Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gornyi
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. KönigBlatt 8
Besprechung 18.12.2014

1. Elastizität eines quadratischen Gitters

(5+4+6=15 Punkte)

Mechanische Spannung beschreibt die Kraft pro Fläche, die auf eine Schnittfläche eines Kristalls wirkt. Man zerlegt die Spannung in eine Komponente senkrecht auf der gewählten Ebene, die Normalspannung, und eine Komponente in der Ebene, die Schubspannung. Diese verschiedenen Spannungen werden im Spannungstensor $\sigma_{\alpha\beta}$ zusammengefasst. Entsprechend enthält der Verzerrungstensor $\varepsilon_{\alpha\beta}$ die Deformationen. Im Fall dass kleine Auslenkungen lineare Rückstellkräfte bewirken, ergibt sich der Zusammenhang

$$\sigma_{\alpha\beta} = C_{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta}, \quad \alpha, \beta, \gamma, \delta = 1 \dots d$$

zwischen Spannungstensor und Verzerrungstensor mit dem Elastizitätstensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$.

Betrachten Sie nun ein quadratisches Gitter in zwei Dimensionen mit der Gitterkonstanten a . Das Gitter besteht nur aus einem Atom (Masse M) pro Einheitszelle. Nehmen Sie an, dass die Atome sich nur innerhalb der zwei-dimensionalen Ebene bewegen können.

- (a) Benutzen Sie die harmonische Näherung (mit Kraftkonstanten K zwischen nächsten Nachbarn) und berechnen Sie die harmonische Elastizitätsmatrix:

$$\Phi_{\alpha\alpha'} \left(\mathbf{R}_n^{(0)} - \mathbf{R}_{n'}^{(0)} \right) = \Phi_{n\alpha, n'\alpha'} = \frac{\partial^2 U}{\partial u_{n\alpha} \partial u_{n'\alpha'}}, \quad \alpha, \alpha' = 1, 2,$$

wobei $\mathbf{R}_n^{(0)}$ die Vektoren des Bravais-Gitters und $\mathbf{u}_n$ die Auslenkungen der Atome aus den Gleichgewichtslagen sind. Zudem bezeichnet U die potentielle Energie des Kristallgitters.

- (b) Bestimmen Sie den Elastizitätstensor $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = -\frac{1}{8v_{EZ}} \sum_n \left[\mathbf{R}_{n\alpha}^{(0)} \Phi_{\beta\delta}(\mathbf{R}_n^{(0)}) \mathbf{R}_{n\gamma}^{(0)} + \mathbf{R}_{n\beta}^{(0)} \Phi_{\alpha\delta}(\mathbf{R}_n^{(0)}) \mathbf{R}_{n\gamma}^{(0)} \right. \\ \left. + \mathbf{R}_{n\alpha}^{(0)} \Phi_{\beta\gamma}(\mathbf{R}_n^{(0)}) \mathbf{R}_{n\delta}^{(0)} + \mathbf{R}_{n\beta}^{(0)} \Phi_{\alpha\gamma}(\mathbf{R}_n^{(0)}) \mathbf{R}_{n\delta}^{(0)} \right],$$

wobei v_{EZ} das Volumen der Einheitszelle ist. Finden Sie die Verschiebungen $\varepsilon_{\alpha\beta}$ für eine Schubspannung $\sigma_{12} \neq 0$.

- (c) Nun fügen Sie die Kräfte mit Federkonstante K' hinzu, die die übernächsten Nachbarn (entlang der Diagonalen der Quadrate) auf dem Gitter verbinden. Bestimmen Sie $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ und finden Sie die Verschiebungen $\varepsilon_{\alpha\beta}$ für eine Schubspannung $\sigma_{12} \neq 0$.

2. Debye-Waller-Faktor

(6+2+4+3=15 Punkte)

Aus der Vorlesung ist bekannt, dass der dynamische Strukturfaktor $S(\mathbf{q}, \omega)$ für die Neutronenstreuung an Kristallen durch die Debye-Waller-Faktor e^{-2W} unterdrückt wird, wobei $2W = \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_0)^2 \rangle = \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_n(t))^2 \rangle$.

Betrachten Sie Phononen mit dem Spektrum $\omega_j(q)$ im d -dimensionalen Kristall. Das Gitter besteht nur aus einem Atom (Masse M) pro Einheitszelle.

- Leiten Sie den allgemeinen Ausdruck für den Debye-Waller-Faktor für beliebige Temperatur T her.
- Schätzen Sie den Wert von W in drei-dimensionalen Kristallen bei $T = 300K$ für q in der Größenordnung des Debye-Wellenvektors ab.
- Analysieren Sie den Debye-Waller-Faktor in $d = 2$ und $d = 1$ für $T = 0$.
- Analysieren Sie den Debye-Waller-Faktor in $d = 2$ und $d = 1$ für $T > 0$.

3. Bonusaufgabe: Thermische Ausdehnung

(4+6=10 Bonuspunkte)

Thermische Ausdehnung von Kristallen kann mit dem Modell eines zweiatomigen Moleküls untersucht werden. Betrachten Sie zwei Atome, die miteinander durch ein anharmonisches 1D-Potential $U(x) = Kx^2 + Bx^3 + Cx^4$ gekoppelt sind, wobei x die relative Verschiebung der Atome von der Gleichgewichtslage bei $T = 0$ ist.

- Finden Sie den Mittelwert $\langle x \rangle$ für ein Molekül bei $T \neq 0$ durch Mittelung der klassischen Bewegungsgleichungen der Atome.
- Betrachten Sie eine 1D-Kette der Länge L mit dem Potential $U(x)$ zwischen benachbarten Atomen. Bestimmen Sie den Koeffizienten der linearen thermischen Ausdehnung $\alpha = L^{-1}(dL/dT)$ der Kette im Temperaturintervall $\hbar(K/M)^{1/2} \ll k_B T \ll Ka^2$, wobei M die Masse eines Atoms und a der Gleichgewichtsabstand zwischen den Atomen ist.