Übungen zu „Theorie ungeordneter Systeme“

Prof. Walter Schirmacher,WS 2009/10

Blatt 7

1) Symmetrien der Dynamischen Matrix

Der harmonische Anteil des Bindungs-Potentials in einem Festkörper kann geschrieben werden als

$$E^{harm} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{i \neq j \\ \mu,\nu}} (u_{i\mu} - u_{j\mu})\, \phi^{ij}_{\mu\nu}\, (u_{i\nu} - u_{j\nu}) \tag{1}$$

Zeigen Sie, dass (1) auch geschrieben werden kann als

$$E^{harm} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ \mu,\nu}} u_{i\mu} D^{ij}_{\mu\nu} u_{j\nu} \tag{2}$$

mit der dynamischen Matrix

$$D^{ij}_{\mu\nu} = -\phi^{ij}_{\mu\nu} + \delta_{ij} \sum_s \phi^{is}_{\mu\nu}. \tag{3}$$

Zeigen Sie, dass $D^{ij}_{\mu\nu}$ folgende Eigenschaften hat:

a) $D^{ij}_{\mu\nu} = D^{ij}_{\nu\mu}$
b) $D^{ij}_{\mu\nu} = D^{ji}_{\nu\mu}$
c) $\sum_i D^{ij}_{\mu\nu} = \sum_j D^{ij}_{\mu\nu} = 0.$

2) Lineare Kette mit zweiatomiger Basis

Betrachten Sie eine lineare Kette mit zweiatomiger Basis. Jedes Atom habe die gleiche Masse M, es gebe aber zwei unterschiedliche Kraftkonstanten K_1 und K_2, die jeweils abwechselnd zwischen zwei Atomen wirken. Das harmonische Potential kann also geschrieben werden als

$$E^{harm} = \frac{K_1}{2} \sum_n \left(u^A_{2n} - u^B_{2n+1}\right)^2 + \frac{K_2}{2} \sum_n \left(u^B_{2n+1} - u^A_{2n+2}\right)^2. \tag{4}$$

a) Zeigen Sie, dass sich die Bewegungsgleichungen schreiben lassen als

$$\begin{aligned} M\ddot{u}^A_{2n} &= -K_1\left(u^A_{2n} - u^B_{2n+1}\right) - K_2\left(u^A_{2n} - u^B_{2n-1}\right) \\ M\ddot{u}^B_{2n+1} &= -K_1\left(u^B_{2n+1} - u^A_{2n}\right) - K_2\left(u^B_{2n+1} - u^A_{2n+2}\right). \end{aligned}$$

b) Zeigen Sie mit dem Ansatz

$$\begin{aligned} u^A_{2n} &= A \cdot e^{i(kna - \omega t)} \\ u^B_{2n+1} &= B \cdot e^{i(kna - \omega t)} \end{aligned}$$

dass

$$\omega^2_\pm = \frac{K_1 + K_2}{M} \pm \frac{1}{M}\sqrt{K_1^2 + K_2^2 + 2K_1K_2 \cos ka} \tag{5}$$

und

$$\frac{B}{A} = \mp \frac{K_1 + K_2 e^{ika}}{|K_1 + K_2 e^{ika}|} \tag{6}$$

gelten muss.

c) Geben Sie die beiden möglichen Frequenzen $\omega_\pm(k)$ in führender Ordnung für $k \ll \frac{\pi}{a}$ und für $k = \frac{\pi}{a}$ an. Zeichnen Sie die beiden Dispersionen $\omega_\pm(k)$. Welches ist der akustische und welches ist der optische Zweig?