

Phononen und Neutronenstreuung

- a) Geben Sie für einen dreidimensionalen Festkörper mit N Atomen in der primitiven Einheitszelle die Art und Anzahl der erwarteten Phononenzweige an. Erläutern Sie mit Formel für die Zustandsdichte $n(\omega)$, welcher Statistik die Phononen folgen. (2 Punkte)
- b) Betrachten Sie nun eine eindimensionale lineare Kette mit zweiatomiger Basis. Beschreiben Sie, wie sich die Atome bei den jeweiligen Schwingungsmoden räumlich zueinander bewegen und geben Sie die räumliche Ausdehnung der Schwingungen an. (2 Punkte)
- c) Skizzieren Sie für den Fall aus Teilaufgabe (b) die Phononen-Dispersionsrelation und beschriften Sie die Skizze vollständig. (2 Punkte)
- d) Geben Sie für das Debye-Modell der Gitterschwingungen die zugrunde liegenden Annahmen und Näherungen an. Erläutern Sie die Begriffe Debye-Frequenz und Debye-Temperatur. (3 Punkte)
- e) In der Debye-Näherung für eine lineare Kette ist die Phononen-Zustandsdichte durch $D(\omega) = \frac{N}{\omega_D}$, und die innere Energie U durch

$$U = \int_0^{\omega_D} \hbar \cdot \omega \cdot n(\omega, T) \cdot D(\omega) \cdot d\omega$$

gegeben (N : Anzahl der Atome; ω_D : Debye-Frequenz). Zeigen Sie, dass in linearer Näherung für hohe Temperaturen der phononische Beitrag zur spezifischen Wärmekapazität dem Dulong-Petit-Gesetz für den 1-D Fall $C_V = N \cdot k_B$ entspricht. (3 Punkte)

Inelastische Neutronenstreuung ist eine der wichtigsten Methoden für die Messung von Phononen-Dispersionsrelationen. In solchen Experimenten werden Anregungen erzeugt oder vernichtet. Im folgenden sollen Neutronen der Wellenlänge $\lambda_0 = 1,80 \text{ \AA}$ an einem LiF-Kristall (fcc Gitter, $a = 4,02 \text{ \AA}$) gestreut werden. Neutronenquelle, Probe und Detektor spannen eine Ebene parallel zu den (001)-Netzebenen des Kristalls auf. Fällt der Neutronenstrahl parallel zur [100]-Richtung ein, so beobachtet man unter einem Ablenkwinkel von $2\Theta = 30^\circ$ gestreute Neutronen der Wellenlänge $\lambda = 1,15 \text{ \AA}$.

- f) Erläutern Sie, warum die Streuung thermischer Neutronen ($E \approx 25 \text{ meV}$) dafür gut geeignet ist. Begründen Sie, ob bei dem angegebenen Streuvorgang Phononen erzeugt oder vernichtet werden. (2 Punkte)
- g) Berechnen Sie Frequenz und Energie der teilnehmenden Phononen. (2 Punkte)
- h) In der Abbildung ist die inelastische Neutronenstreuung im reziproken Gitter dargestellt. Geben Sie den Gittertyp an und berechnen Sie dessen Gitterkonstante. Erläutern Sie die Bedeutung der dargestellten Vektoren und identifizieren Sie insbesondere den Wellenvektor des Phonons. (4 Punkte)

