Phononen im fcc Gitter**

Betrachten Sie ein einatomiges flächenzentriertes Gitter, in dem jedes Ion nur mit seinen zwölf nächsten Nachbarn wechselwirkt. Nehmen Sie an, daß die Wechselwirkung zwischen einem Paar benachbarter Ionen durch ein Potential ϕ beschrieben wird, daß nur vom Abstand der Ionen abhängt.

(a) Zeigen Sie, daß die Frequenzen der Eigenschwingungen mit Wellenvektor $\mathbf{k}$ durch

$$\omega = \sqrt{\frac{\lambda}{M}} \tag{1}$$

gegeben sind, wobei λ die Eigenwerte der 3×3 Matrix

$$D = \sum_{\mathbf{R}} (A\delta_{\mu\nu} + Be_\mu e_\nu) \sin^2(\frac{1}{2}\mathbf{kR}). \tag{2}$$

Die Summation erfolgt über alle zu $\mathbf{R} = 0$ nächsten Nachbarn, d.h. über die Punkte

$$\frac{a}{2}(\pm e_x \pm e_y) \qquad \frac{a}{2}(\pm e_y \pm e_z) \qquad \frac{a}{2}(\pm e_z \pm e_x) \tag{3}$$

e_i sind jeweils Einheitsvektoren, die Konstanten A und B sind $A = 2\phi'(d)/d$, $B = 2(\phi''(d) - \phi'(d)/d)$, d ist der Abstand zum nächsten Nachbarn, e_μ,e_ν sind Einheitsvektoren in Richtung der nächsten Nachbarn.

(b) Zeigen Sie, daß für $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ (d.h. in (100) Richtung) eine Eigenmode longitudinal mit Frequenz $\omega = \sqrt{\frac{8A+4B}{M}} \sin\frac{1}{4}ka$ schwingt, die anderen beiden transversal mit $\omega = \sqrt{\frac{8A+2B}{M}} \sin\frac{1}{4}ka$.

(c) Geben Sie Frequenzen und Polarisierungen für $\mathbf{k} = \frac{1}{\sqrt{3}}(k, k, k)$, d.h. $\mathbf{k}$ in $(1, 1, 1)$ Richtung an.

(d) Zeigen Sie, daß es für $(1, 1, 0)$, also $\mathbf{k} = \frac{1}{\sqrt{2}}(k, k, 0)$ eine longitudinale, eine transversale, in z-Richtung polarisierte und eine transversale, normal zur z-Richtung polarisierte Eigenmode gibt. Geben Sie die Frequenzen an.

15. **Zugabe:** Weiche optische Phononen bzw. Phasenübergang im Ferroelektrikum