6. Übungsblatt

Verteilung 30. Oktober 2007
Besprechung 7./8. November 2007

Thema: Phononen (Teil 2) und Streuung (Teil 2)

Aufgabe 1: *Einstein-Modell für die spezifische Wärmekapazität*

Beim Einstein-Modell wird im Gegensatz zum Debye-Modell (siehe Vorlesung) nur eine Frequenz für die Gitterschwingungen zugelassen. Dies entspricht dem Beitrag eines einzelnen optischen Asts ($\omega(\mathbf{k}) = \omega_E = const.$) der Phononendispersion.
Hier soll der entsprechende Beitrag zur spezifischen Wärme eines Kristallgitters berechnet werden.
Gehen Sie wie folgt vor:

1. Berechnen Sie die thermische Energie in einem Kristall mit N primitiven Zellen in diesem Modell.
   Hinweis: Verwenden Sie die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion für die Besetzungszahl jeder harmonischen Mode.
2. Leiten Sie daraus die spezifische Wärmekapazität ab.
3. Wie gross ist der Beitrag zur Wärmekapazität für hohe Temperaturen $T \gg \Theta_E$, wobei $\Theta_E = \hbar\omega_E/k$ die sogenannte Einstein-Temperatur ist? Wie gross ist er für kleine Temperaturen? Wie gross sind typische Werte für die Einstein-Temperatur? Interpretieren Sie diese Ergebnisse.
4. Wie sieht die Wärmekapazität als Funktion der Temperatur aus? Vergleichen Sie dies mit dem Debye-Modell.

Aufgabe 2: *Einfluss der Temperatur auf die Röntgenstreuung - Debye-Waller-Faktor*

Diese Aufgabe ist eine Ergänzung zum Stoff der Vorlesung.
Neben der inneren Struktur der Elementarzelle des Gitters (*Strukturfaktor*, vgl. Serie 3, Aufgabe 2) verändern auch die Gittterschwingungen bei endlicher Temperatur das Beugungsbild bei Röntgenstreuungsexperimenten.

1. Der *Debye-Waller-Faktor* beschreibt die Temperaturabhängigkeit der Intensität der elastisch gestreuten Strahlung an einem Kristallgitter. Um die Intensität der Reflexe in Abhängigkeit der Temperatur zu beschreiben, geht man vom *Strukturfaktor* der entsprechenden Kristallstruktur aus:
   $$\overline{S_{hkl}} = \sum_i \gamma_i \overline{e^{i\vec{G}\cdot(\vec{r}_i+\vec{u})}} = (\sum_i \gamma_i e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_i})\overline{e^{i\vec{G}\cdot\vec{u}}}.$$
   Dabei ist $\vec{u}(t)$ die momentane Auslenkung eines Gitteratoms aus seiner Gleichgewichtslage auf Grund der thermischen Bewegung. Die Querstriche bedeuten eine zeitliche Mittelung.
   Leiten Sie den Debye-Waller-Faktor $D(T) = e^{-1/3|\vec{G}|^2\overline{u^2}}$ her, der die Temperaturabhängigkeit $I = D(T)I_0$ der Streustrahlung beschreibt. Die Temperaturabhängigkeit steckt dabei in der mittleren quadratischen Auslenkung $\overline{u^2}$ der Atome aus ihrer Ruhelage durch thermische Anregung.
   Hinweis: Nehmen Sie an, dass die Grösse $\vec{G}\cdot\vec{u}$ klein gegenüber 1 ist, womit die Funktion $\overline{e^{i\vec{G}\cdot\vec{u}}}$ in eine Taylorreihe entwickelt werden kann. Betrachten Sie nur die ersten drei Glieder der Reihenentwicklung und setzen Sie voraus, dass die Atome völlig unabhängig voneinander um ihre Ruhelage schwingen.
2. Berechnen Sie den Wert des Debye-Waller-Faktors für die stärksten Reflexe bei Streung an Niob (bcc-Struktur) nahe dem Schmelzpunkt ($T = T_S$).

   Hinweis: Nach dem "Lindemannschen Schmelzkriterium" schmilzt der Kristall, wenn die Amplitude der thermischen Bewegung ca. 20% des Abstandes zu den nächsten Nachbarn beträgt.