

Langwellige Magnonen und Phononen und rotonenähnliche Anregungen in amorphen Festkörpern

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor eines Wissenschaftszweiges (Dr. rer. nat.)

vorgelegt an der Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Ilmenau

von Dipl.-Phys. Rolf Öttking
geboren am 23.08.1964 in Minden (Westfalen)

Berichterstatter:

1. Gutachter : Prof. Dr. K. Handrich, TU Ilmenau
2. Gutachter : Prof. Dr. P. Maaß, TU Ilmenau
3. Gutachter : Prof. Dr. S. Kobe, TU Dresden

eröffnet am: 08.04.2003

wissenschaftliche Aussprache am: 19.09.2003

Verfahrensnummer: N 246

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Behandlung der strukturellen Unordnung	15
2.1	Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor $S_{lw}(q)$ im langwelligen Bereich und für die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion	17
2.2	Statischer Strukturfaktor im kurzwelligen Bereich, Zusammenhang mit der radialen Verteilungsfunktion	22
3	Langwellige Elementaranregungen	25
3.1	Magnonen in amorphen Ferromagneten	25
3.1.1	Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus für Magnonen	25
3.1.2	Verbesserung des Formalismus für Magnonen	27
3.1.3	Dämpfung langwelliger Magnonen	28
3.1.4	Selbstenergie-Renormierung	31
3.1.5	Scheinbare Magnonen-Gap-Energie	35
3.2	Phononen in amorphen Festkörpern	37
3.2.1	Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus für Phononen	37
3.2.2	Dämpfung langwelliger Phononen	39
3.2.3	Selbstenergie-Renormierung	41
3.2.4	Scheinbare Phononen-Gap-Energie	42
3.3	Zustandsdichte aus dem Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus	44
3.3.1	Magnonen-Zustandsdichte	44
3.3.2	Phononen-Zustandsdichte	44
3.3.3	Erhaltung der Gesamtzahl der (Magnonen-und Phononen-) Zustände	45
3.3.4	Amorphenen	46
3.4	Semiquantitative Theorie für Magnonen in amorphen Ferromagneten	55
3.5	Wärmeleitfähigkeit	58
3.5.1	Magnonen-Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit	58
3.5.2	Phononen-Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit	62
3.5.3	Vergleich von Phononen-und Magnonen-Wärmeleitfähigkeit	67
4	Rotonenähnliche Anregungen	68
4.1	Semiquantitative Theorie	69
4.1.1	Vergleich mit Meßdaten	71
4.2	Super- Debye- Beitrag zur spezifischen Wärme	76
4.2.1	Zustandsdichte und Gesamtzahl der Zustände	76

4.2.2	Phononen-und Phonon-Rotonen-Beitrag zur spezifischen Wärme amorpher Festkörper	77
4.2.3	Auswertung experimenteller Daten	78
4.3	Schlußfolgerung	83
5	Zusammenfassung und Ausblick	84
A	Anhang	87
A.1	Methode der Strukturmittlung	87
A.2	Kurzdarstellung der experimentellen Methoden zur Strukturuntersuchung	89
A.3	Magnonen-und Phononen-Zustandsdichte aus der Greenfunktion in Ortsdarstellung . .	90
	Vielen Dank !	98
	Erklärung	99

Kapitel 1

Einleitung

Amorphe, strukturell ungeordnete Festkörper, amorphe, insbesondere aus der Schmelze schnell abgeschreckte Legierungen (auch als „metallische Gläser“ oder „metglasses“ bezeichnet) amorphe Polymere und Gläser erlangen immer größere technologische Bedeutung. Solche Materialien sind meist hart und belastbar und besitzen interessante thermische Eigenschaften. Amorphe Ferromagnete besitzen außerdem besondere magnetische Eigenschaften.

Die Dichte amorpher Festkörper ist nur wenig kleiner als die Dichte der entsprechenden kristallinen Festkörper, weiterhin sind die meisten amorphen Substanzen isotrop. In frühen Struktursimulationen wurde gezeigt, daß für viele amorphe Festkörper (amorphe Legierungen, Polymere) das Modell der stochastischen dichtesten Packung zur Strukturbeschreibung am besten geeignet ist (vgl. [1]). Auf diese Weise entsteht in Strukturmodellen auch die häufig vorhandene Isotropie.

Ein zentrales Problem in der theoretischen Behandlung amorpher Festkörper ist die Berücksichtigung der strukturellen Unordnung. Aus Strukturuntersuchungen ist bekannt, daß die langreichweitigen Struktureigenschaften („Fernordnung“), die sich im statischen Strukturfaktor $S(q)$ im langwelligen Bereich ($10^{-4}\text{\AA}^{-1} \lesssim q \lesssim 10^{-1}\text{\AA}^{-1}$, mit der Wellenzahl q) niederschlagen, und die Nahordnung, die den statischen Strukturfaktor im kurzwelligen Bereich bestimmt, aufgeteilt sind (siehe Kap 2). Insbesondere bestimmt die Lage des ersten ausgeprägten Maximums des statischen Strukturfaktors den mittleren interatomaren Abstand, der durch das erste Maximum der radialen Verteilungsfunktion $g(r)$ gegeben ist. Der erste scharfe Peak im statischen Strukturfaktor (FSDP) liegt für viele amorphen Materialien im q -Bereich $1\text{\AA}^{-1} \lesssim q \lesssim 5\text{\AA}^{-1}$.

Die vorliegende Arbeit folgt dieser Aufteilung. Es werden die langwelligen und kurzwelligen Anregungen getrennt voneinander behandelt. Gleichzeitig werden die magnetischen und phononischen Elementaranregungen soweit wie möglich analog behandelt. Die Gemeinsamkeiten und die Unterschiede werden betont. Die Vielfalt der zu behandelnden Gebiete spiegelt sich auch in der nun folgenden Literaturübersicht wieder. Anschließend erfolgt ein kurzer Überblick über den Inhalt der vorliegenden Arbeit.

Die Untersuchung der Selbstenergie und Dämpfung langwelliger Elementaranregungen (Magnonen und Phononen) ist seit vielen Jahren Gegenstand experimenteller [2]- [10] und theoretischer [1], [11]- [26] Forschung. Wie in Kapitel 2 dargestellt, erhält man Struktur-Informationen über Inhomogenitäten mit großen Korrelationslängen aus der Kleinwinkelstreuung in Neutronen- und Röntgen-Streuexperimenten. Es wird gezeigt, daß für viele, insbesondere aus der Schmelze gewonnene amorphe Festkörper der statische Strukturfaktor im langwelligen Bereich einen starken Anstieg aufweist, der näherungsweise durch ein $q^{-\nu}$ -Gesetz mit $\nu \gtrsim 3$ beschrieben werden kann.

Die Magnonen-Selbstenergie und -Dämpfung wurde innerhalb verschiedener Strukturmodelle untersucht. Die Dispersionsbeziehung der Magnonen für kleine Wellenzahlen q entspricht der üblichen Dq^2 -Näherung [12], [27], bzw. der quasi-kristallinen Näherung [19], [26], [28], mit Stiffnesskonstanten D , die von wenigen ($\approx 2\text{meV}\text{\AA}^2$) bis zu einigen hundert $\text{meV}\text{\AA}^2$ [29] variieren. Weiterhin entstehen Gap-Energien im Bereich von $\sim 0.05\text{meV}$ [30] aufgrund der magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung [29]. Das Modell ungeordneter Legierungen („disordered alloy model“) in der Arbeit

von Edwards und Jones [12] (für magnetische und nichtmagnetische Atome in Kristallgittern) lieferte innerhalb des Heisenberg-Modells eine konzentrationsabhängige Stiffnesskonstante D und eine Dämpfung proportional zu q^5 , wobei die Dämpfung durch Streuung der Magnonen an „Punkt-Defekten“ erklärt werden kann (im folgenden als „magnetische Rayleigh-Streuung“ bezeichnet). Dieses Modell ungeordneter Legierungen wurde später durch die Näherung des kohärenten Potentials („coherent potential approximation“, CPA) verfeinert, die von Tahir-Kheli entwickelt wurde [18] (siehe auch [1] für eine weitere Beschreibung).

Montgomery et al. schlugen das „Random Lattice Model“ vor, in dem das Austausch-Integral I_{ij} stochastisch fluktuiert [11]. Dieses Modell wurde auch von Ishakov [19], und, kombiniert mit der CPA, von Schreiber benutzt [31] (siehe auch [1]).

Im folgenden werden ausgedehnte magnetische Inhomogenitäten in amorphen Ferromagneten behandelt, wie sie aus dem oben angeführten Verhalten des statischen Strukturfaktors im langwelligen Bereich folgen. Solche Inhomogenitäten wurden von Ignatchenko und Ishakov behandelt, die eine Modellfunktion für den statischen Strukturfaktor $S(q) \sim \frac{1}{(\kappa^2 + q^2)^2}$ benutzten, welcher ausgedehnte Inhomogenitäten mit reziproker Korrelationslänge κ beschreibt [20]. In ihrer phänomenologischen Behandlung, die auf der Landau-Lifshitz-Gleichung für die Magnetisierung basiert, wurde in erster Näherung die magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung vernachlässigt. In der Folge wurde das Modell weiter verfeinert und die magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung ebenfalls berücksichtigt [21], [22], [25].

Medvedev [23] behandelte auf der Basis der Ignatchenko-Ishakov'schen phänomenologischen Methode eine zweikomponentige Legierung nach dem Random Lattice Disordered Alloy Modell innerhalb des Heisenberg-Modells durch Einbeziehung ausgedehnter Inhomogenitäten mit demselben statischen Strukturfaktor wie in [20]. Insgesamt findet man bei Präsenz ausgedehnter stochastischer Inhomogenitäten mit charakteristischer Korrelationslänge $\frac{1}{\kappa}$:

- eine Renormierung der Stiffnesskonstante D in Abhängigkeit von κ und q .
- Dämpfung, die in erster Born'scher Näherung einem q^5 -Gesetz für $q \ll \kappa$ und einem q^3 -Gesetz für $q \gg \kappa$ folgt.

Kaneyoshi [16], [24] (siehe auch: [1]) erweiterte den Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus (MKF) auf amorphe Ferromagnete innerhalb des Heisenberg-Modells und erhielt durch Anwendung der doppel-seitigen Fourier-Transformation die retardierte Greenfunktion $G_{\vec{q},\vec{q}'}(E)$. Die Strukturhierarchie wurde durch den statischen Strukturfaktor $S(q)$ erfaßt. Der MKF liefert die strukturgemittelte retardierte Greenfunktion $\langle G_{\vec{q},\vec{q}'}(E) \rangle$ in (\vec{q}, \vec{q}') -Darstellung, welche die Energie und Dämpfung der Magnonen in bekannter Weise liefert (siehe z.B. [24]).

Auch langwellige Phononen in amorphen Festkörpern sind in den letzten drei Jahrzehnten intensiv erforscht worden, wobei die Dispersionsrelation und Lebensdauer von besonderem Interesse sind. Durch Brillouin-Streuung und Neutronenstreuung kann die Dispersionsrelation experimentell ermittelt werden. Letztere Methode ist beispielsweise in dem Übersichtsartikel von Suck beschrieben [32]. Im langwelligen Bereich ($q \rightarrow 0$) wechselwirken Neutronen nur mit longitudinalen Phononen [33], [34]. Suck et al. haben langwellige longitudinale Anregungen durch Neutronen-Brillouin-Streu-Experimente (NBSE) untersucht [33], [34] und die Ergebnisse mit den theoretischen Voraussagen von Hafner [35] verglichen. Hwa et al. untersuchten Kalzium-Aluminosilikat- (CAS-) Gläser in Rayleigh-Brillouin-Streu-Experimenten [36]. Die Rayleigh-Brillouin-Intensitäten und die Brillouin-Aufspaltung liefern unter anderem die Schallgeschwindigkeit.

Takeno und Goda entwickelten eine Greenfunktionen-Theorie für Phononen in amorphen Festkörpern und erhielten eine Struktur-Hierarchie für die Greenfunktionen nach Strukturmittlung der Bewegungsgleichung für die Greenfunktionen in gemischter Orts- und Impuls (Fourier-Transformations-)

Darstellung [37]. Sie erhielten die Dispersionsbeziehung in quasi-kristalliner Näherung (auch bekannt als „virtual crystal approximation“) mit Hilfe der radialen Verteilungsfunktion $g(r)$ und den renormierten Paar-Potentialen in harmonischer Näherung und bezogen somit die Nahordnung in amorphen Festkörpern ein. In zweiter Ordnung tritt Phononen-Dämpfung auf, wobei jedoch weitere Untersuchungen nicht durchgeführt wurden. Kashirin [38] und Pratap et al. [39] erhielten die Phononen-Dispersionsbeziehung unter Verwendung der Ergebnisse von Takeno und Goda für diverse Modellfunktionen für die Paarpotentiale und für die radiale Verteilungsfunktion. Hafner [35] und Sato et al. [40] erhielten eine Aufspaltung der Phononen-Dispersionsrelation in akustische und optische Zweige für Modellcluster für $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$ von 800 beziehungsweise 1000 Atomen in quasi-kristalliner Näherung. Dabei sind allerdings die erlaubten q -Werte durch die periodischen Randbedingungen der endlichen Cluster eingeschränkt [35]. Der Bereich kleiner Wellenzahlen kann mit Computer-Simulationen, die auf relativ kleinen Clustern basieren, nicht behandelt werden, da die charakteristische Korrelationslängen von Inhomogenitäten, die in diesem Bereich wesentlich sind, im Bereich von $50 - 1000 \text{ \AA}^{-1}$ liegen. Handrich und Resch [41] diskutierten sowohl Nah-als auch „Fern“-Ordnung, indem sie die radiale Verteilungsfunktion und den statischen Strukturfaktor in die doppelseitig fouriertransformierte Phononen-Greenfunktion einbezogen und erhielten so Dispersionsrelation und Dämpfung der Phononen. Eine inverse Phononen-Lebensdauer $\frac{1}{\tau_q} \sim q^4$ wurde in [42] erhalten, wobei das Verhalten $\sim q^4$ mit der Rayleigh-Streuung von Phononen interpretiert wurde. Erwarteterweise findet man ein offensichtlich lineares Verhalten der Phononen-Dispersionsbeziehung für langwellige akustische Phononen. Die Entkoppelung der akustischen und optischen Zweige ist als Konsequenz der Isotropie der behandelten amorphen Systeme möglich.

Die Zustandsdichte der Magnonen und Phononen in amorphen Systemen ist auf verschiedenen experimentellen [43] - [45] und theoretischen Wegen [1], [46] - [48] untersucht worden. Die theoretische Untersuchung amorpher Festkörper mit Nahordnung erfolgt üblicherweise mit Hilfe molekulardynamischer (MD) Simulationen der amorphen Konfiguration (s. z.B. [46], [35]) mit Clustergrößen von mehreren 100 bis mehreren 1000 Atomen. Der Einfluß schwacher, ausgedehnter Inhomogenitäten entzieht sich jedoch bisher der Untersuchung durch MD-Simulationen aufgrund der enormen Anzahl von Atomen, die zum Aufbau solcher Inhomogenitäten notwendig sind. Die Technik der inelastischen Neutronenstreuung (INS) wurde von mehreren Gruppen (s. z.B. [43], [45]) zur Untersuchung von aus der Schmelze gesponnenen amorphen Legierungen benutzt. Suck fand einen Anstieg der niederenergetischen Anregungen in aus der Schmelze abgeschrecktem, gesponnenem Ni-Pd-P-Glas mit Dichtefluktuationen, die gezielt während des Abschreck-Prozesses in die Legierung hineingebracht werden [45].

In [1] und [48] wurde eine neue Art von Elementaranregungen in amorphen Festkörpern und Ferromagneten („Amorphonen“) eingeführt, deren Eigenschaften sich im Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus für Magnonen-bzw. Phononen-Greenfunktionen zeigen.

Eine charakteristische thermische Eigenschaft amorpher Festkörper ist das Verhalten der Wärmeleitfähigkeit κ bei tiefen Temperaturen. Anderson (s. z.B. [49]) beschrieb den Wärmetransport schematisch anhand des Beispiels von amorphem Quarz. Demnach verläuft die Wärmeleitfähigkeit für tiefe Temperaturen ($T \sim 1K$) proportional zu $\kappa \sim T^\xi$, ($1.5 \leq \xi \leq 2$) um dann in ein Plateau (für $T \sim 10K$) überzugehen, woraufhin κ weiter ansteigt. Das gleiche Verhalten von κ wird auch in den von Handrich [42] zitierten Arbeiten für $\alpha\text{-SiO}_2$, $\alpha\text{-Ge}$, $\alpha\text{-Se}$, die amorphen Polymere PMMA und PS [50], $\alpha\text{-GeO}_2$ [51] und SC-8 Epoxydharz [52] beobachtet. Auch für hochreines, polykristallines Aluminium mit einer hohen Dichte von Versetzungen folgt $\kappa \sim T^2$ für sehr tiefe Temperaturen [53].

Zhu et al. [52] fanden ebenfalls $\kappa \sim T^2$ ($T \lesssim 4K$) für SC-8 Epoxydharz in einer Untersuchung von verdichtetem $\alpha\text{-SiO}_2$ (mit dem Plateau bei $T \approx 10K$) und von verdichtetem SC-8 Epoxydharz (mit dem Plateau bei $T \approx 15K$). In MY759 Epoxy fällt der Beginn des Plateaus der Wärmeleitfähig-

keit (für $T \gtrsim 4K$) in etwa mit dem Peak der Wärmekapazität $\frac{C_V}{T^3}$ („Super-Debye-Beitrag“, excess specific heat) zusammen, wie anhand der Daten von de Oliveira et al. ersichtlich ist [54]. Der Zusammenhang zwischen dem Plateau in der Wärmeleitfähigkeit κ und dem Minimum in der Phononen-Dispersionsrelation („Rotonen-Minimum“) bei der Wellenzahl $q_1 \approx 2.5\text{\AA}^{-1}$ in $\alpha\text{-Cu}_x\text{Sn}_{100-x}$ wird von Schmidt et al. näher untersucht [55]. Demnach sind rotonenähnliche Anregungen lokalisiert und tragen nicht zum Wärmetransport bei, wirken aber als zusätzliche Streuzentren für die langwelligen Phononen-Moden. Der Zusammenhang zwischen der Phonon-Phonon-Wechselwirkung und der Wärmeleitfähigkeit wird von Krasny betrachtet [56]. In einer Simulationsrechnung für amorphes Mg und amorphes Zn (anhand der amorphen Legierung $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$) wurde das Plateau in κ als Konsequenz des Rotonen-Minimums ermittelt, während bei höheren Temperaturen $\kappa \sim T$ folgt.

Eine Erklärung für das Tieftemperatur-Verhalten der Wärmeleitfähigkeit gibt das phänomenologische Tunnel-Modell von Anderson und Phillips bzw. das vereinfachte Zwei-Niveau-Systeme (TLS)-Modell [57] - [59]. Die Streuung langwelliger Phononen an unendlich ausgedehnten Korngrenzen wie z.B. Kanten, Versetzungen u.ä. wurde von Klemens [60] innerhalb der Born'schen Näherung behandelt. In [61] wurde dieses Modell auf endliche Korngrenzen erweitert. Für $\alpha\text{-SiO}_2$ wurde eine dichte Verteilung von Korngrenzen zur Modellierung der amorphen Struktur angenommen und so die Wärmeleitfähigkeit unter Berücksichtigung der Zwei-Niveau-Systeme berechnet. Krasavin et al. [62] entwickelten aus dem Klemens-Modell das Modell der „Keil-Entneigungs-Dipole“ ((biaxial) wedge-disclination dipoles, WDD's). Aus der Kombination sowohl der Streuung langwelliger (Debye-) Phononen an den WDD's als auch der Rayleigh-Streuung wird gute Übereinstimmung der berechneten Wärmeleitfähigkeit κ mit den Meßwerten für $\alpha\text{-SiO}_2$, $\alpha\text{-GeO}_2$ und PS erzielt.

Handrich folgte den Ideen von Ziman [63] und Joshi [64] und berechnete die Stoßfrequenz $\frac{1}{\tau_q}$ und die Wärmeleitfähigkeit κ aus dem statischen Strukturfaktor im langwelligen Bereich für Phononen [42] und Magnonen [65]. Die Wärmeleitfähigkeit verläuft bei allen genannten Phononen-Modellen näherungsweise proportional $\kappa \sim T^2$ für tiefe Temperaturen und stimmt darin mit den Experimenten überein.

Rotonen sind kurzwellige Elementaranregungen mit Wellenzahlen q_1 im Bereich der doppelten Debye-Wellenzahl $q_1 = 2q_D$, die in vielen ungeordneten Systemen, etwa supraflüssigem ^4He , flüssigen Legierungen, amorphen Ferromagneten, amorphen Festkörpern, existieren. Im Rotonenbereich der Wellenzahlen fällt der erste scharfe Peak des statischen Strukturfaktors („first sharp diffraction peak“, kurz: „FSDP“) bei q_1 mit dem Minimum der Dispersionsbeziehung (Rotonen-Minimum, auch Rotonen-Gap-Energie) bei q_1 zusammen. Der FSDP wird als „verbreiteter Bragg-Reflex“ aufgefaßt. Es bilden sich „Pseudo-Brillouin-Zonen“ im Wellenzahlraum der amorphen Festkörper und aus „diffusen Umklapp-Prozessen“ an den verbreiterten Bragg-Reflexen folgt die Bildung des Rotonen-Minimums.

Im folgenden werden ausgewählte Arbeiten über supraflüssiges ^4He , über Neutronenstreuexperimente an flüssigen Legierungen besprochen, soweit sie für das Rotonen-Verhalten in amorphen Festkörpern aufschlußreich sind. Ebenso werden wichtige experimentelle und theoretische Arbeiten zu rotonenähnlichen Anregungen in amorphen Ferromagneten und amorphen Festkörpern besprochen.

Die Theorie der Quantenflüssigkeiten wurde 1941 von L.D. Landau, unmittelbar nach der Entdeckung der Suprafluidität von ^4He unterhalb $T_\lambda = 2.8\text{K}$ durch P.L.Kapitza entwickelt [28]. Im Rahmen dieser Theorie schlug Landau 1947 die unten beschriebene Form der Dispersionsrelation der Elementaranregungen in ^4He vor und stellte den Zusammenhang zwischen dem Rotonen-Minimum und der Anstiegsflanke des Super-Debye-Beitrages zur spezifischen Wärme (excess specific heat) heraus. Die Dispersionsrelation ist aus Neutronenstreuexperimenten bekannt [66]: Auf einen linearen Anstieg mit der Schallgeschwindigkeit $u = 240\frac{\text{m}}{\text{s}}$ und das Durchlaufen eines Maximums folgt das Rotonen-Minimum der Form $\varepsilon(Q)|_{q \approx q_1} = E_G + \frac{\hbar^2(Q-q_1)^2}{2m^*}$, mit $q_1 = 1.9\text{\AA}^{-1}$, $E_G = 0.75\text{meV}$ und

$m^* = 0.16 m_{4\text{He}}$.

Nach Feynman ist der Zusammenhang der Dispersionsrelation mit dem statischen Strukturfaktor für den gesamten Wellenzahlbereich näherungsweise gegeben durch $\varepsilon(q) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m^* S(q)}$ und die Rotonen gleichen torusförmigen Wirbelringen ([67], s. a. [68]). Laut Wyatt haben Rotonen als Wellenpakete eine Lebensdauer $\tau \lesssim 1$ ms [69]. Boharty entwickelte eine „spezielle Relativitätstheorie¹“ für die Rotonen mit der „effektiven Rotonen-Ruhemasse“ $m_{\text{Roton}} = \frac{E_G}{u^2}$, wobei $m_{\text{Roton}} = 0.32 m_{4\text{He}}$ folgt [70]. Galli et al. [68] und Moroni [71] berechneten das Rotonen-Minimum mit Hilfe von „Schatten-Wellenfunktionen“ und fanden die Gap-Energie in guter Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten. Dalfovo et al. [72], [73] erhielten für die Dispersionsrelation $\varepsilon(q) = \hbar q / \left(m_{4\text{He}} \int_0^\infty d\omega S(q, \omega) (\hbar\omega)^{-1} \right)^{\frac{1}{2}}$ aus der Dichte-Funktional-Theorie, in Verbesserung des Ergebnisses von Feynman.

Die Dispersionsrelation der Elementaranregungen in vielen flüssigen Legierungen besitzt ein Rotonen-Minimum, dessen Lage mit dem FSDP des statischen Strukturfaktors zusammenfällt. Eine Reihe flüssiger Legierungen (u.a. NiGe, Rb_{100-x}Sb_x, flüssiges Rb) wurden in Neutronenstreuexperimenten untersucht ([74] - [78]). Aus dem dynamischen Strukturfaktor $S(q, \omega)$ erhält man das n -te mittlere Moment der Frequenz ω durch $\langle \omega^n \rangle = \int_0^\infty d\omega S(q = \text{const.}, \omega) \omega^n$ und für die isotherme Dispersionsrelation folgt für das zweite Moment $\omega_0^2(q) = \frac{k_B T}{M} \frac{q^2}{S(q)}$, mit M als der Teilchenmasse, in Analogie zum Feynman'schen Ergebnis für ⁴He.

In Flüssigkeiten sind, im Unterschied zu amorphen Festkörpern, Platzwechsel der Atome möglich, es existiert also keine statische Struktur. Daher ist $\hbar k$ ein tatsächlicher Impuls, während in Festkörpern die Struktur statisch ist und $\hbar k$ einen Quasi-Impuls darstellt.

Die erste Messung des Magnon-Rotonen-Minimums erfolgte 1975 an amorphem ferromagnetischem Co₄P [79] mittels inelastischer Neutronenstreuung. Das Rotonen-Minimum tritt bei $q_1 = 3.13 \text{ \AA}^{-1}$ mit der Magnon-Rotonen-Gap-Energie $E_G = 34 \text{ meV}$ auf. In Analogie zu Feynman folgt für den Zusammenhang zwischen dem statischen Strukturfaktor $S(q)$ und der Dispersionsrelation: $\varepsilon(q) \sim \frac{q^2}{2m^* S(q)}$ mit dem (zunächst unbekanntem) Parameter m^* . In Fe₇₅P₁₅C₁₀ wurden mittels inelastischer Neutronenstreuung in TOF- (Time-of-Flight-) Messungen der statische Strukturfaktor $S(q)$ im FSDP-Bereich und die Dispersionsrelation der Magnonen und der Magnon-Rotonen ermittelt, wobei das Minimum $E_G = 19.1 \text{ meV}$ bei $q_1 = 3.05 \text{ \AA}^{-1}$ auftritt [80].

Unter den zweikomponentigen (binären) amorphen Legierungen ist α -Mg₇₀Zn₃₀ eine der am eingehendsten untersuchten Substanzen ([81] - [34]). Die Legierung kann recht einfach aus der Schmelze gesponnen werden. Darüber hinaus sind die Streulängen von Mg und Zn ungefähr gleich ($b_{\text{Mg}} = 5.38 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, $b_{\text{Zn}} = 5.65 \cdot 10^{-15} \text{ m}$) und der kohärente Streuanteil beträgt 98% der gesamten Streuintensität.

Aus elastischen Neutronenstremessungen erhält man den statischen Strukturfaktor, dessen erstes scharfes Maximum bei $q_1 = 2.8 \text{ \AA}^{-1}$ liegt. Aus inelastischen Neutronenstreu-(NIS-) Messungen erhielten Suck et al. [82] das Rotonen-Minimum für transversal polarisierte phononische Anregungen (Phonon-Rotonen). Die Dispersionsrelation für longitudinale Anregungen ist in nachfolgenden Arbeiten für den Wellenzahlbereich $0.6 \text{ \AA}^{-1} \leq q \leq 3.1 \text{ \AA}^{-1}$ mit Hilfe von Neutronen-Brillouin-Streuungs-(NBS-) Experimenten gemessen worden [33], [34], [83].

Außer Mg₇₀Zn₃₀ wurden noch die binären amorphen Legierungen Fe₈₅B₁₅ und Ni₆₇Zr₃₃ untersucht. In Fe₈₅B₁₅ war es jedoch nicht möglich, eine Aussage über die Existenz einer Rotonen-Gap-Energie zu treffen [84]. Bei Ni₆₇Zr₃₃ hingegen liegt bei der FSDP-Wellenzahl $q_1 \approx 3.07 \text{ \AA}^{-1}$ das Rotonen-Minimum

¹Theorie analog zur Einsteinschen speziellen Relativitätstheorie mit Rotonen als massiven Teilchen und Phononen als Austauschquanten, die Energie und Information zwischen den Rotonen übermitteln.

bei $E_G = 15.1$ meV [85].

Neutronen koppeln innerhalb der ersten Debye-Kugel nur an longitudinale Phononen direkt, außerhalb der ersten Debye-Kugel hingegen über „Umklapp“ - artige Prozesse an transversale Anregungen [81]. Im Wellenzahlbereich um den FSDP herrscht die Wechselwirkung der Neutronen mit transversalen Anregungen vor, so daß es sich bei den beobachteten Anregungen zumindest teilweise um transversal polarisierte Phonon-Rotonen handelt [81]. Da keine weiteren Anregungen beobachtet werden, kommt es anscheinend durch die Struktur amorpher Festkörper zur Superposition der Moden.

Einen interessanten experimentellen Hinweis auf die Eigenschaften von Phonon-Rotonen fand Häussler in einer Untersuchung der Auswirkungen der Phonon-Rotonen auf die elektronischen Transporteigenschaften [86]. Die Elektronen können demnach -außer der elastischen Umklapp-Streuung an der statischen Struktur- oberhalb einer bestimmten Temperatur T_0 inelastische Umklapp-Streuung mit den Rotonen erfahren.

Für die theoretische Behandlung der (Magnon-und Phonon-) Rotonen wurde eine Reihe von Methoden entwickelt. Takahashi und Shimizu erhielten die Energie der Magnonen und Magnon-Rotonen aus einem Testfunktionen-Ansatz der Form

$$\begin{aligned} |\vec{q}\rangle &= \sum_l e^{-i\vec{q}\vec{r}_l} |l\rangle; & |\vec{q}| \rightarrow 0, \text{ langwellige Magnonen} \\ |\vec{q}\rangle &= \sum_l f(l) e^{-i(q-q_1)\frac{\vec{q}}{q}\vec{r}_l} |l\rangle; & |\vec{q}| \approx q_1, \text{ Magnon-Rotonen} \end{aligned}$$

mit Hilfe der Ortswellenfunktionen $|l\rangle$ der an den Orten \vec{r}_l sitzenden magnetischen Atome [87]. Im Bereich des Rotonen-Minimums folgt für die Dispersionsrelation näherungsweise

$$\varepsilon(q) = E_G + D (q - q_1)^2; \quad q \approx q_1$$

mit der Stiffnesskonstanten D für langwellige Magnonen. Der so erhaltene Ansatz berücksichtigt insbesondere die Nahordnung der magnetischen Atome. Handrich entwickelte anhand der Magnon-Rotonen ein physikalisches Bild der Rotonen, das auch für Phonon-Rotonen Anwendung findet [1], [88]. Es wurde ein direkter Zusammenhang zwischen der Lage des Minimums bei q_1 (hier hat der statische Strukturfaktor sein erstes ausgeprägtes Maximum mit der Breite Δq) und der Gap-Energie E_G gefunden:

$$E_G^{(m)} = \alpha D (\Delta q)^2, \quad \alpha \approx 1$$

Die Übertragung auf Phonon-Rotonen liefert

$$\left(E_G^{(ph)}\right)^2 = \alpha \hbar^2 u^2 (\Delta q)^2, \quad \alpha \approx 1$$

mit der Schallgeschwindigkeit u , so daß für die Dispersionsrelation der Magnon-bzw. Phonon-Rotonen im Bereich des Rotonen-Minimums :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(m)}(q) &= E_G^{(m)} + D (q - q_1)^2, & q \approx q_1, \text{ für Magnon-Rotonen} \\ \varepsilon^{(ph)}(q) &= \sqrt{\left(E_G^{(ph)}\right)^2 + \hbar^2 u^2 (q - q_1)^2}, & q \approx q_1, \text{ für Phonon-Rotonen} \end{aligned}$$

folgt. In Abb.(1.1) ist eine transversal polarisierte Phononen-Mode mit der Wellenlänge des interatomaren Abstandes a dargestellt.

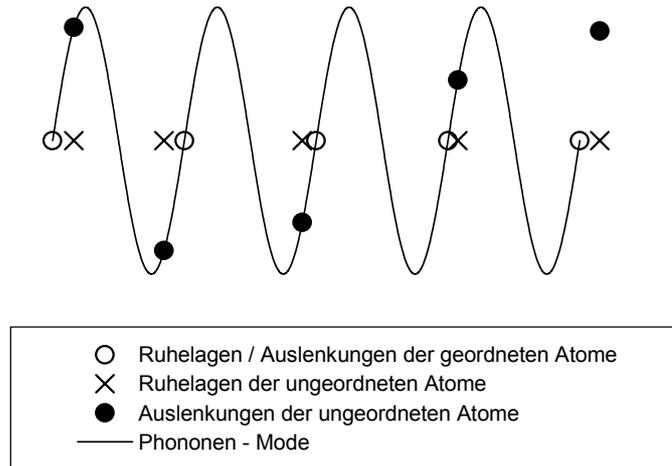


Abbildung 1.1: Physikalisches Bild der Rotonen am Beispiel einer transversal polarisierte Phononen- Mode in kristallinen und amorphen Festkörpern. Im geordneten Kristall (offene Symbole) besitzt die Anregung die Energie $E(q = q_1) = 0$. Im amorphen Festkörper entsteht eine Gap- Energie aufgrund der Auslenkung der durch den „Misfit“ an den „falschen“ Stellen (Kreuze) sitzenden Atome (geschlossene Symbole).

In kristallinen Festkörpern ist die dargestellte Anregung mit der Energie $E|_{q=q_1} = 0$ und bei Impulsübertrag durch einen Umklapp-Prozeß auf den gesamten Kristall möglich. In amorphen Festkörpern hingegen sitzen die Atome an den „falschen Stellen“ („Misfit“), sie sind „quasi ausgelenkt“. Eine Mode mit der Wellenzahl q_1 trifft auf diese „ausgelenkten“ Atome mit der „falschen“, energetisch ungünstigeren Schwingungsphase. Die Auslenkungen benötigen Energie, die für die Bildung von (langwelligen) Kompensationsanregungen (-phononen bzw. -magnonen) erforderlich ist, während die Hauptmode q_1 mit der Energie $E = 0$ propagiert und, durch Umklapp-Prozesse, der Impuls $\hbar q_1$ auf den Festkörper übertragen wird. Die Kompensationsanregungen begleiten als „Wolke“ die Hauptmode der Anregung und kompensieren die Variation der Nächste-Nachbar-(NN-) Abstände. Die Hauptmode und die begleitenden Kompensationsanregungen bilden das Roton als Wellenpaket, dessen Wellenzahlbreite (im Rotonen-Minimum) der Breite Δq des ersten scharfen Peaks des statischen Strukturfaktors entspricht. Dieses Bild erklärt auch das Auftreten des Energieminimums gerade bei jenem q_1 , bei dem der statische Strukturfaktor einen scharfen Peak aufweist.

Struktur und Dynamik (phononische Anregungen) ein-oder zweikomponentiger amorpher Legierungen sind im FSDP-Bereich für Simulationen leichter zugänglich als im langwelligen Bereich [35], da bereits geringe Teilchenzahlen ($N \gtrsim 800$) zu guten Ergebnissen führen. Kashirin erhielt die radiale Verteilungsfunktion $g(r)$ aus einer Simulationsrechnung mit Paarpotentialen aus dem Ballog- und aus dem Morse-Modell für amorphes Cu [38]. Nach Takeno und Goda [37] folgt daraus die Aufspaltung der Phononen-Dispersionsrelation in longitudinale und transversale Zweige. Der longitudinale Zweig zeigt für beide Modellpotentiale ein Rotonen-Minimum bei $q_1 = 2.8 \text{ \AA}^{-1}$ mit $E_G = 0.65 \hbar \omega_{L,\max}$

(Ballog-Modell) beziehungsweise bei $q_1 = 3.05 \text{ \AA}^{-1}$ mit $E_G = 0.5 \hbar\omega_{L,\max}$ (Morse-Modell). Hafner [35] simulierte die amorphe Legierung $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$ in einem 800-Teilchen-Cluster, relaxiert aus dodekaederförmigen Elementarzellen mit Pseudo-Potential-Ansatz. Die so erhaltene Dispersionsrelation zeigt ein Minimum für longitudinale Elementaranregungen bei $q_1 = 2.6 \text{ \AA}^{-1}$ mit einer Rotonen-Gap-Energie $E_G = 15 \text{ meV}$. Bei transversal polarisierten Anregungen tritt hingegen keine ausgeprägte Dispersion auf. Das Minimum wird durch das Auftreten „diffuser Umklapp-Prozesse“ interpretiert, bei welchen der FSDP als „verbreiteter Bragg-Reflex“ wirkt. Sato et al. benutzten die analytische Methode von Takeno und Goda [37] in quasi-kristalliner Näherung mit OPW-Potentialen für $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$ [40]. Sie erhielten die Aufspaltung der Phononen-Dispersionsrelation in akustische sowie in longitudinale und zweifach entartete transversal polarisierte „optische“ Zweige. Die Computersimulation aus einem 1000-Teilchen-Cluster mit Hilfe der verwendeten Potentiale in Störungsrechnung in zweiter Ordnung ergab die Bestätigung der analytischen Ergebnisse für den akustischen Zweig, während beim „optischen“ Zweig die analytische Näherung und die Simulationsergebnisse voneinander abweichen. Der akustische Zweig zeigt kein Minimum, während der optische Zweig nach beiden Methoden ein deutliches Minimum aufweist. Der Vergleich dieser Resultate mit den Ergebnissen von Suck [82] zeigt jedoch deutliche Unterschiede. Hafner et al. [47] untersuchten die Dispersionsrelation und die Zustandsdichte in Computer-Simulationsrechnungen für amorphes $\text{Ni}_{100-x}\text{Zr}_x$. Sie erhielten den statischen Strukturfaktor $S(q)$ und den dynamischen Strukturfaktor $S(q, \omega)$ aus einem 2916-Teilchen-Modell sowie die Dispersionsrelation $\varepsilon(q)$ und die Zustandsdichte $g(\omega)$ aus einem 729-Teilchen-Modell. Die Zustandsdichte $\frac{g(\omega)}{\omega^2}$ zeigt einen Peak bei $\hbar\omega \approx 2 \text{ meV}$, der als „Bosonen-Peak“ identifiziert wird. Die Dispersionsrelation von $\text{Ni}_{50}\text{Zr}_{50}$ zeigt ein Rotonen-Minimum der Form $\varepsilon(q) = \sqrt{E_G^2 + \hbar^2 u^2 (q - q_1)^2}$ mit $E_G \approx 13 \text{ meV}$ für longitudinale Polarisation, welches mit dem Ergebnis diffuser Umklapp-Prozesse gut übereinstimmt. Weiterhin existiert neben dem akustischen (Teilchenzahl-Teilchenzahl-) Phononen-Zweig für $q \leq \frac{q_1}{2}$ ein „optischer“ (Konzentrations-Konzentrations-) Zweig. In einer weiteren Arbeit wurden amorphe $\text{Ni}_{100-x}\text{Zr}_x$ - und $\text{Fe}_{100-x}\text{B}_x$ -Legierungen untersucht, wobei die Formierung von „Pseudo-Brillouin-Zonen“ mit dem FSDP als „verbreitertem Bragg-Reflex“ festgestellt wurde [89]. Hier durchlaufen die akustischen Moden bei q_1 ein „diffuses Umklapp-Minimum“, während die optischen Fluktuationen bei $\frac{q_1}{2}$ (dem Rand der Pseudo-Brillouin-Zone) ein Minimum aufweisen. Eine molekulardynamische Simulationsrechnung von Aihara et al. an $\alpha\text{-Zr}_{67}\text{Ni}_{33}$ erfolgte mit Hilfe der Nose-Methode unter Einbeziehung des thermische Ausdehnungskoeffizienten [90]. Aus den Maxima des Bhatia-Thornton-Spektrums folgt die Aufspaltung der Dispersionsbeziehung in longitudinal und transversal polarisierte Anregungen. Die longitudinal polarisierten Moden zeigen ein deutliches (Rotonen-) Minimum bei $q_1 \approx 2.2 \text{ \AA}^{-1}$ mit $E_G \approx 10 \text{ meV}$.

Handrich und Resch ([41], [91]) berechneten die Dispersionsrelation langwelliger und rotonen-ähnlicher phononischer Anregungen aus dem Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus, indem sie die k -Integration über einen erweiterten Wellenzahlvektor-Bereich ausdehnten. Die Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände wurde durch die Einführung von Gewichtsfunktionen berücksichtigt. Die Dispersionsrelation zeigt ein Rotonen-Minimum, dessen Gap-Energie E_G in Zusammenhang mit der Breite Δq des FSDP steht. Die Ergebnisse konnten jedoch nicht reproduziert werden. Aus der strukturgemittelten Greenfunktion folgt die Zustandsdichte der phononischen Anregungen (Phononen und Phonon-Rotonen). Mit der so berechneten Erhöhung der Zustandsdichte folgt der Super-Debye-Beitrag zur spezifischen Wärme oberhalb $T \gtrsim 1K$. Dieser zusätzliche Beitrag zur spezifischen Wärme ist eine gemeinsame Eigenschaft der meisten amorphen Festkörper.

