



**Theoretische Festkörperphysik**  
**Wintersemester 2010/11 - Übungsblatt 10**  
 Ausgabe: 14.1.2011, Abgabe: 21.1.2011, Übung: 24.-26.1.2011

**Aufgabe 31: Wannier-Funktionen**

**(4 Punkte)**

**a) Fourier-Reihenentwicklung**

Zeigen Sie, dass jede Bloch-Funktion  $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  geschrieben werden kann als

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

wobei  $\phi_n$  die Wannier-Funktionen genannt werden.  $N$  ist die Anzahl der Gitterpunkte im betrachteten Volumen.

*Hinweise:* Für festes  $\mathbf{r}$  ist  $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  als Funktion von  $\mathbf{k}$  periodisch im reziproken Gitter RG. Deshalb lässt sie sich (für festes  $\mathbf{r}$ ) als Fourierreihe mit Wellenvektoren im direktem Gitter  $G$  entwickeln:

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R} \in G} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

$$\phi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RG}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

Zeigen Sie also, dass  $\phi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  nur von der Differenz  $\mathbf{r} - \mathbf{R}$  abhängt.

**b) Orthonormalität**

Zeigen Sie, dass die Wannier-Funktionen bzgl. der Gitterplätze  $\mathbf{R}$  und  $\mathbf{R}'$  orthonormal sind, d.h.

$$\int d\mathbf{r} \phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \phi_{n'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}') = \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$$

*Hinweis:* Nutzen Sie die Orthonormalität der Bloch-Funktionen.

**Aufgabe 32: Greens-Theorem für periodische Funktionen**

**(4 Punkte)**

Zeigen Sie, dass für eine Funktion  $f(\mathbf{r})$  mit der Periodizität eines Bravais-Gitters, die folgenden Integrale über eine primitive Einheitszelle  $C$  verschwinden:

$$\int_C d\mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) = 0, \quad \int_C d\mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r}) = 0.$$

### Aufgabe 33: Debye-Waller-Faktor

(7 Punkte)

Die Struktur eines Festkörpers kann mit Hilfe von Beugungsexperimenten mit Photonen, Elektronen und Neutronen untersucht werden. In der Bornschen Näherung ist der Wirkungsquerschnitt für Streuung proportional zum dynamischen Strukturfaktor (siehe Aufgabe 20). Der Beitrag elastischer Streuung zum statischen Strukturfaktor  $S(\mathbf{q})$  eines Gitters ist:

$$S(\mathbf{q}) = \left\langle \sum_{\mathbf{R} \in \mathbf{G}} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R}, t))} \right\rangle = \sum_{\mathbf{R} \in \mathbf{G}} \langle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{R}, t)} \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} = e^{-W} S_0(\mathbf{q})$$

mit  $S_0(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R} \in \mathbf{G}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{G} \in \mathbf{RG}} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{G}}$ .

Die Verschiebung  $\mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$  muß dabei als quantenmechanischer Operator behandelt werden:

$$e^{-W} = \langle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}} \rangle = 1 + i\langle \mathbf{q} \cdot \mathbf{u} \rangle - \frac{1}{2} \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u})^2 \rangle + \mathcal{O}(\langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u})^3 \rangle) \quad (1)$$

$$= 1 - \frac{1}{2} \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u})^2 \rangle + \mathcal{O}(\langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u})^4 \rangle) \approx e^{-\frac{1}{2} \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u})^2 \rangle} \quad (2)$$

wobei die Erwartungswerte der ungeraden Terme verschwinden (Symmetrie der Verschiebung). Der Faktor  $e^{-2W}$ , der die Abnahme der Intensität  $|S(\mathbf{q})|^2$  der Bragg-Streuung aufgrund der thermischen Bewegung der Ionen (Phononen) beschreibt, wird *Debye-Waller-Faktor* genannt und ist (aufgrund der Translationssymmetrie) unabhängig vom Gitterplatz  $\mathbf{R}$ .

#### a) thermischer Erwartungswert

Berechnen Sie die folgenden thermischen Erwartungswerte für die phononischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ( $n_s(\mathbf{q}, T)$  - Bose-Einstein Verteilungsfunktion,  $a_s(\mathbf{q}) = a_s(\mathbf{q}, 0)$ ):

$$\langle a_s(\mathbf{q}, t) a_{s'}^\dagger(\mathbf{q}') \rangle = (n_s(\mathbf{q}, T) + 1) e^{-i\omega_s(\mathbf{q})t} \delta_{ss'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}, \quad (3)$$

$$\langle a_s^\dagger(\mathbf{q}, t) a_{s'}(\mathbf{q}') \rangle = n_s(\mathbf{q}, T) e^{i\omega_s(\mathbf{q})t} \delta_{ss'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}, \quad (4)$$

$$\langle a_s(\mathbf{q}, t) a_{s'}(\mathbf{q}') \rangle = 0. \quad (5)$$

#### b) Zeit-Unabhängigkeit

Die Verschiebung ist ein zeitabhängiger Operator im Heisenberg-Bild. Zeigen Sie, dass der thermische Erwartungswert  $\langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{R}, t))^2 \rangle$  nicht zeitabhängig ist.

#### c) Berechnung des Debye-Waller-Faktors

Die Verschiebung lässt sich folgendermaßen ausdrücken ( $\mathbf{u}(\mathbf{R}) = \mathbf{u}(\mathbf{R}, 0)$ ):

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}) = \sum_{s, \mathbf{q}} \left( \frac{\hbar}{2NM\omega_s(\mathbf{q})} \right)^{\frac{1}{2}} (a_s(\mathbf{q}) + a_s^\dagger(-\mathbf{q})) \mathbf{e}_s(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}.$$

Berechnen Sie damit und mit a) den Debye-Waller-Faktor  $W \approx \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{R}))^2 \rangle / 2$ .

#### d) Temperaturabhängigkeit

Diskutieren Sie die Temperaturabhängigkeit von  $W$  für  $T \rightarrow 0$  und zeigen Sie, dass für  $W$  und  $T > 0$  im Debye-Modell ( $\omega_s(\mathbf{q}) = vq \leq \omega_D$ ) gilt:

$$W = \frac{3q^2}{M\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} + \frac{1}{2} \right) d\omega.$$

*Hinweise:*  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{s'}(\mathbf{q}') = q \cos \theta$ . Die Summe über  $\mathbf{q}'$  kann in Kugelkoordinaten ausgewertet werden.

e) Werten Sie das Ergebnis von d) für  $k_B T \gg \hbar\omega$  und  $k_B T \ll \hbar\omega$  aus.

*Hinweis:*

$$\int_0^\infty dx \frac{x}{e^x - 1} = \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}.$$