Theoretische Festkörperphysik

Prof. F. Wegner, Universität Heidelberg, WS 05/06

3. Lösungsblatt
Abgabe Mittwoch, 9.11.05 zu Beginn der Vorlesung

5) Welche zusätzlichen Beziehungen erhält man zwischen den Elastizitäts-Moduln $\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$, wenn die Kräfte zwischen den Ionen Zentralkräfte sind?

Hierzu zeige man zunächst, dass für $n \neq m$ $V_{n\alpha}^{m\beta}$ in der Form

$$V_{n\alpha}^{m\beta} = -\frac{f_{nm}}{(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2}(R_{n\alpha} - R_{m\alpha})(R_{n\beta} - R_{m\beta})$$

geschrieben werden kann.

Lösung: Das Potential besteht aus Beiträgen

$$\begin{aligned}
&\frac{f_{nm}}{2}(|\mathbf{R}_n + \boldsymbol{\eta}_n - \mathbf{R}_m - \boldsymbol{\eta}_m| - |\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m|)^2 \\
= \ &\frac{f_{nm}}{2}\left(\sqrt{(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2 + 2(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)\cdot(\boldsymbol{\eta}_n - \boldsymbol{\eta}_m) + (\boldsymbol{\eta}_n - \boldsymbol{\eta}_m)^2} - |\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m|\right)^2.
\end{aligned}$$

Entwickeln wir unter dem Quadrat bis zur ersten Ordnung in $\boldsymbol{\eta}_n - \boldsymbol{\eta}_m$, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
&\frac{f_{nm}}{2}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2\left(\sqrt{1 + 2\frac{(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_m)\cdot(\boldsymbol{\eta}_n - \boldsymbol{\eta}_m)}{(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2}} - 1\right)^2 \\
= \ &\frac{f_{nm}}{2}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2\left(\frac{(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)\cdot(\boldsymbol{\eta}_n - \boldsymbol{\eta}_m)}{(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2}\right)^2 \\
= \ &\frac{f_{nm}}{2(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2}((\boldsymbol{\eta}_n - \boldsymbol{\eta}_m)\cdot(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m))^2.
\end{aligned}$$

Nun ist

$$((\boldsymbol{\eta}_n - \boldsymbol{\eta}_m)\cdot(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m))^2 = (\eta_{n\alpha} - \eta_{m\alpha})(R_{n\alpha} - R_{m\alpha})(\eta_{n\beta} - \eta_{m\beta})(R_{n\beta} - R_{m\beta}).$$

Ziehen wir hier die Beiträge mit den Faktoren $\eta_{n\alpha}\eta_{m\beta}$ heraus und tauschen in den Beiträgen mit $\eta_{n\beta}\eta_{m\alpha}$ die Summations-Indizes α und β aus und addieren sie ebenfalls, dann erhalten wir das angegebene $V_{n\alpha}^{m\beta}$.

Welche Konsequenzen hat das für $C_{\alpha\beta,\gamma\delta}$? Insgesamt (4 P.)

Wir erhalten damit

$$2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \frac{1}{V_\mathrm{Z}}\sum_m (R_n - R_m)_\alpha (R_n - R_m)_\beta (R_n - R_m)_\gamma (R_n - R_m)_\delta \frac{f_{nm}}{(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2}$$

Damit ist also $\hat{C}$ invariant gegen alle Permutationen der vier Indices. Damit folgt aber aus den allgemeinen Beziehungen zwischen $\hat{C}$ und C

$$C_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta},$$

dass auch C invariant gegen Permutation der vier Indices ist.

Diese Invarianz unter Vertauschung der Indices wird auch Cauchy-Beziehung genannt.

6) Man nehme an, auf einem Dreiecksgitter wirken nur Kräfte zwischen benachbarten Ionen, die als Zentralkräfte mit Kraftkonstanten f beschrieben werden können. Man bestimme für das zweidimensionale Problem die Elastizitätsmoduln $C_{\alpha\beta,\gamma\delta}, \quad \alpha,\beta,\gamma,\delta \in 1,2$ aus f und der Gitterkonstanten a. (6 P.)

