Theoretische Festkörperphysik

Prof. F. Wegner, Universität Heidelberg, WS 03/04

7. Übungsblatt

13) Zum Tight-binding Modell: Auf einem einfach kubischen Gitter mit Gitterpunkten $\mathbf{R}_m = (m_1\mathbf{e}_1 + m_2\mathbf{e}_2 + m_3\mathbf{e}_3)a$ sind Elektronen-Orbitale $|\mathbf{R}_m\rangle$, die sich mit Hüpf-Matrix-Elementen t von einem Gitterpunkt zum nächsten bewegen können,

$$H = t\sum_{m,\delta} |\mathbf{R}_{m+\delta}\rangle\langle\mathbf{R}_m|,$$

wobei die Summe über m über m_1, m_2 und m_3 und die über δ über die Verbindungsvektoren $(1,0,0)$, $(-1,0,0)$, $(0,1,0)$, $(0,-1,0)$, $(0,0,1)$ und $(0,0,-1)$ zu den nächsten Nachbarn auszuführen sind.

Berechne die Energie $\epsilon(\mathbf{k})$ des Bandes. Hinweis: Die Eigenfunktionen haben die Form ebener Wellen

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_m \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}|\mathbf{R}_m\rangle.$$

14) "Zweidimensionales NaCl" Auf einem quadratischen Gitter seien Ionen der Sorte Na bei (na, ma) und der Sorte Cl bei $((n+\frac{1}{2})a, (m+\frac{1}{2})a)$. Zwischen ihnen wirken Kräfte, die als Zentralkräfte mit Federkonstanten f_{nn} zwischen benachbarten Na-Ionen, mit f_{cc} zwischen benachbarten Cl-Ionen und f_{cn} zwischen benachbarten Na- und Cl-Ionen angenommen werden. Die dynamische Matrix D hat dann die Form

$$D = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & d_c^* & d_s^* \\ 0 & d_{22} & d_s^* & d_c^* \\ d_c & d_s & d_{33} & 0 \\ d_s & d_c & 0 & d_{44} \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned}
d_{11} &= 2(f_{nn} + f_{cn} - f_{nn}\cos(q_x a))/m_n, \\
d_{22} &= 2(f_{nn} + f_{cn} - f_{nn}\cos(q_y a))/m_n, \\
d_{33} &= 2(f_{cc} + f_{cn} - f_{cc}\cos(q_x a))/m_c, \\
d_{44} &= 2(f_{cc} + f_{cn} - f_{cc}\cos(q_y a))/m_c, \\
d_c &= -2f_{cn}\cos(q_x a/2)\cos(q_y a/2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(q_x+q_y)a/2}/\sqrt{m_n m_c}, \\
d_s &= 2f_{cn}\sin(q_x a/2)\sin(q_y a/2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(q_x+q_y)a/2}/\sqrt{m_n m_c}.
\end{aligned}$$

a) Rechne eines der Diagonalmatrix-Elemente und ein von 0 verschiedenes Außerdiagonal-Element nach.

b) Berechne die Eigenfrequenzen speziell für $\mathbf{q} = (0,0)$, $\mathbf{q} = (0, \pi/a)$ und $\mathbf{q} = (\pi/a, \pi/a)$ oder

c) Berechne die Frequenzen der akustischen Phononen für $\mathbf{q} = (q_x, 0)$ und $\mathbf{q} = (q_x, q_x)$.