Bei sehr tiefen Temperaturen besitzen amorphe Festkörper eine spezifische Wärme proportional zur Temperatur T ($C_V \sim T$). Dieser Beitrag wird im allgemeinen durch das Zwei-Niveau-Systeme-Modell oder das Tunnel-Modell von Anderson [57] und Phillips [58] erklärt. Bei Temperaturen oberhalb $T \gtrsim 1K$ tritt der Super-Debye-Beitrag als Peak in $\frac{C_V}{T^3}$ auf, der auf eine Erhöhung der Zustandsdichte

$g(\omega)$ für $\omega \gtrsim 4$ meV zurückzuführen ist. Zhu et al. bestimmten C_V und die Wärmeleitfähigkeit κ im Plateau-Bereich für verdichtetes amorphes α -SiO₂ [92]. Das Plateau in κ und der Peak des Super-Debye-Beitrages liegen im gleichen Temperatur-Bereich, so daß der gleiche Mechanismus für beide Effekte zugrunde liegen sollte. Zhernov et al. untersuchten die spezifische Wärme C_V für die amorphen Legierungen Zr₇₅Rb₂₅, Zr₆₇Cu₃₃ und Zr₇₀Be₃₀. Die Zunahme der Zustandsdichte als Ursache für den Super-Debye-Beitrag wird mit intrinsischen Leerstellen (interstices) erklärt. Sokolov et al. maßen C_V für amorphes α -SiO₂ und amorphes CaK(NO₃) (CKN-Glas) [93]. Sie vermuteten, daß die Zunahme der Zustandsdichte auf Streuung der Phononen an Dichte-Fluktuationen in ungeordneten Systemen (Inhomogenitäten) zurückzuführen sei. Laut D'Angelo nehmen die zusätzlichen niederenergetischen Vibrationsmoden, die die Ursache für den Super-Debye-Beitrag seien, mit zunehmender Kristallinität ab [94]. Talon et al. [95] und Bartolotta [96] diskutierten den Peak in $\frac{C_V}{T^3}$ als Konsequenz des Bosonen-Peaks in der Zustandsdichte $\frac{g(\omega)}{\omega^2}$.

Die Existenz des Rotonen-Minimums ist nach den oben angeführten Arbeiten etabliert. In amorphen Festkörpern entsteht das Minimum der Dispersionsrelation bei gleichzeitig auftretendem ersten scharfen Peak des statischen Strukturfaktors aufgrund von diffusen Umklapp-Prozessen. Die Polarisation der Phonon-Rotonen ist allerdings letztlich ungeklärt. Während bei Simulationsrechnungen die Dispersionsrelation für transversale Moden bei vergleichsweise hoher Energie (verglichen mit longitudinalen Moden) verläuft, tritt diese in den Messungen nicht auf, obwohl die Suszeptibilität für transversale Anregungen dominiert. Weiterhin ist das Rotonen-Minimum ein verbreiteter Effekt in amorphen Festkörpern, wie oben dargelegt wurde. Eine schlüssige Erklärung dafür, daß lediglich die transversal polarisierten phononischen Anregungen kein Rotonen-Minimum aufweisen, gibt es nicht. Es ist jedoch vorstellbar, daß die kurzwelligen Moden nicht mehr in rein polarisierter Form vorliegen. Langwellige Phononen „spüren“ ein homogenes effektives Medium, in dem die Dichte fluktuiert und behalten somit ihre Polarisation bei. Bei Anregungen mit kurzer Wellenlänge kann die nahe Umgebung Einfluß auf das Polarisationsverhalten haben. Durch Schraubversetzungen oder „Ausweichen“ einzelner Atome bei der Auslenkung können beispielsweise longitudinale Anregungen eine transversale Komponente erhalten. Im folgenden werden daher Debye-Phononen und -Rotonen behandelt, wodurch auch gemischte Zustände näherungsweise eingeschlossen sind.

Zusammenfassend kann man feststellen, daß viele verschiedene Interpretationen des Rotonen-Minimums existieren, jedoch bislang keine davon voll befriedigen kann.

Das Hauptaugenmerk in der vorliegenden Arbeit liegt auf den Konsequenzen der amorphen statischen Struktur auf die langwelligen und rotonenähnlichen magnetischen und phononischen Elementaranregungen. Die Informationen über die statische Struktur erhalten wir aus dem statischen Strukturfaktor $S(q)$, wie er in vielen Streuexperimenten gemessen wurde. Dabei wird durch geeignete Fits der Meßergebnisse die Struktur realer amorpher Festkörper in der Theorie berücksichtigt. Die vorliegende Arbeit ist in folgender Weise aufgebaut:

In Kapitel 2 wird die Behandlung der amorphen Struktur beschrieben. Die langwelligen und kurzwelligen Struktureigenschaften amorpher Festkörper werden getrennt voneinander behandelt. Der statische Strukturfaktor wird durch geeignete Modellfunktionen in den beiden Bereichen gefittet und die resultierenden Eigenschaften im Ortsraum (die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion im langreichweitigen Bereich und die radiale Verteilungsfunktion im Bereich der Nahordnung) beschrieben.

Die Verbesserung des Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus (MKF) durch Handrich [1] (s.a. [97], [98]) bezieht von Beginn an die strukturelle Nahordnung und Fernordnung ein. In Kapitel 3.1 werden, gemäß dem MKF [24] die retardierte Greenfunktion für amorphe Ferromagnete hergeleitet sowie die Verbesserung des MKF [1] zur Berechnung der Magnonen-Energie in quasi-kristalliner Näherung herangezogen. Schließlich werden mit der Magnonen-Energie in *verbesselter* quasi-kristalliner Näherung als Startpunkt aus der Greenfunktion die Dämpfung und die Renormierung der Magnonen-Energie

für die verschiedenen Modellfunktionen aus Abschnitt 2.1 berechnet.

In Kapitel 3.2 wird der Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus (MKF), der für Magnonen in amorphen Ferromagneten entwickelt wurde [24], auf die Phononen in amorphen Festkörpern angewendet. In einem ersten Schritt wird die quasi-kristalline Näherung zur Entkoppelung von longitudinalen und transversalen akustischen Phononen verwendet. Im langwelligen Grenzfall wird die Dispersionsbeziehung in verbesserter quasi-kristalliner Näherung dann als Startnäherung für die strukturgemittelte Greenfunktion $\langle G_{qq'}(E) \rangle$ benutzt. Diese enthält den statischen Strukturfaktor im langwelligen Bereich $S(q)$ in erster Ordnung und liefert die Phononen-Selbstenergie in bekannter Weise. Aus den Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor im langwelligen Bereich erhält man die Dämpfung und die renormierte Phononen-Dispersionsrelation.

In Kapitel 3.3 werden die Zustandsdichten langwelliger Magnonen und akustischer Phononen in einem Kontinuum mit schwachen, ausgedehnten Inhomogenitäten behandelt, wie sie durch den statischen Strukturfaktor im langwelligen Bereich repräsentiert werden. Man erhält die Zustandsdichte $D^{(m)}(E)$ für Magnonen und $D^{(ph)}(\omega)$ für Phononen aus der jeweiligen strukturgemittelten Greenfunktion $\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(m)}(E) \rangle$ bzw. $\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(ph)}(\omega) \rangle$, die aus dem Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus (MKF) folgt [98] [99] (s.a. [100]). Zusätzlich zur Zustandsdichte der Magnonen bzw. Phononen in einem homogenen Kontinuum mit renormierter Selbstenergie entstehen weitere Beiträge zur Zustandsdichte aufgrund der Inhomogenitäten. Die Gesamtzahl der Zustände ist genau dann erhalten, wenn alle Beiträge zur Zustandsdichte berücksichtigt werden. Mit Hilfe der in Kapitel 2 vorgestellten Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor folgen die relativen Änderungen der Zustandsdichte aufgrund der Inhomogenitäten und aufgrund der Amorphen. Letztere sind eine neue Art von Elementaranregungen in amorphen Systemen, die hauptsächlich zu einer Erhöhung der Zustandsdichte im niederenergetischen Bereich beitragen. Die räumliche Korrelation von Magnon- und Phonon-Amorphen, die aus der Fourier-Transformation der Greenfunktionen $\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(m)}(E) \rangle$ und $\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(ph)}(\omega) \rangle$ folgt, liefert spezifische Eigenschaften der Amorphen, insbesondere im Grenzfall für kleine Energien. In diesem Grenzfall sind die Amorphen an die Dichtefluktuationen lokalisiert, im Gegensatz zu den gewöhnlichen Elementaranregungen, die im gesamten Energiebereich räumlich ausgedehnt sind.

Die Behandlung der Wärmeleitfähigkeit beginnen wir mit der Berechnung der Stoßfrequenz $\frac{1}{\tau_q}$ und der mittleren freien Weglänge $\Lambda_q = u_q \tau_q$ für langwellige Magnonen und Phononen aus dem statischen Strukturfaktor im langwelligen Bereich. Die Berechnung von \varkappa erfolgt mit der verallgemeinerten Debye-Formel $\varkappa = \frac{1}{3} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} c_q u_q \Lambda_q$ für Magnonen- und Phononen-Systeme mit dem Beitrag c_q des \vec{q} -ten Zustandes zur Wärmekapazität, seiner Gruppengeschwindigkeit u_q und der mittleren freien Weglänge Λ_q . Bei langwelligen Phononen, die ausschließlich der Rayleigh-Streuung unterliegen, kommt es für $q \rightarrow 0$ zu quadratischer ($\sim q^{-2}$) Divergenz des Integranden in der verallgemeinerten Debye-Formel. Diese Divergenz tritt bei Magnonen-Systemen nicht auf. Klemens ([101], zit. in [63]) schlug vor, die Divergenz dadurch zu heben, daß Phononen mit mittlerer freier Weglänge $\Lambda_q^{(ph)} \geq \Lambda_{\vec{q}}^{(ph)}$ (mit $\vec{q} = \frac{k_B T}{\hbar u}$, k_B : Boltzmann-Konstante) nur mit $\Lambda_{\vec{q}}^{(ph)}$ zu berücksichtigen sind. Alternativ kann für Magnonen und Phononen der Wärmewiderstand ρ nach Ziman berechnet werden, dessen Inverses ρ^{-1} eine untere Grenze für die Wärmeleitfähigkeit \varkappa ist [63]. Es folgt die Berechnung des Magnonenbeitrages zur Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(m)}$ und des Wärmewiderstandes $\rho^{(m)}$ zum Vergleich. Als weitere untere Grenze für $\varkappa^{(m)}$ wird $\varkappa_K^{(m)}$ nach dem Vorschlag von Klemens berechnet. Aus der Debye-Formel folgt die Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(ph)}$ in der Näherung für hohe Temperaturen ($T \approx \Theta_D$, Θ_D : Debye-Temperatur für einkomponentige Festkörper) und für mittlere Temperaturen ($\frac{\hbar u \kappa}{k_B} \ll T < \Theta_D$, κ : reziproke Korrelationslänge, s.u.). Ferner wird für Phononen der Wärmewiderstand $\rho^{(ph)}$ nach Ziman und die Wärmeleitfähigkeit $\varkappa_K^{(ph)}$ nach Klemens berechnet. Der Gesamtverlauf der Wärmeleitfähigkeit

$\chi^{(ph)}$ wird anhand der vorhandenen Näherungen für Phononen-Systeme diskutiert und der Phononen- und Magnonen-Beitrag verglichen.

Die Behandlung der rotonenähnlichen Elementaranregungen erfolgt in Kapitel 4. In einer semi-quantitativen Theorie werden die Rotonen als Wellenpakete behandelt und die Energie des Rotonen-Minimums näherungsweise berechnet. Die Lage und der Verlauf der Rotonen-Minima werden im folgenden anhand der vorhandenen Daten des statischen Strukturfaktors für eine Reihe von amorphen Ferromagneten und amorphen Festkörpern in der semiquantitativen Theorie berechnet und die Ergebnisse mit den verfügbaren Daten für das Rotonen-Minimum verglichen, wobei man befriedigende Übereinstimmung erhält. Aus dem Minimum der Phonon-Rotonen-Dispersionsrelation wird unter Beachtung der Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände der Super-Debye-Beitrag zur spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen ($T \gtrsim 1\text{K}$) berechnet. Gesammelte Daten der spezifischen Wärme einer Reihe amorpher Festkörper dienen zur Berechnung der Rotonen-Gap-Energie. Die semiquantitative Berechnung der Rotonen-Dispersionsrelation und Berechnung des Super-Debye-Beitrages der spezifischen Wärme stützen das Rotonen-Konzept in amorphen Festkörpern.

Abschließend werden die Ergebnisse zusammengefaßt und ein Ausblick auf weiterführende Aspekte der vorliegenden Arbeit gegeben.

Kapitel 2

Behandlung der strukturellen Unordnung

Ein zentrales Problem bei der theoretischen Behandlung amorpher Festkörper ist die Berücksichtigung der amorphen Struktur. Wesentliche Strukturinformationen können aus dem statischen Strukturfaktor gewonnen werden, der in Neutronen- und Röntgenstreuexperimenten für viele amorphe Ferromagneten und amorphe Festkörper gemessen wurde.

In diesem Kapitel soll die Behandlung der amorphen Struktur, wie sie in die Theorie eingeht, besprochen werden. Die benötigten Beziehungen werden eingeführt und der statische Strukturfaktor wird anhand geeigneter Modellfunktionen gefittet. Auf diese Weise wird die Einbeziehung von Ergebnissen experimenteller Strukturuntersuchungen und damit die Struktureigenschaften realer amorpher Festkörper in die Theorie gewährleistet.

Zunächst wird die wichtige Strukturfunktion

$$\rho(\vec{q} - \vec{q}') \equiv \frac{1}{N} \sum_i e^{-i(\vec{q} - \vec{q}')\vec{r}_i} \quad (2.1)$$

eingeführt, wobei N die Anzahl und \vec{r}_i die Lagen der Teilchen bedeuten. Ihr Strukturmittelwert ist durch

$$\langle \rho(\vec{q} - \vec{q}') \rangle = \delta_{\vec{q}\vec{q}'}$$

gegeben. Es ist zweckmäßig (vgl. [24], s.a. [98], [99], Abschn. 3.1.1, 3.2.1), $\rho(\vec{q} - \vec{q}')$ in den Strukturmittelwert $\delta_{\vec{q}\vec{q}'}$ und die strukturbedingten Fluktuationen $\rho_a(\vec{q} - \vec{q}')$ aufzuspalten:

$$\rho(\vec{q} - \vec{q}') \equiv \delta_{\vec{q}\vec{q}'} + \rho_a(\vec{q} - \vec{q}'). \quad (2.2)$$

Man erhält für das zweite Moment von $\rho(\vec{q} - \vec{q}')$ nach der Strukturmittelung, bei Beachtung von $\langle \rho_a(\vec{q} - \vec{q}') \rangle = 0$, die Beziehung

$$\langle \rho(\vec{q} - \vec{q}') \rho(\vec{q}' - \vec{q}) \rangle = \delta_{\vec{q}\vec{q}'} + \langle \rho_a(\vec{q} - \vec{q}') \rho_a(\vec{q}' - \vec{q}) \rangle. \quad (2.3)$$

Der Ausdruck $\langle \rho_a(\vec{q} - \vec{q}') \rho_a(\vec{q}' - \vec{q}) \rangle$ ist gleich dem statischen Strukturfaktor $S(\vec{q} - \vec{q}')$ [24]:

$$\langle \rho_a(\vec{q} - \vec{q}') \rho_a(\vec{q}' - \vec{q}) \rangle = S(\vec{q} - \vec{q}') \quad (2.4)$$

Im statischen Strukturfaktor $S(q)$ findet die „Fernordnung“ im langwelligen und die Nahordnung im kurzwelligen Anteil ihren Niederschlag (Abb. 2.1). Der langwellige Bereich ($10^{-4} \text{ \AA}^{-1} \lesssim q \lesssim 10^{-1} \text{ \AA}^{-1}$) und der kurzwellige Bereich ($q \gtrsim 1.0 \text{ \AA}^{-1}$) werden im folgenden getrennt voneinander behandelt.

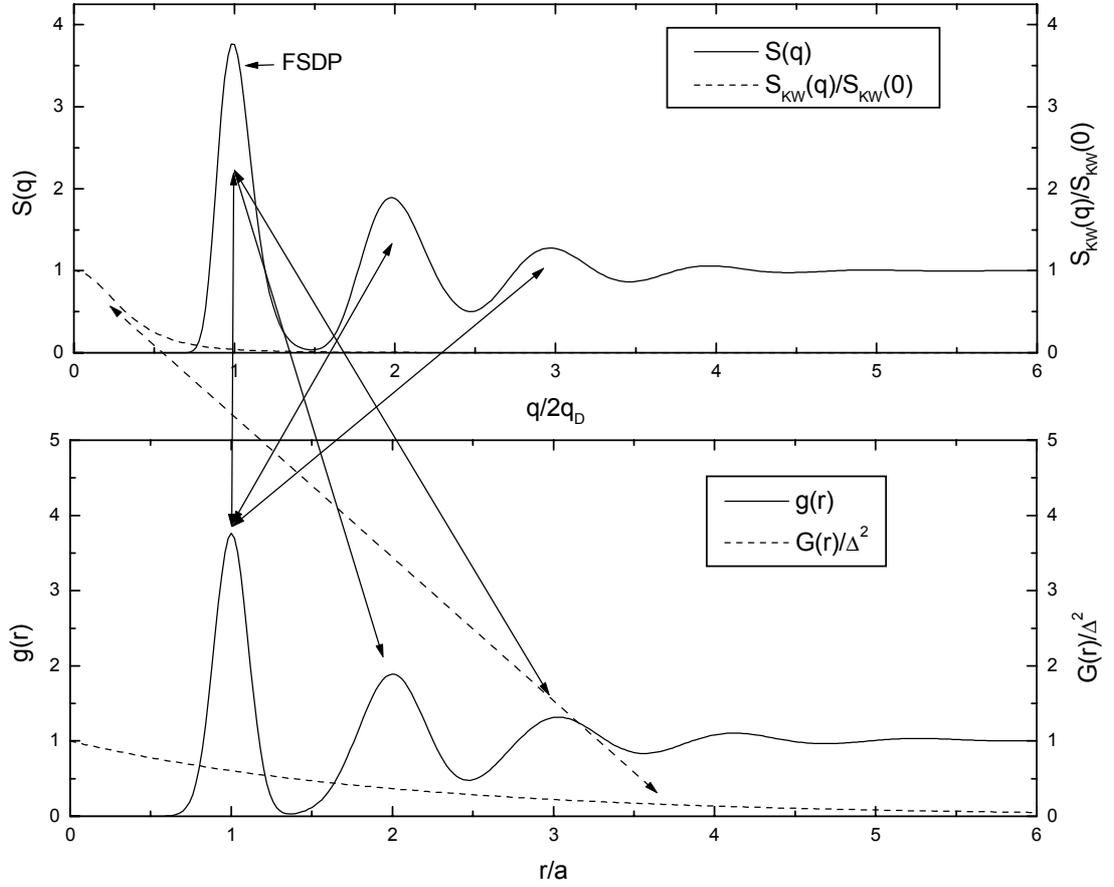


Abbildung 2.1: Aufteilung der Eigenschaften der statischen Struktur amorpher Festkörper in Fern- und Nahordnung. Während sich der Einfluß langreichweitiger Inhomogenitäten (ausgedrückt durch die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion $G(r)$ im statischen Strukturfaktor $S(q)$ im Kleinwinkelbereich niederschlägt (gestrichelte Linien), bestimmt die Nahordnung (ausgedrückt durch die radiale Verteilungsfunktion $g(r)$) den statischen Strukturfaktor im kurzwelligen Bereich. Dabei führt die quasi-Periodizität in $S(q)$ und $g(r)$ zur quasi-Periodizität der jeweils Fourier-transformierten Funktion.

Der langwellige Bereich repräsentiert den Einfluß schwacher, ausgedehnter Inhomogenitäten als Abweichungen $\Delta\rho(r)$ von der mittleren (Spin-) Dichte $\bar{\rho}$. Solche Inhomogenitäten werden im Ortsraum durch die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion $G(r)$ dargestellt

$$G(r) = \frac{1}{V} \int d^3u \frac{\Delta\rho(\vec{r} + \vec{u}) \Delta\rho(\vec{u})}{\bar{\rho}^2}. \quad (2.5)$$

V bedeutet das Volumen des Festkörpers. Der Zusammenhang zwischen der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion $G(r)$ und dem statischen Strukturfaktor im langwelligen Bereich $S_{lw}(q)$ ist durch die

Fouriertransformation

$$S_{lw}(\vec{q}) \equiv \frac{1}{V} \int \frac{d^3r}{(2\pi)^3} G(r) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \quad (2.6)$$

in bekannter Weise gegeben [102]. Die mittlere Stärke der Inhomogenitäten wird durch die mittlere quadratische Dichtefluktuation Δ^2 beschrieben:

$$\Delta^2 = G(0) = \frac{1}{V} \int d^3u \frac{\Delta\rho(\vec{u}) \Delta\rho(\vec{u})}{\bar{\rho}^2}. \quad (2.7)$$

Im kurzwelligen Bereich um das erste ausgeprägte Maximum des statischen Strukturformfaktors $1 \text{ \AA}^{-1} \lesssim q \lesssim 4 \text{ \AA}^{-1}$ hängt $S_{kw}(q)$ mit der Nahordnung in amorphen Festkörpern zusammen. Diese wird in isotropen Systemen durch die radiale Verteilungsfunktion $g(r)$ bestimmt. Insbesondere bestimmt die Lage des ersten ausgeprägten Maximums des statischen Strukturformfaktors den mittleren interatomaren Abstand, der durch das erste Maximum von $g(r)$ gegeben ist. Der Zusammenhang mit $S_{kw}(q)$ lautet

$$S_{kw}(q) - 1 = \int d^3r (g(r) - 1) e^{i\vec{q}\vec{r}}.$$

2.1 Modellfunktionen für den statischen Strukturformfaktor $S_{lw}(q)$ im langwelligen Bereich und für die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion

Streuexperimente zur Strukturuntersuchung amorpher Festkörper und Ferromagnete werden im langwelligen Bereich für $q \rightarrow 0$ sowie im Bereich des ersten scharfen Peaks des statischen Strukturformfaktors durchgeführt.

Untersuchungen des statischen Strukturformfaktors im langwelligen Bereich ($q \rightarrow 0$) sind dadurch begrenzt, daß die Messungen in unmittelbarer Nähe des transmittierten Primärstrahles durchgeführt werden müssen. Abb. 2.2 zeigt eine Zusammenstellung von Meßergebnissen für die Streuintensitäten im q -Bereich von $4 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1} \lesssim q \lesssim 0.26 \text{ \AA}^{-1}$ für eine Reihe amorpher Festkörper aus Neutronen- und Röntgenstreuexperimenten. Die Streuintensität für eine Reihe amorpher Ferromagnete ist in Abb. 2.3 dargestellt. Die Ähnlichkeit der Struktur der amorphen Festkörper einschließlich der ferromagnetischen Systeme ist deutlich erkennbar und gestattet eine gleichartige näherungsweise Beschreibung des statischen Strukturformfaktors durch Modellfunktionen. In den Abbildungen sind den Meßergebnissen die Modellfunktionen für den statischen Strukturformfaktor gegenübergestellt, wie sie sich aus den Fits (s.u.) ergeben.

Der starke Anstieg der Streuintensität im langwelligen Bereich $q \lesssim 10^{-1} \text{ \AA}^{-1}$ ist eine gemeinsame Eigenschaft einer großen Klasse amorpher Festkörper (z. B. amorphe Polymere, Gläser, schnell abgeschreckte amorphe metallische Legierungen, vgl. Abb. 2.2) und amorpher Ferromagnete (vgl. Abb. 2.3). In diesem q -Bereich kann der statische Strukturformfaktor $S(q)$ näherungsweise durch die Funktion

$$S_{lw}(q) = \frac{A}{(q^2 + \kappa^2)^{\frac{\nu}{2}}}, \quad \nu \gtrsim 3, (\kappa \text{ s. u.}) \quad (2.8)$$

modelliert werden. Der Anstieg von $S(q)$ zeigt die Existenz langreichweitiger Inhomogenitäten in amorphen Festkörpern als Abweichungen von der restlichen „Fernordnung“. Die Parameter A in (2.8)

und Δ^2 in (2.7) sind durch die Beziehung

$$\Delta^2 = A \frac{V \Gamma\left(\frac{\nu-3}{2}\right) \kappa^{\nu-3}}{N 8\pi^{3/2} \Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \quad (2.9)$$

verknüpft, mit $\Gamma(x)$ als der Gammafunktion mit reellem Argument x [98].

Die Modellfunktionen für $S_{lw}(k)$ (2.8) führen nach der Fourier-Transformation (2.6) für die verschiedenen ν auf

$$G(r) = \begin{cases} P_\nu(\kappa r) e^{-\kappa r}, & \nu \text{ gerade (Spezialfall)} \\ K_{(\nu-3)/2}(\kappa r), & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.10)$$

mit Polynomen $P_\nu(\kappa r)$, der Besselfunktion zweiter Art und n -ter Ordnung $K_n(\kappa r)$ und mit κ als reziproker charakteristischer Korrelationslänge von $G(r)$. Die vorliegenden Meßkurven der Streuintensitäten wurden anhand der Modellfunktionen gemäß (2.8) gefittet. Tabelle (2.1) zeigt eine Zusammenstellung der resultierenden Werte für ν , κ und Δ^2 für amorphe Festkörper und Tabelle (2.2) enthält die entsprechende Zusammenstellung für amorphe Ferromagnete. Der Parameter Δ^2 kann jedoch mangels geeigneter Absolutmessungen nicht immer ermittelt werden.

Die mittlere Stärke der Inhomogenitäten, repräsentiert durch die relative mittlere quadratische Dichtefluktuation, liegt im Bereich $\Delta^2 \lesssim 10^{-3}$. Die Auswirkungen solcher Inhomogenitäten auf die Eigenschaften langwelliger Elementaranregungen können somit als schwache Korrekturen näherungsweise mit einer Störungsrechnung beschrieben werden [24]. Die reziproke charakteristische Korrelationslänge κ ($\lesssim 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$) ist viel kleiner als der reziproke interatomare Abstand, repräsentiert durch die Debye-Wellenzahl $q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 \frac{N}{V}}$ ($\sim 1 \text{ \AA}^{-1}$). Für langwellige Elementaranregungen bestimmt daher κ die Wellenzahl-Skala.

In Tabelle (2.3) und Abb. 2.4 sind die Modellfunktionen für $S_{lw}(k)$ (gem. (2.8) und (2.9)) und $G(r)$ (gem. (2.10)) für die Werte $\nu = 3, \dots, 10$ gegenübergestellt.

Material	ν	$\kappa[\text{\AA}^{-1}]$	Δ^2
SiO ₂ [103]	6.0	$5.3 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-6}$
PMMA [104]	4.0	$7.3 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-5}$
EPON 218 [105]	4.4	$7.0 \cdot 10^{-4}$	$92 \cdot 10^{-4}$
Polycarbonat [106]	3.6	$4.3 \cdot 10^{-4}$	$3.8 \cdot 10^{-4}$
PET [107]	3.2	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$8.2 \cdot 10^{-4}$
EPON 828 TETA [105]	3.2	$5.4 \cdot 10^{-4}$	$5.2 \cdot 10^{-4}$
EPON 828 NMA [105]	3.0	$9.5 \cdot 10^{-4}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$
PS [108]	4.0	$2.8 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$
PE [109]	6.0	$1.5 \cdot 10^{-3}$	$4.1 \cdot 10^{-3}$
10 mol% Cu-Al ₂ O ₃ [110]	4.4	$4.9 \cdot 10^{-3}$	
Zr _{41.2} Ti _{13.8} Cu _{12.5} Ni ₁₀ Be _{22.5} [111]	4.0	$1.8 \cdot 10^{-2}$	
Mg ₆₂ Cu ₂₅ Y ₁₀ Li ₃ [112]	4.0	$6.9 \cdot 10^{-3}$	

Tabelle 2.1: Fitparameter für die Meßergebnisse der Streuintensitäten aus Neutronen- und Röntgenstreuexperimenten an amorphen Festkörpern anhand der Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor gemäß (2.8) und (2.9), s.a. Abb. 2.2.

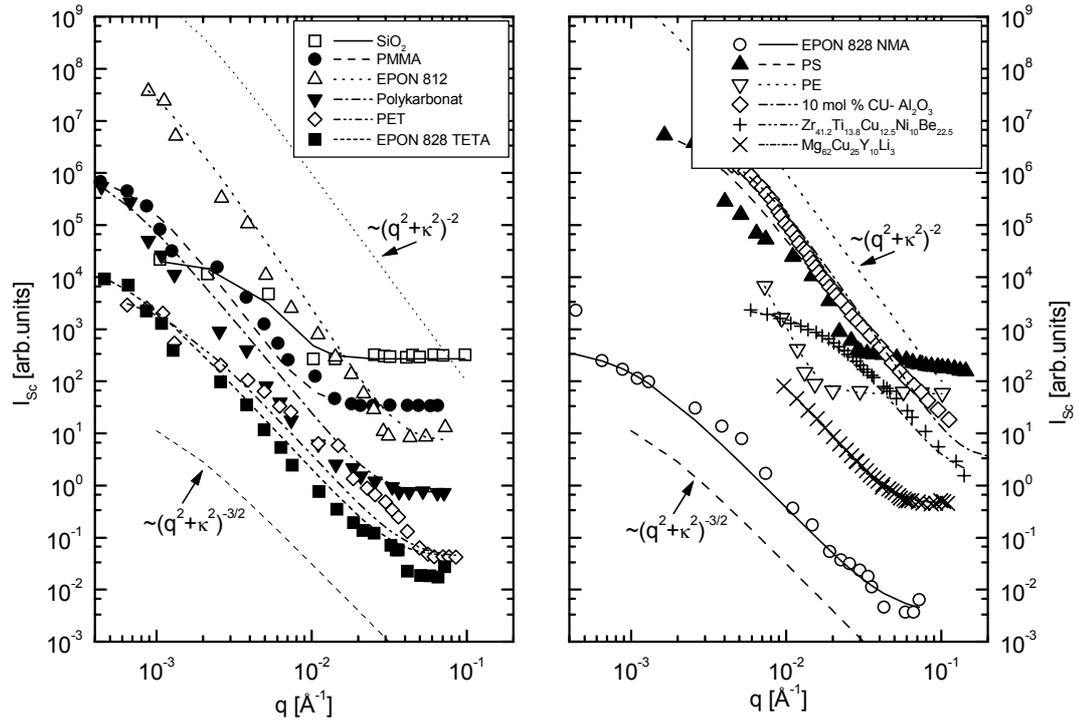


Abbildung 2.2: Meßdaten und Fits gemäß (2.8) der Streuintensitäten über $q[\text{\AA}^{-1}]$ im langwelligen Bereich ($10^{-3.5} \text{\AA}^{-1} < q < 10^{-1} \text{\AA}^{-1}$) für die in Tabelle 2.1 aufgeführten amorphen Festkörper. Die einzelnen Datensätze sind zur besseren Übersichtlichkeit gegeneinander verschoben. Es treten Parameter für die Steigung ν (gem. 2.8) von $\nu = 3.0$ bis $\nu = 6$ auf. Modellfunktionen (gem. 2.8) mit $\nu = 3$ (gestrichelte Linie) und $\nu = 4$ (Strich-Punkt) sind ebenfalls dargestellt.

Material	ν	$\kappa[\text{\AA}^{-1}]$
$\text{Fe}_{73.5}\text{Si}_{15.5}\text{B}_7\text{CuNb}_3$ [4]	4.4	$5.7 \cdot 10^{-2}$
$\text{Fe}_{73.5}\text{Si}_{13.5}\text{B}_9\text{CuNb}_3$ [7]	4.4	$1.8 \cdot 10^{-2}$
$\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ [9]	6.0	$< 10^{-4}$
$(\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35})_{0.89}\text{Mn}_{0.11}$ [113]	4.0	$1.5 \cdot 10^{-3}$
$\text{Ni}_{32}\text{Pd}_{52}\text{P}_{16}$ [2]	4.0	$< 10^{-4}$
$\text{Fe}_{80}\text{B}_{12}\text{Si}_8$ [6]	4.6	$< 10^{-4}$
$\text{Fe}_{60}\text{Ni}_{20}\text{B}_{12}\text{Si}_8$ [6]	4.6	$3.2 \cdot 10^{-2}$
$\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{B}_{12}\text{Si}_8$ [6]	6.0	$4.8 \cdot 10^{-2}$
$\text{Ni}_{80}\text{B}_{12}\text{Si}_8$ [6]	6.0	$9.7 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 2.2: Fitparameter für die Meßergebnisse der Streuintensitäten aus ASANS- Experimenten an amorphen Ferromagneten anhand der Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor gemäß (2.8).

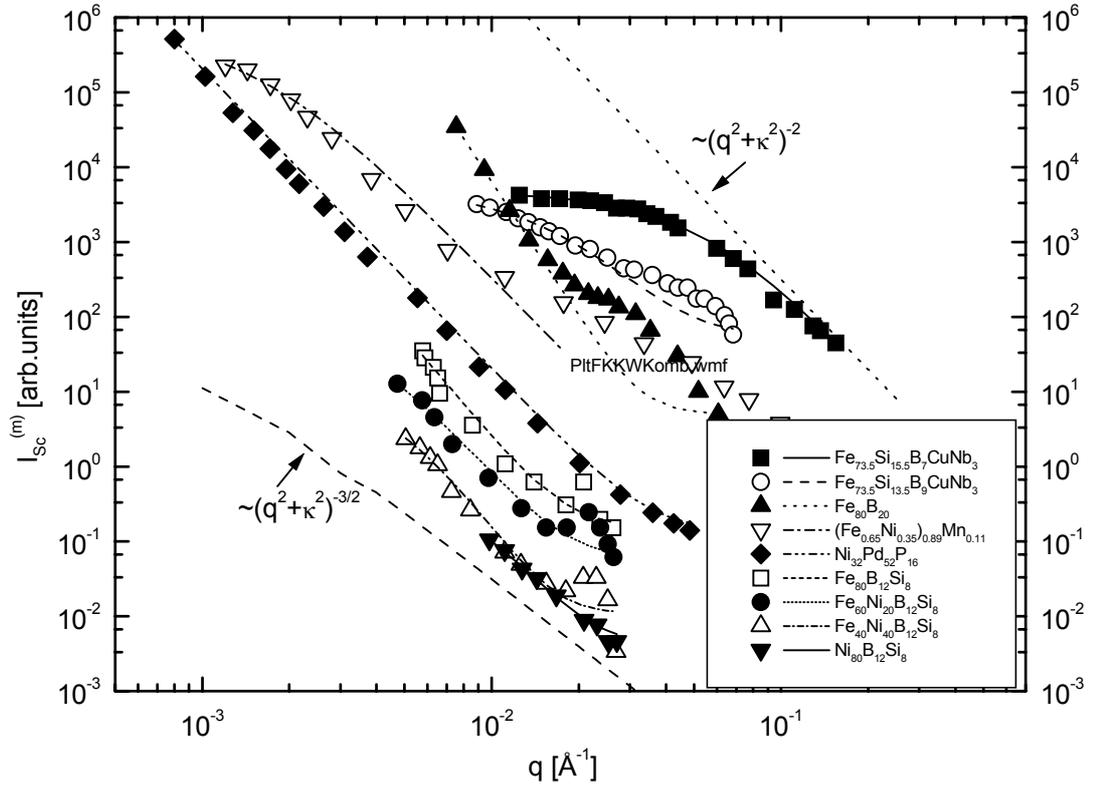


Abbildung 2.3: Meßdaten und Fits des statischen Strukturfaktors im langwelligen Bereich ($10^{-3.5}\text{\AA}^{-1} < q < 10^{-1}\text{\AA}^{-1}$) für die in Tabelle 2.2 aufgeführten amorphen Ferromagnete. Die einzelnen Datensätze sind zur besseren Übersichtlichkeit gegeneinander verschoben. Es treten Parameter für die Steigung ν (gem. 2.8) von $\nu = 4.0$ bis $\nu = 6$ auf. Modellfunktionen (gem. 2.8) mit $\nu = 3$ (gestrichelte Linie) und $\nu = 4$ (Strich-Punkt) sind ebenfalls dargestellt.

ν	$S_{lw}(q)$	$G(r)$
3	$\frac{A}{(\kappa^2+q^2)^{\frac{3}{2}}}$	$A \frac{K_0(\kappa r)}{2\pi^2}$
4	$\frac{8\pi\kappa\Delta^2}{(\kappa^2+q^2)^2}$	$\Delta^2 e^{-\kappa r}$
5	$\frac{6\pi^2\kappa^2\Delta^2}{(\kappa^2+q^2)^{\frac{5}{2}}}$	$\Delta^2 \kappa r K_1(\kappa r)$
6	$\frac{32\pi\kappa^3\Delta^2}{(\kappa^2+q^2)^3}$	$\Delta^2 e^{-\kappa r} (1 + \kappa r)$
7	$\frac{15\pi^2\kappa^4\Delta^2}{(\kappa^2+q^2)^{\frac{7}{2}}}$	$\Delta^2 \frac{\kappa^2 r^2}{2} K_2(\kappa r)$
8	$\frac{64\pi\kappa^5\Delta^2}{(\kappa^2+q^2)^4}$	$\Delta^2 \frac{\kappa^2 r^2 + 3\kappa r + 3}{3} e^{-\kappa r}$
9	$\frac{105\pi^2\kappa^6\Delta^2}{4(\kappa^2+q^2)^{\frac{9}{2}}}$	$\Delta^2 \frac{\kappa^3 r^3}{8} K_3(\kappa r)$
10	$\frac{515\pi\kappa^7\Delta^2}{5(\kappa^2+q^2)^5}$	$\Delta^2 \frac{\kappa^3 r^3 + 6\kappa^2 r^2 + 15\kappa r + 15}{15} e^{-\kappa r}$

Tabelle 2.3: Verschiedene Modellfunktionen $S_{KW}(q)$ (2.8) für den statischen Strukturfaktor im Kleinwinkelbereich mit den dazugehörigen Dichte-Dichte-Korrelationsfunktionen $G(r)$ für $\nu = 4, \dots, 10$. $K_{(\nu-3)/2}(x)$ ist die Bessel-Funktion 2. Art n -ter Ordnung.

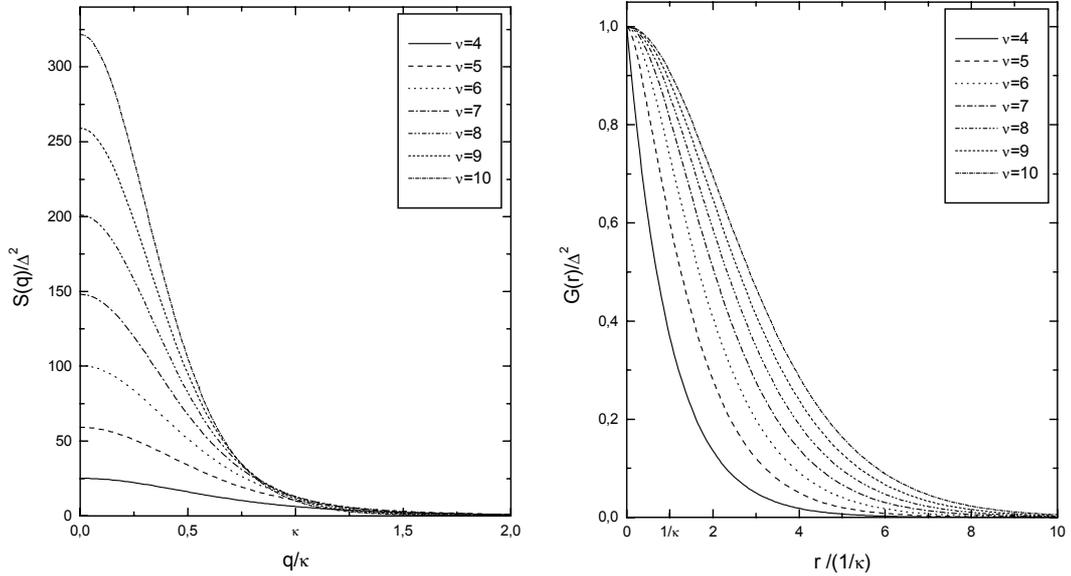


Abbildung 2.4: Statischer Strukturfaktor $S(q)$ in Abhängigkeit von der Wellenzahl q (q ist skaliert auf die reziproke Korrelationslänge κ) und Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion $G(r)$ (r skaliert auf $1/\kappa$) gem. (2.8), Δ^2 gem. (2.9) und Tabelle (2.3).

2.2 Statischer Strukturfaktor im kurzwelligen Bereich, Zusammenhang mit der radialen Verteilungsfunktion

Messungen der Röntgen- und Neutronenstreuintensität mittels der „variable- 2θ -Methode“ ermöglichen die Bestimmung des statischen Strukturfaktors $S(q)$ im Bereich $q \lesssim 20 \text{ \AA}^{-1}$. Weitergehende Messungen im Bereich $q \lesssim 40 \text{ \AA}^{-1}$ werden mit Hilfe der „variable- λ -Methode“ durchgeführt [114]. $S(q)$ kann als Summe von Einzelpeaks bei q_i anhand der Modellfunktion

$$S(q) \sim \sum_i f_i(\Delta q_i) \left((q_i - q)^2 + (\Delta q_i)^2 \right)^{-\frac{\nu}{2}} \quad (2.11)$$

dargestellt werden, wobei $f_i(\Delta q_i)$ die Intensität des i -ten Maximums (in Abhängigkeit von der Breite Δq_i) bedeutet. Diese Art der Darstellung ist in Abb. 2.5 am Beispiel von $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$ für die ersten zwei Maxima dargestellt.

