Aufgabenblatt 7
Donnerstag $15^{15} - 16^{45}$

Sascha Reinhardt

3. Dezember 1999

1 Aufgabe 7.1

Bei periodischen Randbedingungen gilt für die Verschiebung u des Teilches:

$$\begin{aligned} u(sa) &= u(sa + Na) && (1) \\ a &= \text{Gitterkonstante} && (2) \end{aligned}$$

Die Anschauung von diesem Problem ist ein Kreis mit N- Teilchen. Damit die Randbedingung erfüllt ist muß Nqa ein ganzzahliges Vielfache von 2π sein. q kann also die Werte:

$$0, \pm\frac{2\pi}{Na}, \pm\frac{4\pi}{Na}, \pm\frac{6\pi}{Na}, \ldots, \pm\frac{N\pi}{Na}$$

Ein Zustand nimmt den Raum

$$\rho = \frac{N}{\frac{\pi}{a}} = \frac{L}{\pi}$$

ein. Die Gesamtzahl der Zustände ergibt sich dann zu

$$N = \frac{L}{\pi}q.$$

Die Zustandsdichte ist also

$$D(\omega) = \frac{L}{\pi}\frac{dq}{d\omega} = \frac{L}{\pi}\frac{1}{v_g}.$$

Die Dispersionsrelation ist bei einer linearen Kette gegeben durch:

$$\begin{aligned} \omega &= \sqrt{\frac{4C}{M}}|\sin\frac{1}{2}qa| && (3) \\ q(\omega) &= \frac{2}{a}\arcsin\left(\sqrt{\frac{M}{C4}}\omega\right), \text{ für } q \le \pi/a && (4) \\ \frac{dq}{d\omega} &= \frac{2}{a}\sqrt{\frac{M}{4D - M\omega^2}} && (5) \end{aligned}$$

Einsetzen in die Zustandsdichte:

$$\begin{aligned} D(\omega) &= \frac{L}{\pi}\frac{dq}{d\omega} && (6) \\ D(\omega) &= \frac{L}{\pi}\frac{2}{a}\sqrt{\frac{M}{4D - M\omega^2}} && (7) \end{aligned}$$

Die Zustandsdichte hat also eine Singularität, wenn $4D = M\omega^2$. An dieser Stelle ist die Gruppengeschwindigkeit auch Null und $q = \pi/a$. Für $\omega > \sqrt{4D/M}$ ist die Zustandsdichte Null.

2 Aufgabe 7.2

Die Zustandsdichte ist:

$$D(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2 v^3} \tag{8}$$

Die Grenzfrequenz ω_{max} ist:

$$\omega_{max}^3 = 6\pi^2 v^3 \frac{N}{V} \tag{9}$$

$$\omega_{max} = \frac{\theta}{\hbar k_B} \tag{10}$$

Auflösen von 9 nach v^3 und einsetzen in 8:

$$D(\omega) = 3N\frac{\omega}{\omega_{max}^3} \tag{11}$$

Ersetzen ω_{max} durch 10:

$$D(\omega) = \frac{3\omega^2\hbar^3}{\theta^3 k_B^3} N \tag{12}$$

Da gilt $\hbar\omega \ll k_B T$ folgt:

$$\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B t}\right) \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T} \tag{13}$$

Setzen alles in die angegebenen Formel ein:

$$< u^2 > = \int_0^{\omega_{max}} \frac{3}{2}\hbar^3 \frac{2k_B T + \hbar\omega}{\theta^3 k_B^3 M} \tag{14}$$

$$= \left[\frac{3}{2}\hbar^3 \frac{2k_B T\omega + 1/2\hbar\omega^2}{\theta^3 k_B^3 M}\right]_0^{\omega_{max}} \tag{15}$$

$$= \frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{k_B\theta^2}\frac{4T+\theta}{M} \tag{16}$$

Einsetzen der Werte:

$$< u^2 > = 0,035 \mathring{A}^2$$

$$\Rightarrow \sqrt{< u^2 >} = 0,186 \mathring{A}$$

Der Atomabstand ist $2r$, wobei $r = 1,278\mathring{A}$ ist. Die Auslenkung beträgt also $7,3\%$ vom Atomabstand und kann als realistisch betrachtet werden.

3 Aufgabe 7.3

Die Intensitätsabschwächung ist gegeben durch:

$$I = I_0 \exp\left(-\frac{1}{3} < u^2 > G^2\right) \tag{17}$$

Der reziproke Gittervektor ist für die Beugungsreflexe 1. Ordnung

$$G = \frac{2\pi\sqrt{3}}{a}, a = \sqrt{2}2 \cdot 1,278 \mathring{A}$$

bei einem fcc- Gitter. Nach Einsetzen der Werte erhält man:

$$\begin{aligned} G &= 3,01 \frac{1}{\mathring{A}} \\ \frac{I}{I_0} &= 90,0\% \end{aligned}$$