Goethe-Universität Frankfurt
Fachbereich Physik

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

Frankfurt, 04.11.2019

Einführung in die Theoretische Festkörperphysik

Wintersemester 2019/20

Blatt 3

(Abgabe: 11.11.2019)

Aufgabe 1 (**Chemische Bindung**) (4 Punkte)

Die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei Ionen i und j eines ionischen Festkörpers sei gegeben durch

$$U_{ij} = \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} + \lambda e^{-r_{ij}/\rho}, \quad \lambda > 0. \tag{1}$$

Dabei ist Z_i die Ladung des i-ten Ions und r_{ij} der Abstand zwischen dem i-ten und dem j-ten Ion.

a) Der erste Term ist die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ionen. Wofür steht der zweite Term qualitativ?

b) Berechnen Sie die Bindungsenergie im Falle eines eindimensionalen ionischen Festkörpers mit abwechselnden Ladungen $+e$ und $-e$.
Hinweis: Der zweite Term in Gleichung (1) fällt so stark ab, dass man ihn nur für nächste Nachbarn berücksichtigen muss.

c) Berechnen Sie den Gleichgewichtsabstand zwischen den Ionen. Nehmen Sie an, dass $\rho = 0.35$ Å und $\lambda = 0.5 \cdot 10^{-8}$ erg.
Hinweis: Berechnen Sie die Lösung numerisch, z.B. mit Hilfe der Bisektionsmethode oder indem Sie die relevanten Terme in ein gemeinsames Koordinatensystem eintragen. Damit ein numerisches Verfahren konvergiert, müssen Sie eventuell geeignete Einheiten wählen. SI-Einheiten sind hier nicht hilfreich, da die Zahlenwerte zu klein ausfallen.

Aufgabe 2 (**Kopplungskonstante**) (3 Punkte)

Betrachten Sie eine eindimensionale atomare Kette, wobei die Atome auf den Positionen $R_n = na$ sitzen. a sei der Gitterparameter. Die Kraft zwischen zwei Atomen werde modelliert durch das Hookesche Gesetz mit einer Federkonstante $K_{ij} = K(R_i - R_j)$, d.h. die Atome seien nicht nur zwischen nächsten Nachbarn gekoppelt. Nehmen Sie eine lineare Dispersion ($\omega = \eta|k|$) an, wobei η eine Konstante ist. Bestimmen Sie K_{ij}.
Hinweis: Schreiben Sie $K_{ij}(k)$ auf und berechnen Sie dessen inverse Fourier-Transformation.

Aufgabe 3 (**Photoelektrischer Effekt**) (3 Punkte)

Es befinde sich ein Wasserstoffatom in seinem Grundzustand. Dessen Wellenfunktion ist bekannt:

$$\langle \vec{r}|0\rangle = \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{\pi a_0^3}}, \tag{2}$$

wobei a_0 der Bohrradius ist. Dieses Atom werde von einem Strahlungsfeld mit Polarisationsvektor $\vec{\epsilon} = \hat{z}$ bestrahlt und das Elektron werde emittiert. Der Endzustand sei durch

$$\langle \vec{r}|f\rangle = \frac{e^{i\vec{p}_f\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tag{3}$$

gegeben. In der elektrischen Dipolnäherung gilt, in diesem speziellen Fall, für die Übergangs"-wahr"-scheinlichkeit

$$\omega_{0\to f} \propto \left|\left\langle 0 \left| \hat{A} \right| f \right\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_0 - \hbar\omega), \tag{4}$$

wobei $\left\langle \vec{r} \left| \hat{A} \right| \vec{r}' \right\rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\frac{\partial}{\partial z}$, E die jeweilige Zustandsenergie und $\hbar\omega$ die Energie des Photons ist. Berechnen Sie die Übergangswahrscheinlichkeit explizit. Wie hängt diese von der Austrittsrichtung des Photoelektrons ab?