Aufgabe 3: Gitterschwingungen in einer linearen Kette (6 Punkte)

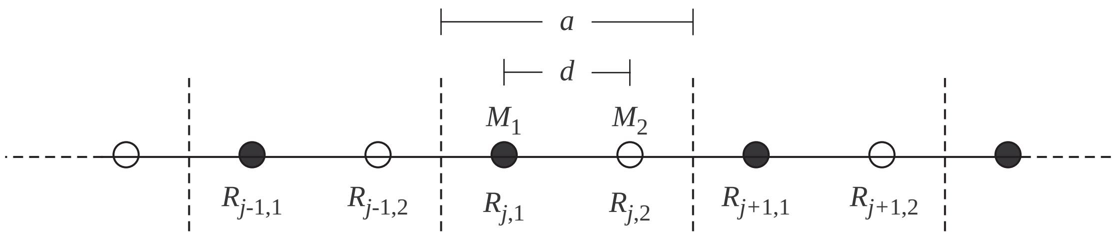
Gegeben sei eine lineare Kette mit zwei Atomen der Massen M_1 und M_2 pro Elementarzelle. Die Atome befinden sich an den Positionen $X_{j,\nu} = R_j + \tau_\nu + u_{j,\nu}$, wobei der Gittervektor $R_j = j \cdot a$ und der Basisvektor τ_ν die Gleichgewichtslage beschreibt und $u_{j,\nu}$ die Auslenkung des Atoms darstellt. Je zwei benachbarte Atome wechselwirken mit einem Potential $V(x)$, welches gegeben ist durch:

$$V(x) = D \left\{ \mathrm{e}^{-2\alpha x} - 2\,\mathrm{e}^{-\alpha x} \right\} .$$

Damit ist die potentielle Energie der Kette also gegeben durch:

$$E^{el} = \sum_i \left\{ V\left((X_{i,1} - X_{i-1,2}) - d\right) + V\left((X_{i,2} - X_{i,1}) - d\right) \right\} ,$$

wobei d der Ruheabstand zweier Atome ist.



a) Skizzieren Sie das Paarpotential $V(x)$.

b) Berechnen Sie die Kraftkonstanten $\phi(j\,\nu,\, j'\,\nu')$.

c) Stellen Sie die Dynamische Matrix $D_{\nu\nu'}(q)$ auf und berechnen Sie die Eigenfrequenzen $\omega(q)$ des Systems. Was ergibt sich für $q = 0$ bzw. $q = \pm\frac{\pi}{a}$?

d) Betrachten Sie speziell den Fall gleicher Massen, d. h. $M_1 = M_2 = M$. Wie sehen jetzt die Eigenfrequenzen $\omega(q)$ aus?

e) Entwickeln Sie $V(x)$ bis zur 2. Ordnung in x und interpretieren Sie Ihre Ergebnisse im Lichte dieser Entwicklung.

Aufgabe 4: Punktgruppe von Graphen (4 Punkte)

Graphen besteht aus einer Schicht von Kohlenstoffatomen, die in einer hexagonalen Struktur angeordnet sind.

a) Fassen Sie zunächst Graphen als rein *zweidimensionale* Struktur auf. Welche Symmetrieoperationen lassen diese Struktur invariant? Geben Sie diese gemäß der Schönflies-Notation (siehe Materialien zur Vorlesung) an und beschreiben Sie diese kurz (z. B. C_2: Drehung um 180° um z-Achse). Markieren Sie die entsprechenden Drehachsen und Spiegelebenen in der Abbildung. Welche Punktgruppe bilden diese Operationen?

b) Betrachten Sie jetzt Graphen als eine Schicht von Kohlenstoffatomen, die sich im *dreidimensionalen* Raum in der x-y-Ebene bei $z = 0$ befinden. Welche zusätzlichen Symmetrieoperationen lassen diese Struktur invariant? Welche Punktgruppe bilden *alle* Symmetrieoperationen?