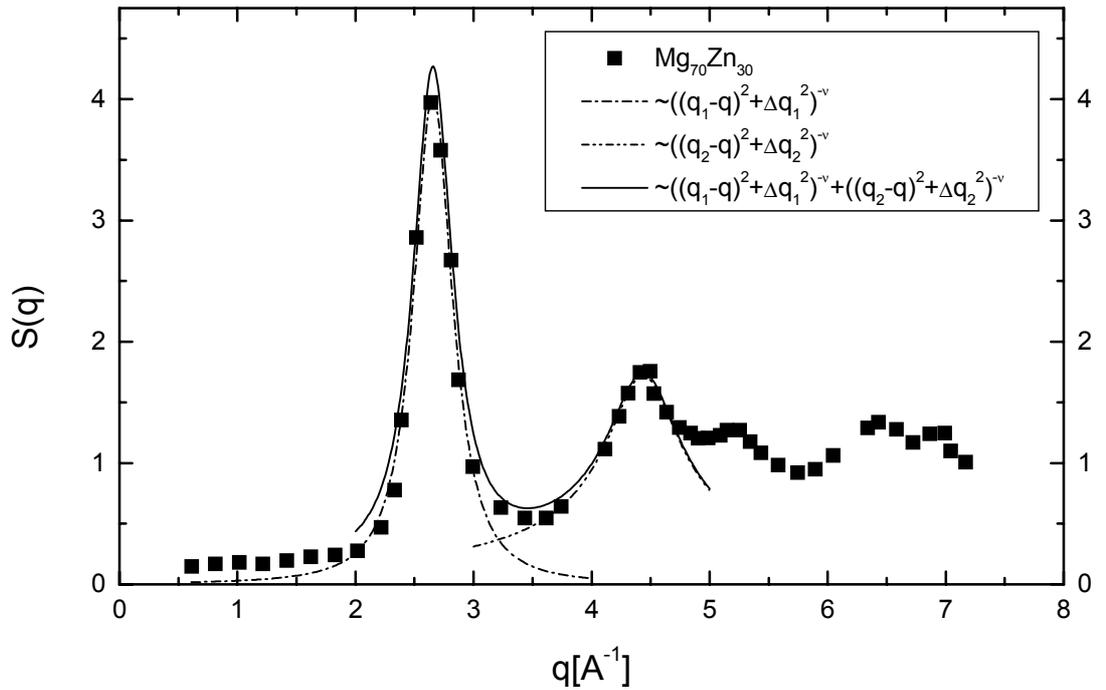


Abbildung 2.5: Darstellung von $S(q)$ [115] im kurzwelligen Bereich ($0.6 \text{ \AA}^{-1} \lesssim q \lesssim 7.2 \text{ \AA}^{-1}$) als Summe von Einzelpeaks gem. (2.11). Dargestellt sind die Fit-Ergebnisse der ersten zwei ausgeprägten Maxima sowie deren Summe.

Material	$\Delta q[\text{\AA}^{-1}]$	$q_1[\text{\AA}^{-1}]$	ν
Mg ₇₀ Zn ₃₀ [115]	0.23	2.66	2.44
ZnCl ₂ [116]	0.07	2.13	0.58
Ni ₃₅ Zr ₃₅ Hf ₃₀ [117]	0.36	2.65	3.37
Ni ₃₅ Zr ₆₅ [117]	0.29	2.67	2.52
Ni ₃₅ Zr ₆₅ [117]	0.19	2.66	1.18
Ni ₆₇ Zr ₃₃ [85]	0.3	3.07	2.3
Ti ₈₄ Si ₁₆ [118]	0.21	2.81	2.34
Ni ₈₀ P ₂₀ [118]	0.25	3.23	1.98
α -Fe [119]	0.40	3.08	3.23
α -Ni [119]	0.36	3.08	2.32
Fe ₇₅ P ₁₅ C ₁₀ [80]	0.11	3.08	0.79

Tabelle 2.4: Fitparameter für die Meßergebnisse des ersten scharfen Peaks des statischen Strukturfaktors aus Neutronen- und Röntgenstreuexperimenten an amorphen Festkörpern und Ferromagneten anhand der Modellfunktionen (2.11). ($\Delta q = \Delta q_1$)

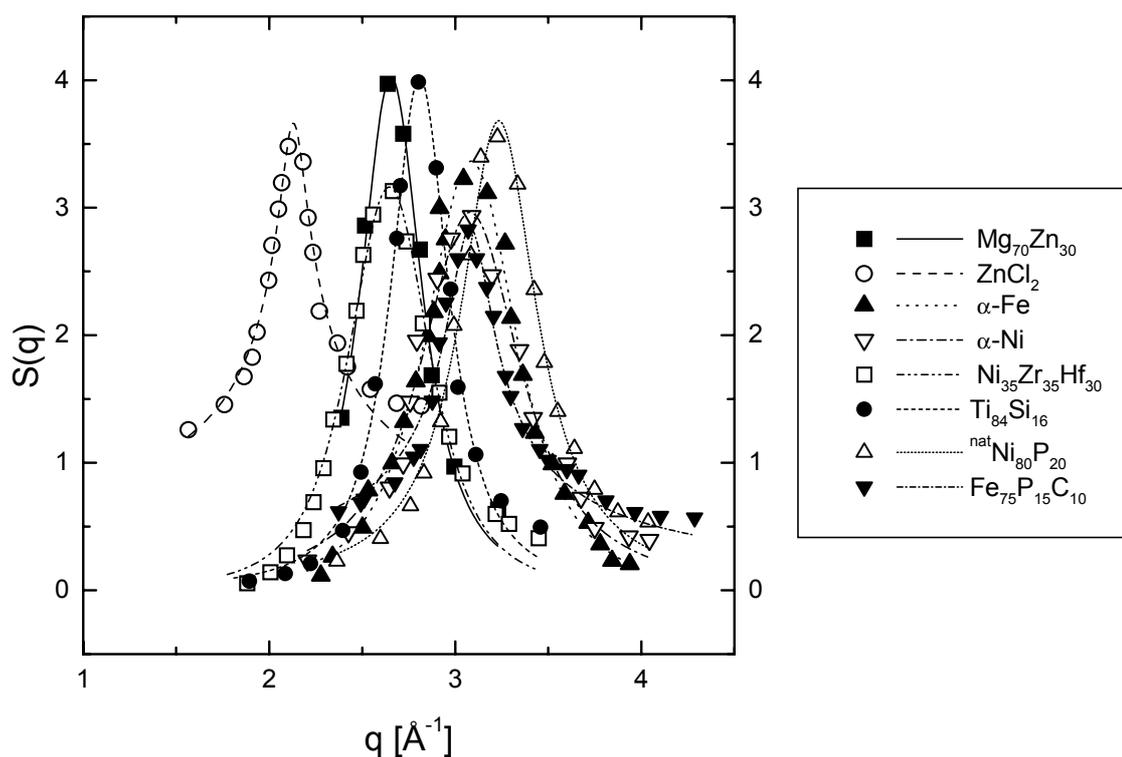


Abbildung 2.6: Meßdaten und Fits des statischen Strukturfaktors im kurzwelligen Bereich ($1.5\text{\AA}^{-1} \lesssim q \lesssim 4.0\text{\AA}^{-1}$) für die in Tabelle 2.4 aufgeführten amorphen Festkörper.

In Abb. 2.6 ist der statische Strukturfaktor $S_{kw}(q)$ im Bereich $1 \text{ \AA}^{-1} \lesssim q \lesssim 5 \text{ \AA}^{-1}$ für eine Reihe amorpher Festkörper und amorphe Ferromagnete (aus Tabelle 2.4) dargestellt. In diesem q -Bereich liegt der erste scharfe Peak im statischen Strukturfaktor (FSDP) für die aufgeführten Materialien. Die Fits des FSDP für die in Abb. 2.6 (links) dargestellten Meßkurven anhand der Modellfunktion

$$S_{kw}(q) \sim \left((q_1 - q)^2 + (\Delta q)^2 \right)^{-\frac{\nu}{2}}$$

ergeben die in Tabelle (2.4) aufgelisteten Werte für die Parameter q_1 , Δq und ν . Abb. 2.6 zeigt die Meßergebnisse mit den resultierenden Fitfunktionen.

Der statische Strukturfaktor kann mittels Modellrechnungen bestimmt werden. So folgt in einer molekulardynamischen Simulationsrechnung für die amorphe Legierung $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$ aus der radialen Verteilungsfunktion $g(r)$ der statische Strukturfaktor $S(q)$ in guter Übereinstimmung mit den Meßergebnissen [35].

Der FSDP verhält sich in amorphen Systemen wie ein „verschmierter Bragg-Reflex“ und ermöglicht die „diffuse Umklapp-Streuung“ kurzweiliger Elementaranregungen.

Kapitel 3

Langwellige Elementaranregungen

Es werden die Auswirkungen langreichweitiger Inhomogenitäten auf langwellige Phononen und Magnonen untersucht. Aus dem verbesserten Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus (MKF) für Magnonen und für Phononen in amorphen Festkörpern erhält man die Dämpfung und die Selbstenergie-Renormierung der Elementaranregungen. Für Magnonen und Phononen mit Wellenzahlen größer als die reziproke charakteristische Korrelationslänge κ der Inhomogenitäten erhält man eine scheinbare Gap-Energie E_G . Die Zustandsdichte $D^{(m)}(E)$ für Magnonen und $D^{(ph)}(\omega)$ für Phononen wird aus der Spur der strukturgemittelten Greenfunktionen $\langle G_{\bar{q}\bar{q}'}^{(m)}(E) \rangle$ und $\langle G_{\bar{q}\bar{q}'}^{(ph)}(\omega) \rangle$ der Magnonen und Phononen berechnet. Man erhält eine Erhöhung der Magnonen- und Phononen-Zustandsdichte für niederenergetische Zustände sowohl durch die Inhomogenitäten als auch durch Magnon- bzw. Phonon-Amorphen, eine neue Art von Elementaranregungen in amorphen Festkörpern. Die Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände ist genau dann gewährleistet, wenn sowohl die Veränderung der Zustandsdichte aufgrund der Renormierung und der Inhomogenitäten als auch die Amorphonen-Zustände berücksichtigt werden. Die räumliche Korrelation der Amorphonen wird untersucht. Es folgt, daß für kleine Energien ($E \ll D\kappa^2$ bzw. $\hbar\omega \ll \hbar u\kappa$) die Amorphonen an den Inhomogenitäten lokalisiert sind. Alternativ zum MKF wird für langwellige Magnonen die Renormierung und Dämpfung aus einer elementaren quantenmechanischen Theorie berechnet. Schließlich wird die Wärmeleitfähigkeit κ bzw. der Widerstand ρ der Magnonen und Phononen berechnet.

3.1 Magnonen in amorphen Ferromagneten

3.1.1 Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus für Magnonen

Wir untersuchen amorphe Ferromagnete auf der Grundlage des Heisenberg-Modells :

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i,j} I_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - \mu_B g B \sum_i \hat{S}_i^z \quad (3.1)$$

mit dem Spin-Operator des i -ten Atoms, \hat{S}_i und dem Austausch-Integral zwischen i -tem und j -tem Atom, I_{ij} sowie dem Landé-Faktor g und dem Bohr'schen Magneton μ_B . (Das B -Feld lassen wir im folgenden gegen 0 gehen.)

Aus der retardierten Greenfunktion

$$\begin{aligned} G_{ij}(t) &= -i\theta(t) \overline{\left[\widehat{S}_i^+(t), \widehat{S}_j^-(0) \right]} \\ &= -i\theta(t) \frac{\text{Spur} \left\{ \left(e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \widehat{S}_i^+ e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \widehat{S}_j^- - \widehat{S}_j^- e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \widehat{S}_i^+ e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \right) e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \right\}}{\text{Spur} \left\{ e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \right\}} \\ &\equiv \left\langle \left\langle \widehat{S}_i^+(t), \widehat{S}_j^-(0) \right\rangle \right\rangle \end{aligned} \quad (3.2)$$

mit den Spin-Flip -Operatoren $\widehat{S}_i^\pm = \widehat{S}_i^x \pm i \widehat{S}_i^y$ erhält man (wir beschränken uns im folgenden auf $S = \frac{1}{2}$) die Selbstenergie und Zustandsdichte der Magnonen in bekannter Weise.

Durch Differentiation der Greenfunktion (3.2) nach der Zeit und unter Verwendung der Fourier-Transformation

$$G_{ij}(E) = \left\langle\left\langle \widehat{S}_i^+, \widehat{S}_j^- \right\rangle\right\rangle \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{ij}(t) e^{iEt} \quad (3.3)$$

gewinnt man die Bewegungsgleichung für die Greenfunktion

$$EG_{ij}(E) = 2\delta_{ij} \overline{S_i^z} + 2 \sum_l I_{il} \left(\left\langle\left\langle \widehat{S}_i^z \widehat{S}_i^+; \widehat{S}_j^- \right\rangle\right\rangle - \left\langle\left\langle \widehat{S}_i^z \widehat{S}_l^+; \widehat{S}_j^- \right\rangle\right\rangle \right) \quad (3.4)$$

In Tjablikow-Näherung [120] vernachlässigt man die Fluktuationen von S_i^z :

$$\left\langle\left\langle \widehat{S}_i^z \widehat{S}_i^+, \widehat{S}_j^- \right\rangle\right\rangle \approx \overline{S_i^z} \left\langle\left\langle \widehat{S}_i^+, \widehat{S}_j^- \right\rangle\right\rangle \quad (3.5)$$

wobei $\overline{S_i^z}$ den quantenstatistischen Mittelwert von \widehat{S}_i^z bedeutet. Im allgemeinen werden ebenfalls die Strukturfluktuationen von $\overline{S_i^z}$ vernachlässigt, d.h.

$$\overline{S_i^z} \left\langle\left\langle \widehat{S}_i^+, \widehat{S}_j^- \right\rangle\right\rangle \approx \langle \overline{S^z} \rangle \left\langle\left\langle \widehat{S}_i^+, \widehat{S}_j^- \right\rangle\right\rangle \quad (3.6)$$

Diese zusätzliche Näherung für den amorphen Fall ist konsistent mit der Tjablikow-Näherung. Die Operation $\langle \dots \rangle$ bezeichnet die Strukturmittelung. Die Bewegungsgleichung für die Greenfunktion (3.4) lautet damit:

$$EG_{ij}(E) = 2\delta_{ij} \langle \overline{S^z} \rangle + 2 \langle \overline{S^z} \rangle \sum_l I_{il} (G_{ij}(E) - G_{lj}(E)) \quad (3.7)$$

In Tief-Temperatur-Näherung folgt $2 \langle \overline{S^z} \rangle \approx 1$ (für $S = \frac{1}{2}$).

Gleichung (3.7) wird einer doppelseitigen Fourier-Transformation $\left(\frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\vec{q}\vec{r}_i} \dots e^{i\vec{q}'\vec{r}_j} \right)$ unterzogen:

$$EG_{\vec{q}\vec{q}'}(E) = \rho(\vec{q} - \vec{q}') + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(I(\vec{q} - \vec{k}) - I(\vec{k}) \right) \rho(\vec{q} - \vec{k}) G_{\vec{k}\vec{q}'}(E) \quad (3.8)$$

wobei

$$G_{\vec{q}\vec{q}'}(E) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\vec{q}\vec{r}_i} G_{ij}(E) e^{i\vec{q}'\vec{r}_j} \quad (3.9)$$

bedeutet und

$$I_{lm} \equiv \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} I(\vec{k}) e^{-i\vec{k}(\vec{r}_l - \vec{r}_m)}, \quad (3.10)$$

mit dem Probenvolumen V und der Zahl der magnetischen Atome N , verwendet wurden [1].

Die Funktion $\rho(\vec{q} - \vec{q}')$ (2.1) wird in ihren Mittelwert und die strukturbedingten Fluktuationen (Strukturfluktuationen) aufgespalten (2.2) [24]. Gleichung (3.8) geht nach Strukturmittelung bei Beachtung von $\langle \rho_a(\vec{q} - \vec{q}') \rangle = 0$ über in :

$$\begin{aligned} (E - \varepsilon(q)) \langle G_{\vec{q}\vec{q}'}(E) \rangle &= \frac{(2\pi)^3 N}{V} \delta(\vec{q} - \vec{q}') \\ &+ \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(I(\vec{q} - \vec{k}) - I(\vec{k}) \right) \left\langle \rho_a(\vec{q} - \vec{k}) G_{\vec{k}\vec{q}'}(E) \right\rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

Dabei wurde $I(0) - I(\vec{q}) = \varepsilon(\vec{q})$ gesetzt. Gleichung (3.11) enthält den Ausdruck $\langle \rho_a(\vec{q} - \vec{k}) G_{\vec{k}\vec{q}'}(E) \rangle$, der zunächst unbekannt ist. Multipliziert man Gleichung (3.8) mit $\rho_a(\vec{k}_1 - \vec{q})$ und führt wiederum die Strukturmittelung durch, so tritt die nächsthöhere Ordnung $\langle \rho_a(\vec{k}_1 - \vec{q}) \rho_a(\vec{q} - \vec{k}) G_{\vec{k}\vec{q}'}(E) \rangle$ auf. Es entsteht eine unendliche Gleichungshierarchie als Konsequenz der amorphen Struktur. Die einfachste nichttriviale Näherung ([1], [24], [98]) erhält man, indem man:

$$\langle \rho_a(\vec{k}_1 - \vec{q}) \rho_a(\vec{q} - \vec{k}) G_{\vec{k}\vec{q}'}(E) \rangle \approx \langle \rho_a(\vec{k}_1 - \vec{q}) \rho_a(\vec{q} - \vec{k}) \rangle \langle G_{\vec{k}\vec{q}'}(E) \rangle \quad (3.12)$$

setzt ¹. Dabei gilt [1], [24]:

$$\langle \rho_a(\vec{k}_1 - \vec{q}) \rho_a(\vec{q} - \vec{k}) \rangle = S(\vec{q} - \vec{k}) \frac{(2\pi)^3 N}{V} \delta(\vec{q} - \vec{k}_1), \quad (3.13)$$

wobei $S(\vec{q})$ der statische Strukturfaktor ist.

Man erhält somit für die strukturgemittelte Greenfunktion in (\vec{q}, \vec{q}') -Darstellung [1], [24]:

$$\langle G_{\vec{q}\vec{q}'}(E) \rangle = \frac{(2\pi)^3 N}{V} \delta(\vec{q} - \vec{q}') \left\{ \frac{1 + \frac{V}{N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})}{E - \varepsilon(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k})}{E - \varepsilon(\vec{q}) - \frac{V}{N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k}))(\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k}))}{E - \varepsilon(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k})} \right\}. \quad (3.14)$$

3.1.2 Verbesserung des Formalismus für Magnonen

Im ursprünglichen Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus wird die vollständige Fouriertransformierte des Austausch-Integrals $I(\vec{r})$ verwendet

$$I(\vec{q}) = \int d^3 r I(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}}, \quad (3.15)$$

die allerdings noch keine Strukturinformationen enthält [24]. Erst in erster Näherung für die Greenfunktion erhält man in diesem Formalismus die Magnonen-Energie in quasi-kristalliner Näherung.

Günstiger ist es, Gleichung (3.10) mit $e^{i\vec{q}(\vec{r}_l - \vec{r}_m)}$ zu multiplizieren und über \vec{r}_l und \vec{r}_m abzusummieren [1], [98]. Mit der bekannten Ersetzung (vgl.(2.3)):

$$\left\langle \frac{1}{N} \sum_{l,m} e^{i(\vec{q} - \vec{k})(\vec{r}_l - \vec{r}_m)} \right\rangle = \delta_{\vec{q}\vec{k}} + S(\vec{q} - \vec{k}) \quad (3.16)$$

erhält man nach Strukturmittelung :

$$I(\vec{q}) = I_0(\vec{q}) - \frac{V}{N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} I(\vec{k}) S(\vec{q} - \vec{k}) \quad (3.17)$$

mit

$$I_0(\vec{q}) \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_{l,m} I_{lm} e^{i\vec{q}(\vec{r}_l - \vec{r}_m)} \right\rangle = \frac{N}{V} \int d^3 r g(\vec{r}) I(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \quad (3.18)$$

mit $g(\vec{r})$ als der radialen Verteilungsfunktion.

¹Die Behandlung der höheren Ordnungen ist in [16] und [24], oder auch [41], [91] (für Phononen) erwähnt. Insbesondere in [16] werden die Ausdrücke höherer Ordnung für die Selbstenergie iterativ behandelt

Auf diese Weise liefert bereits $I_0(\vec{q})$ die quasi-kristalline Näherung, in der die Nahordnung der magnetischen Atome als wichtige Strukturinformation enthalten ist. Die Integralgleichung (3.17) kann man somit folgendermaßen interpretieren: Die Nahordnung ist in $I_0(\vec{q})$ bereits enthalten. Es wird im weiteren die k -Integration durchweg auf die Debye-Kugel $\left(k \leq q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 \frac{N}{V}}\right)$ beschränkt, um die korrekte Zahl der Freiheitsgrade zu berücksichtigen. Beschreibt man ein homogenes (quasi-kristallines) magnetisches Kontinuum mit schwachen, ausgedehnten Inhomogenitäten, so wird über $S(\vec{k})$ dann nur noch der Einfluß räumlich ausgedehnter Inhomogenitäten mit einer charakteristischen Länge κ^{-1} deutlich größer als der mittlere Abstand der Atome berücksichtigt. Diese Interpretation ist insbesondere für den langwelligen Bereich, auf den wir uns in diesem Kapitel beschränken, zutreffend, für den Dichte-Dichte-Korrelationslängen von 10 – 1000 Å typisch sind, wie in Abschnitt (2.1) dargestellt ist. Da der Beitrag des Integrals in (3.17) außerdem relativ gering ist ($S(\vec{q}) \sim \Delta^2$), kann man die Integralgleichung (3.17) iterativ lösen.

$$I(\vec{q}) \approx I_0(\vec{q}) - \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} I_0(\vec{k}) S(\vec{q} - \vec{k}) \quad (3.19)$$

Wir erhalten somit als nullte Näherung für die Magnonen-Energie

$$\varepsilon_0(\vec{q}) = I_0(0) - I_0(\vec{q}), \quad (3.20)$$

die bereits die quasi-kristalline Näherung darstellt. Unter Annahme der Isotropie von $I(\vec{r})$ und $g(\vec{r})$ erhält man für die Magnonen-Energie im langwelligen Bereich (kleine q):

$$\varepsilon_0(q) = D_0 q^2 \quad (3.21)$$

mit der Stiffnesskonstanten $D_0 = \frac{2\pi}{3} \frac{N}{V} \int_0^\infty dr r^4 I(r) g(r)$ in quasi-kristalliner Näherung und aus den Gleichungen (3.19) und (3.20) :

$$\varepsilon(\vec{q}) = (1 - \Delta^2) D_0 q^2 \quad (3.22)$$

mit der relativen mittleren quadratischen Dichtefluktuation Δ^2 (vgl.(2.7)) in verbesserter quasi-kristalliner Näherung. Gleichung (3.22) verwenden wir als Start-Näherung in der Bewegungsgleichung für die Greenfunktion $\langle G_{\vec{q}\vec{q}'}(E) \rangle$ (3.14). Diesen Zugang bezeichnen wir als verbesserten Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus. $\varepsilon(q)$ enthält bereits wesentliche Struktureigenschaften der amorphen Ferromagneten: die Nahordnung, die über $g(r)$ in D_0 berücksichtigt wird und die „Fernordnung“, die über $S(q)$ zu einer ersten Renormierung von $\varepsilon(q)$, proportional zur mittleren quadratischen Dichtefluktuation Δ^2 , führt.

3.1.3 Dämpfung langwelliger Magnonen

Die Pole der Greenfunktion (3.14) liefern die Magnonen-Energie. Sie sind nach (3.14) durch:

$$E = \varepsilon(\vec{q}) + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\left(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right) \left(\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right)}{E - \varepsilon(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \quad (3.23)$$

gegeben, jedoch mit $\varepsilon(\vec{q}) = D_0 q^2 (1 - \Delta^2)$ in verbesserter quasi-kristalliner Näherung für langwellige Magnonen.

Setzt man im Nenner des Integrales in (3.23) näherungsweise $E \approx \varepsilon(\vec{q})$, so folgt mit der Identität

$$\left(\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right) \left(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right) = \left(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right)^2 + \left(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right) \left(\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})\right)$$

für die Magnonen-Energie [1] :

$$E = \varepsilon(\vec{q}) + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\left(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right)^2}{\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right) S(\vec{q} - \vec{k}). \quad (3.24)$$

Das zweite Integral in (3.24) kann direkt berechnet werden, indem man Gl. (3.22) für langwellige Magnonen benutzt:

$$\frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right) S(\vec{q} - \vec{k}) = \varepsilon(\vec{q}) \Delta^2 \quad (3.25)$$

Man erhält für Gl. (3.24) :

$$E = \varepsilon(\vec{q}) (1 + \Delta^2) + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\left(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right)^2}{\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \quad (3.26)$$

Mit Hilfe der Dirac-Formel

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k}) + i\eta} \rightarrow \mathcal{P} \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})} - i\pi \delta(\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})) \quad (3.27)$$

(mit $\eta > 0$ für retardierte Greenfunktionen) läßt sich das Integral in (3.26) in Real- und Imaginärteil aufteilen. Der Realteil führt zu einer Renormierung der Magnonen-Energie und der Imaginärteil zu einer Dämpfung $\Gamma^{(m)}(q)$ der Magnonen infolge der langreichweitigen Dichte-Fluktuationen, die im Kleinwinkelanteil von $S(q)$ enthalten sind.

Es folgt für die Magnonen-Dämpfung :

$$\begin{aligned} \Gamma^{(m)}(q) &= \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k})\right)^2 S(q - \vec{k}) \left(\pi \delta(\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k}))\right) \\ &= \frac{V}{8\pi N} D_0 (1 - \Delta^2) q^5 \int_{-1}^1 dx (2x - 1)^2 S(q\sqrt{2 - 2x}) \end{aligned} \quad (3.28)$$

woraus sich für die Dämpfung $\Gamma^{(m)}(q)$ allgemein sowie für die Grenzfälle für $q \gg \kappa$ und $q \ll \kappa$ die in den Tabellen (3.1) und (3.2) aufgeführten Ausdrücke ergeben. Für $q \ll \kappa$ ist die Dämpfung proportional zu q^5 , unabhängig von der speziellen Wahl der Modell-Funktion für den Strukturfaktor. Dieses q^5 -Gesetz entspricht der magnetischen Rayleigh-Streuung (vgl. Abschnitt 3.5.1), bei der sehr langwelliger Magnonen an den Dichte-Dichte-Fluktuationen wie an Punktdefekten gestreut werden [65]. Dieses Ergebnis ist in Übereinstimmung mit z.B., Medvedev [23], Edwards und Jones [12] und Ignatchenko und Ishakov [22]. Für $q \gg \kappa$ folgt dagegen stets eine q^3 -Proportionalität, wiederum in Übereinstimmung mit Ignatchenko und Ishakov [22]. Die meisten Autoren beschränken sich jedoch entweder auf den Bereich kleiner bzw. großer q oder auf spezielle Näherungen für den statischen Strukturfaktor. Abbildung 3.1 gibt die Dämpfung $\Gamma^{(m)}(q)$ für $\nu = 4, \dots, 10$; Tabelle 3.1, aufgetragen in Abhängigkeit von der reduzierten Wellenzahl $\left(\frac{q}{\kappa}\right)$ in doppelt-logarithmischer Darstellung zusammen mit den asymptotischen Näherungen für $q \ll \kappa$ ($\nu = 4$) und für $q \gg \kappa$ ($\nu = 10$) wieder. Die Magnonen-Dämpfung zeigt

einem recht scharfen Übergang von der charakteristischen q^5 -Abhängigkeit im Grenzbereich kleiner q zur q^3 -Abhängigkeit im Bereich bereits unterhalb der reziproken charakteristischen Korrelationslänge κ .

ν	$\Gamma^{(m)}(q) [D_0(1 - \Delta^2)]$
4	$\Delta^2 \left(\frac{2q(q^4 + 6q^2\kappa^2 + 2\kappa^4)}{\kappa(4q^2 + \kappa^2)} - \frac{\kappa}{q}(q^2 + \kappa^2) \ln\left(\frac{4q^2 + \kappa^2}{\kappa^2}\right) \right)$
5	$\Delta^2 \pi \left(\frac{q^4 - 4q^2\kappa^2 - 8\kappa^4}{4q\kappa} - \frac{\kappa^2(71q^4 + 52q^2\kappa^2 + 8\kappa^4)}{4q(4q^2 + \kappa^2)^{\frac{3}{2}}} \right)$
6	$\Delta^2 \left(\frac{8q(q^2 + \kappa^2)(2q^4 - 5q^2\kappa^2 - \kappa^4)}{\kappa(4q^2 + \kappa^2)^2} + \frac{2\kappa^3}{q} \ln\left(\frac{4q^2 + \kappa^2}{\kappa^2}\right) \right)$
7	$\Delta^2 \pi \left(\frac{3q^4 - 4q^2\kappa^2 + 8\kappa^4}{8q\kappa} - \frac{\kappa^4(203q^4 + 76q^2\kappa^2 + 8\kappa^4)}{8q(4q^2 + \kappa^2)^{\frac{5}{2}}} \right)$
8	$\Delta^2 \left(\frac{16q^5(16q^4 - 4q^2\kappa^2 + 7\kappa^4)}{3\kappa(4q^2 + \kappa^2)^3} \right)$
9	$\Delta^2 \pi \left(\frac{15q^4 - 12q^2\kappa^2 + 8\kappa^4}{32q\kappa} - \frac{\kappa^6(407q^4 + 100q^2\kappa^2 + 8\kappa^4)}{32q(4q^2 + \kappa^2)^{\frac{7}{2}}} \right)$
10	$\Delta^2 \left(\frac{128q^5(48q^6 + 16q^4\kappa^2 + 2q^2\kappa^4 + 7\kappa^6)}{15\kappa(4q^2 + \kappa^2)^4} \right)$

Tabelle 3.1: Analytische Ausdrücke für die Dämpfung $\Gamma^{(m)}(q)$ nach Gl. (3.28), wobei für den statischen Strukturfaktor die Modellfunktionen (2.8) mit (2.9) und $\nu = 4, \dots, 10$ verwendet wurden.

ν	$\Gamma^{(m)}(q) [D_0(1 - \Delta^2)]$ für $q \ll \kappa$	$\Gamma^{(m)}(q) [D_0(1 - \Delta^2)]$ für $q \gg \kappa$
4	$\Delta^2 \frac{14}{3\kappa^3} q^5$	$\Delta^2 \frac{1}{2\kappa} q^3$
5	$\Delta^2 \frac{7\pi}{2\kappa^3} q^5$	$\Delta^2 \frac{\pi}{4\kappa} q^3$
6	$\Delta^2 \frac{56}{3\kappa^3} q^5$	$\Delta^2 \frac{1}{\kappa} q^3$
7	$\Delta^2 \frac{35\pi}{4\kappa^3} q^5$	$\Delta^2 \frac{3\pi}{8\kappa} q^3$
8	$\Delta^2 \frac{112}{3\kappa^3} q^5$	$\Delta^2 \frac{4}{3\kappa} q^3$
9	$\Delta^2 \frac{245}{16\kappa^3} q^5$	$\Delta^2 \frac{15\pi}{32\kappa} q^3$
10	$\Delta^2 \frac{896}{15\kappa^3} q^5$	$\Delta^2 \frac{8}{5\kappa} q^3$

Tabelle 3.2 $\Gamma^{(m)}(q)$ für die Grenzfälle $q \ll \kappa$ und $q \gg \kappa$ für $\nu = 4, \dots, 10$.

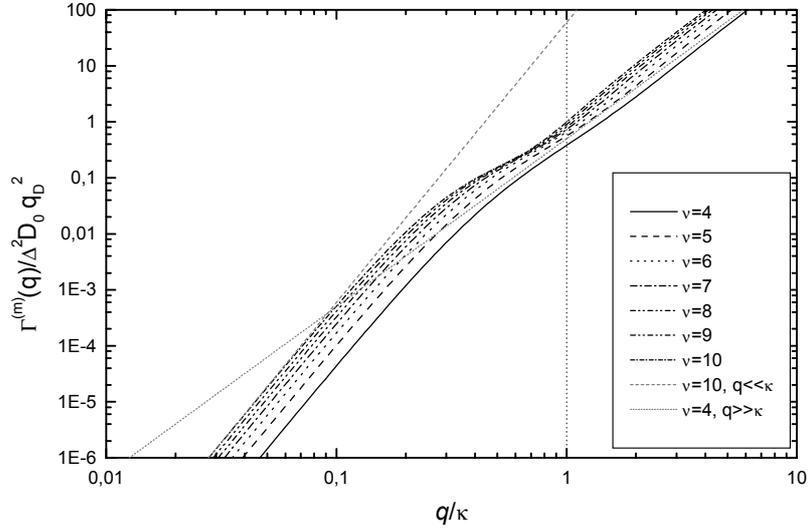


Abbildung 3.1: Dämpfung $\Gamma^{(m)}(q)$ langwelliger Magnonen gem. (3.28) für die Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor gem. (2.8) mit (2.9) und $\nu = 4, \dots, 10$ (s.a. Tab. 3.1) über q/κ . Die Grenzfälle $q \ll \kappa$ für $\nu = 10$ (magnetische Rayleigh-Streuung) und $q \gg \kappa$ für $\nu = 4$ sind hinzugefügt.

3.1.4 Selbstenergie-Renormierung

Für den Realteil der Selbstenergie der Magnonen folgt aus Gleichung (3.26):

$$E = \varepsilon(\vec{q}) (1 + \Delta^2) + \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k}))^2}{\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}), \quad (3.29)$$

wobei \mathcal{P} den Hauptwert des Integrals bezeichnet. Es folgt :

$$\begin{aligned} \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{q} - \vec{k}))^2}{\varepsilon(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) &= \varepsilon(\vec{q}) \left\{ \frac{V}{4\pi^2 N} \int_{-1}^1 dx \int_{k \leq q_D} dk k^2 \frac{(2kx - q)^2}{q^2 - k^2} S(\sqrt{q^2 + k^2 - 2qkx}) \right\} \\ &\equiv \varepsilon(\vec{q}) R^{(m)}(\vec{q}) \end{aligned} \quad (3.30)$$

mit $\varepsilon(q) = D q^2$ für langwellige Magnonen. Die Magnonen-Energie (3.29) unter Berücksichtigung von (3.25) bis zur Ordnung Δ^2 , lautet dann

$$E = D_0 q^2 \left(1 + R^{(m)}(\vec{q}) \right). \quad (3.31)$$

Für die Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor (2.8), mit (2.9) mit $\nu = 4, \dots, 10$ konvergiert das Integral in (3.30) hinreichend schnell, so daß die Integration in (3.30) von $k = 0$ bis $k = \infty$ durchgeführt werden kann. Die Ergebnisse und die Grenzfälle für $q \ll \kappa$ und $q \gg \kappa$ sind in den Tabellen 3.3 und 3.4 aufgelistet. Unabhängig vom Exponenten ν folgt für die Renormierung der

Stiffnesskonstanten für $q \ll \kappa$:

$$R^{(m)}(q) = -\frac{4}{3}\Delta^2; \quad q \ll \kappa.$$

Für $q \gg \kappa$ folgt unabhängig von ν :

$$R^{(m)}(q) \longrightarrow -\frac{9}{4}\Delta^2.; \quad q \gg \kappa.$$

Dies gilt auch für $\nu \gtrsim 3.4$. Abbildung 3.2 zeigt $R^{(m)}(q)$ aus Tabelle 3.3. $R^{(m)}(q)$ gem. Gl.(3.30) für $\nu = 3.4, \dots, 4$ bei numerischer Integration ist in Abb. 3.3 dargestellt. In beiden Abbildungen ist q auf die reziproke charakteristische Korrelationslänge κ skaliert (κ ist im allgemeinen sehr viel kleiner als q_D , siehe Tabelle 2.2). Die Insets sind Vergrößerungen für den q -Bereich $0 \leq q \leq 2\kappa$. Für $q \simeq \kappa$ folgt eine stärkere q -Abhängigkeit von $R^{(m)}(q)$. In diesem q -Bereich liegt bereits die q^3 -Abhängigkeit der Dämpfung $\Gamma^{(m)}(q)$ (3.28) vor.

Die Resultate in Tabelle 3.3 sowie in Abbn. 3.2 und 3.3 zeigen eine Verringerung der Stiffnesskonstanten, im Vergleich zur üblichen quasi-kristallinen Näherung, aufgrund der Strukturfluktuationen. Diese Renormierung wurde qualitativ innerhalb des MKF bereits gezeigt [1]. Allgemeiner folgt eine Verringerung der Energie langwelliger Magnonen durch Strukturfluktuationen unter Verwendung des Boguljubow-Theorems für die freie Energie [1], [13], [17]. Es liegt hier somit ein spezielles Beispiel dieser allgemeinen Eigenschaft vor.

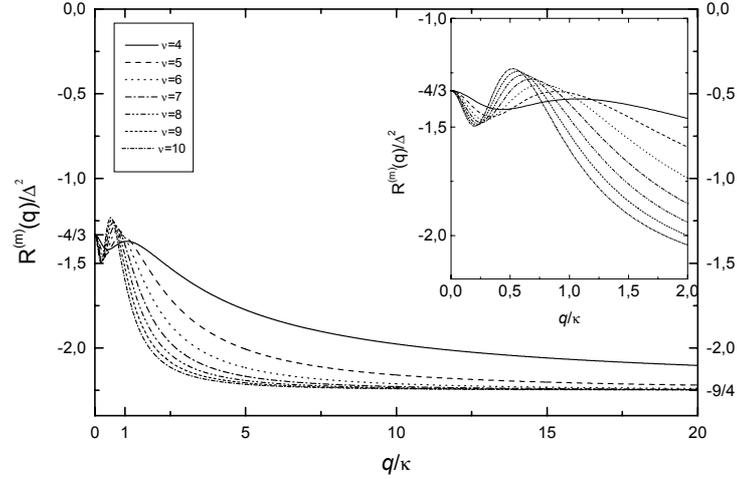


Abbildung 3.2: Renormierung $R^{(m)}(q)$ langwelliger Magnonen gem. (3.30) für die Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor gem. (2.8) mit (2.9) und $\nu = 4, \dots, 10$ (analytische Integration) (s.a. Tab. 3.3) über q/κ . Die Renormierung startet für alle Modellfunktionen bei $R^{(m)}(q \rightarrow 0) = -\frac{4}{3}\Delta^2$ und strebt für große Wellenzahlen ($q \gg \kappa, q \ll q_D$ gegen $R^{(m)}(q \gg \kappa) = -\frac{9}{4}\Delta^2$. Die „Ausschnittsvergrößerung“ zeigt die stärkere q - Abhängigkeit für $q \approx \kappa$.

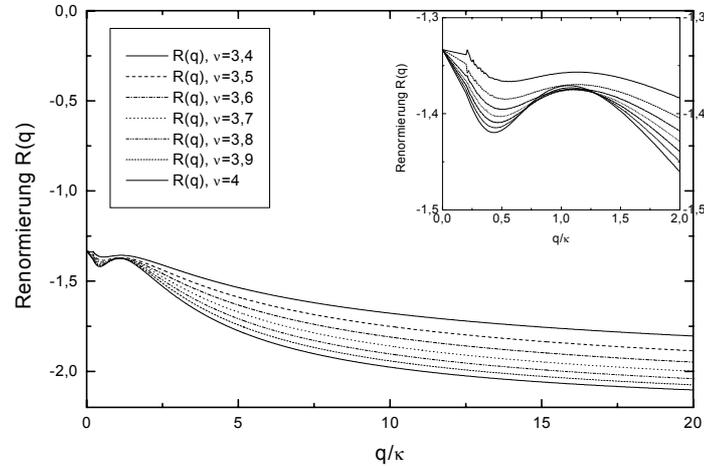


Abbildung 3.3: Renormierung $R^{(m)}(q)$ langwelliger Magnonen gem. (3.30) für die Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor gem. (2.8) mit (2.9) und $\nu = 3.4, \dots, 4.0$ (numerische Integration) über q/κ . Die Renormierung startet für alle Modellfunktionen bei $R^{(m)}(q \rightarrow 0) = -\frac{4}{3}\Delta^2$ und strebt für große Wellenzahlen ($q \gg \kappa, q \ll q_D$ gegen $R^{(m)}(q \gg \kappa) = -\frac{9}{4}\Delta^2$. Die „Ausschnittsvergrößerung“ zeigt die stärkere q - Abhängigkeit für $q \approx \kappa$.

ν	$R^{(m)}(q)$
4	$-\Delta^2 \left(\frac{9q^5 - 4\pi q^4 \kappa + 16q^3 \kappa^2 - 5\pi q^2 \kappa^3 + 4q\kappa^4 - \pi\kappa^5}{q^3(4q^2 + \kappa^2)} + \frac{2\kappa(q^2 + \kappa^2)}{q^3} \arctan\left(\frac{\kappa}{2q}\right) \right)$
5	$-\Delta^2 \left(\frac{9q^4 + 32q^2 \kappa^2 + 8\kappa^4}{q^2(4q^2 + \kappa^2)} - \frac{\kappa^2(71q^4 + 52q^2 \kappa^2 + 8\kappa^4)}{4q^3(4q^2 + \kappa^2)^{\frac{3}{2}}} \ln\left(\frac{4q^2 + \kappa^2 + 2q\sqrt{4q^2 + \kappa^2}}{4q^2 + \kappa^2 - 2q\sqrt{4q^2 + \kappa^2}}\right) \right)$
6	$-\Delta^2 \left(\frac{36q^7 - 53q^5 \kappa^2 + 32\pi q^4 \kappa^3 - 52q^3 \kappa^4 + 16\pi q^2 \kappa^5 - 8q\kappa^6 + 2\pi\kappa^7}{q^3(4q^2 + \kappa^2)^2} - \frac{4\kappa^3}{q^3} \arctan\left(\frac{\kappa}{2q}\right) \right)$
7	$-\Delta^2 \left(\frac{72q^6 - 35q^4 \kappa^2 - 52q^2 \kappa^4 - 8\kappa^6}{2q^2(4q^2 + \kappa^2)^2} + \frac{\kappa^4(203q^4 + 76q^2 \kappa^2 + 8\kappa^4)}{8q^3(4q^2 + \kappa^2)^{\frac{5}{2}}} \ln\left(\frac{\sqrt{4q^2 + \kappa^2} + 2q}{\sqrt{4q^2 + \kappa^2} - 2q}\right) \right)$
8	$-\Delta^2 \left(\frac{432q^6 + 40q^4 \kappa^2 + 71q^2 \kappa^4 + 4\kappa^6}{3(4q^2 + \kappa^2)^3} \right)$
9	$-\Delta^2 \left(\frac{1152q^8 + 296q^6 \kappa^2 - 7q^4 \kappa^4 - 68q^2 \kappa^6 - 8\kappa^8}{8q^2(4q^2 + \kappa^2)^3} + \frac{\kappa^6(407q^4 + 100q^2 \kappa^2 + 8\kappa^4)}{32q^3(4q^2 + \kappa^2)^{\frac{7}{2}}} \ln\left(\frac{\sqrt{4q^2 + \kappa^2} + 2q}{\sqrt{4q^2 + \kappa^2} - 2q}\right) \right)$
10	$-\Delta^2 \left(\frac{8640q^8 + 5232q^6 \kappa^2 + 644q^4 \kappa^4 + 481q^2 \kappa^6 + 20\kappa^8}{15(4q^2 + \kappa^2)^4} \right)$

Tabelle 3.3: Renormierung $R^{(m)}(q)$ gem. Gl (3.30) für $\nu = 4, \dots, 10$.

