Übungen zur Vorlesung Festkörperphysik WS 07/08

Prof. G. Maret

Blatt 5, Besprechung am 29./30.11.07

1. Aufgabe: Raman Streuung
Die Wechselwirkung von sichtbarem Licht mit Phononen erfolgt über die Polarisierbarkeit der Valenzelektronen, die sich aus:

$$P = \varepsilon_0 \chi E$$

ergibt, wobei χ die elektronische Suszeptibilität und $E = E_0 \cos \omega_0 t$ das eingestrahlte elektrische Feld sind. Durch die zeitliche Änderung von P wird die Streuwelle mit der Intensität $I \propto \ddot{P}^2$ abgestrahlt. χ ist nun nicht konstant, sondern wird durch die Gitterschwingungen der Frequenz ω und deren Auslenkung $s = s_0 \cos \omega t$ moduliert. In erster Ordnung gilt:

$$\chi = \chi_0 + \frac{\partial \chi}{\partial s} s.$$

a) Leiten Sie einen Ausdruck für die Polarisation P als Funktion von ω und ω_0 her.
b) Skizzieren Sie das Spektrum der Streuintensität.

2. Wahrscheinlichste Phononenfrequenz
Berechnen sie die wahrscheinlichste Phononenfrequenz $\omega^*(T)$ für das Debye-Gittermodell im Bereich $1K \leq T \leq 1000K$.

3. Einsteinmodell in 1D
Zeigen sie anhand des Modells der 2-atomigen linearen Kette, dass das Einsteinmodell eine gute Näherung ist, wenn $M_1 \gg M_2$ ist.

4. Thermische Ausdehnung
Die thermische Ausdehnung eines Kristalls ist eine Konsequenz des anharmonischen Teils des Potentials. Als Modellfall betrachten wir einen zweiatomigen Oszillator. Die potentielle Energie des Oszillators bei einer Änderung x des Atomabstandes (relativ zum Gleichgewichtsabstand a_0 bei $T = 0K$) ist durch

$$U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4 \tag{1}$$

gegeben, wobei c, g und f positive Konstanten sind. Die Terme in x^3 und x^4 stellen den anharmonischen Teil dar: gx^3 beschreibt die Asymmetrie der repulsiven Atom-Atom-Wechselwirkung, während fx^4 eine Aufweichung der Federkonstante bei großem x beschreibt.
a) Berechnen Sie unter der Annahme $|gx^3| \ll k_B T$ den Mittelwert $\langle x \rangle$ der Auslenkung

für $T \neq 0$ mit Hilfe von

$$\langle x \rangle = \frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty} x \exp\left[\frac{-U(x)}{k_B T}\right] dx}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{-U(x)}{k_B T}\right] dx} \tag{2}$$

Hinweis: Trennen Sie im Zähler den harmonischen und anharmonischen Teil des Exponenten. Letzterer soll bis zur ersten Ordnung entwickelt werden ($e^y \approx 1 + y$). Im Nenner kann der anharmonische Teil vernachlässigt werden, d.h. entwickeln Sie nur bis zur nullten Ordnung. Nützliches Integral:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} t^n \exp\left[-at^2\right] dt = \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \cdot a^{-\frac{n+1}{2}} \text{ mit n gerade,} \tag{3}$$

wobei Γ die Gamma-Funktion ist. Hierfür gilt: $\Gamma(s+1) = s\Gamma(s)$ und $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$

b) Was passiert für ungerade n?

c) Berechnen Sie die Gitterkonstante für Argon bei 75K über $a_{Ar}(75K) = a_{Ar}(0K) + \langle x \rangle$, wobei $g/c^2 = 1.675 \cdot 10^{19} \frac{\text{Å}}{J}$ und $a_{Ar}(0K) = 5.3\text{Å}$.

d) Wie groß ist damit die relative Änderung Δ der Gitterkonstante a_{Ar} von Argon durch Erhöhung der Temperatur von 0 K auf 75 K?