Aus

$$C_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \frac{1}{2V_{\mathrm{Z}}} \sum_m (R_n - R_m)_\alpha (R_n - R_m)_\beta (R_n - R_m)_\gamma (R_n - R_m)_\delta \frac{f_{nm}}{(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2}$$

folgen mit den Vektoren $\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m$ zu den Nachbarn

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}^{(1)} &= a(1,0), \\
\mathbf{a}^{(1)} + \mathbf{a}^{(2)} &= a(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}), \\
\mathbf{a}^{(2)} &= a(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}), \\
-\mathbf{a}^{(1)} &= a(-1,0), \\
-\mathbf{a}^{(1)} - \mathbf{a}^{(2)} &= a(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}), \\
-\mathbf{a}^{(2)} &= a(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}).
\end{aligned}$$

und

$$V_{\mathrm{Z}} = \frac{\sqrt{3}ca^2}{2}$$

die Moduln

$$\begin{aligned}
C_{11,11} = C_{22,22} &= \frac{a^4 f}{2V_{\mathrm{Z}}a^2}\frac{9}{4} = \frac{3\sqrt{3}f}{4c}, \\
C_{11,22} = C_{12,12} &= \frac{a^4 f}{2V_{\mathrm{Z}}a^2}\frac{3}{4} = \frac{\sqrt{3}f}{4c}, \\
C_{11,12} = C_{12,22} &= 0.
\end{aligned}$$

Ergänzung zu 5) Die obige Herleitung ist korrekt, wenn im Gleichgewicht sämtliche Federn entspannt sind. Im Allgemeinen ist dies nicht der Fall. Es seien die Federlängen im entspannten Zustand $\hat{R}_{nm}$. Mit

$$\mathbf{R}_{nm} := \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m, \quad \boldsymbol{\eta}_{nm} := \boldsymbol{\eta}_n - \boldsymbol{\eta}_m$$

folgt bis zur zweiten Ordnung in η

$$\begin{aligned}
\mathcal{V} &= \sum_{mn} \frac{f_{nm}}{4} \left(|\mathbf{R}_{nm} + \boldsymbol{\eta}_{nm}| - \hat{R}_{nm} \right)^2 \\
&= \sum_{mn} \frac{f_{nm}}{4} \left(R_{nm} + \frac{\mathbf{R}_{nm} \cdot \boldsymbol{\eta}_{nm}}{R_{nm}} + \frac{\boldsymbol{\eta}_{nm}^2}{2R_{nm}} - \frac{(\mathbf{R}_{nm} \cdot \boldsymbol{\eta}_{nm})^2}{2R_{nm}^3} - \hat{R}_{nm} \right)^2 \\
&= \sum_{mn} \frac{f_{nm}}{4} \left((R_{nm} - \hat{R}_{nm})^2 + 2\frac{(R_{nm} - \hat{R}_{nm})(\mathbf{R}_{nm} \cdot \boldsymbol{\eta}_{nm})}{R_{nm}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(R_{nm} - \hat{R}_{nm})\boldsymbol{\eta}_{nm}^2}{R_{nm}} - \frac{(\mathbf{R}_{nm} \cdot \boldsymbol{\eta}_{nm})^2}{R_{nm}^2} \right).
\end{aligned}$$

Daraus folgt der Koeffizient des Potentials

$$V_{n\alpha}^{m\beta} = -f_{nm} \left(\frac{R_{nm\alpha} R_{nm\beta}}{R_{nm}^2} - \frac{R_{nm} - \hat{R}_{nm}}{R_{nm}} \delta_{\alpha\beta} \right).$$

Falls $R_{nm} = \hat{R}_{nm}$, dann verschwindet der letzte Term natürlich.

Für eine homogene Verzerrung ist

$$\eta_{nm\alpha} = \sum_{\beta} (\epsilon_{\alpha\beta} + \omega_{\alpha\beta}) R_{nm\beta}$$

Damit ergibt sich in linearer Ordnung in ϵ und η eine Veränderung des Potentials um

$$\delta\mathcal{V} = \sum_{mn\gamma\delta} \frac{f_{nm}}{2} \frac{R_{nm} - \hat{R}_{nm}}{R_{nm}} (\epsilon_{\gamma\delta} + \omega_{\gamma\delta}) R_{nm\gamma} R_{nm\delta}$$

Im entspannten Zustand ist der Koeffizient bei $\epsilon_{\gamma\delta} + \omega_{\gamma\delta}$ gleich 0. Daher gilt

$$\sum_{m} \frac{f_{nm}}{2} \frac{R_{nm} - \hat{R}_{nm}}{R_{nm}} R_{nm\gamma} R_{nm\delta} = 0.$$

Unter Verwendung dieser Beziehung findet man, dass der zweite Beitrag zur Kraft im entspannten Zustand des Kristalls nichts zu den Elastizitäts-Moduln beiträgt.