INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. C. Jurecka
Dipl.-Phys. F. Heidrich-Meisner

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK — WS 2001/2002

10. Übungsblatt

13. 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.
Allgemein ist der harmonische Beitrag zum Potential gegeben durch:

$$U^{\mathrm{harm}} = \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(u_\mu(\mathbf{R}) - u_\mu(\mathbf{R}'))\phi_{\mu\nu}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')(u_\nu(\mathbf{R}) - u_\nu(\mathbf{R}')), \tag{1}$$

wobei $\phi_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \partial^2\phi(\mathbf{r})/\partial r_\mu \partial r_\nu$ ist.

(a) Zeigen Sie, dass sich U^{harm} darstellen lässt als

$$U^{\mathrm{harm}} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} u_\mu(\mathbf{R}) D_{\mu\nu}(\mathbf{R}-\mathbf{R}') u_\nu(\mathbf{R}')$$

mit

$$D_{\mu\nu}(\mathbf{R}-\mathbf{R}') = \delta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}\sum_{\mathbf{R}''}\phi_{\mu\nu}(\mathbf{R}-\mathbf{R}'') - \phi_{\mu\nu}(\mathbf{R}-\mathbf{R}').$$

(b) Stellen Sie die Bewegungsgleichung für $u_\mu(\mathbf{R})$ auf und zeigen Sie, dass die Frequenzen der Eigenschwingungen mit Wellenvektor $\mathbf{k}$ durch

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

gegeben sind, wobei die λ die Eigenwerte der sogenannten *dynamischen Matrix*

$$D_{\mu\nu}(\mathbf{k}) = -2\sum_{\mathbf{R}} D_{\mu\nu}(\mathbf{R})\sin^2\left(\frac{1}{2}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}\right) \tag{2}$$

sind.

(c) Zeigen sie, dass sich $D_{\mu\nu}(\mathbf{k})$ für $\phi(\mathbf{r}) = \phi(|\mathbf{r}|)$ wie folgt umschreiben lässt:

$$D_{\mu\nu} = \sum_{\mathbf{R}}(A\delta_{\mu\nu} + B r_\mu r_\nu)\sin^2\left(\frac{1}{2}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}\right). \tag{3}$$

Die Summation erfolgt über alle zu $\mathbf{R} = 0$ nächsten Nachbarn; im Fall des fcc-Gitters sind das die Punkte

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

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 und r_μ,r_ν sind Einheitsvektoren in Richtung der nächsten Nachbarn.

(d) 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 $\omega = \sqrt{\frac{8A+2B}{M}} \sin \frac{1}{4}ka$.

(e) 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.

(f) 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.