Abgabe: bis zum *4.Jan.2010, 10:00 Uhr* im Postfach von Prof. Rieger

1 Dynamische Suszeptibilität

1.1 Diffusionsgleichung

Gegeben sei die Diffusionsgleichung für $M(x,t)$ (z.B die Magnetisierung in einem Ferromagneten) in einem äußeren Feld $F(x,t)$:

$$\dot{M}(\mathbf{x},t) = D\nabla^2 M(\mathbf{x},t) + F(\mathbf{x},t). \tag{10.1}$$

Die Fouriertransformation einer beliebigen Größe $A(x,t)$ ist gegeben durch $\tilde{A}(\mathbf{q},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} A(\mathbf{x},t)$.
1) Zeigen Sie, dass $\tilde{M}(\mathbf{q},\omega)$ folgende Gleichung erfüllt:

$$i\omega\tilde{M}(\mathbf{q},\omega) = -D\mathbf{q}^2\tilde{M}(\mathbf{q},\omega) + \tilde{F}(\mathbf{q},\omega). \tag{10.2}$$

2) Wir definieren die dynamische Suszeptibilität (linearer Response) $\chi(\mathbf{q},\omega)$ als

$$\chi(\mathbf{q},\omega) := \left.\frac{d\tilde{M}(\mathbf{q},\omega)}{d\tilde{F}(\mathbf{q},\omega)}\right|_{\tilde{F}(\mathbf{q},\omega)=0}. \tag{10.3}$$

Zeigen Sie, dass

$$\chi(\mathbf{q},\omega) = \chi_{\text{stat}}(\mathbf{q})\frac{iD\mathbf{q}^2}{\omega + iD\mathbf{q}^2}, \tag{10.4}$$

mit $\chi_{\text{stat}}(\mathbf{q}) = \chi(\mathbf{q},\omega=0)$. Berechnen Sie außerdem $\chi'(\mathbf{q},\omega) = \mathrm{Re}(\chi(\mathbf{q},\omega))$ und $\chi''(\mathbf{q},\omega) = \mathrm{Im}(\chi(\mathbf{q},\omega))$. Zeichnen Sie anschließend $\chi'(\omega,\mathbf{q})/\chi(\mathbf{q})$, $\chi''(\omega,\mathbf{q})/\chi(\mathbf{q})$ als Funktion von $\omega/D\mathbf{q}^2$.
3) Berechnen Sie $G^{>}(\mathbf{q},\omega)$ mit Hilfe des Fluktuations-Dissipations-Theorems und zeichnen Sie $G^{>}(\mathbf{q},\omega)/\chi(\mathbf{q})$ als Funktion von $\omega/D\mathbf{q}^2$.

1.2 Überkritisch gedämpfter Oszillator

Gegeben sei die klassische Bewegungsgleichung des überkritisch gedämpften Oszillators $Q(t)$:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \gamma\frac{d}{dt} + \omega_0^2\right) Q(t) = \frac{F(t)}{m}. \tag{10.5}$$

Die Fouriertransformation in der Zeit sei analog zu 1.1 definiert.
1) Zeigen Sie, dass

$$\chi(\omega) = \left.\frac{dQ(\omega)}{dF(\omega)}\right|_{\tilde{F}(\omega)=0} = \frac{1/m}{-\omega^2 + \omega_0^2 - i\omega\gamma}. \tag{10.6}$$

2) Berechnen Sie $\chi'(\omega) = \mathrm{Re}(\chi(\omega))$ und $\chi''(\omega) = \mathrm{Im}(\chi(\omega))$. Stellen Sie $\chi'(\omega)/\chi$, $\chi''(\omega)/\chi$ mit $\chi = 1/(m\omega_0^2)$ als Funktion von ω/ω_0 graphisch dar.

3) Berechnen Sie $G^{>}(\omega)$ mit Hilfe des Fluktuations-Dissipations-Theorems und zeichnen Sie $G^{>}(\omega)/\chi$ als Funktion von ω/ω_0.