ν	$R^{(m)}(q)$ für $q \gg \kappa$
4	$-\frac{9\Delta^2}{4} + \frac{\Delta^2 \pi \kappa}{q} - \frac{71\Delta^2 \kappa^2}{16q^2}$
5	$-\frac{9\Delta^2}{4} - \frac{119\Delta^2 \kappa^2}{16q^2} + \frac{71\Delta^2 \kappa^2}{32q^2} \ln\left(\frac{16q^2}{\kappa^2}\right)$
6	$-\frac{9\Delta^2}{4} + \frac{71\Delta^2 \kappa^2}{16q^2}$
7	$-\frac{9\Delta^2}{4} + \frac{71\Delta^2 \kappa^2}{32q^2}$
8	$-\frac{9\Delta^2}{4} + \frac{71\Delta^2 \kappa^2}{48q^2}$
9	$-\frac{9\Delta^2}{4} + \frac{71\Delta^2 \kappa^2}{64q^2}$
10	$-\frac{9\Delta^2}{4} + \frac{71\Delta^2 \kappa^2}{80q^2}$

Tabelle 3.4: $R^{(m)}(q)$ für den Grenzfall $q \gg \kappa$ für $\nu = 4, \dots, 10$.

3.1.5 Scheinbare Magnonen-Gap-Energie

Der Beitrag zur Magnonenenergie (3.31), der aufgrund der Inhomogenitäten entsteht, lautet im Bereich großer Wellenzahlen näherungsweise (vgl. Tabelle 3.4)

$$E = D_0(1 - \frac{9}{4}\Delta^2)q^2 + E_G^{(m)} \text{ für } q \gg \kappa \quad (3.32)$$

Die Magnonen-Energie (3.31) sowie die Näherung (3.32) und $D_0(1 - \frac{9}{4}\Delta^2)q^2$, zum Vergleich, sind in Abbildung (3.4) für $\nu = 6$ schematisch dargestellt. Für große Wellenzahlen verläuft die Magnonen-Energie näherungsweise entlang (3.32), um für kleine Wellenzahlen dann in $E = 0$ überzugehen.

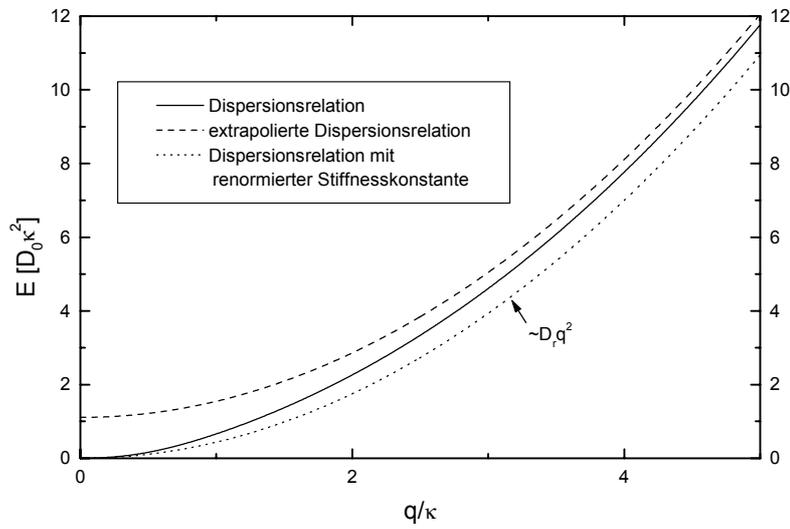


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Magnonen-Dispersionsrelation (3.31) und der Näherung (3.32) für große Wellenzahlen. Die Magnonen-Energie liefert $E = 0$ bei $q = 0$, um sich für große Wellenzahlen an die um die scheinbare Gap-Energie angehobene Näherung (3.32) anzunähern. Der Ausdruck $D_r q^2$ ist zum Vergleich mit (3.32) hinzugefügt.

Für $q \gg \kappa$ tritt, zusätzlich zur Renormierung, die scheinbare Gap-Energie $E_G^{(m)}$ auf, mit

$$E_G^{(m)} = \alpha D_0 \Delta^2 \kappa^2. \quad (3.33)$$

Energie- Beiträge dieser Form werden in Greenfunktionen-Theorien üblicherweise als Folge der Entstehung weiterer Elementaranregungen interpretiert [133]. Hier ist die scheinbare Gap-Energie die Folge der Entstehung von Kompensationsmagnonen. Diese begleiten die Magnonen und kompensieren die Abweichungen der amorphen magnetischen Struktur vom homogenen Kontinuum. Die Natur des so entstehenden „Magnon-dressed Magnon“ wird verdeutlicht durch die Bildung von $R^{(m)}(q)$ aus der k -Integration in (3.29), die dem Energie-Beitrag eines Wellenpaketes entspricht, welches das Magnon als „Wolke“ begleitet.

Die Kompensationsmagnonen verschwinden für sehr langwellige Magnonen mit $q \ll \kappa$. In Abb 3.5 ist für $\nu = 6$ der Beitrag $q^2 R^{(m)}(q)$ sowie seine lineare Extrapolationen über q^2 aufgetragen. Die

Abbildung zeigt auch die linearen Extrapolationen für $\nu = 6, \dots, 10$. Zusätzlich sind in Tabelle (3.5) die analytisch bzw. numerisch (für $\nu = 4, 5$) erhaltenen Ergebnisse für α (3.33) zusammengestellt.

ν	α gem. (3.33)
4	(numerisch): 21.865
5	(numerisch): 9.0478
≥ 6	$\frac{4.4375}{\nu-5}$

Tabelle 3.5: Analytisch bzw. numerisch (für $\nu = 4, 5$) erhaltenen Ergebnisse für den Faktor α für die scheinbare Magnonen- Gap- Energie gem. (3.33).

Für die Modellfunktion (2.8), mit (2.9) für den statischen Strukturfaktor folgt :

$$E_G^{(m)} = D_0 \frac{71\kappa^2}{16(\nu-5)} \Delta^2, \quad \nu > 5$$

Für $\nu \leq 5$ gilt diese Beziehung nicht mehr. Aus diesem Grunde wird hier das Ergebnis der jeweiligen numerischen linearen Extrapolation (s. Abb. 3.5) angegeben.

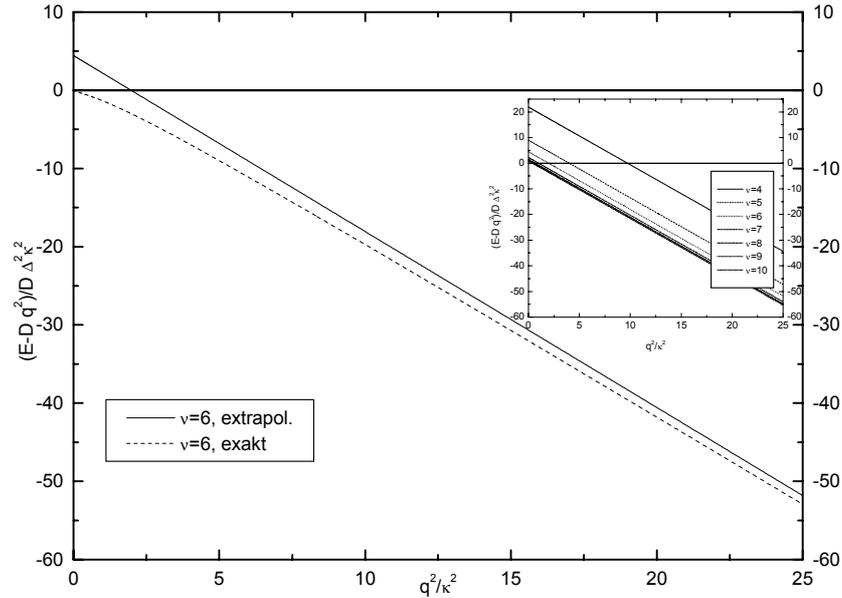


Abbildung 3.5: Lineare Extrapolation der Änderung (Renormierung) der Energie langwelliger Magnonen aus dem Bereich großer Wellenzahlen ($q \gg \kappa$) in den Bereich kleiner Wellenzahlen ($q \ll \kappa$) über q^2/κ^2 zusammen mit der Energie-Änderung für $\nu = 6$. Die Extrapolation zeigt das Auftreten einer scheinbaren Gap-Energie $E_G = \alpha \Delta^2 D_0 \kappa^2$ infolge der Bildung einer „Wolke“ von „Kompensationsmagnonen“ aufgrund der Strukturfluktuationen. Man erkennt, daß für kleine Wellenzahlen die scheinbare Gap- Energie (und damit auch die Wolke von Kompensationsmagnonen) verschwindet. In der eingefügten Abbildung ist die lineare Extrapolation für $\nu = 4, \dots, 10$ dargestellt.

3.2 Phononen in amorphen Festkörpern

3.2.1 Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus für Phononen

In einkomponentigen amorphen Festkörpern mit Atommasse M sei $V_{i,j}^{\mu\nu} = \frac{\partial^2 V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)}{\partial u_i^\mu \partial u_j^\nu}$ die Kraftkonstante zwischen dem i -ten und dem j -ten Atom mit dem interatomaren Potential $V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ und mit den Indizes der kartesischen Koordinaten μ und ν . Dann lautet der Hamilton-Operator in harmonischer Näherung:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2M} + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sum_{\mu,\nu} V_{i,j}^{\mu,\nu} \hat{u}_i^\mu \hat{u}_j^\nu \quad (3.34)$$

wobei \hat{p}_i und \hat{u}_i den Impulsoperator bzw. die Auslenkung des i -ten Atoms bedeuten. Die retardierte Greenfunktion in ω -Darstellung

$$G_{i,j}^{\mu,\nu}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \left(-i\theta(t) \frac{\text{Spur} \left\{ \left(e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{u}_i^\mu e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{u}_j^\nu - \hat{u}_j^\nu e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{u}_i^\mu e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \right) e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \right\}}{\text{Spur} \left\{ e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \right\}} \right) \quad (3.35)$$

genügt der Bewegungsgleichung

$$M\hbar^2\omega^2 G_{i,j}^{\mu,\nu}(\omega) = \delta_{i,j}\delta_{\mu,\nu} + \sum_{l,\nu'} |V_{i,l}^{\mu,\nu'}| \left(G_{i,j}^{\nu',\nu}(\omega) - G_{l,j}^{\nu',\nu}(\omega) \right). \quad (3.36)$$

Die weitere Behandlung erfolgt analog zum Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus (MKF), wie er für Magnonen in amorphen Ferromagneten eingeführt wurde [98]. Durch doppelseitige Fourier-Transformation $\left(\frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\vec{q}\vec{r}_i} \dots e^{i\vec{q}'\vec{r}_j} \right)$ von Gl. (3.36) folgt die Bewegungsgleichung für die Greenfunktion in (\vec{q}, \vec{q}') -Darstellung

$$M\hbar^2\omega^2 G_{\vec{q}\vec{q}'}^{\mu\nu}(\omega) = \rho(\vec{q} - \vec{q}') + \frac{V}{N} \sum_{\nu'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(V^{\mu\nu'}(\vec{q} - \vec{k}) - V^{\mu\nu'}(\vec{k}) \right) \rho(\vec{q} - \vec{k}) G_{\vec{k}\vec{q}'}^{\nu'\nu}(\omega) \quad (3.37)$$

(für N Atome im Volumen V) mit

$$G_{\vec{q}\vec{q}'}^{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\vec{q}\vec{r}_i} G_{i,j}^{\mu\nu}(\omega) e^{i\vec{q}'\vec{r}_j}$$

und $\rho(\vec{q} - \vec{q}')$ (Gl. 2.1), sowie

$$|V_{i,l}^{\mu\nu}| = \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} V^{\mu\nu}(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_l)}. \quad (3.38)$$

Die Aufspaltung der Funktion $\rho(\vec{q} - \vec{q}')$ in ihren Mittelwert und den Anteil der Fluktuation gemäß (2.2) und nachfolgende Strukturmittelung (3.37) führt zu

$$\begin{aligned} \sum_{\nu'} (\hbar^2\omega^2 \delta_{\mu\nu'} - \varepsilon_{\mu\nu'}^2(q)) \langle G_{\vec{q}\vec{q}'}^{\nu'\nu}(\omega) \rangle &= \frac{(2\pi)^3 N}{V} \delta_{\mu\nu} \delta(\vec{q} - \vec{q}') \\ &+ \frac{V}{N} \sum_{\nu'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(V^{\mu\nu'}(\vec{q} - \vec{k}) - V^{\mu\nu'}(\vec{k}) \right) \langle \rho_a(\vec{q} - \vec{k}) G_{\vec{k}\vec{q}'}^{\nu'\nu}(\omega) \rangle \end{aligned} \quad (3.39)$$

mit

$$\varepsilon_{\mu\nu'}^2(q) = \left(V^{\mu\nu'}(0) - V^{\mu\nu'}(\vec{q}) \right). \quad (3.40)$$

Für sphärisch symmetrische Paarpotentiale entkoppelt die Bewegungsgleichung (3.39) für den longitudinalen Phononen-Zweig $\varepsilon_L^2(q)$ und den zweifach entarteten transversal polarisierten Phononen-Zweig $\varepsilon_T^2(q)$ [37]. Die kartesischen Indizes μ und ν können somit ohne Verlust an Klarheit weggelassen werden.

Die weitere Rechnung folgt Abschnitt 3.1.2 und führt schließlich zur strukturgemittelten Phononen-Greenfunktion in (\vec{q}, \vec{q}') -Darstellung:

$$M \langle G_{\vec{q}, \vec{q}'}(\omega) \rangle = \frac{(2\pi)^3 N}{V} \delta(\vec{q} - \vec{q}') \frac{1 + \frac{V}{N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{(\varepsilon^2(\vec{k}) - \varepsilon^2(\vec{q} - \vec{k}))}{\hbar^2 \omega^2 - \varepsilon^2(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k})}{\hbar^2 \omega^2 - \varepsilon^2(\vec{q}) - \frac{V}{N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{(\varepsilon^2(\vec{k}) - \varepsilon^2(\vec{q} - \vec{k}))(\varepsilon^2(\vec{q}) - \varepsilon^2(\vec{k} - \vec{q}))}{\hbar^2 \omega^2 - \varepsilon^2(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k})} \quad (3.41)$$

Zur Bestimmung der Funktion $V(q)$, wird Gleichung (3.38) mit $\frac{1}{N} e^{-i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}$ multipliziert über \vec{r}_i und \vec{r}_j absummiert. Die Ersetzung (3.16) liefert eine Integralgleichung für $V(\vec{q})$

$$V(\vec{q}) = V_0(\vec{q}) - \frac{V}{N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} V(\vec{k}) S(\vec{q} - \vec{k}) \quad (3.42)$$

mit

$$V_0(\vec{q}) \equiv \frac{1}{N} \sum e^{i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} V_{ij} \rightarrow \frac{1}{V} \int d^3 r g(r) \frac{\partial^2 V(r)}{\partial r^2} e^{i\vec{q}\vec{r}}. \quad (3.43)$$

Bei sphärischer Symmetrie von $V(r)$ und $g(r)$ folgt aus Gleichung (3.43) die Dispersionsrelation für langwellige Phononen

$$\varepsilon_0(q) = \hbar u q, \quad (3.44)$$

mit u als der Schallgeschwindigkeit für longitudinale

$$u = u_L = \sqrt{\frac{2\pi}{15} \int dr r^3 g(r) (2V'(r) + 3rV''(r))}$$

oder transversale

$$u = u_T = \sqrt{\frac{2\pi}{15} \int dr r^3 g(r) (4V'(r) + rV''(r))}$$

akustische Phononen [37]. Gleichung (3.40) und (3.42) liefern dann, Abschnitt 3.1.2 folgend, für den langwelligen Grenzfall

$$\varepsilon_{L/T}^2(q) = \hbar^2 u_{0L/T}^2 (1 - \Delta^2) q^2 \equiv \hbar^2 u_{L/T}^2 q^2 \quad (3.45)$$

die verbesserte quasi-kristalline Näherung $u_{L/T}^2 = u_{0L/T}^2 (1 - \Delta^2)$, wobei Δ^2 (vgl.(2.7)) die relative quadratische Dichtefluktuation bedeutet. In der weiteren Diskussion wird Gleichung (3.45) als Startnäherung in der Greenfunktion $\langle G_{\vec{q}\vec{q}'}(\omega) \rangle$ verwendet.

3.2.2 Dämpfung langwelliger Phononen

Aus den Polstellen der strukturgemittelten Greenfunktion $\langle G_{\vec{q}\vec{q}'}(\omega) \rangle$ (3.41) folgt für die Dämpfung $\Gamma^{(ph)}(q)$ und die renormierte Energie $\varepsilon_R^{(ph)}(q)$ langwelliger akustischer Phononen

$$\Gamma^{(ph)}(\vec{q}) = \pm \frac{J_{\text{Im}}\sqrt{2}}{\sqrt{\varepsilon^2(\vec{q})(1-\Delta^2) + J_{\text{Re}} + \sqrt{(\varepsilon^2(\vec{q})(1-\Delta^2) + J_{\text{Re}})^2 + J_{\text{Im}}^2}}} \quad (3.46)$$

$$\varepsilon_R^{(ph)}(\vec{q}) = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon^2(\vec{q})(1-\Delta^2) + J_{\text{Re}} + \sqrt{(\varepsilon^2(\vec{q})(1-\Delta^2) + J_{\text{Re}})^2 + J_{\text{Im}}^2}}{2}} \quad (3.47)$$

mit den Real- und Imaginärteilen $J_{\text{Re}}, J_{\text{Im}}$ des Integrals im Nenner von $\langle G_{\vec{q}\vec{q}'}(\omega) \rangle$:

$$J_{\text{Re}} = \varepsilon^2(\vec{q}) \left\{ \frac{V}{4\pi^2 N} \int_{-1}^1 dx \int dk k^2 \frac{(2kx - q)^2}{q^2 - k^2} S(\sqrt{q^2 + k^2 - 2qkx}) \right\}$$

$$J_{\text{Im}} = \frac{V}{8\pi N} \hbar^2 u^2 (1 - \Delta)^2 q^5 \int_{-1}^1 dx (2x - 1)^2 S(q\sqrt{2 - 2x})$$

Die unterschiedlichen Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor $S(q)$ (2.8), mit (2.9) mit $\nu = 4, 5, \dots$ führen zu den in Tabelle (3.6) aufgeführten Ausdrücken für die Dämpfung $\Gamma^{(ph)}(q)$ der Phononen. Für die Grenzfälle $q \ll \kappa$ bzw. $q \gg \kappa$ folgt:

$$\Gamma^{(ph)}(q) \sim q^4 \quad q \ll \kappa$$

$$\Gamma^{(ph)}(q) \sim q^2 \quad q \gg \kappa,$$

siehe auch Abbildung 3.6 und Tabelle (3.7).

ν	$\Gamma^{(ph)}(q) [\hbar u \Delta^2]$
4	$\frac{q^4 + 6q^2 + 2\kappa^4}{\kappa(4q^2 + \kappa^2)} - \frac{\kappa(q^2 + \kappa^2)}{2q^2} \arctan\left(\frac{4q^2 + \kappa^2}{\kappa^2}\right)$
5	$\frac{\pi(q^4 - 4q^2\kappa^2 - 8\kappa^4)}{8q^2\kappa} + \frac{\pi\kappa^2(71q^4 + 52q^2\kappa^2 + 8\kappa^4)}{8q^2(4q^2 + \kappa^2)^{\frac{3}{2}}}$
6	$\frac{4(2q^6 - 3q^4\kappa^2 - 6q^2\kappa^4 - \kappa^6)}{\kappa(4q^2 + \kappa^2)^2} + \frac{\kappa^3}{q^2} \ln\left(\frac{4q^2 + \kappa^2}{\kappa^2}\right)$
7	$\frac{\pi(3q^4 - 4q^2\kappa^2 + 8\kappa^4)}{16q^2\kappa} - \frac{\pi\kappa^4(203q^4 + 76q^2\kappa^2 + 8\kappa^4)}{16q^2(4q^2 + \kappa^2)^{\frac{5}{2}}}$
8	$\frac{8q^4(16q^4 - 4q^2\kappa^2 + 7\kappa^4)}{3\kappa(4q^2 + \kappa^2)^3}$
9	$\frac{\pi(15q^4 - 12q^2\kappa^2 + 8\kappa^4)}{64q^2\kappa} - \frac{\pi\kappa^6(407q^4 + 100q^2\kappa^2 + 8\kappa^4)}{64q^2(4q^2 + \kappa^2)^{\frac{7}{2}}}$
10	$\frac{64q^4(48q^6 + 16q^4\kappa^2 + 2q^2\kappa^4 + 7\kappa^6)}{15\kappa(4q^2 + \kappa^2)^4}$

Tabelle 3.6: Dämpfung $\Gamma^{(ph)}(q)$ für die verschiedenen Modellfunktionen $S(k)$ (2.8) für den statischen Strukturfaktor im Kleinwinkelbereich für $\nu = 4, \dots, 10$.

ν	$\Gamma^{(ph)}(q) [\hbar u \Delta^2]$ für $q \ll \kappa$	$\Gamma^{(ph)}(q) [\hbar u \Delta^2]$ für $q \gg \kappa$
4	$\frac{7}{3} \frac{1}{\kappa^3} q^4$	$\frac{1}{4} \frac{1}{\kappa} q^2$
5	$\frac{7\pi}{4} \frac{1}{\kappa^3} q^4$	$\frac{\pi}{8} \frac{1}{\kappa} q^2$
6	$\frac{28}{3} \frac{1}{\kappa^3} q^4$	$\frac{1}{2} \frac{1}{\kappa} q^2$
7	$\frac{35\pi}{8} \frac{1}{\kappa^3} q^4$	$\frac{3\pi}{16} \frac{1}{\kappa} q^2$
8	$\frac{56}{3} \frac{1}{\kappa^3} q^4$	$\frac{2}{3} \frac{1}{\kappa} q^2$
9	$\frac{245\pi}{32} \frac{1}{\kappa^3} q^4$	$\frac{15\pi}{64} \frac{1}{\kappa} q^2$
10	$\frac{448}{15} \frac{1}{\kappa^3} q^4$	$\frac{4}{5} \frac{1}{\kappa} q^2$

Tabelle 3.7: Phonondämpfung $\Gamma^{(ph)}(q)$ aus Tabelle (3.6) in den Grenzfällen $q \ll \kappa$ und $q \gg \kappa$

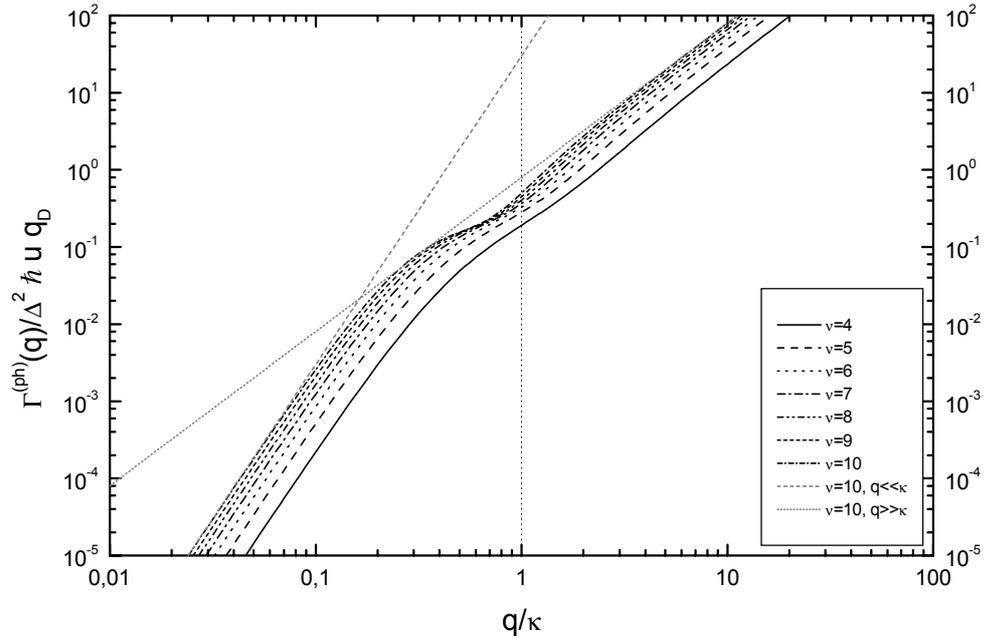


Abbildung 3.6: Dämpfung $\Gamma^{(ph)}(q)$ langwelliger Phononen gem. (3.46) für die Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor gem. (2.8) mit (2.9) und $\nu = 4, \dots, 10$ (s.a. Tab. 3.6) über q/κ . Die Grenzfälle $q \ll \kappa$ (magnetische Rayleigh-Streuung) und $q \gg \kappa$ für $\nu = 10$ sind hinzugefügt.

Die q^4 -Abhängigkeit der Dämpfung für sehr langwellige Phononen bedeutet „Phononen-Rayleigh-Streuung“. In analoger Weise wie Magnonen ([98], Abschnitt 3.1.3) werden Phononen mit Wellenlänge viel größer als die Korrelationslänge $\frac{1}{\kappa}$ durch die Inhomogenitäten wie durch „Punkt-Defekte“ gestreut und gedämpft.

3.2.3 Selbstenergie-Renormierung

Die renormierte Phononen-Selbstenergie $\varepsilon_R(\vec{q})$ (3.47) kann in der Form

$$\varepsilon_R(\vec{q}) = \hbar u q \left(1 + R^{(ph)}(q) \right) \quad (3.48)$$

dargestellt werden, mit

$$R^{(ph)}(q) = \frac{R^{(m)}(q)}{2} \quad (3.49)$$

$R^{(m)}(q)$ siehe Tabelle 3.3.

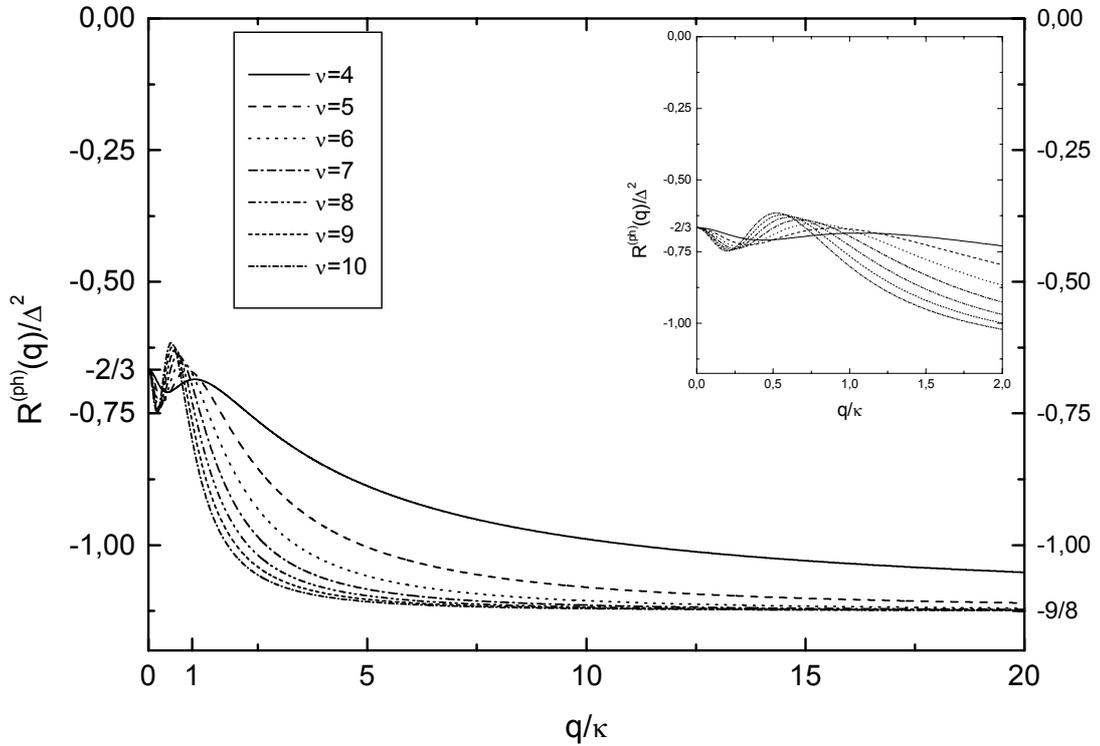


Abbildung 3.7: Renormierung $R^{(ph)}(q)$ langwelliger Phononen gem. (3.47) für die Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor gem. (2.8) mit (2.9) und $\nu = 4, \dots, 10$ über q/κ . Die Renormierung startet für alle Modellfunktionen bei $R^{(ph)}(q \rightarrow 0) = -\frac{2}{3}\Delta^2$ und strebt für große Wellenzahlen ($q \gg \kappa, q \ll q_D$) gegen $R^{(ph)}(q \gg \kappa) = -\frac{9}{8}\Delta^2$. Die „Ausschnittsvergrößerung“ zeigt die stärkere q -Abhängigkeit für $q \approx \kappa$.

Abbildung 3.7 zeigt $R^{(ph)}(q)$ gemäß (3.49) für $\nu = 4, \dots, 10$ anhand der analytischen Ausdrücke in Tabelle (3.3). In der Abbildungen ist q auf die reziproke charakteristische Korrelationslänge κ skaliert. κ ist im allgemeinen sehr viel kleiner als q_D (siehe Tabelle (2.2)). Die eingezeichneten kleineren Abbildungen sind „Vergrößerungen“ für den q -Bereich $0 \leq q \leq 2\kappa$. Für $q \simeq \kappa$ folgt eine stärkere q -Abhängigkeit von $R^{(ph)}(q)$.

3.2.4 Scheinbare Phononen-Gap-Energie

Die weitere Diskussion wird für $\varepsilon_R^2(q)$ durchgeführt, um der Bildung von $\varepsilon_R(q)$ (3.47) gerecht zu werden. Zudem werden weitere gemeinsame Eigenschaften der Phononen- und Magnonen-Selbstenergie verdeutlicht. Die Diskussion folgt dabei im wesentlichen dem Abschnitt 3.1.5 für die scheinbare Magnonen-Gap-Energie.

Für $q \gg \kappa$ tritt, zusätzlich zur Renormierung, eine scheinbare Gap-Energie infolge der langreichweitigen Inhomogenitäten, wie sie im langwelligen Bereich von $S(q)$ ihren Niederschlag finden, auf. Multiplikation der Ausdrücke für $R^{(ph)}(q) = \frac{R^{(m)}(q)}{2}$, mit $R^{(m)}(q)$ gemäß Tabelle (3.4), für $q > \kappa$ mit $\hbar^2 u^2 q^2$ (vgl. (3.47), (3.48)) ergibt näherungsweise

$$\varepsilon_R^2(q) = \left(E_G^{(ph)}\right)^2 + \hbar^2 u^2 q^2 \text{ für } q > \kappa$$

mit

$$\left(E_G^{(ph)}\right)^2 = \alpha \Delta^2 \hbar^2 u^2 \kappa^2 \quad (3.50)$$

für die scheinbare Gap-Energie $E_G^{(ph)}$. Diese ist die Folge einer "Wolke" aus Kompensationsphononen, die auf die selbe Weise wie die Kompensationsmagnonen als Folge der Inhomogenitäten in amorphen Festkörpern entstehen (vgl. Abschnitt 3.1.5). Die Kompensationsphononen begleiten das Phonon als Wellenpaket und kompensieren die Abweichungen der amorphen Struktur vom homogenen Kontinuum, wobei das Phonon und das Wellenpaket zusammen ein „Phonon-dressed Phonon“ bilden. Die Kompensationsphononen verschwinden für sehr langwellige Phononen mit $q \ll \kappa$. In Abb. 3.8 sind für $\nu = 6, \dots, 10$ die Terme $q^2 R^{(ph)}(q)$ sowie deren lineare Extrapolationen über q^2 aufgetragen. Zusätzlich sind in Tabelle (3.8) die analytisch bzw. numerisch (für $\nu = 4, 5$) erhaltenen Ergebnisse für die Gap-Energie zusammengestellt.

Für die Modellfunktion (2.8), mit (2.9) für den statischen Strukturfaktor folgt :

$$\left(E_G^{(m)}\right)^2 = \frac{71 \hbar^2 u^2 \kappa^2}{32(\nu - 5)} \Delta^2, \quad \nu > 5$$

Für $\nu \leq 5$ gilt diese Beziehung nicht mehr. Aus diesem Grunde wird hier das Ergebnis der jeweiligen numerischen linearen Extrapolation (s. Abb.3.8) angegeben.

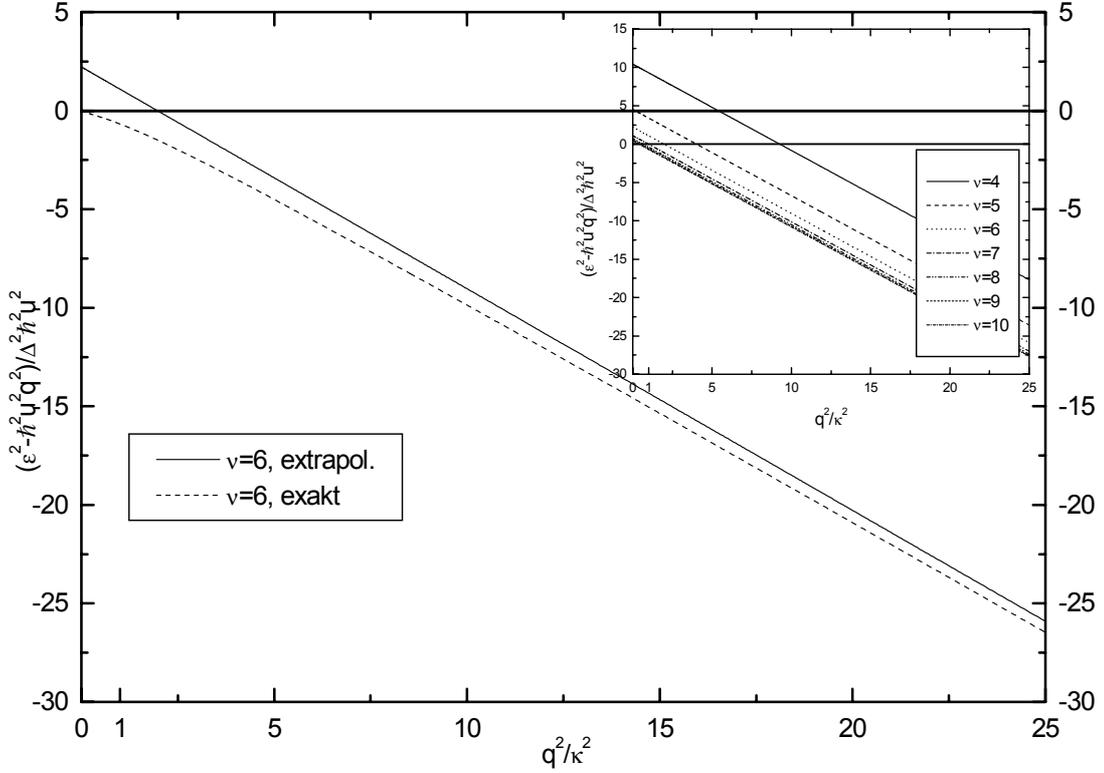


Abbildung 3.8: Lineare Extrapolation der Änderung (Renormierung) der Energie langwelliger Phononen aus dem Bereich großer Wellenzahlen ($q \gg \kappa$) in den Bereich kleiner Wellenzahlen ($q \ll \kappa$). Die Extrapolation zeigt das Auftreten einer scheinbaren Gap-Energie mit $E_G^2 = \alpha \Delta^2 \hbar^2 u^2 \kappa^2$ infolge der Bildung einer „Wolke“ von „Kompensationsphononen“ aufgrund der Strukturfluktuationen. In der eingefügten Abbildung ist die lineare Extrapolation zusammen mit der Energie-Änderung dargestellt. Man erkennt, daß für kleine Wellenzahlen die scheinbare Gap-Energie (und damit auch die Wolke von Kompensationsphononen) verschwindet.

ν	α
4	(numerisch): 10.933
5	(numerisch): 4.524
≥ 6	$\frac{2.2188}{\nu-5}$

Tabelle 3.8: Analytisch bzw. numerisch (für $\nu = 4, 5$) erhaltenen Ergebnisse für den Faktor α für die scheinbare Magnonen-Gap-Energie gem. (3.33).

3.3 Zustandsdichte aus dem Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus

3.3.1 Magnonen-Zustandsdichte

Die Magnonen-Zustandsdichte $D^{(m)}(E)$ lautet in üblicher Weise

$$D^{(m)}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\vec{q}} \left\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(m)}(E) \right\rangle, \quad (3.51)$$

ausgedrückt durch die Spur der strukturgemittelten Magnonen-Greenfunktion $\left\langle G_{\vec{q}\vec{q}'}^{(m)}(E) \right\rangle$ (3.14) in doppelseitig Fourier-transformierter (\vec{q}, \vec{q}') -Darstellung für amorphe Ferromagneten. In (3.14) bedeutet $S(\vec{q})$ den statischen Strukturfaktor im langwelligen Bereich und $\varepsilon_m(\vec{q}) = D_0 q^2$ die Magnonen-Selbstenergie in quasi-kristalliner Näherung mit der Stiffnesskonstanten D_0 . Weiterhin ist (3.23)

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q}) &\equiv \varepsilon_m(q) + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{(\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})) (\varepsilon_m(\vec{q}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k}))}{\varepsilon_m(\vec{q}) - \varepsilon_m(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \\ &= D_0 \left(1 + R^{(m)}(q)\right) q^2 \equiv D_r q^2 \end{aligned} \quad (3.52)$$

die renormierte Selbstenergie langwelliger Magnonen mit der renormierten Stiffnesskonstanten D_r aufgrund der Renormierung $R^{(m)}(q)$ gemäß dem MKF (3.30). Mit Hilfe der Dirac-Formel (3.27) erhält man aus der retardierten Greenfunktion (3.14) mit (3.51) die Magnonen-Zustandsdichte

$$\begin{aligned} D^{(m)}(E) &= \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \delta(E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})) \\ &+ \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \delta(E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})) \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{E - \varepsilon_m(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \\ &+ \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(E - \varepsilon_m(\vec{k})) \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})} S(\vec{q} - \vec{k}) \end{aligned} \quad (3.53)$$

In (3.53) bedeutet der erste Summand den Anteil der Magnonen-Zustandsdichte in einem homogenen Kontinuum mit renormierter Stiffnesskonstante D_r (3.52), der zweite Summand ist die Modifikation der Magnonen-Zustandsdichte aufgrund der Inhomogenitäten und der dritte Summand beschreibt den Anteil zusätzlicher Magnon-Amorphonen-Zustände, die eine Folge der schwachen, ausgedehnten Inhomogenitäten sind (vgl. [48]).

3.3.2 Phononen-Zustandsdichte

Die Phononen-Zustandsdichte $D^{(ph)}(\omega)$ lautet in üblicher Weise (vgl. [121])

$$D^{(ph)}(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \sum_{\vec{q}} \left\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(ph)}(\omega) \right\rangle, \quad (3.54)$$

ausgedrückt durch die Spur der strukturgemittelten Phononen-Greenfunktion $\left\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(ph)}(\omega) \right\rangle$ (3.41) in doppelseitig Fourier-transformierter (\vec{q}, \vec{q}') -Darstellung, analog zur Magnonen-Zustandsdichte. In (3.41) bedeutet $\varepsilon_{ph}(\vec{q}) = \varepsilon(\vec{q}) = \hbar u_0 q$ die Phononen-Selbstenergie in quasi-kristalliner Näherung mit der Schallgeschwindigkeit $u_0 = u_{0L/T}$ für longitudinale bzw. transversal polarisierte langwellige akustische Phononen.

Weiterhin ist (3.47)

$$\begin{aligned}\tilde{\varepsilon}_{ph}^2(\vec{q}) &\equiv \varepsilon_{ph}^2(q) + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{(\varepsilon_{ph}^2(\vec{k}) - \varepsilon_{ph}^2(\vec{q} - \vec{k})) (\varepsilon_{ph}^2(\vec{q}) - \varepsilon_{ph}^2(\vec{q} - \vec{k}))}{\varepsilon_{ph}^2(\vec{q}) - \varepsilon_{ph}^2(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \\ &= \hbar^2 u_0^2 \left(1 + R^{(ph)}(q)\right)^2 q^2 \equiv \hbar^2 u_r^2 q^2\end{aligned}$$

für die renormierte Selbstenergie langwelliger Phononen mit der renormierten Schallgeschwindigkeit u_r mit der Renormierung $R^{(ph)}(q)$ (3.48).

Mit Hilfe der Dirac-Formel (3.27) erhält man aus der retardierten Greenfunktion (3.41) mit (3.54) die Phononen-Zustandsdichte :

$$\begin{aligned}D^{(ph)}(\omega) &= 2\omega \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \delta(\hbar^2\omega^2 - \tilde{\varepsilon}_{ph}^2(\vec{q})) \\ &\quad + 2\omega \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \delta(\hbar^2\omega^2 - \tilde{\varepsilon}_{ph}^2(\vec{q})) \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_{ph}^2(\vec{k}) - \varepsilon_{ph}^2(\vec{q} - \vec{k})}{\hbar^2\omega^2 - \varepsilon_m^2(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \\ &\quad + 2\omega \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(\hbar^2\omega^2 - \varepsilon_{ph}^2(\vec{k})) \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_{ph}^2(\vec{k}) - \varepsilon_{ph}^2(\vec{q} - \vec{k})}{\hbar^2\omega^2 - \tilde{\varepsilon}_{ph}^2(\vec{q})} S(\vec{q} - \vec{k})\end{aligned}\quad (3.55)$$

In (3.55) bedeutet der erste Summand den Anteil der Phononen-Zustandsdichte in einem homogenen Kontinuum mit renormierter Schallgeschwindigkeit u_r , der zweite Beitrag ist die Änderung der Phononen-Zustandsdichte aufgrund der Inhomogenitäten und der dritte Summand beschreibt den Anteil zusätzlicher Phonon-Amorphonen-Zustände, die aus den schwachen, ausgedehnten Inhomogenitäten entstehen, analog zu Abschnitt 3.3.2 (vgl. [48]).

