Exercise 9 for Theoretical Solid State Physics in Summer 2021

Prof. Dr. Andreas Klümper
Mathis Giesen (jan.giesen@uni-wuppertal.de G.11.07)

Submission: 18.06.2021, 12:00 in the P.O. Box Giesen on D.10 or by e-mail
Discussion: 21.06.2021, 14:15

1. **Zweidimensionales Quadratgitter (15 Punkte)**

   Wir betrachten ein Quadratgitter – ein Atom pro Elementarzelle – mit harmonischen Kopplungen zwischen nächsten Nachbarn entlang der Achsen und für die übernächsten Nachbarn entlang der Diagonalen. Da die Rechnungen etwas aufwändig sind und die Gefahr besteht, sich zu verrennen, hat diese Aufgabe einen langen Vorspann. Bitte alle Aussagen kritisch überprüfen bzw. nachrechnen. Am Ende sind die eigenen Aufgaben genannt.

   Das Gitter habe ein Potential, das durch "Federn" mit Konstanten C_1 und C_2 und Ruhelängen l_1 und l_2 zwischen allen nächsten und übernächsten Nachbarn zusammengehalten wird. Die nächsten und übernächsten Nachbarn haben Positionen, die sich durch einen Differenzvektor $\vec{R}$ unterscheiden mit:

$$\vec{R} = a(1,0)^T, \quad a(-1,0)^T, \quad a(0,1)^T, \quad a(0,-1)^T, \quad \text{(nächste N.)} \tag{1}$$
$$\vec{R} = a(1,1)^T, \quad a(-1,1)^T, \quad a(1,-1)^T, \quad a(-1,-1)^T, \quad \text{(übernächste N.)} \tag{2}$$

   1) Wir wollen nun das Potential einer Feder C mit Ruhelänge l, eingespannt zwischen zwei Punkten mit Ortsvektoren $\vec{r}_0 = \vec{R}_0 + \vec{u}_0$ und $\vec{r}_1 = \vec{R}_1 + \vec{u}_1$ bestimmen. Hierbei sind die $\vec{R}_i$ die Ruhepunkte und $\vec{R}_1 - \vec{R}_0 =: \vec{R}$ mit Werten wie oben gegeben.

   Die Feder ist gestreckt/gestaucht um die Länge $|\vec{r}_1 - \vec{r}_0| - l$ und hat daher die Energie

$$U = \frac{C}{2}\left(|\vec{r}_1 - \vec{r}_0| - l\right)^2 = \frac{C}{2}\left(|\vec{R} + \vec{u}| - l\right)^2 \tag{3}$$

   wobei (s.o.) $\vec{R} := \vec{R}_1 - \vec{R}_0$ und $\vec{u} := \vec{u}_1 - \vec{u}_0$

   Wir entwickeln nun $|\vec{R} + \vec{u}|$ bis in quadratischer Ordnung in $\vec{u}$, wobei wir $\sqrt{1+x} = 1 + x/2 - x^2/8 + O(x^3)$ nutzen. Wir setzen das Ergebnis in $\left(|\vec{R} + \vec{u}| - l\right)^2$ ein und multiplizieren aus, wobei wir nur Terme bis quadratischer Ordnung beibehalten. Ergebnis (bitte überprüfen):

$$U = \frac{C}{2}\left((R-l)^2 + 2\frac{R-l}{R}(\vec{R}\cdot\vec{u}) + \frac{l}{R}\frac{(\vec{R}\cdot\vec{u})^2}{R^2} + \frac{R-l}{R}\vec{u}^2\right) + O(u^3) \tag{4}$$

Die 0. Ordnungsterme bestimmen über Minimierung die Gitterkonstante a. Die Energie des Gitters ohne Auslenkungen ist pro Elementarzelle (einmal Feder entlang x-Achse, einmal entlang y-Achse, sowie entlang beider Diagonalen):

$$E_0 = C_1(a-l_1)^2 + C_2(\sqrt{2}\,a - l_2)^2 \tag{5}$$

Dieses bzgl. a minimiert sollte liefern:

$$a = \frac{C_1 l_1 + \sqrt{2}\,C_2 l_2}{C_1 + 2C_2} \tag{6}$$

2) Buchhaltung der Terme
Nachdem der 0. Ordnungsterm seinen Zweck erfüllt hat, können wir ihn ignorieren. Wir ignorieren auch die linearen Terme in $\vec{u}$, da diese über das gesamte Gitter sich zu 0 summieren. Wir behalten die quadratischen Terme und schreiben diese in Matrixform:

$$\frac{C}{2}\left(\frac{l}{R}\frac{(\vec{R}\cdot\vec{u})^2}{R^2} + \frac{R-l}{R}\vec{u}^2\right) = \frac{1}{2}\vec{u}^T M \vec{u} \tag{7}$$

wobei

$$M := C\left(\frac{l}{R^3}\vec{R}\vec{R}^T + \frac{R-l}{R}1_2\right) \tag{8}$$

Beachte: $\vec{R}\vec{R}^T$ ist eine (2×2) Matrix (links Spaltenvektor, rechts Zeilenvektor) und 1_2 ist die (2×2) Einheitsmatrix.

Jetzt setzen wir in $\frac{1}{2}\vec{u}^T M\vec{u}$ den Vektor $\vec{u} := \vec{u}_1 - \vec{u}_0$ ein:

$$\frac{1}{2}\vec{u}^T M\vec{u} = \frac{1}{2}\left(\vec{u}_0^T M\vec{u}_0 + \vec{u}_1^T M\vec{u}_1 - \vec{u}_0^T M\vec{u}_1 - \vec{u}_1^T M\vec{u}_0\right) \tag{9}$$

Dies mit der richtigen Buchhaltung der Terme sollte auf die dynamische Matrix führen (die erste Summe stammt von den nächsten Nachbarn, die zweite Summe von den übernächsten Nachbarn):

$$\hat{G}(\vec{q}) = \sum_{\vec{R}=a(1,0) u.a(0,1)} 2\left(1-\cos(\vec{R}\cdot\vec{q})\right) M_1(\vec{R}) + \sum_{\vec{R}=a(1,1) u.a(1,-1)} 2\left(1-\cos(\vec{R}\cdot\vec{q})\right) M_2(\vec{R}) \tag{10}$$

wobei $M_i(\vec{R})$ die Matrix M in (8) mit Parametern C_i und l_i bezeichnet. Die Abhängigkeit von $\vec{R}$ ist aus naheliegenden Gründen explizit gemacht worden.

Aufgaben:

(a) Bestimme die Eigenzustände und die Eigenwerte $\omega^2(\vec{q})$.

(b) Plotte die Frequenz als Funktion des Impulses $\vec{q}$ in $(1,0)$ und in $(1,1)$ Richtung. Benutze hierzu “sinnvolle” Kopplungs-Parameter-Werte.

(c) Ist die Frequenz immer ungleich 0, sofern $\vec{q}$ nicht 0 ist?