Goethe-Universität Frankfurt
Fachbereich Physik

Lehrende: Prof. Dr. Roser Valentí, Raum 01.130
Übungsgruppenleitung: Karim Zantout, Room 01.142

Frankfurt, 21.10.2019

Einführung in die Theoretische Festkörperphysik

Wintersemester 2019/20

Blatt 1

(Abgabe: 28.10.2019)

Aufgabe 1 (**Bravais-Gitter, reziprokes Gitter, Zellvolumen**) (4 Punkte)

Diskutieren Sie, ob die unten angegebenen Gitter gültige Bravais-Gitter sind. Geben Sie für die Bravais-Gitter die Basisvektoren, die dazugehörigen reziproken Gittervektoren, sowie das Volumen im direkten und reziproken Raum an. Gehen Sie davon aus, dass nur ein Atom pro Gitterpunkt vorliegt. Überlegen Sie sich für die übrigen Gitter ein mögliches Bravais-Gitter mit kleinstmöglicher atomarer Basis und berechnen Sie die zuvor genannten Größen.

a) basiszentriertes kubisches Gitter
b) kantenzentriertes kubisches Gitter
c) zweidimensionales Bienenwabengitter

Aufgabe 2 (**Gitterperiodische Funktionen**) (3 Punkte)

Eine gitterperiodische Funktion $f(\vec{r})$ im direkten Raum lässt sich in eine Fourier-Reihe entwickeln:

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} f(\vec{K}) \tag{1}$$

Dabei gilt:

$$f(\vec{K}) = \frac{1}{V}\int_V d^3r\, e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}) \tag{2}$$

V ist das Volumen der betrachteten Einheitszelle.

a) Über welche Vektoren $\vec{K}$ wird in (1) summiert?
b) Welche Eigenschaft müssen alle $f(\vec{K})$ erfüllen, wenn die Funktion $f(\vec{r})$ reell ist?
c) Nutzen Sie die in b) gefundene Eigenschaft, um die Summation über die verschiedenen Raumrichtungen in (1) einzuschränken. Dies ist zum Beispiel für eine Implementierung als Computerprogramm vorteilhaft.

Aufgabe 3 (**Symmetrie und Observable**) (3 Punkte)

Geben Sie Matrizen an, die den folgenden Symmetrieoperationen entsprechen:

a) 180°-Rotation um die x-Achse
b) 90°-Rotation um die z-Achse
c) 90°-Rotation um die y-Achse

Zeigen Sie unter Berücksichtigung dieser Symmetrieoperationen, dass der Leitfähigkeitstensor σ_{ij} $(i, j = x, y, z)$ eines Kristalls mit kubischer Symmetrie als $\sigma\mathbb{1}$ geschrieben werden kann, wobei σ ein Skalar und $\mathbb{1}$ die Einheitsmatrix ist.
Hinweis: Eine Matrix A ist invariant unter einer Symmetrieoperation R, wenn gilt $R^{-1}AR = A$.