3.3.3 Erhaltung der Gesamtzahl der (Magnonen-und Phononen-) Zustände

Für die Gesamtzahl der Magnonen-Zustände, bezogen auf die Teilchendichte der magnetischen Atome gilt:

$$\begin{aligned}Z^{(m)} &= \int dE D^{(m)}(E) \\ &= \int dE \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \delta(E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})) \\ &\quad + \int dE \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \delta(E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})) \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{E - \varepsilon_m(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \\ &\quad + \int dE \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(E - \varepsilon_m(\vec{k})) \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})} S(\vec{q} - \vec{k}) \\ &= \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \\ &\quad + \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{\tilde{\varepsilon}_m(\vec{q}) - \varepsilon_m(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \\ &\quad + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{\varepsilon_m(\vec{k}) - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})} S(\vec{q} - \vec{k}) \\ &= \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} = 1\end{aligned}$$

In analoger Weise erhält man für die Gesamtzahl $Z^{(ph)}$ der Phononen-Zustände einer Polarisationsrichtung, bezogen auf die Teilchendichte

$$\begin{aligned} Z^{(ph)} &= \int d\omega D^{(ph)}(\omega) = \int d\omega^2 \frac{D^{(ph)}(\omega)}{2\omega} \\ &= \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} = 1, \end{aligned}$$

mit der Substitution $d\omega \rightarrow \frac{1}{2\omega}d\omega^2$ und $D^{(ph)}(\omega)$ aus (3.55). Die Erhaltung der Gesamtzahl der Phononen- und Magnonen-Zustände ist somit genau dann gewährleistet, wenn sowohl der Amorphonen-Anteil als auch der durch die Inhomogenitäten modifizierte Anteil der Zustandsdichte berücksichtigt werden.

3.3.4 Amorphonen

In der weiteren Diskussion werden die Magnonen- und Phononen-Zustandsdichte $D^{(m)}(E)$ bzw. $D^{(ph)}(\omega)$ gemeinsam behandelt. Dabei werden die Substitutionen

$$E \equiv D_r q_E^2$$

für Magnonen und

$$\omega \equiv u_r q_E$$

für Phononen verwendet, mit q_E als der Wellenzahl von Magnonen mit der Energie E und von Phononen mit der Kreisfrequenz ω . *Indem man die Zustandsdichte im homogenen (quasi-kristallinen) Kontinuum absepariert, können die Änderungen der Magnonen- und der Phononen-Zustandsdichte somit vollkommen analog beschrieben werden.*

Man erhält für die Magnonen-Zustandsdichte, unter Verwendung von $\tilde{\varepsilon}_m(\vec{q}) = D_0 q^2 (1 + R^{(m)}(q))$ in (3.53), mit der quasi-kristallinen Stiffnesskonstanten D_0 :

$$\begin{aligned} D^{(m)}(q_E) &= D_{H0}^{(m)}(q_E) (1 + d_R(q_E) + d_I(q_E) + d_A(q_E)) \\ &\equiv D_{H0}^{(m)}(q_E) + \Delta D^{(m)}(q_E). \end{aligned} \quad (3.56)$$

Für die Phononen-Zustandsdichte ist bei der Bildung von $\tilde{\varepsilon}_{ph}^2(\vec{q}) = \hbar^2 u_0^2 q^2 (1 + R^{(ph)}(q))^2$ in (3.55) die Beziehung (3.47) bzw. Gl. (3.49) zu berücksichtigen. Es folgt $\tilde{\varepsilon}_{ph}^2(\vec{q}) = \hbar^2 u_0^2 q^2 (1 + R^{(m)}(q))$ mit der quasi-kristallinen Schallgeschwindigkeit u_0 und für die Phononen-Zustandsdichte:

$$\begin{aligned} D^{(ph)}(q_E) &= D_{H0}^{(ph)}(q_E) (1 + d_R(q_E) + d_I(q_E) + d_A(q_E)) \\ &\equiv D_{H0}^{(ph)}(q_E) + \Delta D^{(ph)}(q_E). \end{aligned} \quad (3.57)$$

Dabei bedeuten $D_{H0}^{(m)}(q_E) \equiv \frac{3}{D_0 q_D^2} \frac{q_E}{q_D}$ und $D_{H0}^{(ph)}(q_E) \equiv \frac{3}{\hbar u_0 q_D} \frac{q_E^2}{q_D^2}$ die Zustandsdichte für langwellige Magnonen und akustische Phononen in einem homogenen (quasi-kristallinen) Kontinuum und $\Delta D^{(m)}(q_E)$ bzw. $\Delta D^{(ph)}(q_E)$ die entsprechenden Änderungen der Zustandsdichte.

Die relativen Beiträge zur Änderung der Zustandsdichten in den Gln.(3.56,3.57) sind die Modifikation aufgrund der Renormierung, $d_R(q_E)$, die Änderung der Zustandsdichte aufgrund der Inhomogenitäten, $d_I(q_E)$, und $d_A(q_E)$ für die Magnon-Amorphonen- bzw. Phonon-Amorphonen-Zustände.

Diese sind durch

$$d_R(q_E) = -R^{(m)}(q_E) - \frac{q_E}{2} \frac{\partial R^{(m)}(q_E)}{\partial q_E} \quad (3.58)$$

$$d_I(q_E) = \frac{3}{2q_D^3} \int_0^{q_D} dk \int_{-1}^1 dx k^2 \frac{2q_E kx - q_E^2}{q_E^2 - k^2} S\left(\sqrt{q_E^2 + k^2 - 2q_E kx}\right) \quad (3.59)$$

$$d_A(q_E) = \frac{3}{2q_D^3} \int_0^{q_D} dq \int_{-1}^1 dx q^2 \frac{2q_E qx - q^2}{q_E^2 - q^2} S\left(\sqrt{q_E^2 + q^2 - 2q_E qx}\right) \quad (3.60)$$

sowohl für Magnonen als auch für Phononen gegeben.

Der relative Anteil $d_R(q_E)$ (3.58) läßt sich anhand der Ausdrücke in Tabelle 3.3 ermitteln. Für kleine Energien, ausgedrückt durch q_E , $q_E \ll \kappa$, besitzt $d_R(q_E)$ den Grenzwert $d_R(0) = \frac{4}{3}\Delta^2$. Die stärkere q - Abhängigkeit von $R^{(m)}(q)$ im Bereich $q \simeq \kappa$ findet ihren Niederschlag im entsprechenden q_E - Bereich von $d_R(q_E)$. Bei großen Werten für q_E ($\kappa \ll q_E \ll q_D$) strebt $d_R(q_E)$ schließlich zu einem Grenzwert von $d_R(q_E) = \frac{9}{4}\Delta^2$.

Für niederenergetische Zustände ($q_E \lesssim 0.8 q_D$) folgen die Ausdrücke aus Tab.(3.9) für die relativen Änderungen der Zustandsdichte $d_I(q_E)$ (3.59) für die Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor im langwelligen Bereich (2.8) mit $4 \leq \nu \leq 10$.

ν	$d_I(q_E)$
4	$\Delta^2 \left(\frac{\pi\kappa^3 - 4q_E\kappa^2 + 4\pi q_E^2\kappa - 10q_E^3}{2q_E(4q_E^2 + \kappa^2)} - \frac{\kappa}{q_E} \arctan\left(\frac{\kappa}{2q_E}\right) \right)$
5	$\Delta^2 \left(\frac{\kappa^2(11q_E^2 + 2\kappa^2)}{4q_E(4q_E^2 + \kappa^2)^{\frac{3}{2}}} \ln\left(\frac{\sqrt{4q_E^2 + \kappa^2} + 2q_E}{\sqrt{4q_E^2 + \kappa^2} - 2q_E}\right) - \frac{2\kappa^2 + 5q_E^2}{4q_E^2 + \kappa^2} \right)$
6	$\Delta^2 \frac{q_E^2(\kappa^2 - 20q_E^2)}{(4q_E^2 + \kappa^2)^2}$
7	$\Delta^2 \left(\frac{\kappa^4(17q_E^2 + 2\kappa^2)}{8q_E(4q_E^2 + \kappa^2)^{\frac{5}{2}}} \ln\left(\frac{\sqrt{4q_E^2 + \kappa^2} + 2q_E}{\sqrt{4q_E^2 + \kappa^2} - 2q_E}\right) - \frac{2\kappa^4 + 9q_E^2\kappa^2 + 40q_E^4}{2(4q_E^2 + \kappa^2)^2} \right)$
8	$\Delta^2 \frac{q_E^2(5\kappa^4 - 136q_E^2\kappa^2 - 240q_E^4)}{(4q_E^2 + \kappa^2)^3}$
9	$\Delta^2 \left(\frac{3\kappa^6(23q_E^2 + 2\kappa^2)}{32q_E(4q_E^2 + \kappa^2)^{\frac{7}{2}}} \ln\left(\frac{\sqrt{4q_E^2 + \kappa^2} + 2q_E}{\sqrt{4q_E^2 + \kappa^2} - 2q_E}\right) - \frac{6\kappa^6 + 37q_E^2\kappa^4 + 392q_E^4\kappa^2 + 640q_E^6}{8(4q_E^2 + \kappa^2)^3} \right)$
10	$\Delta^2 \frac{q_E^2(35\kappa^6 - 1204q_E^2\kappa^4 - 4272q_E^4\kappa^2 - 4800q_E^6)}{15(4q_E^2 + \kappa^2)^4}$

Tabelle 3.9: Relative Änderung $d_I(q_E)$ gemäß (3.59) für die verschiedenen Modellfunktionen $S(k)$ (2.8) für den statischen Strukturfaktor im Kleinwinkelbereich für $\nu = 4, \dots, 10$.

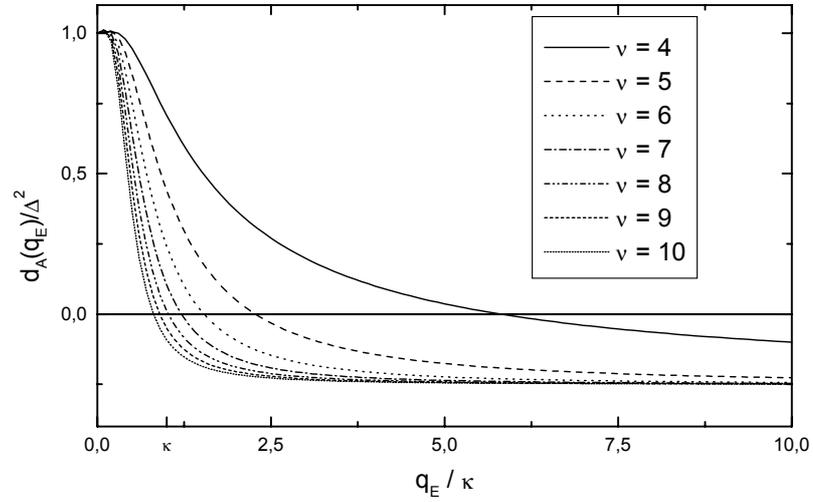


Abbildung 3.9: Relative Änderung $d_A(q_E) = d_I(q_E) + \Delta^2$ (3.60,3.61) der Zustandsdichte langwelliger *Magnonen und Phononen* infolge der Amorphonen-Zustände für die Modellfunktionen (2.8) mit $\nu = 4, \dots, 10$ (s.a. Tabelle 3.9) über q_E/κ . Für große q_E , $\kappa \ll q_E \ll q_D$ strebt $d_I(q_E)$ gegen $-\frac{1}{4}\Delta^2$. Der Anstieg von $d_A(q_E)$ im Bereich $q_E \ll \kappa$ führt zum Anstieg der Zustandsdichte im niederenergetischen Bereich.

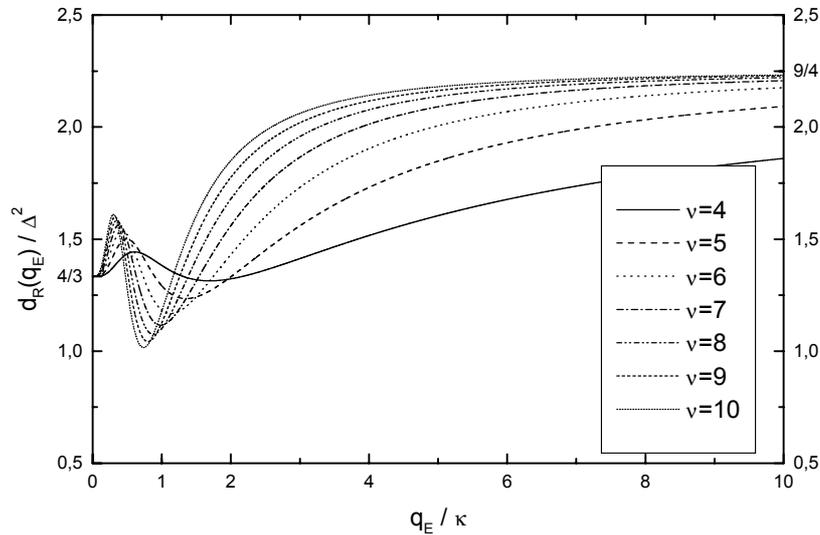


Abbildung 3.10: Relative Änderung der Zustandsdichte langwelliger *Magnonen und Phononen* $d_R(q_E)$ (3.58) infolge der Renormierung $R^{(m/ph)}(q)$ (s.a. Tabelle 3.3) für die Modellfunktionen (2.8) mit $\nu = 4, \dots, 10$ über q_E/κ . Für große q_E , $\kappa \ll q_E \ll q_D$ strebt $d_R(q_E)$ gegen $\frac{9}{4}\Delta^2$.

Für sehr kleine ($q_E \ll \kappa$) bzw. sehr große Wellenzahlen ($\kappa \ll q_E \ll q_D$) folgt schließlich

$$\begin{aligned} d_I(q_E) &= \Delta^2 \frac{(\nu-3)q_E^2}{3\kappa^2}; \quad q_E \ll \kappa, \nu = 4, \dots, 10 \\ d_I(q_E) &= \Delta^2 \left(-\frac{5}{4} + \frac{11(\nu-5)\kappa^2}{16q_E^2} \right); \quad q_E \gg \kappa, \nu \geq 6 \\ d_I(q_E) &= \Delta^2 \left(-\frac{5}{4} + \frac{\pi\kappa}{2q_E} \right); \quad q_E \gg \kappa, \nu = 4 \\ d_I(q_E) &= \Delta^2 \left[-\frac{5}{4} + \frac{11\kappa^2}{32q_E^2} \ln \left(16 \frac{q_E^2}{\kappa^2} \right) - \frac{3\kappa^2}{16q_E^2} \right]; \quad q_E \gg \kappa, \nu = 5 \end{aligned}$$

Auf der anderen Seite hängt die relative Änderung der Amorphonen-Zustände $d_A(q_E)$ für die betrachteten Zustände ($q_E \ll q_D$) mit $d_I(q_E)$ über

$$d_A(q_E) = d_I(q_E) + \Delta^2 \quad (3.61)$$

zusammen. Die relative Modifikation durch die Amorphonen-Zustände startet mit $d_A(0) = \Delta^2$, mit einer geringen Erhöhung, um bei großen Werten für q_E ($\kappa \ll q_E \ll q_D$) schließlich zum Grenzwert $d_A(q_E) = -\frac{1}{4}\Delta^2$ zu streben. Die Abbildungen 3.9 und 3.10 zeigen die relativen Änderungen $d_A(q_E)$ und $d_R(q_E)$. Bei großen Energien, ausgedrückt durch q_E , $\kappa \ll q_E \ll q_D$ sind die relativen Änderungen $d_{R/I/A}(q_E)$ konstant und es folgt für die Zunahme der Zustandsdichte in den Gln.(3.56,3.57)

$$\Delta D^{(m/ph)}(q_E) = \frac{3}{4}\Delta^2 D_{H0}^{(m/ph)}(q_E), \quad \kappa \ll q_E \ll q_D. \quad (3.62)$$

Dieses Verhalten entspricht der Zustandsdichte von Magnonen bzw. Phononen in einem homogenen Kontinuum mit konstanter Renormierung der Energie der Elementaranregungen.

Der Anstieg der Zustandsdichte im niederenergetischen Bereich ist in Abb. 3.11 für Magnonen bzw. Abb. 3.12 für Phononen gezeigt. Die Zustandsdichten für Magnonen und Phononen weisen im Bereich kleiner Energien ($E \ll D_0\kappa^2$ bzw. $\omega \ll u_0\kappa$) in der Darstellung $\Delta D^{(m)}(E)/\sqrt{E}$ und $\Delta D^{(ph)}(\omega)/\omega^2$ Peaks auf, die als Beitrag zum Bosonen-Peak interpretiert werden (vgl. [44]). Die Anhebung der Zustandsdichte im gesamten Energiebereich ist auf die Renormierung zurückzuführen. Der Peak in $\Delta D^{(m)}(E)/\sqrt{E}$ und $\Delta D^{(ph)}(\omega)/\omega^2$ im niederenergetischen Bereich hingegen entsteht insbesondere aufgrund des steigenden Beitrages der Amorphonen-Zustände für kleine Energien.

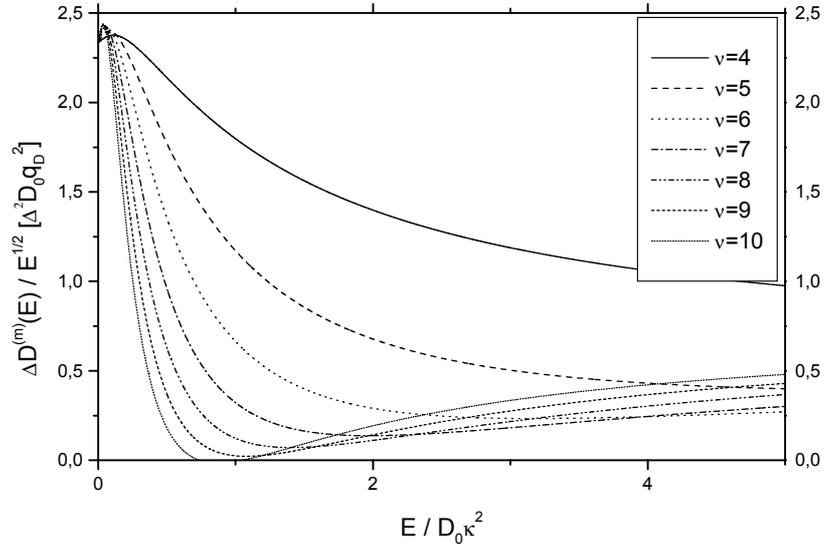


Abbildung 3.11: Erhöhung der Zustandsdichte $\Delta D^{(m)}(E)/\sqrt{E}$ (3.62) für niederenergetische Magnonen infolge der Änderungen aufgrund der Renormierung sowie der Inhomogenitäten und der Amorphonen- Zustände über $E/D_0\kappa^2$. Der Anstieg der Zustandsdichte gegenüber der Zustandsdichte im homogenen Kontinuum wird hauptsächlich durch die Renormierung verursacht. Der Peak im niederenergetischen Bereich entsteht hingegen durch die Amorphonen- Zustände.

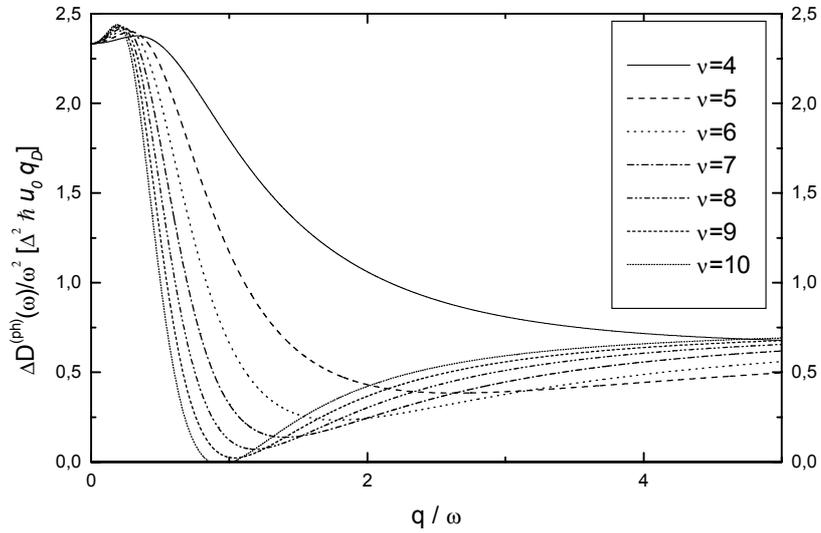


Abbildung 3.12: Erhöhung der Zustandsdichte $\Delta D^{(ph)}(\omega)/\omega^2$ (3.62) für niederenergetische Phononen infolge der Änderungen aufgrund der Renormierung sowie der Inhomogenitäten und der Amorphonen- Zustände über $E/\hbar u_0\kappa$. Der Peak im niederenergetischen Bereich wird, wie auch der Peak in der Magnonen-Zustandsdichte, als Beitrag zum Bosonen-Peak interpretiert.

Das räumliche Verhalten der Magnon- und Phonon-Amorphenen wird anhand der räumlichen Korrelationsfunktion der Amorphenen-Zustände verdeutlicht. Die räumliche Korrelationsfunktion $\eta(r, q_E)$, mit $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, ausgedrückt anhand der Greenfunktion $G_{ij}^{(m)}(E), G_{ij}^{(ph)}(\omega)$ für Magnonen bzw. Phononen in Orts- (\vec{r}_i, \vec{r}_j) -Darstellung, lautet

$$\begin{aligned}\eta^{(m)}(r, q_E) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left\langle G_{r0}^{(m)}(E) \right\rangle \\ \eta^{(ph)}(r, q_E) &= -\frac{2\omega}{\pi} \operatorname{Im} \left\langle G_{r0}^{(ph)}(\omega) \right\rangle.\end{aligned}$$

Mit Hilfe der doppelseitigen Fourier-Transformation erhält man für die räumliche Korrelationsfunktion der Magnonen

$$\begin{aligned}\eta^{(m)}(r, q_E) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}'} e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{r}} \left\langle G_{\vec{q}\vec{q}'}^{(m)}(E) \right\rangle \\ &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\vec{r}} \frac{1 + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q}-\vec{k})}{E - \varepsilon_m(\vec{k})} S(\vec{q}-\vec{k})}{E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})} \\ &= \frac{3}{D_0 q_D^3} \frac{\sin(q_E r)}{r} (1 + d_R(q_E) + d_I(q_E)) \\ &\quad + \frac{3}{D_0 q_D^3 r} \int dq \int_{-1}^1 dx q q_E \frac{2q q_E x - q^2}{q_E^2 - q^2} S\left(\sqrt{q_E^2 + q^2 - 2q q_E x}\right) \sin(qr) \\ &= \eta_H^{(m)}(r, q_E) (1 + d_R(q_E) + d_I(q_E)) + \eta_A^{(m)}(r, q_E).\end{aligned}$$

Dabei bedeutet $\eta_H^{(m)}(r, q_E) = \frac{3}{D_0 q_D^3} \frac{\sin(q_E r)}{r}$ die räumliche Korrelationsfunktion der Magnonen im homogenen Kontinuum.

In gleicher Weise erhält man für Phononen

$$\begin{aligned}\eta^{(ph)}(r, q_E) &= \frac{6 q_E}{\hbar u_r q_D^3} \frac{\sin(q_E r)}{r} (1 + d_R(q_E) + d_I(q_E)) \\ &\quad + \frac{6 q_E}{\hbar u_r q_D^3 r} \int dq \int_{-1}^1 dx q q_E \frac{2q q_E x - q^2}{q_E^2 - q^2} S\left(\sqrt{q_E^2 + q^2 - 2q q_E x}\right) \sin(qr) \\ &= \eta_H^{(ph)}(r, q_E) (1 + d_R(q_E) + d_I(q_E)) + \eta_A^{(ph)}(r, q_E).\end{aligned}$$

mit der räumlichen Korrelationsfunktion $\eta_H^{(ph)}(r, q_E) = \frac{6 q_E}{\hbar u_r q_D^3} \frac{\sin(q_E r)}{r}$ für Phononen im homogenen Kontinuum. Insbesondere die räumliche Korrelationsfunktion der Amorphenen lautet

$$\eta_A^{(m)}(r, q_E) = \frac{3}{D_r q_D^3 r} \int dq \int_{-1}^1 dx q q_E \frac{2q q_E x - q^2}{q_E^2 - q^2} S\left(\sqrt{q_E^2 + q^2 - 2q q_E x}\right) \sin(qr), \quad (3.63)$$

für Magnon-Amorphenen, bzw.

$$\eta_A^{(ph)}(r, q_E) = \frac{6 q_E}{\hbar u_r q_D^3 r} \int dq \int_{-1}^1 dx q q_E \frac{2q q_E x - q^2}{q_E^2 - q^2} S\left(\sqrt{q_E^2 + q^2 - 2q q_E x}\right) \sin(qr), \quad (3.64)$$

für Phonon-Amorphenen.

Die Abbildungen 3.13 und 3.14 zeigen einige Eigenschaften von $\eta_A^{(m)}(r, q_E)$ bzw. $\eta_A^{(ph)}(r, q_E)$. Im Grenzfall kleiner Energien ($E \ll D \kappa^2$, $\omega \ll \hbar u \kappa$) ist η_A proportional zur Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion $G(r)$, genauer ausgedrückt:

$$\begin{aligned}\eta_A^{(m)}(r, q_E) &\sim q_E G(r), \quad q_E \ll \kappa \\ \eta_A^{(ph)}(r, q_E) &\sim q_E^2 G(r), \quad q_E \ll \kappa\end{aligned}$$

für Magnonen bzw. Phononen, die sich daher an die Dichtefluktuationen lokalisiert sind. Dies im Gegensatz zu den „üblichen“ Magnonen und Phononen, die vollständig delokalisiert sind. Im Bereich größerer Energien zeigen Amorphonen jedoch ebenfalls delokalisiertes Verhalten mit geringerer Abnahme der Einhüllenden, verglichen mit den üblichen Elementaranregungen. Die Eigenschaften der räumlichen Korrelationsfunktion sind für die Modellfunktionen (2.8) mit $\nu = 5$ und $\nu = 10$ in den Abbildungen 3.13 und 3.14 verdeutlicht. Hier ist die räumliche Korrelationsfunktion η_A für diese Fälle abgebildet. Zum Vergleich ist auch die Korrelationsfunktion η_H für Magnonen bzw. Phononen aufgeführt.

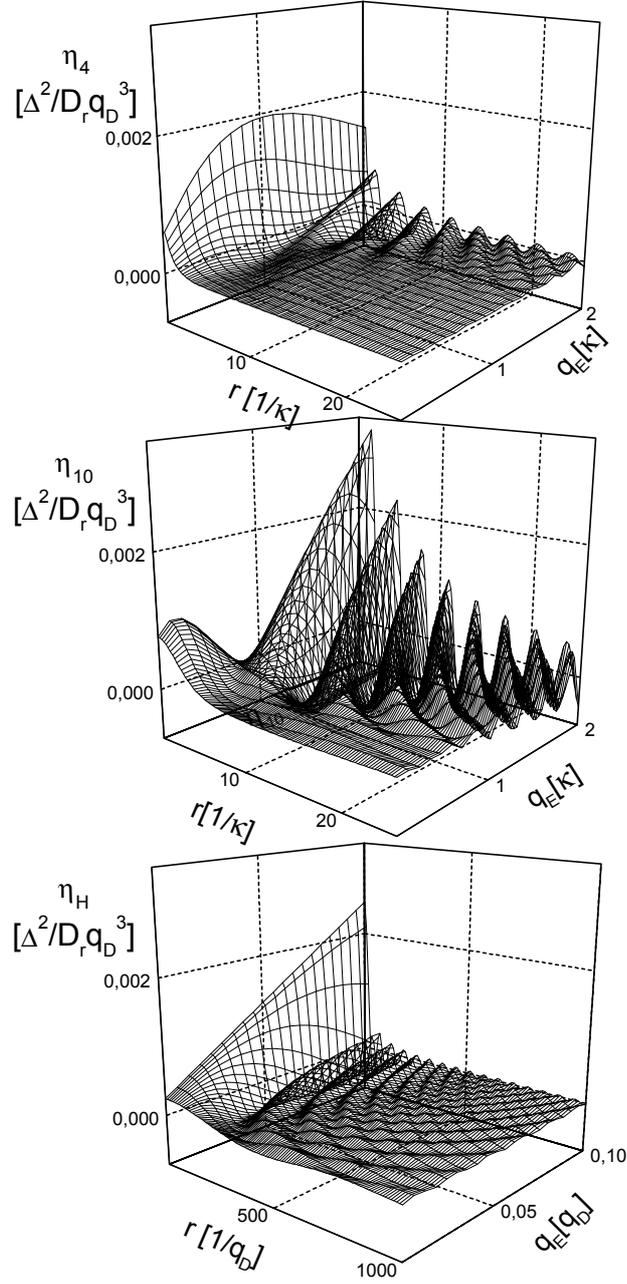


Abbildung 3.13: Räumliche Korrelation $\eta_A^{(m)}(r, q_E)$ der Magnon- Amorphonen gem. (3.63) für die Modellfunktionen des statischen Strukturfaktors gem. (2.8),(2.9) mit $\nu = 4$ (oben) und $\nu = 10$ (Mitte) über $r[1/\kappa] = 0.01, \dots, 25.0$ und $q_E[\kappa] = 0.2, \dots, 2$, sowie $\eta_H^{(m)}(r, q_E)$ über $r[1/q_D] = 0.005, \dots, 1000.0$ und $q_E[q_D] = 0.01, \dots, 0.1$ für Magnonen im Kontinuum (unten). Während die üblichen Magnonen über den gesamten Ferromagneten verteilt sind, sind die Amorphonen mit kleinen Wellenzahlen $q_E \ll \kappa$ an die Inhomogenitäten „gepinnt“. Im Bereich größerer Energie zeigen Amorphonen delokalisiertes Verhalten. Die Einhüllende der räumlichen Korrelation der Magnon-Amorphonen hat in diesem Energiebereich einen schwächeren Abfall als die Einhüllende der Magnonen.

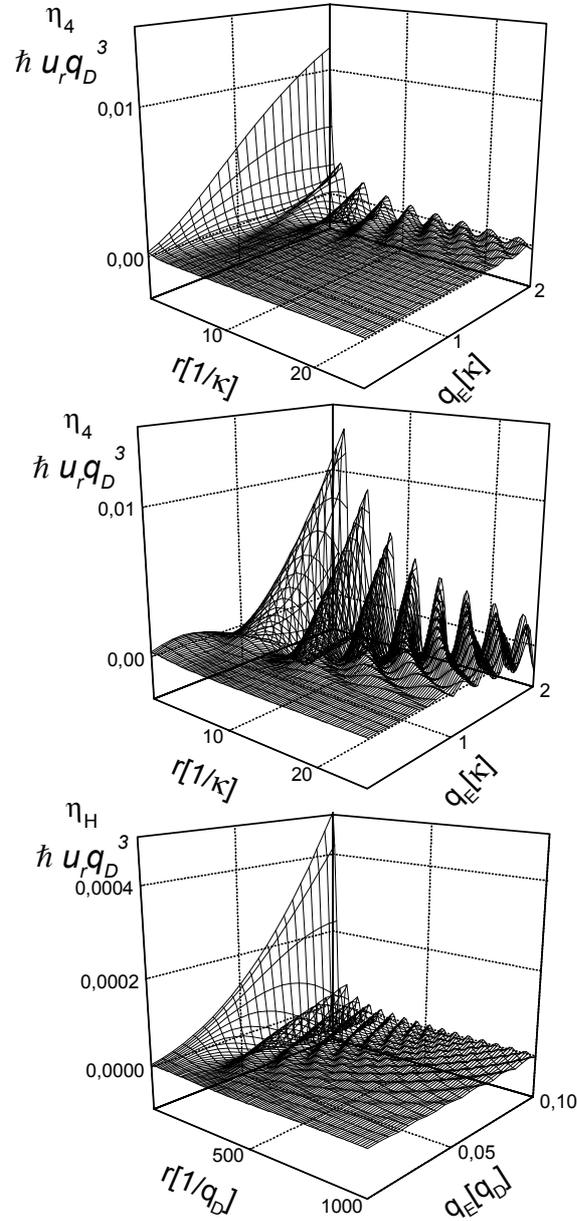


Abbildung 3.14: Räumliche Korrelation $\eta_A^{(ph)}(r, q_E)$ der Phonon- Amorphonen gem. (3.64) für die Modellfunktionen des statischen Strukturfaktors gem. (2.8),(2.9) mit $\nu = 4$ (oben) und $\nu = 10$ (Mitte) über $r[1/\kappa] = 0.005, \dots, 25.0$ und $q_E[\kappa] = 0.2, \dots, 2$, sowie $\eta_H^{(m)}(r, q_E)$ über $r[1/q_D] = 0.1, \dots, 1000.0$ und $q_E[\kappa] = 0.01, \dots, 0.1$ für Phononen im Kontinuum (unten). Während die üblichen Phononen über den gesamten Festkörper delokalisiert sind, sind die Amorphonen mit kleinen Wellenzahlen $q_E \ll \kappa$ an die Inhomogenitäten „gepinnt“. Im Bereich größerer Energie zeigen Amorphonen delokalisiertes Verhalten. Hier ist bei den Amorphonen ein geringerer Abfall der Einhüllenden der räumlichen Korrelation zu verzeichnen, als es bei den Phononen der Fall ist.

3.4 Semiquantitative Theorie für Magnonen in amorphen Ferromagneten

Alternativ zu Abschnitt 3.1 erhält man die Renormierung und Dämpfung der Magnonen in amorphen Ferromagneten qualitativ mit Hilfe einer quantenmechanischen Störungsrechnung.

Betrachten wir die Stiffnesskonstante in 3.21 als Funktional der Spin- Dichte $\rho_m(r)$:

$$D = D(\bar{\rho}) + \left. \frac{\delta \rho}{\delta D} \right|_{\bar{\rho}} \Delta \rho(r) = D_0 + D_0 \gamma_m \frac{\Delta \rho(r)}{\rho}$$

mit der magnetischen Grüneisen-Konstante $\gamma_m = -\frac{\partial \ln D}{\partial \ln V}$ [65], dann lautet die Magnonen-Energie:

$$\varepsilon^{(m)}(\vec{q}) = D_0 q^2 + D_0 q^2 \gamma_m \frac{\Delta \rho(r)}{\rho}. \quad (3.65)$$

Dabei ist $\Delta \varepsilon^{(m)}(\vec{q}) = D_0 q^2 \gamma_m \frac{\Delta \rho(r)}{\rho}$ die Störungsenergie aufgrund der magnetischen Dichte-Fluktuationen.

Die ungestörte Energie der Magnonen $\varepsilon_0^{(m)}(\vec{q}) = D_0 q^2$ besitzt die Eigenzustände $|\vec{q}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{q}\vec{r}}$. Aus diesen folgt für kleine Störungen der strukturgemittelte² Erwartungswert der Selbstenergie in der Störungsrechnung bis zur zweiten Ordnung:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon^{(m)}(q) \rangle &= \overline{\langle \vec{q} | \varepsilon_0^{(m)}(q) | \vec{q} \rangle} + \overline{\langle \vec{q} | \Delta \varepsilon^{(m)}(q) | \vec{q} \rangle} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\overline{\langle \vec{q} | \Delta \varepsilon^{(m)}(\vec{k}) | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \Delta \varepsilon^{(m)}(\vec{q}) | \vec{q} \rangle}}{\varepsilon_0^{(m)}(\vec{q}) - \varepsilon_0^{(m)}(\vec{k})} \\ &= D_0 q^2 + \frac{1}{V} \int d^3 r D_0 q^2 \gamma_m \overline{\frac{\Delta \rho(r)}{\rho}} \\ &\quad + \frac{V}{N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{V^2} \int d^3 r d^3 r' \frac{D_0^2 \gamma_m^2 q^2 k^2}{D_0 q^2 \gamma_m - D_0 k^2 \gamma_m} \overline{\frac{\Delta \rho(r) \Delta \rho(r')}{\bar{\rho}^2}} e^{-i(\vec{q}-\vec{k})(\vec{r}-\vec{r}')} \end{aligned} \quad (3.66)$$

Der zweite Summand verschwindet wegen $\overline{\Delta \rho(r)} = 0$. Mit (2.6) folgt

$$\langle \varepsilon^{(m)}(q) \rangle = D_0 q^2 + D_0 \gamma_m^2 q^2 \frac{V}{N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{q^2 - k^2} S(\vec{q} - \vec{k}) = D_0 q^2 \left(1 + R_{QM}^{(m)}(q) \right) + i \Gamma_{QM}^{(m)}(q) \quad (3.67)$$

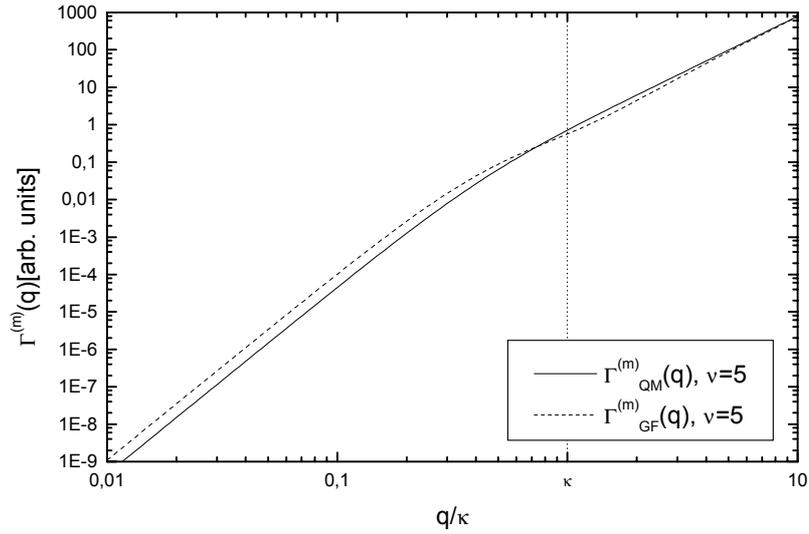
Mit Hilfe der Modellfunktionen für den statischen Strukturfaktor (2.8) erhält man die in der Tabelle (3.10) angegebenen Ausdrücke für die Dämpfung $\Gamma_{QM}^{(m)}(q)$. Für die Grenzfälle sehr kleiner ($q \ll \kappa$) bzw. großer ($\kappa \ll q \ll q_D$) Wellenzahlen folgt

$$\begin{aligned} \Gamma_{QM}^{(m)}(q) &\sim D_0 \Delta^2 \frac{q^5}{\kappa^3}, & q \ll \kappa \\ \Gamma_{QM}^{(m)}(q) &\sim D_0 \Delta^2 \frac{q^3}{\kappa}, & q \gg \kappa, q < q_D \end{aligned}$$

Dies ist in qualitativer Übereinstimmung mit den Ausdrücken in Tabelle 3.2 aus Abschnitt 3.1.3. In Abb. 3.15 sind $\Gamma_{QM}^{(m)}(q)$ und $\Gamma_{GF}^{(m)}(q)$ gem. Tabelle (3.1) für $\nu = 4$ dargestellt. Sowohl der Bereich der magnetischen Rayleigh-Streuung als auch die Dämpfung im Bereich $q \gg \kappa$ wird qualitativ übereinstimmend wiedergegeben.

²Zur Unterscheidung des quantenmechanischen Skalarproduktes von der Strukturmittelung wird letztere in diesem Abschnitt als $\overline{(\dots)}$ gekennzeichnet.

ν	$\Gamma_{QM}^{(m)}(q)/D_0\gamma_m^2$
4	$\Delta^2 \frac{2q^5}{\kappa(4q^2+\kappa^2)}$
5	$\Delta^2 \left(\frac{\pi q^3}{4\kappa} - \frac{\pi q^3 \kappa^2}{4(4q^2+\kappa^2)^{3/2}} \right)$
6	$\Delta^2 \frac{8q^5(2q^2+\kappa^2)}{\kappa(4q^2+\kappa^2)^2}$
7	$\Delta^2 \left(\frac{3\pi q^3}{8\kappa} - \frac{3\pi q^3 \kappa^4}{8(4q^2+\kappa^2)^{5/2}} \right)$
8	$\Delta^2 \left(\frac{4q^3}{3\kappa} - \frac{4q^3 \kappa^5}{3(4q^2+\kappa^2)^3} \right)$
9	$\Delta^2 \left(\frac{15\pi q^3}{32\kappa} - \frac{15\pi q^3 \kappa^6}{32(4q^2+\kappa^2)^{7/2}} \right)$
10	$\Delta^2 \left(\frac{8q^3}{5\kappa} - \frac{8q^3 \kappa^7}{5(4q^2+\kappa^2)^4} \right)$

Tabelle 3.10: Dämpfung $\Gamma_{QM}^{(m)}(q)$ für verschiedene ν .Abbildung 3.15: Gegenüberstellung der Dämpfung für Magnonen in amorphen Ferromagneten $\Gamma_{QM}^{(m)}(q)/\Delta^2 D_0 \gamma_m^2$ (3.67) aus der quantenmechanischen Störungsrechnung und $\Gamma_{GF}^{(m)}(q)/\Delta^2 D_0$ (3.28) aus dem MKF für die Modellfunktion für den statischen Strukturfaktor gem. (2.8) und (2.9) mit $\nu = 5$ über q/κ .

