Goethe-Universität Frankfurt
Fachbereich Physik

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

Frankfurt, 25.11.2019

Einführung in die Theoretische Festkörperphysik

Wintersemester 2019/20

Blatt 6

(Abgabe: 02.12.2019)

Aufgabe 1 (**Term zweiter Ordnung im Dulong-Petit Gesetz**) (3 Punkte)

Die spezifische Wärme eines dreidimensionalen einatomigen Festkörpers wird bei hohen Temperaturen in erster Näherung durch das Dulong-Petit Gesetz beschrieben: $c_V^0 = 3nk_B$. Dabei ist n die Dichte des Materials und k_B die Boltzmann-Konstante. Betrachtet man Terme bis einschließlich zweiter Ordnung in T^{-1}, so erhält man $c_V = c_V^0\left(1 - \frac{A}{T^2}\right)$. Berechnen Sie A als Funktion der Phononendispersion.

Aufgabe 2 (**Abschätzung der Debye-Temperatur**) (3 Punkte)

Ein Neutronenstrahl der Wellenlänge $\lambda_0 = 1$ Å treffe entlang der Richtung [001] auf einen Festkörper mit fcc-Kristallstruktur. Dieser besitze den Gitterparameter $a = 3.52$ Å und eine einatomige Basis. Ein Teil der Neutronen werde mit einer Wellenlänge $\lambda_1 = 1.25$ Å in eine Richtung gestreut, die um einen Winkel von 4° von der Einfallsrichtung abweicht.

a) Nehmen Sie an, dass ein einzelnes Phonon an dem Streuprozess beteiligt ist. Berechnen Sie dessen Energie und Wellenvektor.

b) Wird bei dem Streuvorgang ein Phonon erzeugt oder absorbiert?

c) Schätzen Sie ausgehend von Energie und Wellenvektor des Phonons die Schallgeschwindigkeit und die Debye-Temperatur für das betrachtete Material ab.

Aufgabe 3 (**Neutronenstreuung und Phononen**) (4 Punkte)

In dieser Aufgabe vervollständigen wir die Herleitung des dynamischen Strukturfaktors in den Gleichungen (4.141) - (4.145) des Vorlesungsskripts. (*Hinweis:* In diesem Abschnitt des Skripts wurden ein paar kleinere Tippfehler korrigiert.)

Im Vorlesungsskript wurde gezeigt, dass der dynamische Strukturfaktor geschrieben werden kann als $S(\vec{q},\omega) \approx S_{(0)}(\vec{q},\omega) + S_{(1)}(\vec{q},\omega)$, mit:

$$S_{(0)}(\vec{q},\omega) = \frac{1}{N} e^{-2W} \int \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} \sum_{n,n'} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{n0}-\vec{R}_{n'0})} \tag{1}$$

$$S_1(\vec{q},\omega) = \frac{1}{N} e^{-2W} \int \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} \sum_{n,n'} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{n0}-\vec{R}_{n'0})} \langle (\vec{q}\cdot\vec{u}_n(0))(\vec{q}\cdot\vec{u}_{n'}(t))\rangle \tag{2}$$

a) Zeigen Sie, dass $S_{(0)}(\vec{q},\omega)$ foldendermaßen geschrieben werden kann:

$$S_{(0)}(\vec{q},\omega) = e^{-2W}\delta(\omega) N \sum_{\vec{G}} \delta_{\vec{q},\vec{G}} \tag{3}$$

b) Zeigen Sie, indem Sie die atomaren Auslenkungen durch Phononerzeuger und -vernichter ausdrücken,

$$\vec{u}_n = \sum_{\vec{k},j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\vec{k})}} \left(a_{\vec{k},j} + a^\dagger_{-\vec{k},j}\right) \vec{e}_j(\vec{k})\; e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{n0}}, \tag{4}$$

dass $S_{(1)}(\vec{q},\omega)$ folgendermaßen geschrieben werden kann:

$$S_1(\vec{q},\omega) = \frac{\hbar e^{-2W}}{2M} \sum_{\vec{k},j} \delta_{\vec{q}-\vec{k},\vec{G}} \frac{(\vec{q}\cdot\vec{e}_j(\vec{k}))^2}{\omega_j(\vec{k})} \Big\{(1 + \langle a^\dagger_{\vec{k},j} a_{\vec{k},j}\rangle)\delta(\omega - \omega_j(\vec{k})) + \langle a^\dagger_{-\vec{k},j} a_{-\vec{k},j}\rangle \delta(\omega + \omega_j(\vec{k}))\Big\} \tag{5}$$

Sie können folgende Eigenschaften verwenden: $\omega_j(\vec{k}) = \omega_j(-\vec{k})$ und $\vec{e}_j(\vec{k}) = \vec{e}_j(-\vec{k})$.