2 Debye-Waller-Faktor für Phononen

In dieser Übung wollen wir den kohärenten Strukturfaktor $S_{\text{coh}}(\mathbf{k},\omega)$ betrachten, welcher experimentell gemessen werden kann (z.B. durch Neutronenstreuung). Gegeben seien N Atome der Masse M im Volumen V an den Positionen $\mathbf{x}_n(t)$, welche beschrieben werden durch den Hamiltonoperator H. $S_{\text{coh}}(\mathbf{k},\omega)$ ist definiert durch

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{k},\omega) := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i\omega t} \frac{1}{N} \sum_{n,m} \langle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_n(t)} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_m(t)} \rangle, \tag{10.7}$$

wobei $\langle O \rangle$ eine thermische Mittelung über den Operator O darstellt:

$$\langle O \rangle = \sum_k \frac{e^{-\beta E_k}}{Z} \langle k|O|k \rangle, \tag{10.8}$$

$|k\rangle$ die Eigenvektoren von H sind und Z die Zustandssumme bezeichnet.
1) Wir führen folgenden Dichteoperator ein: $\rho(\mathbf{x},t) = \sum_n \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n(t))$, sowie seine räumliche Fouriertransformierte $\rho_{\mathbf{k}}(t) = V^{-1/2} \int_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x},t)$. Zeigen Sie, dass

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{k},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i\omega t} \frac{V}{N} \langle \rho_{\mathbf{k}}(t) \rho_{-\mathbf{k}}(0) \rangle. \tag{10.9}$$

Jetzt wollen wir die Positionsvektoren der Atome aufspalten in $\mathbf{x}_n(t) = \mathbf{a}_n + \mathbf{u}_n(t)$ ($\mathbf{a}_n$ bezeichnet die Knotenpunkte des d-dimensionalen kubischen Gitters) und die Auslenkungen $\mathbf{u}_n(t)$ als Funktion der Normalmoden darstellen

$$\mathbf{u}_n(t) = \frac{1}{\sqrt{VM}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_n} Q_{\mathbf{k}}(t) \quad , \quad Q_{\mathbf{k}}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} (a_{\mathbf{k}}(t) + a^\dagger_{-\mathbf{k}}(t)), \tag{10.10}$$

mit $a_{\mathbf{k}}(t) = e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} a_{\mathbf{k}}$ in Heisenbergdarstellung, so dass der Hamiltonoperator des Systems gegeben ist durch:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(a^\dagger_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \tag{10.11}$$

2) Zeigen Sie, dass:

$$\langle \mathbf{u}_n(t) \rangle = \langle \mathbf{u}_n(0) \rangle = 0. \tag{10.12}$$

3) Gegeben seien zwei Operatoren A, B mit $\langle A \rangle = \langle B \rangle = 0$. Zeigen Sie, dass:

$$\langle e^A e^B \rangle = e^{\langle 2AB + A^2 + B^2 \rangle} + \mathcal{O}(A^3, B^3, A^2 B, AB^2). \tag{10.13}$$

(10.13) ist exakt, sobald A und B lineare Funktionen von $a_{\mathbf{k}}$ und $a^\dagger_{\mathbf{k}}$ sind. (*e.g.* Ashcroft-Mermin Seite 792).
4) Zeigen Sie unter Ausnutzung von Translationsinvarianz, dass

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{k},\omega) = e^{-2W} \frac{1}{N} \sum_{n,m} e^{-i(\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_m)\cdot\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i\omega t} e^{\langle \mathbf{k}\cdot\mathbf{u}_n(t) \mathbf{k}\cdot\mathbf{u}_m(t) \rangle}, \tag{10.14}$$

mit $W = e^{-\langle (\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}_n(0))^2 \rangle}$ der Debye-Waller-Faktor ist. Diskutieren Sie den Grenzfall $T \to 0$.
5) Entwickeln Sie die letzte Exponentialfunktion in (10.14) in niedrigster Ordnung um die durch den Debye-Waller-Faktor modifizierte Bragg-Bedingung herzuleiten.
6) Entwickeln Sie die letzte Exponentialfunktion in (10.14) in höheren Ordnungen und diskutieren Sie den physikalischen Ursprung der Terme in Bezug auf Phononenstreuprozesse. Was ist ihr qualitativer Effekt auf $S_{\text{coh}}(\mathbf{k},\omega = 0)$?