Die Renormierung $R_{QM}^{(m)}(q)$ in Gl. (3.67) ergibt mit Hilfe der Modellfunktionen für $S(q)$ (2.8) die in Tabelle (3.11) angegebenen Funktionen. Für die Grenzfälle ($q \ll \kappa$) und ($q \gg \kappa, q < q_D$) folgt:

$$R_{QM}^{(m)}(q) = -\Delta^2 \gamma_m^2, \quad q \ll \kappa$$

$$R_{QM}^{(m)}(q) = -\frac{5}{4} \Delta^2 \gamma_m^2, \quad q \gg \kappa$$

ν	$R_{QM}^{(m)}(q)/\Delta^2\gamma_m^2$
4	$\frac{5q^2 + \kappa^2}{4q^2 + \kappa^2}$
5	$-\left(\frac{5q^2 + \kappa^2}{4q^2 + \kappa^2} + \frac{q\kappa^2}{4(4q^2 + \kappa^2)^{3/2}} \ln\left(\frac{\kappa^2}{8q^2 + \kappa^2 - 4q\sqrt{4q^2 + \kappa^2}}\right)\right)$
6	$-\frac{20q^4 + 11q^2\kappa^2 + \kappa^4}{(4q^2 + \kappa^2)^2}$
7	$-\left(\frac{40q^4 + 21q^2\kappa^2 + 2\kappa^4}{2(4q^2 + \kappa^2)^2} + \frac{3q\kappa^4}{8(4q^2 + \kappa^2)^{5/2}} \ln\left(\frac{\kappa^2}{8q^2 + \kappa^2 - 4q\sqrt{4q^2 + \kappa^2}}\right)\right)$
8	$-\frac{240q^6 + 184q^4\kappa^2 + 51q^2\kappa^4 + 3\kappa^6}{3(4q^2 + \kappa^2)^3}$
9	$-\left(\frac{640q^6 + 488q^4\kappa^2 + 129q^2\kappa^4 + 8\kappa^6}{8(4q^2 + \kappa^2)^3} + \frac{15q\kappa^6}{32(4q^2 + \kappa^2)^{7/2}} \ln\left(\frac{\kappa^2}{8q^2 + \kappa^2 - 4q\sqrt{4q^2 + \kappa^2}}\right)\right)$
10	$-\frac{1600q^8 + 1616q^6\kappa^2 + 620q^4\kappa^4 + 115q^2\kappa^6 + 5\kappa^8}{5(4q^2 + \kappa^2)^4}$

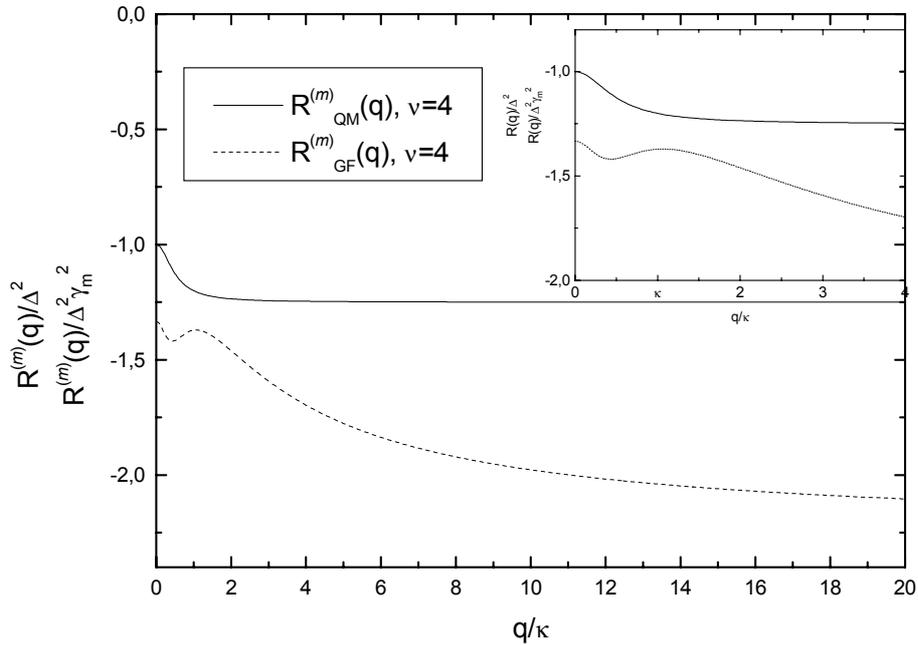
Tabelle 3.11: Renormierung $R_{QM}^{(m)}(q)$ für $\nu = 4, \dots, 10$.

Abbildung 3.16: Gegenüberstellung der Renormierung für Magnonen in amorphen Ferromagneten $R_{QM}^{(m)}(q)/\Delta^2 D_0 \gamma_m^2$ (3.67) aus der quantenmechanischen Störungsrechnung und $R_{GF}^{(m)}(q)/\Delta^2 D_0$ (3.30) aus dem MKF für die Modellfunktion des statischen Strukturfaktors gem. (2.8) und (2.9) mit $\nu = 4$ über q/κ . Man erkennt, daß insbesondere im Bereich kleiner Wellenzahlen ($q \lesssim 3\kappa$) das Verhalten der Renormierung $R_{QM}^{(m)}$ qualitativ nur gering von $R_{GF}^{(m)}$ abweicht. In diesem speziellen Fall sagt außerdem $R_{GF}^{(m)}$ das Erscheinen einer scheinbaren Gap-Energie voraus.

In qualitativer Übereinstimmung mit der Renormierung $R^{(m)}(q)$ gemäß (3.3) aus der Greenfunktionentheorie ist die Renormierung $R_{QM}^{(m)}(q)$ stets negativ für die unterschiedlichen verwendeten Modellfunktionen. Für $\nu = 4$ folgt hingegen für die scheinbare Gap-Energie $E_{G(QM)}$

$$E_{G(QM)} = \frac{D \Delta^2 \gamma_m^2 \kappa^2}{16}$$

In Abb. 3.16 sind $R_{QM}^{(m)}(q)$ und $R^{(m)}(q)$ für die Modellfunktion für den statischen Strukturfaktor gem. (2.8), mit (2.9) mit $\nu = 4$ als Beispiel eingetragen. Man erkennt die qualitative Übereinstimmung, insbesondere bei kleinen Wellenzahlen ($q \ll \kappa$), wobei das Anwachsen der Renormierung in Richtung auf kleinere Wellenzahlen zur Bildung der scheinbaren Gap-Energie führt.

Die Energie-Renormierung in Gl. (3.67) entsteht aufgrund der Bildung eines Wellenpaketes aus $|\vec{k}\rangle$ -Partialwellen. Diese sind Kompensationsmagnonen, welche die Hauptmode begleiten und die die Abweichungen der amorphen Struktur vom homogenen Kontinuum kompensieren (vgl. Kapitel 3.1.5).

3.5 Wärmeleitfähigkeit

Zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit \varkappa verwenden wir die verallgemeinerte Debye-Formel :

$$\varkappa = \frac{1}{3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} c_q u_q \Lambda_q \quad (3.68)$$

für Magnonen- und Phononen-Systeme mit dem Beitrag des \vec{q} -ten Zustandes zur Wärmekapazität c_q , seiner Gruppengeschwindigkeit u_q und der mittleren freien Weglänge Λ_q .

Die bei Phononen-Systemen auftretende Singularität infolge der stark wachsenden mittleren freien Weglänge Λ_q für kleine Wellenzahlen kann durch die Näherungen von Ziman [63] und Klemens [101] umgangen werden. Diese Näherungen werden auch auf Magnonen-Systeme übertragen.

3.5.1 Magnonen-Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit

Stoßfrequenz und mittlere freie Weglänge

Vernachlässigt man zunächst die Dipol-Dipol-Wechselwirkung in der Magnonen-Energie Gl. (3.65), so erhält man mit Hilfe der Eigenzustände $|\vec{q}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{q}\vec{r}}$ der ungestörten Magnonen-Energie die Übergangsmatrixelemente aus der Störungsrechnung in erster Ordnung

$$\langle \vec{q}' | \Delta \varepsilon^{(m)} | \vec{q} \rangle = \frac{D_0 q^2 \gamma_m}{V} \int d^3 r e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{r}} \frac{\Delta \rho^{(m)}(r)}{\rho^{(m)}}.$$

Für elastische Streuung von $|\vec{q}\rangle$ nach $|\vec{q}'\rangle$ folgt die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit

$$w_{\vec{q}\vec{q}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{q}' | \Delta \varepsilon^{(m)} | \vec{q} \rangle \right|^2 \delta \left(\varepsilon^{(m)}(q) - \varepsilon^{(m)}(q') \right).$$

Nach Einführung des bekannten Gewichtsfaktors aus der Transporttheorie $(1 - \cos \vartheta)$, $\vartheta = \angle_{\vec{q}\vec{q}'}$ [63], erhält man durch Summation über alle Endzustände und nach Strukturmittelung, mit Gl. (2.6), die Stoßfrequenz $\frac{1}{\tau_q^{(m)}}$ (siehe z.B. [65]):

$$\frac{1}{\tau_q^{(m)}} = \frac{V}{N} \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \frac{\pi}{\hbar} D_0 q^3 \gamma_m^2 (1 - \cos \vartheta) \delta(q - q') S(\vec{q} - \vec{q}').$$

Nach Ausführung der trivialen Integrationen folgt mit der Substitution $\cos \vartheta \rightarrow y$:

$$\frac{1}{\tau_q^{(m)}} = \frac{V}{N} \frac{D_0 \gamma_m^2}{8\pi \hbar} q^5 \int_0^2 dy y^3 S(qy). \quad (3.69)$$

Im Bereich kleiner Wellenzahlen $q \ll \kappa$ ist das Integral (3.69) infolge der Eigenschaften des statischen Strukturfaktors konstant und es folgt $\frac{1}{\tau_q^{(m)}} \sim q^5$, was der magnetischen Rayleigh-Streuung entspricht (vgl. Gl. (3.28)). Mit der Gruppengeschwindigkeit $u_q = \frac{2D_0q}{\hbar}$ erhält man für die mittlere freie Weglänge $\Lambda_q^{(m)}$:

$$\frac{1}{\Lambda_q^{(m)}} = \frac{V}{N} \frac{\gamma_m^2}{16\pi} q^4 \int dy y^3 S(qy). \quad (3.70)$$

Wärmewiderstand und Wärmeleitfähigkeit

Ziman entwickelte eine Variationsrechnung für die zeitliche Änderung der Entropie mit Hilfe der Boltzmann-Gleichung und berechnete so näherungsweise den Wärmewiderstand für die Phononenleitung $\varrho^{(ph)}$ [63]. Wir übertragen diese Methode auf den Fall der Magnonen in amorphen Ferromagneten, deren mittlere freie Weglänge durch Gl. (3.70) gegeben ist. Demnach lautet der Wärmewiderstand, bezogen auf die Teilchendichte³ n

$$\varrho^{(m)} = \frac{1}{C_V^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{c_q^{(m)}}{u_q \Lambda_q}, \quad (3.71)$$

mit $c_q^{(m)} = \frac{D_0 q^4 e^{\frac{D_0 q^2}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{D_0 q^2}{k_B T}} - 1 \right)^2 k_B T^2}$ als dem Beitrag des \vec{q} -ten Zustandes zur spezifischen Wärme der Magnonen und $C_V = 3k_B n \frac{1}{x^2} \int_0^1 d\tilde{q} \frac{\tilde{q}^6 e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}} - 1 \right)^2} \equiv 3k_B n I^{(m)}(x)$, dem Magnonen-Beitrag zur spezifischen

Wärme bei der reduzierten Temperatur $x = \frac{k_B T}{\theta_D^{(m)}}$, $\theta_D^{(m)} = D_0 q_D^2$. Es folgt, mit der Substitution $q = q_D \tilde{q}$:

$$\varrho^{(m)} = \frac{3\pi}{16} \frac{\hbar \gamma_m^2}{D_0 k_B n} \frac{1}{x^2 \left(I^{(m)}(x) \right)^2} \int_0^1 d\tilde{q} \frac{\tilde{q}^9 e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}} - 1 \right)^2} \int_0^2 dy y^3 S(q_D \tilde{q} y). \quad (3.72)$$

Für die Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(m)}$ folgt aus der Debye-Formel (3.68)

$$\varkappa^{(m)} = \frac{16}{3\pi} \frac{D_0 k_B n}{\hbar \gamma_m^2} \frac{1}{x^2} \int_0^1 d\tilde{q} \frac{\tilde{q}^3 e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}} - 1 \right)^2 \int_0^2 dy y^3 S(q_D \tilde{q} y)}. \quad (3.73)$$

In der Näherung von Klemens wird die durch die wachsende mittlere freie Weglänge $\Lambda_q^{(ph)}$ für Phononen entstehende Singularität durch die Ersetzung $\Lambda_q^{(ph)} \rightarrow \Lambda_{\bar{q}}^{(ph)}$ (mit $\bar{q} = \frac{k_B T}{\hbar u}$) umgangen [101]. Das

³Bezogen auf die Teilchendichte $n[\text{mol}/\text{cm}^3]$ erhält man die üblichen Einheiten für \varkappa : Watt/(cm K)

Analogon für Magnonen lautet, mit $\bar{q} = \sqrt{\frac{k_B T}{D_0}}$

$$\varkappa_K^{(m)} = \frac{16}{3\pi} \frac{D_0 k_B n}{\hbar \gamma_m^2} \frac{1}{x^2} \left(\frac{\int_0^{\sqrt{x}} d\tilde{q} \frac{\tilde{q}^7 e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}} - 1\right)^2}}{x^2 \int_0^2 dy y^3 S(q_D \sqrt{x} y)} + \int_{\sqrt{x}}^1 d\tilde{q} \frac{\tilde{q}^3 e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}^2}{x}} - 1\right)^2 \int_0^2 dy y^3 S(q_D \tilde{q} y)} \right) \quad (3.74)$$

nach den Substitutionen $q \rightarrow \tilde{q} q_D$ und $\bar{q} \rightarrow \sqrt{x} q_D$. Die Gegenüberstellung von $\varkappa^{(m)}$, $\varkappa_K^{(m)}$ und $(\varrho^{(m)})^{-1}$ in Abb. 3.17 zeigt das Verhalten der Wärmeleitfähigkeit in den Bereichen sehr tiefer ($T \ll \frac{D_0 \kappa^2}{k_B}$), mittlerer ($\frac{D_0 \kappa^2}{k_B} \ll T \ll \theta_D^{(m)}$) und „hoher“ Temperaturen ($T \lesssim \theta_D^{(m)}$). Bei sehr tiefen Temperaturen strebt $\varkappa^{(m)}$ für $T \rightarrow 0$ gegen den Grenzwert

$$\varkappa^{(m)}|_{T \rightarrow 0} = \left(\varrho^{(m)}\right)^{-1}|_{T \rightarrow 0} \approx 9.62 \frac{k_B n D_0 \kappa^3}{\hbar \gamma_m^2 \Delta^2 q_D^3}. \quad (3.75)$$

Wird zusätzlich die Dipol-Dipol-Wechselwirkung ($\Delta_{DD} \approx 1K k_B$) berücksichtigt, so werden die Magnonen unterhalb der entsprechenden Temperatur, $T \lesssim \Delta_{DD}/k_B$, „eingefroren“ und die Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(m)}$ fällt sehr stark (s. Abb. 3.17, Inset).

Im Bereich sehr tiefer Temperaturen tragen fast ausschließlich diejenigen Magnonen zum Wärmetransport bei, die der magnetischen Rayleigh-Streuung unterliegen. Bei mittleren Temperaturen verläuft die Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(m)}$ im wesentlichen proportional zu $T^{\frac{3}{2}}$, mit

$$\varkappa^{(m)} \approx \frac{k_B n D_0}{\hbar \gamma_m^2 \Delta^2} \left(112.05 x^{\frac{3}{2}} + 82.68 x \frac{\kappa}{q_D} \right) \quad \text{für } \frac{D_0 \kappa^2}{k_B} \ll T \ll \theta_D^{(m)}, \quad (3.76)$$

um schließlich in den „Hochtemperatur“-Grenzwert zu münden:

$$\varkappa^{(m)} \approx \frac{k_B n D_0}{\hbar \gamma_m^2 \Delta^2} \left(\frac{16\pi}{3} + 8\pi \frac{\kappa}{q_D} \right) \quad \text{für } T \rightarrow \theta_D^{(m)}. \quad (3.77)$$

Für den Temperaturbereich $T \ll \theta_D^{(m)}$ gilt außerdem $\varkappa_K^{(m)} \leq (\varrho^{(m)})^{-1} \leq \varkappa^{(m)}$, wobei $(\varrho^{(m)})^{-1}$ und $\varkappa^{(m)}$ ausgezeichnet übereinstimmen.

Bei der Diskussion des Magnonen-Anteils zur Wärmeleitfähigkeit ist zu berücksichtigen, daß die Langwellen-Näherung für die Magnonen-Energie $\varepsilon_0(q) = D_0 q^2$ für Temperaturen nahe $\theta_D^{(m)}$ zu überhöhten Werten für $\varkappa^{(m)}$ führt. Wird hingegen im Hochtemperaturbereich die realistischere Näherung $\varepsilon_S(q) = \frac{6}{\pi^2} D_0 q_D^2 \left(1 - \frac{\sin \frac{\pi q}{q_D}}{\frac{\pi q}{q_D}} \right)$ verwendet, so ist der Hochtemperatur-Grenzwert um einen Faktor ~ 0.3 vermindert. Weiterhin ist zu berücksichtigen, daß für Temperaturen etwa oberhalb der halben Curie-Temperatur, $T \gtrsim \frac{1}{2} T_C$, die Annahme von Magnonen als freie Bosonen und die Näherung $\varepsilon_0(q) = D_0 q^2$ nicht mehr gültig sind. Überdies ist die hohe Temperatur des Plateaus $\theta_D^{(m)}$ darauf zurückzuführen, daß rotonenähnliche Anregungen, wie sie im nächsten Kapitel untersucht werden, in dieser Betrachtung der Wärmeleitfähigkeit nicht berücksichtigt sind. Im Bereich mittlerer Temperaturen, $\frac{D_0 \kappa^2}{k_B} \ll T \ll \theta_D^{(m)}$, wird $\varkappa^{(m)}$ korrekt wiedergegeben. Bei sehr tiefen Temperaturen werden eine Reihe anderer Wechselwirkungen wie z.B. mit den Kernspins u.ä., wichtig, die jedoch in der vorliegenden Diskussion nicht berücksichtigt werden.

In allen untersuchten Temperaturbereichen ist $\varkappa^{(m)}$ (siehe (3.75), (3.76), (3.77)) umgekehrt proportional zu der mittleren quadratischen Dichtefluktuation Δ^2 . Weiterhin wächst $\varkappa^{(m)}$ mit der reziproken

charakteristischen Korrelationslänge κ . Mit anderen Worten, die Wärmeleitfähigkeit wächst mit sinkender Höhe bzw. sinkender räumlicher Ausdehnung der Inhomogenitäten in amorphen Ferromagneten. Abb. 3.18 zeigt $\varkappa^{(m)}$ für verschiedene Werte der reziproken charakteristischen Korrelationslänge κ . Der Fall $\kappa = 0$ entspricht dem Ergebnis von Handrich [65].

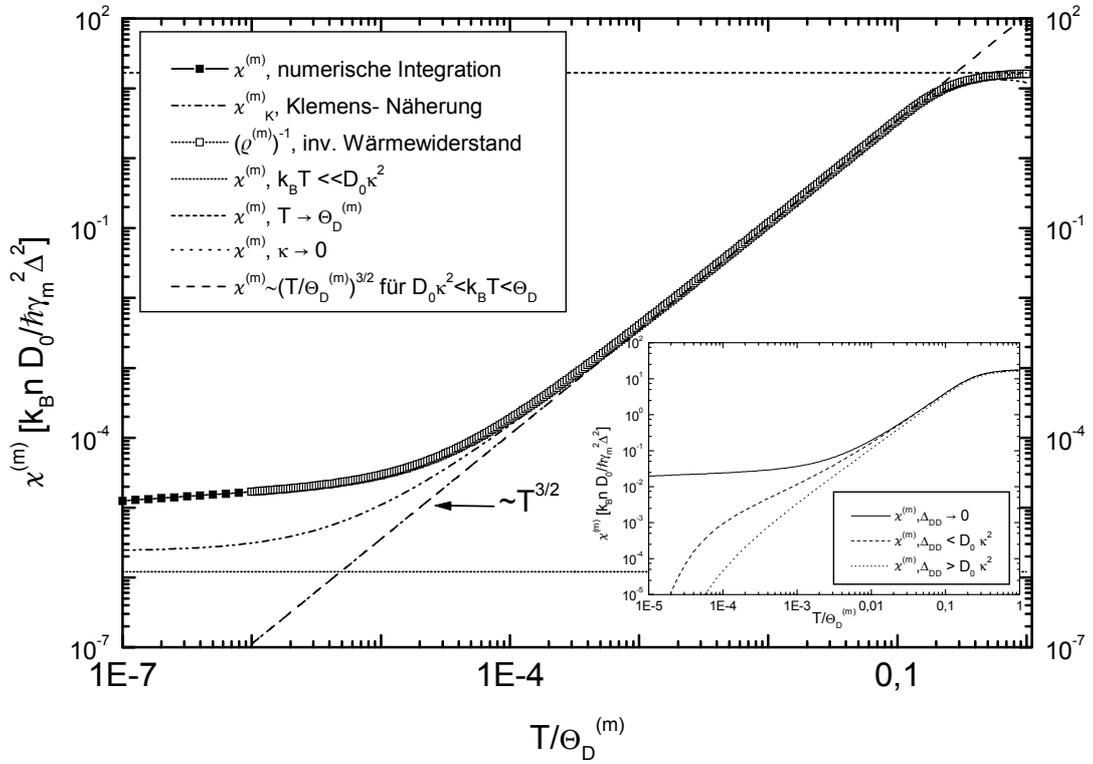


Abbildung 3.17: Magnonen- Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(m)}$ aus der numerischen Berechnung von Gl. (3.73) sowie die Übertragungen der Näherungen $\varkappa_K^{(m)}$ nach der Klemens- Methode (3.74) und des inversen Wärmewiderstandes $(\varrho^{(m)})^{-1}$ nach Ziman (3.72) auf Magnonen- Wärmeleitung. $(\varrho^{(m)})^{-1}$ und $\varkappa^{(m)}$ verlaufen nahezu identisch und können daher in der Darstellung optisch nicht voneinander getrennt werden, während $\varkappa_K^{(m)}$ eine untere Grenze für $\varkappa^{(m)}$ bildet. Dargestellt sind ferner $\varkappa^{(m)}$ für die Grenzfälle $k_B T \ll D_0 \kappa^2$ und $k_B T \rightarrow D_0 q_D^2$ sowie die Approximation $\varkappa^{(m)}$ für den Temperaturbereich $D_0 \kappa^2 \ll k_B T \ll D_0 q_D^2$. Das Inset zeigt das Verhalten von $\varkappa^{(m)}$ bei Berücksichtigung der magnetischen Dipol- Dipol- Energie $\Delta_{DD} < D_0 \kappa^2$ und $\Delta_{DD} > D_0 \kappa^2$, wobei der starke Abfall von $\varkappa^{(m)}$ für kleine Temperaturen $T \lesssim \Delta_{DD}/k_B$ sichtbar ist.

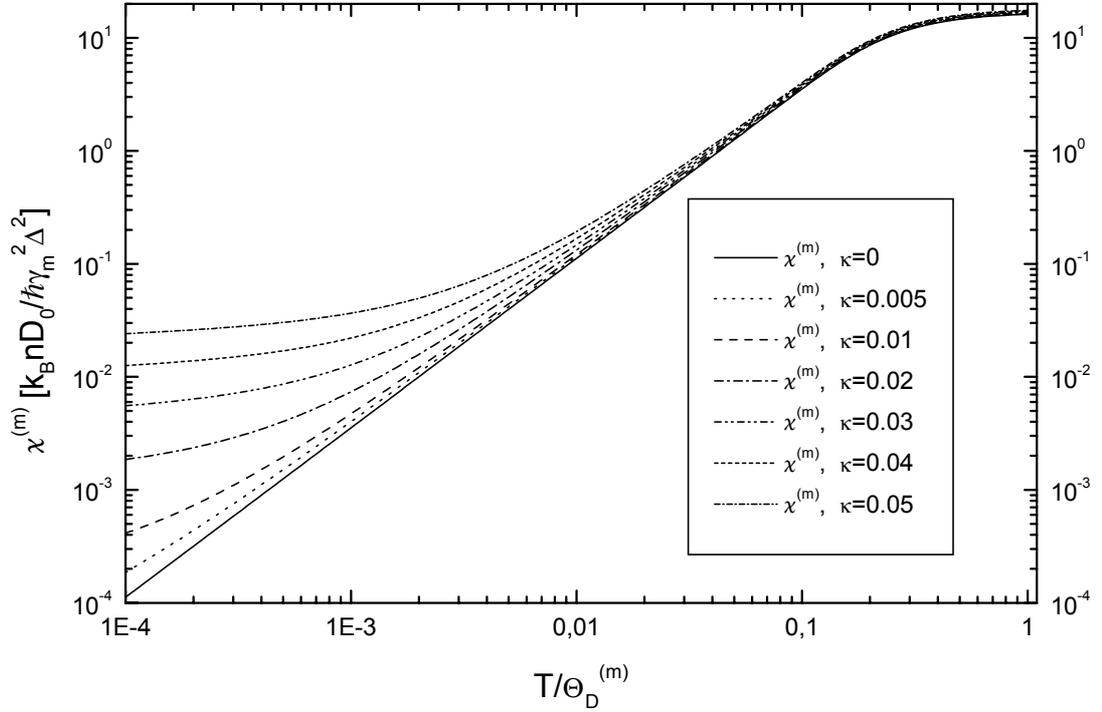


Abbildung 3.18: Magnonen- Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit $\chi^{(m)}$ für verschiedene Werte der reziproken charakteristischen Korrelationslänge $\kappa/q_D = 0.005, \dots, 0.05$ sowie für den Fall $\kappa = 0$ [65]. $\chi^{(m)}$ sinkt in allen Temperaturbereichen mit steigender Korrelationslänge $\frac{1}{\kappa}$.

3.5.2 Phononen-Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit

Stoßfrequenz und mittlere freie Weglänge

Der Arbeit [42] folgend, betrachten wir die Schallgeschwindigkeit u in 3.44 als Funktional der Teilchendichte $\rho(r)$:

$$u = u[\bar{\rho}] + \left. \frac{\delta \rho}{\delta u} \right|_{\bar{\rho}} \Delta \rho(r) = u_0 + u_0 \gamma \frac{\Delta \rho(r)}{\rho}$$

mit der Grüneisen-Konstante $\gamma = -\frac{\partial \ln u}{\partial \ln V}$. Aus der Phononen-Energie

$$\varepsilon^{(ph)}(\vec{q}) = \varepsilon_0^{(ph)}(\vec{q}) + \Delta \varepsilon^{(ph)}(\vec{q}) = \hbar u q + \hbar u q \gamma \frac{\Delta \rho(r)}{\rho}$$

erhält man, der Rechnung in Abschnitt 3.5.1 folgend, die Stoßfrequenz für die elastische Streuung der Phononen [42]

$$\frac{1}{\tau_q^{(ph)}} = \frac{V}{N} \frac{u \gamma^2}{4\pi} q^4 \int_0^2 dy y^3 S(qy). \quad (3.78)$$

Im Bereich sehr kleiner Wellenzahlen ($q \ll \kappa$) ist das Integral in (3.78) ebenfalls konstant und es folgt $\frac{1}{\tau_q^{(ph)}} \sim q^4$, was der Rayleigh-Streuung langwelliger Phononen entspricht (vgl.(3.46)). Für die mittlere freie Weglänge $\Lambda_q^{(ph)} = u \tau_q^{(ph)}$ folgt

$$\frac{1}{\Lambda_q^{(ph)}} = \frac{1}{u \tau_q^{(ph)}} = \frac{V}{N} \frac{\gamma^2}{4\pi} q^4 \int_0^2 dy y^3 S(qy).$$

Wärmewiderstand und Wärmeleitfähigkeit

Der Wärmewiderstand nach Ziman [63], bezogen auf die Teilchendichte n lautet

$$\varrho = \frac{1}{C_V} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{c_q}{u_q \Lambda_q}$$

mit $c_q = \frac{\hbar^2 u^2 q^2 e^{\frac{\hbar u q}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar u q}{k_B T}} - 1\right)^2 k_B T^2}$ als dem Beitrag des \vec{q} -ten Zustandes zur spezifischen Wärme und $C_V = 9 k_B n \frac{1}{x^2} \int_0^1 d\tilde{q} \frac{\tilde{q}^4 e^{\frac{\tilde{q}}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}}{x}} - 1\right)^2} \equiv 9 k_B n I^{(ph)}(x)$, dem Phononen-Beitrag zur spezifischen Wärme bei der reduzierten Temperatur $x = \frac{k_B T}{\hbar u q_D}$ [63]. Es folgt, mit der Substitution $q \rightarrow \tilde{q} q_D$,

$$\varrho^{(ph)} = \frac{3\pi}{2} \frac{\gamma^2 q_D}{k_B n u x^2} \frac{1}{\left(I^{(ph)}(x)\right)^2} \int_0^1 d\tilde{q} \frac{\tilde{q}^8 e^{\frac{\tilde{q}}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}}{x}} - 1\right)^2} \int_0^2 dy y^3 S(q_D \tilde{q} y). \quad (3.79)$$

Für die Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(ph)}$ ergibt die Debye-Formel (3.68)

$$\varkappa^{(ph)} = \frac{2}{3\pi} \frac{k_B n u}{\gamma^2 q_D} \frac{1}{x^2} \int_0^1 d\tilde{q} \frac{e^{\frac{\tilde{q}}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}}{x}} - 1\right)^2 \int_0^2 dy y^3 S(q_D \tilde{q} y)}. \quad (3.80)$$

Durch die wachsende mittlere freie Weglänge $\Lambda_q^{(ph)}$ für Phononen entsteht an der unteren Integrationsgrenze in Gl. (3.80) eine Singularität $\sim q^2$. Diese wird in der Näherung von Klemens dadurch umgangen, daß für Phononen mit mittlerer freier Weglänge $\Lambda_q^{(ph)} > \Lambda_{\tilde{q}}^{(ph)}$ (mit $\tilde{q} = \frac{k_B T}{\hbar u}$) diese $\Lambda_{\tilde{q}}^{(ph)}$ ersetzt wird [101]. Es folgt für die so entstehende Näherung $\varkappa_K^{(ph)}$, mit $\tilde{q} \rightarrow x q_D$,

$$\varkappa_K^{(ph)} = \frac{2}{3\pi} \frac{k_B n u}{\gamma^2 q_D} \frac{1}{x^2} \left(\frac{\int_0^x d\tilde{q} \frac{\tilde{q}^4 e^{\frac{\tilde{q}}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}}{x}} - 1\right)^2}}{x^4 \int_0^2 dy y^3 S(q_D x y)} + \int_x^1 d\tilde{q} \frac{e^{\frac{\tilde{q}}{x}}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}}{x}} - 1\right)^2 \int_0^2 dy y^3 S(q_D \tilde{q} y)} \right) \quad (3.81)$$

Die Gegenüberstellung von $\varkappa^{(ph)}$, $\varkappa_K^{(ph)}$ und $(\rho^{(ph)})^{-1}$ in Abb. 3.19 zeigt das Verhalten der Wärmeleitfähigkeit in den Bereichen mittlerer ($\frac{\hbar u \kappa}{k_B} \ll T \ll \theta_D$) und „hoher“ Temperaturen ($T \lesssim \theta_D^{(m)}$).

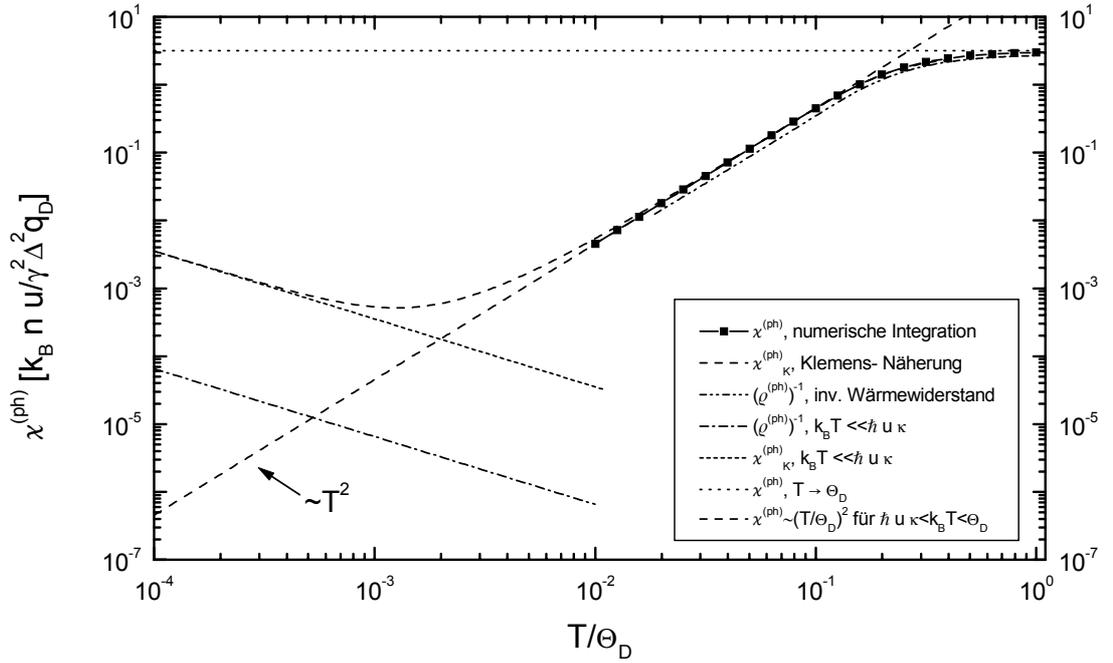


Abbildung 3.19: Phononen- Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit $\chi^{(ph)}$ gem. (3.80) (numerische Integration für den Temperaturbereich $0.1\theta_D < k_B T < \theta_D$) sowie die Näherungen $\chi_K^{(ph)}$ nach der Klemens- Methode (3.81) und der inverse Wärmewiderstand $(\varrho^{(ph)})^{-1}$ (3.79) nach Ziman. $(\varrho^{(ph)})^{-1}$ und $\chi_K^{(ph)}$ verlaufen im betrachteten Temperaturbereich identisch, während $\chi^{(ph)}$ eine untere Grenze für $\chi^{(ph)}$ bildet. Dargestellt sind ferner $\chi^{(ph)}$ für die Grenzfälle $k_B T \ll D_0 \kappa^2$ und $T \rightarrow \theta_D$ sowie die Approximation $\chi^{(ph)}$ für den Temperaturbereich $D_0 \kappa^2 \ll k_B T \ll D_0 q_D^2$. Das Erscheinen des Minimums in $\chi^{(ph)}$ bei $T/\theta_D \approx 10^{-3}$ ist jedoch unphysikalisch, da niederenergetische Anregungen (wie zum Beispiel Tunnel- Zustände [57],[58]) nicht berücksichtigt wurden, die bei tiefen Temperature wichtig werden.

Bei mittleren Temperaturen verläuft die Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(ph)}$ im wesentlichen proportional zu T^2 , mit

$$\varkappa^{(ph)} \approx \frac{k_B n u}{\gamma^2 \Delta^2 q_D} \left(45.32 x^2 + 20.67 x \frac{\kappa}{q_D} \right) \quad \text{für } \frac{\hbar u \kappa}{k_B} \ll T \ll \theta_D, \quad (3.82a)$$

um schließlich in den Hochtemperatur -Grenzwert zu münden:

$$\varkappa^{(ph)} \approx \frac{k_B n u}{\gamma^2 q_D \Delta^2} \left(\pi + 2\pi \frac{\kappa}{q_D} \right) \quad \text{für } T \rightarrow \theta_D. \quad (3.83)$$

Für den Temperaturbereich $T \ll \theta_D$ gilt außerdem $(\rho^{(ph)})^{-1} \leq \varkappa_K^{(ph)} \leq \varkappa^{(ph)}$. Die Lage des Plateaus bei der relativ hohen Temperatur $T \rightarrow \theta_D^{(m)}$ ist darauf zurückzuführen, daß rotonenähnliche Anregungen, wie sie im nächsten Kapitel untersucht werden, in dieser Betrachtung der Wärmeleitfähigkeit nicht berücksichtigt sind.

Für $\kappa > 0$ kann bei sehr tiefen Temperaturen ($T \ll \frac{\hbar u \kappa}{k_B}$) die Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(ph)}$ aufgrund der Divergenz im Integranden von (3.80) nicht mehr berechnet werden. In diesem Bereich werden die Näherungsmethoden für $\rho^{(ph)}$ nach Ziman [63] und $\varkappa_K^{(ph)}$ nach Klemens [101] zur Abschätzung verwendet. Hier verlaufen

$$\left(\varrho^{(ph)} \right)^{-1} \Big|_{T \ll \frac{\hbar u \kappa}{k_B}} = \frac{\pi}{60} \frac{k_B n u}{\gamma^2 q_D \Delta^2} \frac{\kappa^3}{q_D^3} \quad (3.84)$$

und

$$\varkappa_K^{(ph)} \Big|_{T \ll \frac{\hbar u \kappa}{k_B}} = \xi \cdot \left(\varrho^{(ph)} \right)^{-1} \quad (3.85)$$

parallel zueinander, mit dem Proportionalitätsfaktor $\xi \approx 2.83$ aus dem numerischen Vergleich. Das Verhalten von $(\varrho^{(ph)})^{-1}$ und $\varkappa_K^{(ph)}$ deutet auf ein Minimum in der Wärmeleitfähigkeit $\varkappa^{(ph)}$ hin. Dieses Minimum ist allerdings unphysikalisch, da bei tiefen Temperaturen niederenergetische Anregungen, wie Zwei-Niveau-oder Tunnel-Zustände wichtig werden, die bei der vorliegenden Berechnung nicht berücksichtigt wurden. Ebenso wurde die Streuung der Phononen an Korngrenzen, u.ä., nicht berücksichtigt, die ein Anwachsen der mittleren freien Weglänge über diese Abmessungen hinaus verhindert.

Analog zur Magnonen-Wärmeleitfähigkeit ($\varkappa^{(m)}|_{T \rightarrow 0} \sim \frac{\kappa^3}{q_D^3}$) im Tieftemperaturbereich spiegelt die Phononen-Wärmeleitfähigkeit ($\varkappa_K^{(ph)}|_{T \rightarrow 0} \sim \frac{1}{x} \frac{\kappa^3}{q_D^3}$) im Tieftemperaturbereich das Verhalten von Phononen wider, die ausschließlich der Rayleigh-Streuung durch statische Inhomogenitäten unterworfen sind. In allen untersuchten Temperaturbereichen ist $\varkappa^{(ph)}$ reziprok proportional zur mittleren quadratischen Dichtefluktuation Δ^2 . Weiterhin wächst $\varkappa^{(ph)}$ mit der reziproken charakteristischen Korrelationslänge κ . Mit anderen Worten, die Wärmeleitfähigkeit wächst mit sinkender Höhe bzw. sinkender räumlicher Ausdehnung der Inhomogenitäten. Abb. 3.20 zeigt $(\rho^{(ph)})^{-1}$ für verschiedene Werte der reziproken charakteristischen Korrelationslänge κ . Der Fall $\kappa = 0$ entspricht dem Ergebnis von Handrich [42].

Weitere Klarheit über den Tieftemperaturbereich bringt die Einbeziehung inelastische Streuung mittels des dynamischen Strukturformfaktors $S(q, \omega)$ in die Berechnung der mittleren freien Weglänge Λ_q , mit

$$\frac{1}{\Lambda_q} = \frac{u \gamma^2}{4 \pi} q^2 \sum_{\bar{q}'} [S(q, (\varepsilon(q) - \varepsilon(q'))) + S(q, (\varepsilon(q') - \varepsilon(q)))] .$$

Für eine weitergehende Diskussion wird eine genauere Kenntnis des dynamischen Strukturformfaktors $S(q, \omega)$ benötigt. Dieser ist allerdings nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

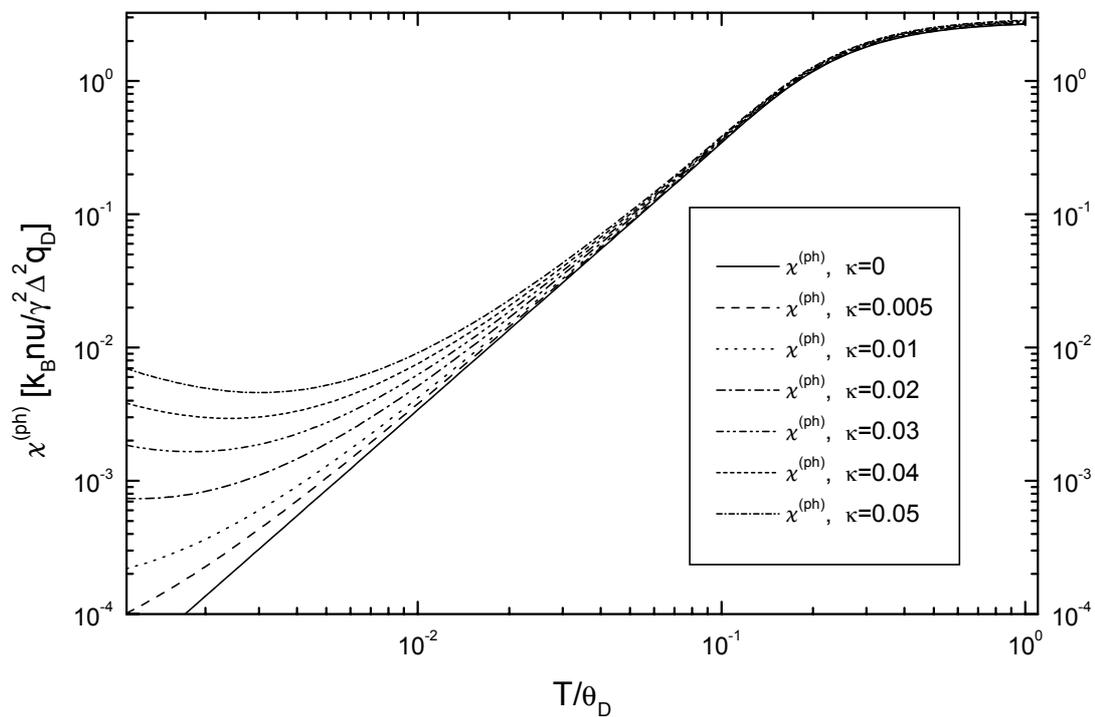


Abbildung 3.20: Phononen- Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit $\chi^{(ph)}$ für verschiedene Werte der reziproken charakteristischen Korrelationslänge $\kappa/q_D = 0.005, \dots, 0.05$ sowie für den Fall $\kappa = 0$ (s. [42]). $\chi^{(ph)}$ sinkt in allen beobachteten Temperaturbereichen mit steigender Korrelationslänge $\frac{1}{\kappa}$.

