5. Übungsblatt zur Einführung in die Festkörperphysik

Ausgabe: 08.11.2021 — Wintersemester 2021/22

Abgabe: 15.11.2021, 08:15 im Moodle — Prof. Dr. D. Suter

Aufgabe 1: Dispersionsrelation einer zwei-atomigen Kette (10 Punkte)

Gegeben sei eine unendlich lange Anordnung von alternierenden Massen M_1 und M_2, welche in Ruhelage den gegenseitigen Abstand a haben. Jede Masse sei mit seinen beiden nächsten Nachbarn durch eine Kraftkonstante D_1 gekoppelt. Zusätzlich seien die Massen M_1 mit den übernächsten Nachbarn durch die Kopplungskonstante D_2 und die Massen M_2 mit den übernächsten Nachbarn durch die Kopplung D_3 verbunden. Die Massenpunkte lassen sich longitudinal auslenken, wobei die Auslenkung des Punktes s der Masse M_1 durch die Koordinate u_s und für die Masse M_2 durch v_s beschrieben wird.

a) Fertigen Sie eine Skizze der linearen Kette mit ihren Kopplungen an.

b) Geben Sie die Bewegungsgleichungen an und bestimmen Sie die Matrix-Vektor-Form für das vorgegebene System.

c) Zeigen Sie, dass die Dispersionsrelation $\omega(q)$ der Phononen für die gegebene Anordnung folgende Form erfüllt:

$$\begin{aligned}\omega^2_{1/2}(q) =& \frac{1}{M_1 M_2}[(1-cos(qa))(M_1D_3+M_2D_2)+D_1(M_1+M_2)] \\ &\pm\left\{\frac{1}{M_1^2M_2^2}[(1-cos(qa))(M_1D_3+M_2D_2)+D_1(M_1+M_2)]^2\right. \\ &\left.+\frac{1}{M_1M_2}[4(cos(qa)-1)(D_1D_2+D_1D_3+\frac{D_1^2}{2})+4D_2D_3(2cos(qa)-cos^2(qa)-1)]\right\}^{1/2}\end{aligned}$$

d) Bestimmen Sie Werte für $\omega_{1/2}$ bei $q=0$ und $q=\pi/a$ und fertigen Sie eine Skizze an. Dabei gilt $D_1 > D_2$ und $D_1 > D_3$.
Hinweis: Eine kurze Visualisierung mit den Python Paketen numpy und matplotlib kann hier helfen.

e) Skizzieren Sie die Dispersionsrelation für $M_1 = M_2$ und $D_2 = D_3 < D_1$. Inwieweit unterscheidet sich die Lösung von Aufgabenteil d)?

Aufgabe 2: Born-Meyer Theorie der Bindung in ionischen Kristallen (8 Punkte)

Betrachten Sie zuerst eine eindimensionale Kette alternierender Ionen mit den Ladungen $\pm q$. Der Abstand zwischen zwei Ionen sei R und die totale Anzahl an Ionenpaaren ist $2N$. Zusätzlich zu dem elektrostatischen Potential zwischen zwei unterschiedlich geladenen Ionen existiert zudem ein repulsives Potential der Form A/R^n zwischen nächsten Nachbarn.

a) Bestimmen Sie die Gesamtenergie des Kristalls. Dabei sollte im Endergebnis auch die Madelung-Konstante α vorkommen.

b) Bestimmen Sie einen Ausdruck für den Gleichgewichtsabstand R_0 nächste Nachbarn.

c) Bestimmen Sie die Gitterenergie pro Ionenpaar im Gleichgewicht ϵ_L.

Nach der Bindungstheorie von Born und Meyer kann die in Aufgabenteil a) hergeleitete Formel in leicht modifizierter Form verwendet werden, um die potentielle Energie eines ionischen Kristalles zu beschreiben. Die modifizierte Formel sieht dabei wie folgt aus:

$$U(R) = -\frac{2N\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{2NA}{R^n}$$

d) Bestimmen Sie die Madelung Konstante für einen NaCl-Kristalls um das zentrale Na^+ Ion. Betrachten Sie dabei erst ein Volumen aus 2x2x2 Einheitszellen (α_1) und danach das nächstgrößere Volumen aus 4x4x4 Einheitszellen (α_2). Vergleichen Sie die bestimmten Werte mit dem Literatur-Wert für einen NaCl Kristall.
Hinweis: Das erste Volumen entspricht Abbildung 3.32 im Skript

e) Schreiben Sie mithilfe der vorher ermittelten Formel für R_0 die Gitterenergie $U_0 = U(R_0)$ auf. Das Ergebnis sollte dabei die Form

$$U_0 = \beta\dot{(}1 - \frac{1}{n}) \tag{1}$$

haben, wobei β ein Vorfaktor bestehend aus den verschiedenen physikalischen Größen dieser Aufgabe ist. Bestimmen Sie anschließend mithilfe der Formel für ϵ_L die experimentelle Konstante n für einen NaCl Kristall (Gitterkonstante $a = 0.563\,\mathrm{nm}$, $\epsilon_L = 7.95\,\mathrm{eV}$). Worum handelt es sich bei dieser Konstante?