3.5.3 Vergleich von Phononen- und Magnonen-Wärmeleitfähigkeit

Die Magnonen- und Phononen-Wärmeleitfähigkeit wurden für typische Werte amorpher Systeme ($u = 1500 \frac{m}{s}$, $D_0 = 250 meV \text{ \AA}^2$, $q_D = 1.5 \text{ \AA}^{-1}$, $\gamma_m = \gamma$, $\Delta_{(m)}^2 = \Delta_{(ph)}^2$, Verhältnis der Dichte magnetischer Teilchen zur Gesamteilchendichte $\frac{n_{(m)}}{n_{(ph)}} = 0.5$) berechnet.

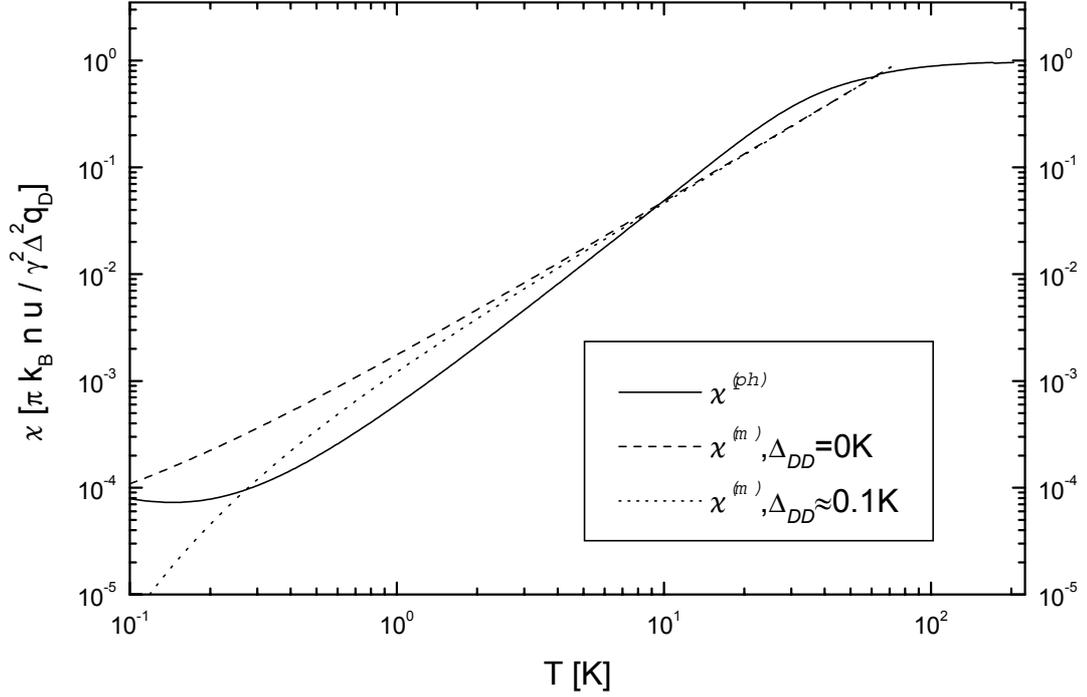


Abbildung 3.21: Gegenüberstellung von Magnonen- und Phononen- Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit gem.(3.73) bzw. (3.80) für typische Werte amorpher Ferromagneten ($u = 1500 \frac{m}{s}$, $D_0 = 250 meV \text{ \AA}^2$, $q_D = 1.5 \text{ \AA}^{-1}$, $\gamma_m = \gamma$, $\Delta_{(m)}^2 = \Delta_{(ph)}^2$, Verhältnis der Dichte magnetischer Teilchen zur Gesamteilchendichte $\frac{n_{(m)}}{n_{(ph)}} = 0.5$). Bei sehr tiefen Temperaturen kann, auch bei Berücksichtigung der magnetischen Dipol- Dipol- Wechselwirkung $\Delta_{DD} \lesssim 1K$, der Magnonen-Beitrag überwiegen.

Der Vergleich des Phononen-Beitrag mit dem Magnonen-Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit in Abb. 3.21 zeigt, daß der Magnonen-Beitrag in amorphen Ferromagneten nicht vernachlässigbar ist und bei tiefen Temperaturen sogar dominieren kann. Für die Eigenschaften des Magnonen-Anteils der Wärmeleitfähigkeit bei hohen Temperaturen gilt allerdings die erwähnte Einschränkung, daß sich Magnonen bei hohen Temperature nicht mehr wie freie Bosonen verhalten und somit ein wesentlich kleinerer Hochtemperatur-Grenzwert folgt. Sofern jedoch die quadratische Näherung für die Magnonen-Energie gültig ist, ist der Magnonen-Anteil im Bereich $T \lesssim \left(3 \cdot 10^{-3} \frac{u^2}{D_0} + (0.28 \frac{n_{(m)}}{n_{(ph)}} - 0.07) u \kappa \right) [K]$ größer als der Phononen-Anteil zur Wärmeleitfähigkeit.

Kapitel 4

Rotonenähnliche Anregungen

In amorphen Festkörpern fällt der relativ scharfe erste Peak des statischen Strukturfaktors $S(q)$, bei der doppelten Debye-Wellenzahl $q_1 = 2q_D$ mit der Breite Δq sowohl für Phononen als auch für Magnonen mit dem Rotonen-Minimum zusammen (siehe Abbildung 4.1).

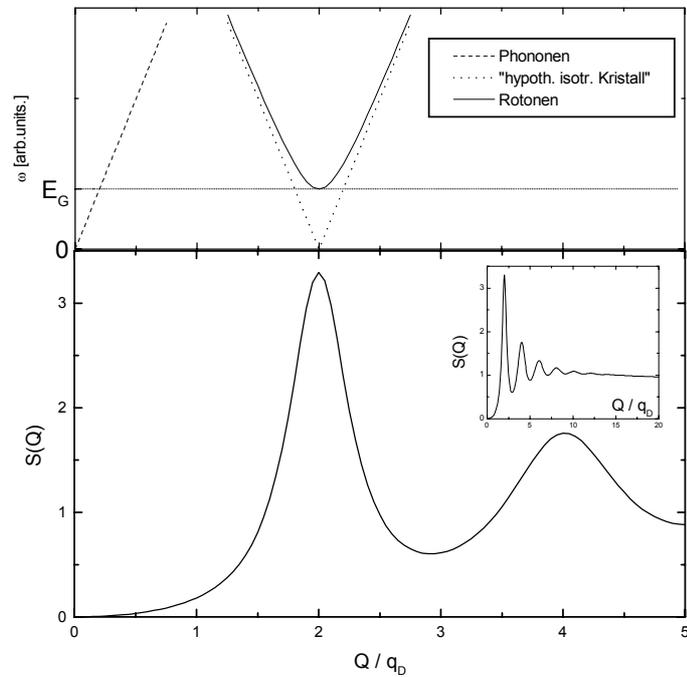


Abbildung 4.1: Die Lage des ersten scharfen Peaks des statischen Strukturfaktors $S(Q)$ (unten) bestimmt die Lage des Rotonen- Minimums der Dispersionsrelation. In einem „hypothetischen isotropen Kristall“ würde aus dem Bragg- Reflex bei q_1 die Dispersionsrelation $D_0(Q - q_1)^2$ (für Magnonen) bzw. $\hbar u(Q - q_1)$ (für Phononen) folgen. Aus der Verbreiterung ($\sim \Delta q$) des Peaks des statischen Strukturfaktors folgt die Gap- Energie ($E_G^{(m)} \sim (\Delta q)^2$ für Magnon- und $E_G^{(ph)} \sim \Delta q$ für Phonon- Rotonen, s. u.).

Rotonenähnliche Anregungen in der Umgebung des ersten scharfen Peaks von $S(q)$ mit der Wellen-

zahl \vec{Q} ($|\vec{Q}| \approx q_1$) werden als Wellenpakete beschrieben. Wir interpretieren im folgenden die Rotonen als unabhängigen Anregungsweig mit Wellenzahlen außerhalb der ersten Debye-Kugel, der jedoch in die erste Debye-Kugel vorreduziert werden kann. Aus der Interpretation der Rotonen als Wellenpakete folgen die Dispersionsrelation und insbesondere die Gap-Energie der Rotonen. Die Resultate der Rechnung werden mit Meßergebnissen für verschiedene Materialien verglichen. Aus der vorreduzierten Dispersionsrelation der Phonon-Rotonen folgt der Super-Debye-Beitrag zur spezifischen Wärme C_V (excess specific heat) für Temperaturen $T \gtrsim 1K$ unter Beachtung der Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände. Aus der Lage des Peaks in der $\frac{C_V}{T^3}$ -Darstellung erhält man die Gap-Energie der Phonon-Rotonen und aus der Höhe des Peaks die Renormierung der Schallgeschwindigkeit im Rotonen-Bereich. Umgekehrt folgt näherungsweise aus der Breite Δq des ersten scharfen Peaks des statischen Strukturfaktors die Rotonen-Gap-Energie für verschiedene Materialien und daraus der Super-Debye-Beitrag zur spezifischen Wärme.

4.1 Semiquantitative Theorie

Bei der Ausbreitung der Rotonen in \vec{Q} -Richtung ist die Streuung der Wellenzahlvektoren in der Umgebung von q_1 vor allem in $\vec{k} \parallel \vec{Q}$ -Richtung entscheidend (\vec{Q} liegt außerhalb der ersten Debye-Kugel). Mit dem Ansatz

$$|\vec{Q}\rangle = \sum_{\vec{k} \parallel \vec{Q}} \rho(\vec{Q} - \vec{k}) |\vec{k}\rangle \quad (4.1)$$

wird die Wellenfunktion $|\vec{Q}\rangle$ als Superposition langwelliger $|\vec{k}\rangle$ -Anregungen mit Ausbreitungsrichtung \vec{k} parallel zu \vec{Q} dargestellt. Die Summation in (4.1) erstreckt sich über orthonormale Wellenfunktionen mit \vec{k} innerhalb der ersten Debye-Kugel (insbesondere ist $k \lesssim \Delta q$, s.u.). Für Vektoren \vec{Q} in der Umgebung des FSDP ist es zweckmäßig, diese als $\vec{Q} = (q_1 + q) \hat{\vec{Q}}$ darzustellen mit dem Einheitsvektor $\hat{\vec{Q}}$ in \vec{Q} -Richtung und der Wellenzahl q innerhalb der ersten Debye-Kugel. Für den Operator $\hat{\mathcal{H}}^{(m)}$ (3.1) folgt aus den Eigenzuständen $|\vec{k}\rangle$ langwelliger Magnonen der Eigenwert $\varepsilon^{(m)}(k) = D k^2$ mit der renormierten Stiffnesskonstante D im Rotonenbereich. Ebenso folgt für den Operator $\hat{\mathcal{H}}^{(ph)}$ (3.34) der Eigenwert $\varepsilon^{(ph)}(k) = \hbar u k$ mit der renormierten Schallgeschwindigkeit u im Rotonenbereich. Der Ansatz (4.1) für die Wellenfunktion mit $\vec{Q} = (q_1 + q) \hat{\vec{Q}}$ liefert dann die quantenmechanischen Mittelwerte der Rotonen-Energie $\langle E^{(m/ph)}(q) \rangle$ nach Strukturmittelung (...):

$$\begin{aligned} \langle E^{(m)}(q) \rangle &= \frac{\sum_{\vec{k}', \vec{k} \parallel \vec{Q}} \langle \vec{k}' | \rho^* \left((q_1 + q) \hat{\vec{Q}} - \vec{k}' \right) \varepsilon^{(m)}(k) \rho \left((q_1 + q) \hat{\vec{Q}} - \vec{k} \right) | \vec{k} \rangle}{\sum_{\vec{k}', \vec{k} \parallel \vec{Q}} \langle \vec{k}' | \rho^* \left((q_1 + q) \hat{\vec{Q}} - \vec{k}' \right) \rho \left((q_1 + q) \hat{\vec{Q}} - \vec{k} \right) | \vec{k} \rangle} \\ &= \frac{\sum_{\vec{k}', \vec{k} \parallel \vec{Q}} D_0 k^2 S \left((q_1 + q) \hat{\vec{Q}} - \vec{k} \right)}{\sum_{\vec{k}', \vec{k} \parallel \vec{Q}} S \left((q_1 + q) \hat{\vec{Q}} - \vec{k} \right)}. \end{aligned}$$

Für isotrope amorphe Ferromagnete ist $S(\vec{Q})$ nur vom Betrag von \vec{Q} abhängig und mit $|(q_1 + q)\hat{Q} - \vec{k}| = q_1 + q - k$, wegen $\vec{k} \parallel \vec{Q}$, folgt

$$\langle E^{(m)}(q) \rangle = \frac{\int_{-q_D}^{q_D} dk D k^2 S(q_1 + q - k)}{\int_{-q_D}^{q_D} dk S(q_1 + q - k)} \quad (4.2)$$

für Magnon-Rotonen bzw.

$$\langle E^{(ph)}(q) \rangle = \sqrt{\frac{\int_{-q_D}^{q_D} dk \hbar^2 u^2 k^2 S(q_1 + q - k)}{\int_{-q_D}^{q_D} dk S(q_1 + q - k)}} \quad (4.3)$$

für Phonon-Rotonen. In (4.2) und (4.3) wurde $\langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \delta(\vec{k} - \vec{k}')$ verwendet. Außerdem ist

$$\langle \rho^*(q_1 + q - k) \rho(q_1 + q - k) \rangle = \langle \rho(k - (q_1 + q)) \rho(q_1 + q - k) \rangle = S(q_1 + q - k)$$

(vgl.(2.4)) für q und k innerhalb der ersten Debye-Kugel. Für kleine q erstrecken sich die Integrationen in (4.2) und (4.3) über den ersten scharfen Peak des statischen Strukturformfaktors und im Wesentlichen tragen nur die Beiträge mit $k \lesssim \Delta q$ zur Integration bei. Für die Energie der Magnon- und Phonon-Rotonen in der Umgebung des Rotonen-Minimums folgt (vgl. [1], [87], [88], [122])

$$E^{(m)}(Q) |_{Q \approx q_1} = E_G^{(m)} + D(Q - q_1)^2 \quad (4.4)$$

für Magnon-Rotonen und

$$E^{(ph)}(Q) |_{Q \approx q_1} = \sqrt{\left(E_G^{(ph)}\right)^2 + \hbar^2 u^2 (Q - q_1)^2} \quad (4.5)$$

für Phonon-Rotonen. Mit (normierten) Modellfunktionen $S(Q) \sim \left((Q - q_1)^2 + (\Delta q)^2\right)^{\frac{\nu}{2}}$ (vgl.(2.11)) für den FSDP mit der Breite Δq folgt die Rotonen-Gap-Energie $E_G^{(m)} = \alpha D (\Delta q)^2$ bzw. $E_G^{(ph)} = \alpha \hbar u \Delta q$ mit $\alpha = \frac{1}{\nu-3}$, $\nu > 3$.

Die Interpretation der Rotonen-Dispersionsrelation erfolgt mit Hilfe des Konzeptes der Kompensationsmagnonen bzw. -phononen. In einem „hypothetischen isotropen Kristall“ wäre der statische Strukturformfaktor in der Nähe des reziproken Gittervektors vom Betrag q_1 durch $S(Q) = \delta(Q - q_1)$ gegeben. Die Energie wäre gleich $E^{(m)}(Q) = D(Q - q_1)^2$ bzw. $E^{(ph)}(Q) = \hbar u |Q - q_1|$ und entspräche einem exakten Umklapp-Prozess an dem Bragg-Reflex bei q_1 . In realen amorphen Ferromagneten und amorphen Festkörpern führt die Impuls-Unschärfe ($\Delta q \ll q_1$) des FSDP als Folge der amorphen Struktur zur Bildung eines Wellenpaketes der Breite $\sim \Delta q$ (vgl. Abb. 4.1). Somit sind außer der „umgeklappten“ Hauptmode $|\vec{q}_1\rangle$ noch langwellige Kompensationsanregungen $|\vec{k}\rangle$ mit dem Gewicht proportional zu $\rho(q_1 + q - k)$ vertreten. Diese tragen im Mittel den Wert $\alpha \varepsilon (\Delta q)$ zur Energie des Wellenpaketes bei, während die Hauptmode die Energie $E = 0$ des „umgeklappten“ Zustandes besitzt.

Der Vergleich mit langwelligen Magnonen und Phononen in amorphen Systemen (vgl. Abschnitt (3.1.5) und (3.2.4)) zeigt, daß die Bildung von Wellenpaketen inklusive langwelliger Kompensationsanregungen eine generelle Eigenschaft der Elementaranregungen in amorphen Ferromagneten und amorphen Festkörpern ist.

Der Variation der Nächste-Nachbar-Abstände (proportional zur Impulsverbreiterung Δq) bei kurzwelligen Anregungen im Rotonen-Bereich entsprechen die langreichweitigen Inhomogenitäten (mit Korrelationslänge κ) bei langwelligen Anregungen. Die Kompensationsanregungen werden zum Ausgleichen bzw. als Folge dieser Strukturfluktuationen gebildet. Sie tragen der Impulsverbreiterung Rechnung und tragen, der Stärke der Verbreiterung Δq entsprechend, zur Energie des Wellenpaketes bei. Die mittlere quadratische Dichtefluktuation Δ^2 und die Höhe des Nullreflexes bei langreichweitigen Anregungen entspricht sinngemäß dem FSDP bei den rotonenähnlichen Anregungen.

Im Rotonen-Bereich ($Q \approx q_1$) herrscht der Einfluß der Variation der interatomaren Abstände für das Wellenpaket vor, während sich der amorphe Festkörper für langwellige Elementaranregungen als homogenes Medium darstellt, so daß die Kompensationsmagnonen bzw. -phononen verschwinden, und daher nur eine *scheinbare* Gap-Energie vorliegt, die erst im Bereich $k > \kappa$ erkennbar wird.

Das hier entwickelte Konzept der rotonenähnlichen Anregungen ist auch auf supraflüssiges ${}^4\text{He}$ anwendbar. Entwickelt man (4.5) an der Stelle ($Q \approx q_1$), so erhält man die Beziehung $E^{(ph)}(Q) = \Delta + \frac{\hbar^2(Q-q_1)^2}{2\Delta}$. Vergleicht man diesen Ausdruck mit dem Landau-Ausdruck der Rotonen-Dispersionsbeziehung in ${}^4\text{He}$

$$\varepsilon(Q)|_{Q \approx q_1} = E_G + \frac{\hbar^2(Q - q_1)^2}{2m^*}, \quad (4.6)$$

so erhält man für die reduzierte Rotonenmasse $m_R^* = E_G u_{\text{He}^4}^2$ [70], mit der Schallgeschwindigkeit $u_{\text{He}^4}^2 = 286.25 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ im Rotonenbereich, was um einen Faktor 0.73 von dem von Landau angegebenen Wert abweicht. Diese Abweichung ist relativ gering, wenn man den sehr breiten Peak des statischen Strukturfaktors im Rotonenbereich von ${}^4\text{He}$ in Betracht zieht. Dieses Resultat stützt zusätzlich das obige Rotonenbild.

4.1.1 Vergleich mit Meßdaten

Die Rotonen-Dispersionsbeziehung, die mit Hilfe des statischen Strukturfaktors im FSDP-Bereich aus der semiquantitativen Theorie folgt, wurde an amorphem ferromagnetischem $\text{Fe}_{75}\text{P}_{15}\text{C}_{10}$ und an den amorphen Legierungen $\text{Ni}_{67}\text{Zr}_{33}$ und $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$ getestet. Die berechneten Werte werden mit den gemessenen Werten für die Rotonen-Gap-Energie verglichen. Weiterhin wurde aus den gesammelten Steudaten für den FSDP die Gap-Energie für die verschiedenen Materialien berechnet.

Aus der Anpassung der Meßwerte von amorphem ferromagnetischen $\text{Fe}_{75}\text{P}_{15}\text{C}_{10}$ aus [80] für die Dispersionsbeziehung an Gl. (4.4) erhält man die renormierte Stiffnesskonstante $D_{(\text{FePC})} = 80.31 \text{ meV}\text{\AA}^2$ im Magnon-Rotonenbereich und die Gap-Energie $E_{G(\text{FePC})}^{(m)} = 19.13 \text{ meV}$ (s. Abb.4.2, oben). Die Daten des ersten scharfen Begungspeaks wurden um den diffusen Untergrund bereinigt (siehe Abb.4.2, unten). Es folgt aus (4.2) die Dispersionsbeziehung $E^{(m)}(Q) = E_{G(\text{FePC})}^{(m)} + D_{(\text{FePC})}(Q - q_1)^2$ mit der Gap-Energie $E_{G(\text{FePC})}^{(m)} = 15.28 \text{ meV}$.

Die Anpassung der Meßwerte von amorphem $\text{Ni}_{67}\text{Zr}_{33}$ aus [85] liefert für die Phonon-Rotonen-Dispersionrelation die Gap-Energie $E_{G(\text{NiZr})}^{(ph)} = 15.06 \text{ meV}$. Es ist zu bedenken, daß das Modell für die Dispersionsbeziehung, aus dem die Schallgeschwindigkeit folgt, nur für den Bereich nahe des Rotonen-Minimums gilt. Wird die Berechnung auf diesen Bereich beschränkt, so folgt für die renormierte Schallgeschwindigkeit im Rotonen-Bereich $u_{(\text{NiZr})} = 3022.68 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Mit Hilfe der angepassten Modellfunktion (gem.(2.11)) für den FSDP folgt aus (4.3) für die Dispersionsrelation $E^{(ph)}(Q) = \sqrt{\left(E_{G(\text{NiZr})}^{(ph)}\right)^2 + \hbar^2 u_{(\text{NiZr})}^2 (Q - q_1)^2}$ mit $E_{G(\text{NiZr})}^{(ph)} = 10.51 \text{ meV}$. Weiterhin erscheint der FSDP um $Q = 2.7 \text{\AA}^{-1}$ deformiert. Diese Deformation des statischen Strukturfaktors ist jedoch bei der Berechnung der Dispersionrelation nicht berücksichtigt.

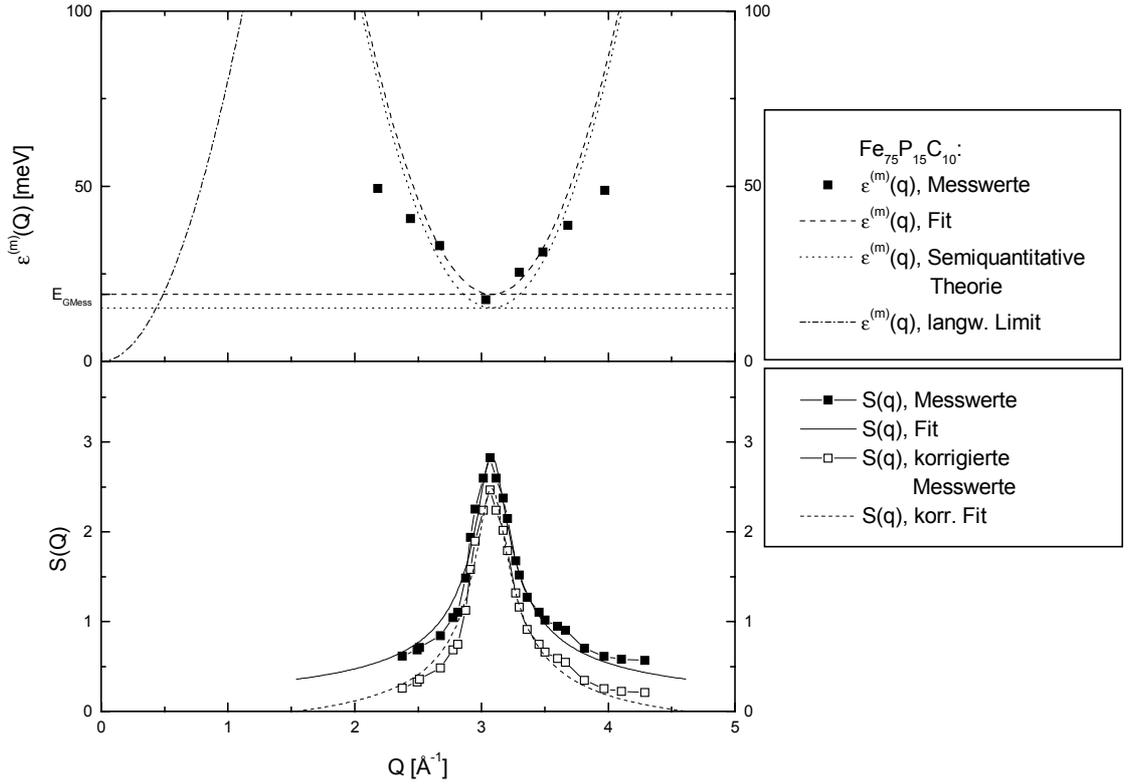


Abbildung 4.2: Statischer Strukturfaktor $S(Q)$ (s. Tabelle 2.4 und Magnonen-Dispersionsrelation (mit der Gap- Energie $E_{G(\text{FePC})}^{(m)} = 19.13\text{meV}$) für amorphes ferromagnetisches $\text{Fe}_{75}\text{P}_{15}\text{C}_{10}$. Aus den Meßwerten für $\epsilon(Q)$ folgt die Stiffnesskonstante $D_{(\text{FePC})}$ im Rotonen- Bereich. Mit dieser und der Modellfunktion für den statischen Strukturfaktor mit den Parametern aus Tabelle 2.1 wird die Rotonen- Dispersionsrelation (gem. (4.2)) berechnet. Nach Abzug des diffusen Untergrundes von $S(Q)$ folgt die Rotonen- Dispersionsrelation mit der Gap- Energie $E_{G(\text{FePC})}^{(m)} = 15.28$ meV.

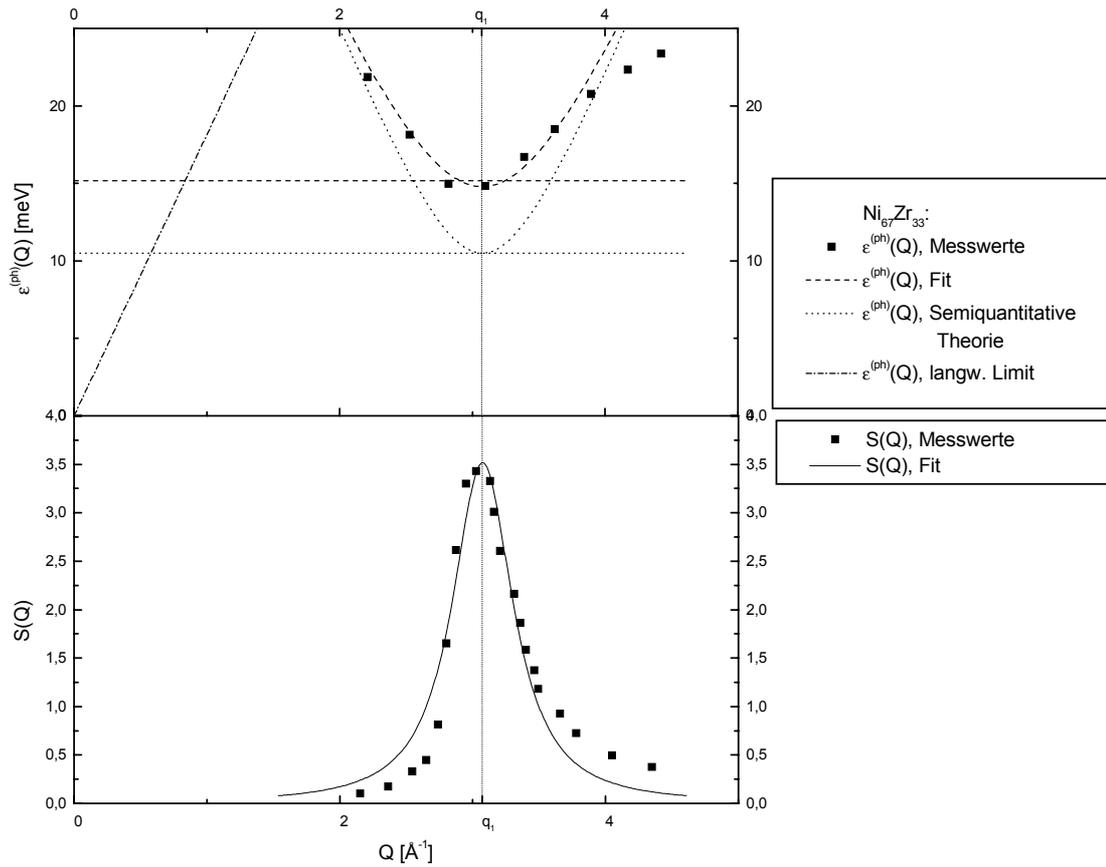


Abbildung 4.3: Statischer Strukturfaktor $S(Q)$ (s. Tabelle 2.4 und Phononen-Dispersionsrelation (mit der Gap-Energie $E_{G(NiZr)}^{(ph)} = 15.06\text{meV}$) für amorphes $Ni_{67}Zr_{33}$. Aus den Meßwerten für $\varepsilon(Q)$ folgt die Schallgeschwindigkeit $u_{(NiZr)}$ im Rotonen-Bereich. Mit dieser und der Modellfunktion für den statischen Strukturfaktor mit den Parametern aus Tabelle 2.4 folgt die Rotonen-Dispersionsrelation (gem. (4.3)) mit der Gap-Energie $E_{G(NiZr)}^{(ph)} = 10.51\text{meV}$.

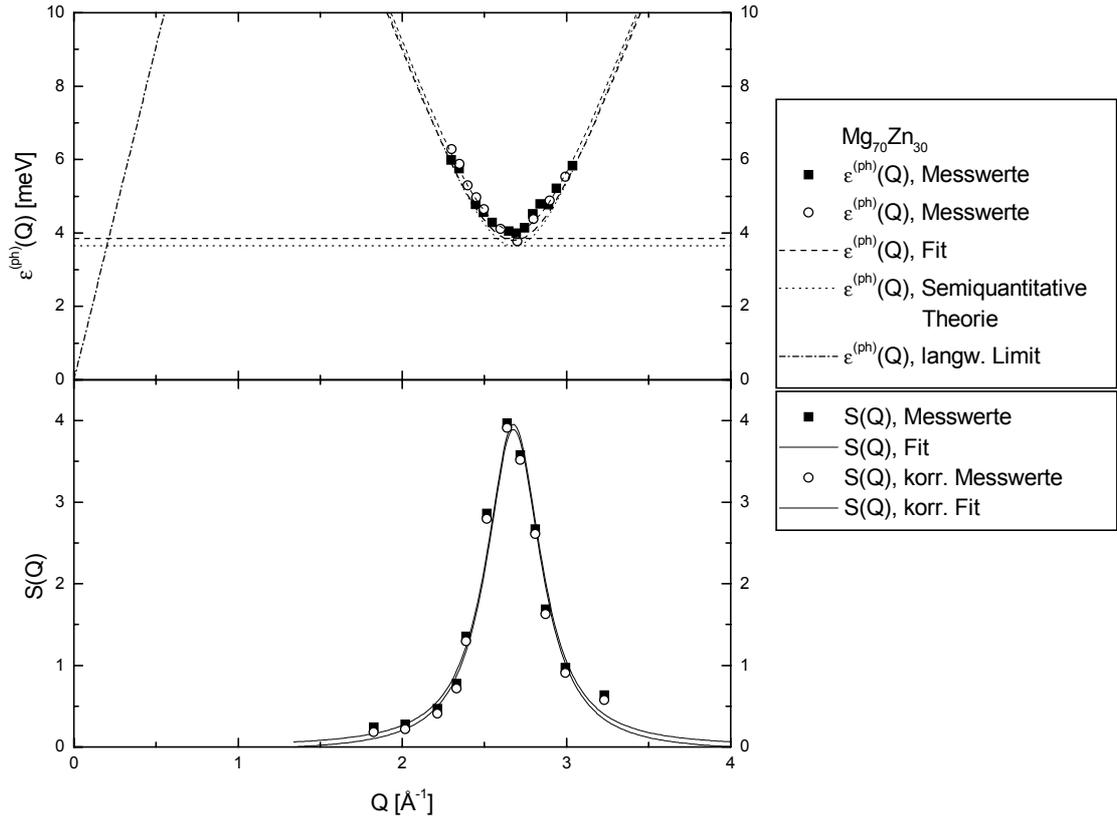


Abbildung 4.4: Statischer Strukturfaktor $S(Q)$ (s. Tabelle 2.4 und Phononen-Dispersionsrelation mit der Gap- Energie $E_{G(MgZn)}^{(ph)} = 3.8, \text{meV}$ für amorphes $Mg_{70}Zn_{30}$. Aus den Meßwerten für $\varepsilon(Q)$ folgt die Schallgeschwindigkeit $u_{(MgZn)}$ im Rotonen- Bereich. Mit dieser und der Modellfunktion für den statischen Strukturfaktor mit den Parametern aus Tabelle 2.4, nach Abzug des Untergrundes von $S(Q)$, folgt die Rotonen- Dispersionsrelation gemäß (4.3) mit der Gap- Energie $E_{G(MgZn)}^{(ph)} = 3.65 \text{meV}$.

Material	Gap-Energie $\frac{E_G^{(m)}}{D\text{\AA}^{-2}}$
α -Fe	0.16
α -Ni	0.23
Ni ₈₀ P ₂₀	0.23

Tabelle 4.1: Berechnete Gapenergie für Magnon- Rotonen gemäß Gl. (4.2). Die Stiffnesskonstante D im Rotonenbereich ist, infolge fehlender Meßdaten, unbestimmt.

Material	Gap-Energie $\frac{E_G^{(ph)}}{\left(10^{-3}meV u\left(\frac{m}{s}\right)^{-1}\right)}$
ZnCl ₂	3.4
Ni ₃₅ Zr ₃₅ Hf ₃₀	2.3
Ni ₃₅ Zr ₆₅	2.5
Ti ₈₄ Si ₁₆	2.3

Tabelle 4.2: Berechnete Gapenergie für Phonon- Rotonen gemäß Gl. (4.3).

Für Mg₇₀Zn₃₀ folgt die Schallgeschwindigkeit $u_{(MgZn)} = 1855.24 \frac{m}{s}$ und die Gap-Energie $E_{G(MgZn)}^{(ph)} = 3.8 meV$. Aus (4.3) folgt mit Hilfe des Fits des FSDP gem.(2.11), nach Eliminierung des diffusen Untergrundes der Streuung, für die Gap-Energie $E_{G(MgZn)}^{(ph)} = 3.65 meV$. Abbildung 4.4 zeigt die ausgezeichnete Übereinstimmung.

Für eine Reihe von Materialien liegen Meßwerte für den statischen Strukturfaktor im FSDP-Bereich vor (vgl.Tab.(2.4)), wobei jedoch die Stiffnesskonstante bzw. die Schallgeschwindigkeit in Ermangelung von Meßdaten unbekannt sind. Aus diesem Grunde können für die Gap-Energie gemäß (4.2, 4.3) nur die relativen Ausdrücke $\frac{E_G^{(m)}}{D}$ für Magnon-Rotonen bzw. $\frac{E_G^{(ph)}}{u}$ für Phonon-Rotonen angegeben

werden. Die Tabellen 4.1 und 4.2 zeigen, daß die Ergebnisse für die Gap-Energie zwischen $\frac{E_G^{(m)}(\alpha-Fe)}{D_{(\alpha-Fe)}} =$

0.16\AA^{-2} und $\frac{E_G^{(m)}(NiP)}{D_{(NiP)}} = 0.23 \text{\AA}^{-2}$ für Magnon-Rotonen bzw. $\frac{E_G^{(ph)}(TiSi)}{u_{(TiSi)}} = 2.3 \cdot 10^{-3} meV \left(\frac{m}{s}\right)^{-1}$

und $\frac{E_G^{(ph)}(ZnCl)}{u_{(ZnCl)}} = 3.4 \cdot 10^{-3} meV \left(\frac{m}{s}\right)^{-1}$ für Phonon-Rotonen variiert. Die genaue Kenntnis der

Stiffnesskonstante bzw. der Schallgeschwindigkeit im Rotonen-Bereich, ist zur Berechnung der Gap-Energie erforderlich, insbesondere bei Vorliegen von wellenzahlabhängiger Dispersion, vgl. Kap. 3.1.4, 3.2.3 und 3.4. Typische Werte für die Stiffnesskonstante liegen im Bereich zwischen $50 meV\text{\AA}^{-2}$ und $150 meV\text{\AA}^{-2}$, was zu Magnon-Rotonen-Gap-Energien von $E_G^{(m)} \sim 10 meV$ führt. Die Schallgeschwindigkeit liegt im Bereich $\sim 1000 \frac{m}{s}$, so daß die Gap-Energie der Phonon-Rotonen einige meV beträgt.

Die gemessene und die berechnete Dispersionsrelation und insbesondere die Gap-Energie, liegen für die einzelnen Materialien im gleichen Größenbereich. Bei exakter Berechnung der renormierten Stiffnesskonstanten bzw. der renormierten Schallgeschwindigkeit, besonders für gemischt polarisierte Zustände, und bei sorgfältiger Behandlung des ersten scharfen Beugungspeaks im statischen Struk-

turfaktor kann die Rotonen-Dispersion um einen Faktor ~ 0.7 genau berechnet werden. Insbesondere verschmierte Streudaten und diffuser Untergrund der Streuung können das Ergebnis der Berechnung verfälschen. Die berechneten Werte für die Dispersionsrelation im Rotonenbereich liegen im Trend unterhalb der gemessenen Werte, jedoch entspricht die Form der Dispersionsbeziehung für Magnon- und Phonon-Rotonen qualitativ dem Verlauf der Meßwerte. Dieses qualitative Verhalten stützt die Interpretation von rotonenähnlichen Anregungen in amorphen Festkörpern als Wellenpakete.

4.2 Super- Debye- Beitrag zur spezifischen Wärme

4.2.1 Zustandsdichte und Gesamtzahl der Zustände

Phononen und Phonon-Rotonen tragen als unabhängige Anregungsbranche additiv zum Gitteranteil der spezifischen Wärme in amorphen Festkörpern bei. Durch den Anteil der Phonon-Rotonen erhöht sich die Zustandsdichte $D^{(ph)}(\varepsilon)$ oberhalb der Gap-Energie E_G , während die Gesamtzahl der Zustände erhalten bleiben muß [128]. Die Zustandsdichte im k -Raum lautet $D^{(ph)}(k) dk = \frac{3V}{2\pi^2} k^2 dk$ (3.57), woraus für akustische Debye-Phononen mit der Dispersionsrelation $\varepsilon = \hbar u_D k$ mit der Debye-Schallgeschwindigkeit u_D der Phononen-Anteil zur Zustandsdichte

$$D^{(ph)}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\varepsilon^2}{\hbar^3 u_D^3} d\varepsilon \quad (4.7)$$

in Abhängigkeit von der Energie ε folgt. Der Faktor 3 in $D^{(ph)}(k) dk$ bzw. $D^{(ph)}(\varepsilon) d\varepsilon$ entsteht aufgrund der drei Polarisationszweige der akustischen Phononen.

Die Zustandsdichte $D^{(r)}(k) dk$ im k -Raum für Phonon-Rotonen mit Wellenzahl Q lautet analog

$$D^{(r)}(k) dk = \frac{3V}{2\pi^2} k^2 dk \quad \text{mit } k = Q - q_1,$$

da Rotonen als Wellenpakete aus langwelligen Anregungen mit Wellenzahlen k innerhalb der ersten Debye-Kugel ($k \leq q_D$) gebildet werden. Diese Vorreduktion um q_1 der Rotonen-Dispersionsbeziehung entspricht dem physikalischen Bild der rotonenähnlichen Anregungen. Die Schallgeschwindigkeit u_R im Rotonen-Bereich ist infolge der Streuung an Strukturdefekten um den Renormierungsfaktor ρ renormiert:

$$u_R = \rho u_D, \quad \rho < 1. \quad (4.8)$$

Damit folgt aus der Dispersionsrelation (4.5) der Phonon-Rotonen $\varepsilon = \sqrt{E_G^2 + \hbar^2 u_D^2 \rho^2 k^2}$ der Rotonen-Anteil zur Zustandsdichte in Abhängigkeit von der Energie ε

$$D^{(r)}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - E_G^2}}{\hbar^3 u_D^3 \rho^3} d\varepsilon. \quad (4.9)$$

Man erhält die Gesamtzahl der Zustände N_P (für Phonon) $+N_R$ (für Rotonen) durch Integration von $D^{(ph)}(\varepsilon) d\varepsilon$ und $D^{(r)}(\varepsilon) d\varepsilon$ von $\varepsilon = 0$ bzw. von $\varepsilon = E_G$ für den Rotonenzweig bis zur maximalen Energie $\varepsilon_{\max} \equiv \alpha \hbar u_D q_D$ mit dem Auffüll-Faktor α . In der üblichen Debye- Theorie ist $\varepsilon_{\max} = \hbar u_D q_D = \hbar \omega_D$, und $\alpha = 1$. Im vorliegenden Fall wird die Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände durch Abbruch der Integration bei der Maximal-Energie ε_{\max} gewährleistet. Man erhält für N_P und N_R :

$$N_P = \int_0^{\varepsilon_{\max}} D^{(ph)}(\varepsilon) d\varepsilon = 3 N \alpha^3,$$

$$N_R = \int_{E_G}^{\varepsilon_{\max}} D^{(r)}(\varepsilon) d\varepsilon = 3N \frac{(\alpha^2 - \tau^2)^{\frac{3}{2}}}{\rho^3},$$

mit der Abkürzung

$$\tau = \frac{E_G}{\hbar u_D q_D}. \quad (4.10)$$

Aus der Forderung nach der Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände $N_P + N_R = 3N$ folgt für den Auffüll-Faktor α

$$\alpha^3 + \frac{(\alpha^2 - \tau^2)^{\frac{3}{2}}}{\rho^3} = 1.$$

4.2.2 Phononen-und Phonon-Rotonen-Beitrag zur spezifischen Wärme amorpher Festkörper

Der Phononen-Beitrag zur spezifischen Wärme folgt in bekannter Weise als Ableitung des Phononen-Anteils der inneren Energie nach der Temperatur T

$$C^{(ph)} = \int_0^{\varepsilon_{\max}} \frac{\varepsilon^2 e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} - 1\right)^2 k_B T^2} D^{(r)}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (4.11)$$

Für tiefe Temperaturen, $T \ll \theta_D$ mit der Debye-Temperatur $\theta_D = \frac{\hbar u_D q_D}{k_B}$, folgt das bekannte Debye-Gesetz

$$C_D \equiv C^{(ph)} = \frac{12\pi^4 N k_B}{5} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3.$$

$\frac{C_D}{T^3}$ wird häufig als Debye-Faktor bezeichnet. Im Grenzbereich hoher Temperaturen ($T \gtrsim \theta_D$) folgt für den Phononen-Beitrag zur spezifischen Wärme das bekannte Dulong-Petit-Gesetz

$$C^{(ph)} = 3N k_B \alpha^3 \quad (4.12)$$

unter Berücksichtigung des Auffüll-Faktors α .

Der Phonon-Rotonen-Beitrag zur inneren Energie lautet

$$U_R = \int_{E_G}^{\varepsilon_{\max}} \varepsilon \bar{n}(\varepsilon) D^{(r)}(\varepsilon) d\varepsilon \quad (4.13)$$

mit der Zustandsdichte (4.9). Phonon-Rotonen genügen der Bose-Einstein-Statistik und es folgt der Rotonen-Anteil zur spezifischen Wärme

$$C^{(r)} = \frac{9k_B N}{\rho^3 x^2} \int_{\tau}^{\alpha} \frac{e^{\frac{\tilde{q}}{x}} \tilde{q}^3 \sqrt{\tilde{q}^2 - \tau^2}}{\left(e^{\frac{\tilde{q}}{x}} - 1\right)^2} d\tilde{q} \quad (4.14)$$

mit den Abkürzungen $x = \frac{T}{\theta_D}$ und τ gemäß Gl. (4.10) sowie der der Sustitution $q = q_D \tilde{q}$.

Bei tiefen Temperaturen ($T \ll \frac{E_G^{(ph)}}{k_B}$) verhalten sich Rotonen näherungsweise gemäß der Boltzmann-Statistik mit der mittleren Besetzungszahl $\bar{n}(\varepsilon) = e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}$. Damit folgt näherungsweise für die freie Energie der Rotonen bei tiefen Temperaturen (vgl. [28])

$$F^{(r)} = \int_{E_G}^{\infty} (-k_B T) e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} D_R^{(ph)}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{9k_B N \theta_D x^2 \tau^2 K_2\left(\frac{\tau}{x}\right)}{\rho^3}$$

mit der modifizierten Besselfunktion zweiter Art n -ter Ordnung $K_n(x)$. Für den Rotonen-Anteil zur spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen erhält man

$$C^{(r)} = -T \frac{\partial^2 F^{(r)}}{\partial T^2} = \frac{9k_B N \tau}{\rho^3 x} \left((12x^2 \tau + \tau^3) K_0\left(\frac{\tau}{x}\right) + (24x^2 \tau + 5x\tau^2) K_1\left(\frac{\tau}{x}\right) \right). \quad (4.15)$$

Im Bereich hoher Temperaturen folgt aus Gl. (4.14)

$$C^{(r)} = \frac{k_B N (a^2 - \tau^2)}{\rho^3} \left(3 + \frac{3a^2 - 2\tau^2}{20x^2} \right). \quad (4.16)$$

Addiert man den Phononen-Anteil (4.13) und den Rotonen-Anteil (4.16), so erhält man wegen der Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände das bekannte Dulong-Petit-Gesetz für $T > \theta_D$:

$$C_V = C^{(ph)} + C^{(r)} = 3k_B N.$$

Die spezifische Wärme C_V und die getrennten Beiträge der Phononen und Phonon-Rotonen sind in Abb. 4.5 über $\frac{T}{\theta_D}$ dargestellt. Man erkennt das Debye-Verhalten für $T \lesssim 0.01 \theta_D$, wobei die Tunnel-Zustände nicht berücksichtigt sind. Oberhalb von $T \approx 0.01 \theta_D$ steigt C_V durch den Rotonen-Anteil an, und geht für $T \rightarrow \theta_D$ in das Dulong-Petit-Gesetz über.

4.2.3 Auswertung experimenteller Daten

Das Verhalten der spezifischen Wärme amorpher Festkörper $C_V \sim T$ bei sehr tiefen Temperaturen ($T \lesssim 1K$) wird auf Zwei-Niveau- bzw. Tunnel-Zustands-Systeme zurückgeführt (vgl. [57] - [59]). Der Super-Debye-Beitrag zur spezifischen Wärme, der Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist, stellt den Peak in $\frac{C_V}{T^3}$ bei Temperaturen oberhalb von $T \gtrsim 1K$ dar. Die vorliegenden experimentellen Daten (vgl. Tab. 4.3) für die spezifische Wärme geben im allgemeinen $\frac{C_V}{T^3}$ über $T[K]$ wieder. Für die aufgeführten Materialien liegen die Werte für die Debye-Temperatur und den Debye-Faktor $\frac{C_D}{T^3}$ der spezifischen Wärme vor (für GeO_2 , $\alpha\text{-Se}$, PMMA , v-SiO_2 siehe [123], sonstige Materialien wie aufgeführt, s.u.). Mit diesen Werten werden die Daten in einer ersten Normierung auf die Form $\frac{C_V}{C_D}$ gebracht.

Die Anpassung der Daten anhand des Modells $\frac{C^{(ph)} + C^{(r)}}{C_D}$ gemäß den Gln. (4.11) und (4.14) erfolgt in zwei weiteren Schritten. Zunächst wird die Debye Temperatur θ_D anhand der Hochtemperatur-Abstiegsflanke von $\frac{C_V}{C_D}$, für die das Dulong-Petit-Gesetz gilt, geeicht. Diese Eichung ist notwendig, um die Werte für die Debye-Temperatur θ_D mit der Theorie für einkomponentige amorphe Festkörper in Einklang zu bringen. Dann werden die geeichten Meßkurven an der Tieftemperatur-Anstiegsflanke bis zum Erreichen des Maximums an das Modell $\frac{C^{(ph)} + C^{(r)}}{C_D}$ gefittet, wobei die noch offenen Parameter τ (Gl. (4.10)) und ρ (Gl. (4.8)) angepaßt werden. Die Methode ist in Abb. 4.6 anhand der Meßwerte der spezifischen Wärme von D-Aethanol aus [124] dargestellt. Die Meßpunkte sind anhand der

Hochtemperatur-Flanke geeicht. Die Tieftemperatur-Flanke $\frac{C^{(ph)}+C^{(r)}}{C_D}$ ist mit den Daten aus dem Fit (s. entsprechende Werte aus Tabelle 4.3) berechnet und das Ergebnis für C_V ist dargestellt.

Aus der Lage des Maximums von $\frac{C_V}{C_D}$ folgt die relative Höhe τ (Gl. (4.10)) der Gap-Energie, während der Renormierungsfaktor ρ (Gl. (4.8)) aus der Höhe des Peaks folgt. In Tabelle (4.3) sind die Werte für τ und ρ sowie $E_G = \frac{\tau \theta_D}{k_B}$ nach Rückeichung der Debye-Temperatur angegeben.

Mit den Werten aus Tabelle 4.3 wird $\frac{C_V}{C_D}$ berechnet und mit den Meßkurven verglichen (Abb.4.7). Die Übereinstimmung mit den Meßkurven ist zufriedenstellend.

Die semiquantitative Theorie (Kap. (4.1)) liefert für die Gap-Energie aus dem ersten scharfen Peak des statischen Strukturfaktors (FSDP) näherungsweise (vgl. (4.3))

$$\left(E_G^{(ph)}\right)^2 = \hbar^2 u^2 \rho^2 \tau^2 q_D^2 \quad (4.17)$$

Für langwellige Phononen sind sowohl die Renormierung $R(q)$ als auch das Quadrat der scheinbaren Gap-Energie $\left(E_G^{(ph)}\right)^2$ proportional zur mittleren quadratischen Dichtefluktuation Δ^2 (vgl. Kap. 3.2.3 und 3.2.4). Δ^2 ist ein Maß für die Unordnung, die im langwelligen Bereich durch die langreichweitigen Inhomogenitäten repräsentiert wird. Wir nehmen daher an, daß die Renormierung der Schallgeschwindigkeit im Rotonenbereich $R(q)$ proportional zu $-\tau^2$ ist und schätzen ρ durch $\rho = \rho_{\max} = \sqrt{1 - \tau^2}$ ab. Man erhält aus (4.17) die in Tabelle (4.4) angegebenen Werte für τ und ρ . Mit diesen Werten wird die spezifische Wärme berechnet. (siehe Abb.4.8))

Die Werte für τ aus den Tabellen 4.3 und 4.4 sind von gleicher Größenordnung, aber im Trend liegen die Werte für τ aus Tabelle 4.3 um einen Faktor ~ 0.5 unterhalb der Werte aus Tabelle 4.4. Eine Diskrepanz der Theorie ist, daß diese für sowohl für C_V als auch für E_G für einkomponentige amorphe Festkörper formuliert wurde, während die behandelten Materialien überwiegend aus mehreren Komponenten bestehen. Weiterhin ist der Beitrag zur spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen $T \lesssim 1K$, der aus den Zwei-Niveau- bzw. Tunnel-Zustands-Systemen stammt, nicht völlig abseparierbar. Diese Schwierigkeit führt zur Verschiebung des Peaks in $\frac{C_V}{T^3}$ zu tiefen Temperaturen, was auf zu niedrige Werte für τ führt. Beide Effekte sind allerdings schwer zu quantifizieren.

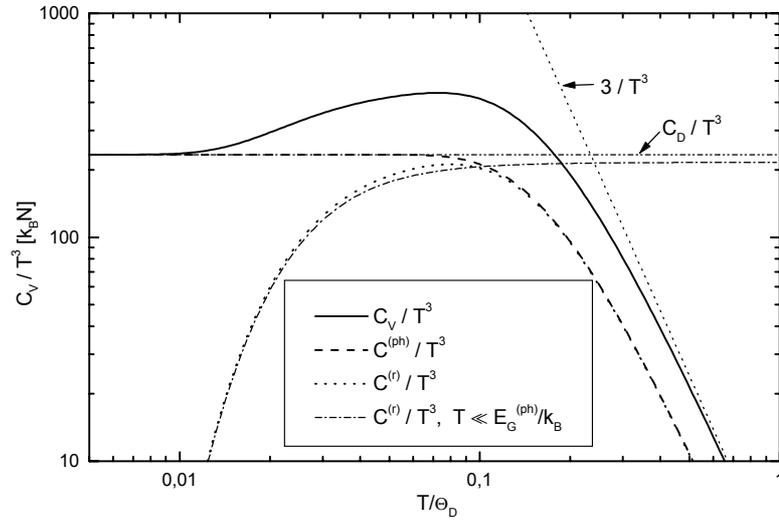


Abbildung 4.5: Spezifische Wärme $\frac{C_V}{T^3}$ mit dem Phononen-Beitrag gemäß Gl. (4.11) und dem Rotonen-Beitrag gemäß Gl. (4.14) sowie die Näherungen für den Rotonen-Beitrag $C^{(r)}/T^3$ und für den Phononen-Beitrag $C^{(ph)}/T^3$ im Bereich tiefer Temperaturen $T \ll E_G^{(ph)}/k_B$ bzw. $T \ll \theta_D$. Zusätzlich ist der Verlauf des Debye-Gesetzes für $T \ll \theta_D$ und des Dulong-Petit-Gesetzes für $T \rightarrow \theta_D$ eingezeichnet.

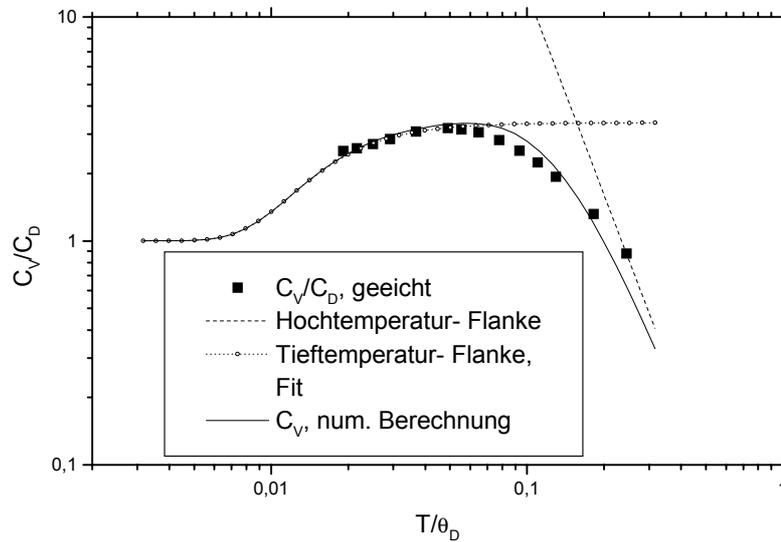


Abbildung 4.6: Darstellung der Methode zur Berechnung von $C(T)$ am Beispiel der Daten für D-Äthanol [124]. Die Debye-Temperatur θ_D wurde an der Hochtemperatur-Flanke geeicht. Die Anpassung der Parameter τ und ρ erfolgte an der Tieftemperatur-Flanke. Mit diesen Parametern wurde schließlich $C(T)$ berechnet (s. Text).

Material	τ	ρ	E_G [meV]
GeO ₂ [51], [50]	0.137	0.875	1.246
α -Se [125]	0.105	0.945	0.574
PMMA [51], [50]	0.052	0.825	0.482
v-SiO ₂ [96]	0.106	0.538	1.263
1-Propanol [126]	0.09	0.813	0.727
2-Propanol [126]	0.067	0.814	0.502
Aethanol [124]	0.058	0.735	0.595
D-Aethanol [124]	0.061	0.73	0.639

Tabelle 4.3: Fit-Parameter τ , ρ und $E_G = \frac{\tau\theta_D}{k_B}$ für die angegebenen Materialien aus dem Fit der spezifischen Wärme $\frac{C(T)}{C_P(T)}$ gemäß (4.11) und (4.14).

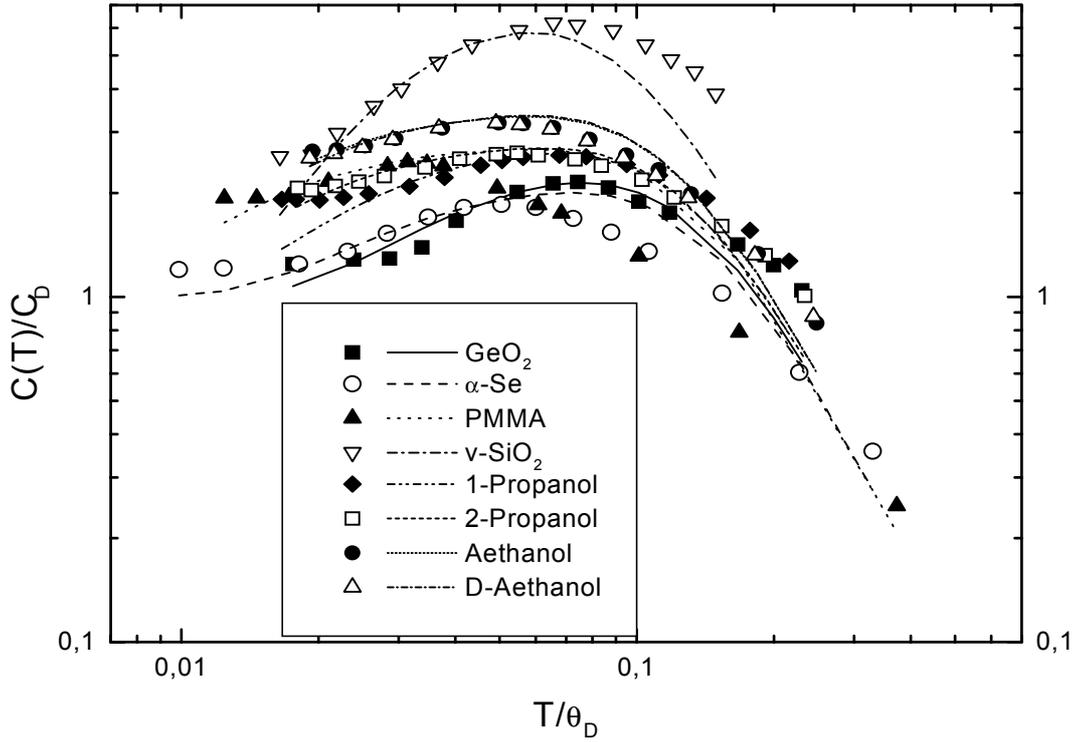


Abbildung 4.7: Gegenüberstellung der Meßdaten und der berechneten Werte für $\frac{C(T)}{C_D}$ gem. (4.11) und (4.14) mit den Parametern aus Tabelle 4.3 über $\frac{T}{\theta_D}$ (ge- eicht). Die Parameter in Tabelle 4.3 geben die Rotonen- Gap- Energie ($\sim \tau$) und die Renormierung der Schallgeschwindigkeit ($\sim \rho$) wieder. Die Übereinstimmung der Kurven ist zufriedenstellend.

Material	τ	ρ
Mg ₇₀ Zn ₃₀ [115]	0.128	0.992
ZnCl ₂ [116]	0.294	0.956
α -Fe [119]	0.129	0.992
α -Ni [119]	0.157	0.988
Ni ₃₅ Zr ₃₅ Hf ₃₀ [117]	0.142	0.99
Ni ₃₅ Zr ₆₅ [117]	0.199	0.98
Ti ₈₄ Si ₁₆ [118]	0.124	0.992
Ni ₈₀ P ₂₀ [118]	0.147	0.989

Tabelle 4.4: Fit- Parameter τ , ρ und $E_G = \frac{\tau\theta_D}{k_B}$ gemäß (4.17) für die angegebenen Materialien aus dem Fit des statischen Strukturfaktors $S(Q)$ im FSDP- Bereich (vgl.(2.4)) (s. Text).

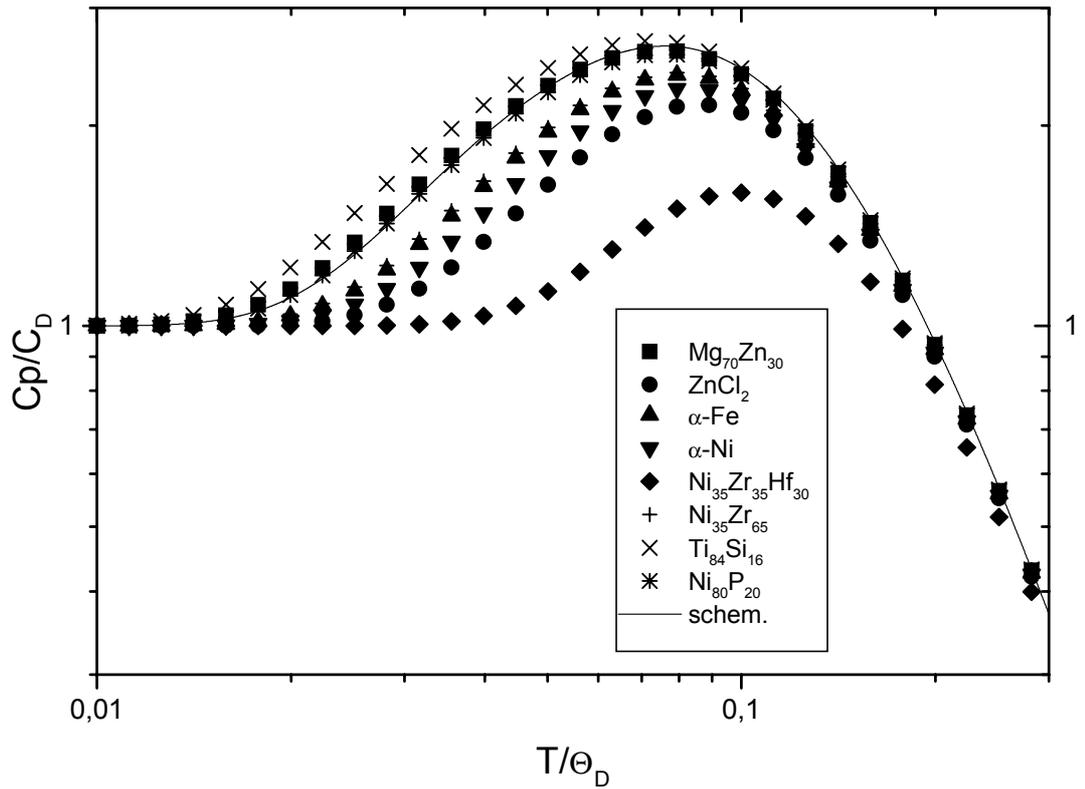


Abbildung 4.8: Spezifische Wärme $\frac{C_V}{C_D}$ gemäß den Gln. (4.11) und (4.14) mit den Werten für τ und ρ aus Tabelle 4.3 über $\frac{T}{\theta_D}$. Als schematische Darstellung ist $\frac{C_V}{C_D}$ für $\tau = 0.16$ und $\rho = 0.97$ hinzugefügt.

4.3 Schlußfolgerung

Das Verhalten rotonenähnlicher Anregungen (Phonon- und Magnon-Rotonen) kann mit Hilfe eines semiquantitativen physikalischen Bildes näherungsweise beschrieben werden. Eine Greenfunktions-Methode auf der Basis des Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus, wie sie in Kap. 3 für langwellige Anregungen beschrieben wurde, ist jedoch derzeit nicht vorhanden.

Das grundsätzliche Verhalten rotonenähnlicher Anregungen, vor allem der Phonon-Rotonen, in amorphen Festkörpern, ist in der Literatur etabliert. Danach existiert bei der doppelten Debye-Wellenzahl q_1 ein Minimum der Dispersionsrelation, das mit dem ersten scharfen Peak des statischen Strukturfaktors (mit der Breite $\pm\Delta q$) zusammenfällt. Die Breite des FSDP ist eine Konsequenz der amorphen Struktur (vgl. Abschn. 2.2).

In unserer Interpretation werden die Rotonen mit der Wellenzahl $Q \approx q_1$ durch diffuse Umklapp-Prozesse an dem FSDP, der als verschmierter Bragg-Reflex fungiert in die erste Debye-Kugel vorreduziert. Es entstehen, als Konsequenz der Verbreiterung des FSDP, Wellenpakete mit der Breite $\sim \pm\Delta q$, die aus langwelligeren Anregungen mit der Wellenzahl \vec{k} parallel zu \vec{Q} gebildet werden. Die Anregung der Teilmode mit der Wellenzahl \vec{k} ist durch die Funktion $\rho(\vec{Q} - \vec{k})$ (Gl. (2.1)) gegeben. Durch die langwelligeren Anregungen, deren Wellenzahl nicht gleich der Hauptmode sind, wird die amorphe Struktur kompensiert und sie wirken demnach als Kompensationsanregungen, wie dies auch für den langwelligen Bereich der Fall ist. Die Entstehung der Kompensationsanregungen führt schließlich zur Gap-Energie $E_G^{(m)} = \alpha^2 D (\Delta q)^2$ für Magnon-Rotonen und $(E_G^{(ph)})^2 = \alpha^2 \hbar^2 u^2 (\Delta q)^2$ für Phonon-Rotonen mit $\alpha \approx 1$. Die Dispersionsrelation zeigt in der Umgebung des Rotonen-Minimums die Form

$$E^{(m)}(Q) = E_G^{(m)} + D (Q - q_1)^2 \quad (\text{Magnon-Rotonen}),$$

bzw.

$$E^{(ph)}(Q) = \sqrt{(E_G^{(ph)})^2 + \hbar^2 u^2 (Q - q_1)^2} \quad (\text{Phonon-Rotonen})$$

mit der renormierten Stiffnesskonstante D bzw. Schallgeschwindigkeit u im Rotonenbereich. Die Phonon-Rotonen-Dispersionsrelation gilt näherungsweise auch für supraflüssiges ^4He .

Sind sowohl der statische Strukturfaktor $S(Q)$ als auch die renormierte Stiffnesskonstante bzw. Schallgeschwindigkeit im Rotonenbereich bekannt, so liefert der Vergleich der berechneten Dispersionsrelation mit den Meßdaten zufriedenstellende Übereinstimmung.

Der Super-Debye-Beitrag zur spezifischen Wärme oberhalb $T \gtrsim 1K$ wurde mit Hilfe des Rotonen-Konzeptes gedeutet. Die spezifische Wärme wurde unter Beachtung der Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände berechnet. Anhand der Hochtemperatur-Flanke der spezifischen Wärme in der $\frac{C_V}{T^3}$ -Darstellung, für die das Dulong-Petit-Gesetz als klassischer Grenzfall gilt, wurde die Debye-Temperatur für eine Reihe amorpher Festkörper geeicht. Die Lage und die Höhe der Peaks in der $\frac{C_V}{T^3}$ -Darstellung liefert zufriedenstellende Ergebnisse für die vorreduzierte und renormierte Phonon-Rotonen-Energie. Die Vorreduktion garantiert eine realistische Höhe des Super-Debye-Beitrages.

Aus dem statischen Strukturfaktor im Rotonen-Bereich für verschiedene amorphe Festkörper erhält man deren relative Rotonen-Gap-Energie. Mit den erhaltenen Werten für $\tau = \frac{E_G}{\hbar u q D}$ der Phonon-Rotonen wurde die spezifische Wärme berechnet, wobei realistische Resultate erhalten wurden.

Die aus der spezifischen Wärme und die aus der semiquantitativen Theorie berechneten Werte für die relative Rotonen-Gap-Energie liegen in der gleichen Größenordnung. Die Übereinstimmung der berechneten und der gemessenen Rotonen-Selbstenergie sowie die größenordnungsmäßige Übereinstimmung der aus dem Super-Debye-Beitrag und der aus der semiquantitativen Theorie gewonnenen relativen Rotonen-Gap-Energie stützen das anschauliche Wellenpaket-Bild der Rotonen.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

Die Auswirkungen der statischen Struktur amorpher Festkörper auf langwellige und rotonenähnliche Elementaranregungen sind das Thema dieser Arbeit.

Der statische Strukturfaktor im langwelligen Bereich, in dem die „Fernordnung“ der amorphen Festkörper (ausgedrückt durch die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion $G(r)$) ihren Niederschlag findet, wird anhand von geeigneten Modellfunktionen an experimentelle Ergebnisse angepaßt. Die Ergebnisse zeigen, daß schwache, ausgedehnte Inhomogenitäten mit charakteristischer Korrelationslänge $\frac{1}{\kappa} \sim 10 - 10^3 \text{ \AA}^{-1}$ eine gemeinsame Eigenschaft vieler -insbesondere aus der Schmelze gewonnener- amorpher Festkörper sind.

Der statische Strukturfaktor im kurzwelligen Bereich, insbesondere sein erster scharfer Peak (FSDP), konnte in ähnlicher Weise anhand von Modellfunktionen an experimentelle Ergebnisse angepaßt werden. Hier findet die Nahordnung, die durch die radiale Verteilungsfunktion $g(r)$ ausgedrückt wird, ihren Niederschlag. Die Anpassung der Modellfunktionen an experimentelle Daten gewährleistet die Berücksichtigung der Struktur realer amorpher Festkörper bei der Untersuchung der Elementaranregungen.

Der verbesserte Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus (MKF) für Magnonen und Phononen liefert die Dämpfung und die Selbstenergie-Renormierung langwelliger Magnonen und Phononen. Die Dämpfung zeigt (magnetische) Rayleigh-Streuung der Magnonen und Phononen mit einer Wellenzahl q kleiner als die reziproke charakteristische Korrelationslänge κ an den Inhomogenitäten. Die Renormierung und Dämpfung der Magnonen erhält man auch alternativ aus einer elementaren quantenmechanischen Theorie, in der Abweichungen von der mittleren Dichte in der Stiffnesskonstanten als Störung in zweiter Ordnung der Störungstheorie behandelt werden. Aus dem MKF folgt eine scheinbare Magnonen-Gap-Energie der Größe $E_G^{(m)} = \Delta^2 D \kappa^2$ bzw. eine Phononen-Gap-Energie mit $\left(E_G^{(ph)}\right)^2 = \Delta^2 \hbar^2 u^2 \kappa^2$ für Magnonen bzw. Phononen mit Wellenzahlen q größer als die reziproke charakteristische Korrelationslänge κ ($\kappa \ll q \ll q_D$) infolge der Bildung von Kompensationsmagnonen bzw. -phononen, die den Einfluß der Inhomogenitäten kompensieren. Diese Kompensationsanregungen begleiten die Hauptmode der Anregung und bilden als Wellenpaket ein „Magnon-dressed Magnon“ bzw. ein „Phonon-dressed Phonon“.

Die Spur der strukturgemittelten Greenfunktion, $\left\langle G_{\vec{q}\vec{q}'}^{(m)}(E) \right\rangle$ für Magnonen bzw. $\left\langle G_{\vec{q}\vec{q}'}^{(ph)}(\omega) \right\rangle$ für Phononen, liefert die Zustandsdichten $D^{(m)}(E)$ bzw. $D^{(ph)}(\omega)$ langwelliger Magnonen und Phononen. Bestandteile der Zustandsdichte sind die Zustandsdichte von Elementaranregungen in einem homogenen (magnetischen) Kontinuum ($D_H(q_E)$), die durch die Renormierung und die Inhomogenitäten verändert werden ($D_H(q_E)(d_R(q_E) + d_I(q_E))$) sowie der zusätzliche Anteil von Amorphonen in der Zustandsdichte ($D_H(q_E) d_A(q_E)$), die eine neue Art von Elementaranregungen in amorphen Ferromagneten bzw. amorphen Festkörpern sind und aufgrund der amorphen Struktur entstehen. Die Gesamtzahl der Zustände ist genau dann erhalten, wenn sowohl die Veränderungen aufgrund der Inhomogenitäten als auch die Amorphonen-Anteile berücksichtigt werden. Für niederenergetische Zustände folgt eine Erhöhung der Zustandsdichte, die Peaks für $D^{(m)}(E)/\sqrt{E}$ bzw. $D^{(ph)}(\omega)/\omega^2$

zur Folge haben. Diese Peaks werden als Beitrag zum Bosonen-Peak interpretiert. Die räumliche Korrelationsfunktion der Zustände veranschaulicht, daß die gewöhnlichen Magnonen und Phononen delokalisiert sind, während die Amorphonen für niedrige Energien an den Inhomogenitäten räumlich lokalisierte Anregungen darstellen.

Aus einer quantenmechanischen Störungsrechnung, in welcher die Fluktuationen der (magnetischen) Dichte als Störungen in die Stiffnesskonstante bzw. in die Schallgeschwindigkeit eingehen, folgt die Stoßfrequenz und die mittlere freie Weglänge der Magnonen und Phononen, die in die Berechnung der Wärmeleitfähigkeit der Magnonen und Phononen eingehen. Bei der Berechnung der Wärmeleitfähigkeit der Phononen aus der verallgemeinerten Debye-Formel entstehen an der unteren Integrationsgrenze Divergenzen ($\sim q^{-2}$) bei der Berücksichtigung endlicher reziproker charakteristischer Korrelationslängen κ . Diese Schwierigkeiten wurden mit der Berechnung des Wärmewiderstandes $\varrho \gtrsim \varkappa^{-1}$ nach Ziman (bzw. durch Übertragung auf Magnonen) für Magnonen- und Phononenwärmeleitung umgangen, wobei insbesondere für Magnonen der inverse Wärmewiderstand ϱ^{-1} und die Wärmeleitfähigkeit \varkappa ausgezeichnet übereinstimmen. Als weitere untere Grenze für die Wärmeleitfähigkeit wurde \varkappa_K nach der Klemens-Methode (bzw. durch Übertragung auf Magnonen) für Magnonen und Phononen berechnet. Die Wärmeleitfähigkeit sinkt sowohl für Magnonen als auch für Phononen mit steigender Höhe (ausgedrückt durch die mittlere quadratische Dichtefluktuation) und steigender mittlerer Ausdehnung (ausgedrückt durch die mittlere charakteristische Korrelationslänge $\frac{1}{\kappa}$) der Inhomogenitäten. Der Vergleich von Magnonen- und Phononen-Wärmeleitfähigkeit zeigt, daß bei tiefen Temperaturen die Magnonen-Wärmeleitfähigkeit nicht vernachlässigbar ist und bei sehr tiefen Temperaturen sogar überwiegen kann.

Das physikalische Bild, das zur Behandlung der rotonenähnlichen Anregungen in der vorliegenden Arbeit benutzt wird, behandelt Magnon- und Phonon-Rotonen als Wellenpakete langwelliger Anregungen, die einen weiteren Anregungsweig in amorphen Festkörpern bilden. Aus einer elementaren semiquantitativen quantenmechanischen Theorie wird die Dispersionsrelation von Magnon- und Phonon-Rotonen in der Umgebung des Rotonen-Minimums berechnet. Die Vorreduktion um die Wellenzahl q_1 (q_1 bezeichnet die Lage des ersten scharfen Peaks des statischen Strukturfaktors) entspricht einem (diffusen) Umklapp-Prozeß innerhalb des physikalischen Bildes der Rotonen. Die Gap-Energie E_G entsteht aufgrund der Bildung von Kompensationsanregungen zur Kompensation der amorphen Struktur, wie sie auch bei langwelligeren Anregungen auftritt. Der Vergleich der gemessenen mit der berechneten Dispersionsrelation liefert befriedigende Übereinstimmung, wenn die Stiffnesskonstante D bzw. die Schallgeschwindigkeit u und der statische Strukturfaktor $S(q)$ hinreichend genau bekannt sind.

Aus der vorreduzierten Dispersionsrelation für Phonon-Rotonen wird unter Beachtung der Erhaltung der Gesamtzahl der Zustände der Super-Debye-Beitrag zur spezifischen Wärme (excess specific heat) bei tiefen Temperaturen ($T \gtrsim 1K$) berechnet. Die Lage des Maximums des Super-Debye-Beitrages in der $\frac{C(T)}{T^3}$ -Darstellung liefert die Gap-Energie des Rotonen-Minimums, die Höhe des Maximums bestimmt die Renormierung der Schallgeschwindigkeit im Rotonen-Bereich. Umgekehrt konnte für eine Reihe amorpher Festkörper, für welche der statische Strukturfaktor im FSDP-Bereich bekannt ist, der Super-Debye-Beitrag berechnet werden. Die aus dem statischen Strukturfaktor und die aus dem Super-Debye-Beitrag folgende relative Gap-Energie des Phonon-Rotonen-Minimums liegen im gleichen Größenbereich. Die befriedigende Übereinstimmung der berechneten Kurven mit dem Meßdaten, sowohl der Dispersionsrelation als auch der spezifischen Wärme stützen das physikalische Bild der Rotonen.

Bei der Behandlung der Elementaranregungen in amorphen Festkörpern stellen sich in den Eigenschaften von Magnonen und Phononen weitgehende Gemeinsamkeiten heraus. Diese treffen sowohl für die langwelligeren als auch die rotonenähnlichen Anregungen zu und sind auf analoge Streu-Mechanismen

zurückzuführen. Diese führen zur Dämpfung, Renormierung und Erhöhung der Zustandsdichte der langwelligen Magnonen und Phononen. Des weiteren werden sowohl langwellige als auch rotonenähnliche Anregungen als Wellenpakete interpretiert. Dabei wird durch die Bildung von Kompensationsanregungen der Einfluß der amorphen Struktur kompensiert. Die Feststellung dieser Analogien bzw. Gemeinsamkeiten stellt ein wichtiges Ergebnis dieser Arbeit dar.

Zur weiteren Bestätigung des Rotonen-Bildes wäre eine Greenfunktionen-Theorie analog zum Matsubara-Kaneyoshi-Formalismus hilfreich. Eine solche Untersuchung sollte überdies die Renormierung der Stiffnesskonstanten bzw. der Schallgeschwindigkeit und die Zustandsdichte der Zustände mit Energien größer als die Rotonen-Gap-Energie liefern. Auch Amorphonen-Zustände (dann: „Roton-Amorphonen“) analog zum langwelligen Bereich sind zu erwarten, die in der Folge Auswirkungen auf die Wärmeleitfähigkeit und die spezifische Wärme hätten.

In der vorliegenden Arbeit wurde der Akzent auf die Auswirkungen des *statischen* Strukturfaktors amorpher Ferromagneten und Festkörper gelegt. Ebenso aufschlußreich wäre die Berücksichtigung des dynamischen Strukturfaktors, der zusätzlich zu den elastischen auch zu inelastischen Beiträgen zur Streuung der Elementaranregungen führen würde.

Anhang A

Anhang

A.1 Methode der Strukturmittelung

Eine vollständige Beschreibung eines amorphen Systems mit N Atomen erfordert eine Wahrscheinlichkeits-Verteilungsfunktion $P_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ (vgl.z. B. [37], [24]). Die Wahrscheinlichkeit, die Atome bei $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ in den Volumeninkrementen d^3r_1, \dots, d^3r_N anzutreffen, ist gleich $P_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) d^3r_1 \cdots d^3r_N$. Die $P_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ sind normiert:

$$\frac{1}{V^N} \int P_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) d^3r_1 \cdots d^3r_N = 1$$

Der Strukturmittelwert einer Größe $F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ lautet dann:

$$\langle F \rangle = \frac{1}{V^N} \int F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) P_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) d^3r_1 \cdots d^3r_N.$$

Man erhält reduzierte Verteilungsfunktionen für ein Atom, Atom-Paare etc. durch

$$\begin{aligned} P_1(\vec{r}_i) &= \frac{1}{V^{N-1}} \int P_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) d^3r_1 \cdots d^3r_{i-1} d^3r_{i+1} \cdots d^3r_N \\ P_2(\vec{r}_i, r_j) &= \frac{1}{V^{N-2}} \int P_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) d^3r_1 \cdots d^3r_{i-1} d^3r_{i+1} \cdots d^3r_{j-1} d^3r_{j+1} \cdots d^3r_N. \end{aligned}$$

Dabei ist $P_1(\vec{r}_i)$ wegen der Homogenität des Konfigurationsraumes konstant [24].

Durch doppelseitige Fourier-Transformation der Funktion $\delta_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j : \text{Atom-Orte})$ erhält man die wichtige Funktion

$$\rho(\vec{q} - \vec{q}') = \frac{1}{N} \sum_i e^{-i(\vec{q} - \vec{q}')\vec{r}_i}$$

mit dem Strukturmittelwert

$$\langle \rho(\vec{q} - \vec{q}') \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{V} \int d^3r_i P_1(\vec{r}_i) e^{-i(\vec{q} - \vec{q}')\vec{r}_i} = \delta_{\vec{q}\vec{q}'}$$

Im Zusammenhang mit $P_2(\vec{r}_i, r_j)$ steht die bedingte Wahrscheinlichkeits-Verteilungsfunktion $g_2(\vec{r}_i; \vec{r}_j)$. Die Wahrscheinlichkeit, ein Atom bei \vec{r}_j im Volumeninkrement d^3r_j anzutreffen, wenn bei \vec{r}_i ein Atom ist, ist gleich $g_2(\vec{r}_i; \vec{r}_j) d^3r_j$. Es gilt

$$P_2(\vec{r}_i, r_j) = P_1(\vec{r}_i) g_2(\vec{r}_i; \vec{r}_j) \tag{A.1}$$

In isotropen Medien ist g_2 nur vom Abstand $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ der Atome abhängig und $g_2(\vec{r}_i; \vec{r}_j)$ ist gleich der radialen Verteilungsfunktion $g(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$.

Der Strukturmittelwert des Betragsquadrates (oder „zweites Moment“) von $\rho(\vec{q} - \vec{q}')$ lautet

$$\langle \rho(\vec{q} - \vec{q}') \rho(\vec{q}' - \vec{q}) \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \frac{1}{V^2} \int d^3 r_i d^3 r_j P_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) e^{-i(\vec{q} - \vec{q}')(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}$$

Mit Gl. (A.1) folgt:

$$\begin{aligned} \langle \rho(\vec{q} - \vec{q}') \rho(\vec{q}' - \vec{q}) \rangle &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \frac{1}{V^2} \int d^3 r_i d^3 r_j P_1(\vec{r}_i) g_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) e^{-i(\vec{q} - \vec{q}')(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\ &= \delta_{\vec{q}\vec{q}'} + \frac{1}{N^2} \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{V^2} \int d^3 r_i d^3 r_j P_1(\vec{r}_i) g_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) e^{-i(\vec{q} - \vec{q}')(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\ &= \delta_{\vec{q}\vec{q}'} + \int d^3 r g(\vec{r}) e^{-i(\vec{q} - \vec{q}')\vec{r}} \\ &= \delta_{\vec{q}\vec{q}'} + S(\vec{q} - \vec{q}'). \end{aligned}$$

Der zweite Summand $S(\vec{q} - \vec{q}')$ ist der statische Strukturfaktor, der im FSDP-Bereich als Fourier-Transformation der radialen Verteilungsfunktion die Nahordnung des Systems beschreibt.

Für langreichweitige Dichte-Inhomogenitäten $\Delta\rho(\vec{r})$ gilt entsprechend :

$$\begin{aligned} \langle \rho(\vec{q} - \vec{q}') \rho(\vec{q}' - \vec{q}) \rangle &= \delta_{\vec{q}\vec{q}'} + \frac{1}{V^2} \int d^3 r d^3 u \frac{\overline{\Delta\rho(\vec{r} + \vec{u}) \Delta\rho(\vec{u})}}{\bar{\rho}^2} e^{-i(\vec{q} - \vec{q}')\vec{r}} \\ &= \delta_{\vec{q}\vec{q}'} + S_{lw}(\vec{q} - \vec{q}'). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Der zweite Beitrag ist der statische Strukturfaktor $S_{lw}(\vec{q})$ im langwelligen Bereich ($q \rightarrow 0$), der, als Fourier-Transformation der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion

$$G(r) = \frac{1}{V} \int d^3 u \frac{\overline{\Delta\rho(\vec{r} + \vec{u}) \Delta\rho(\vec{u})}}{\bar{\rho}^2},$$

den Einfluß langreichweitiger Inhomogenitäten wiedergibt. Die Stärke dieser Inhomogenitäten ist die mittlere quadratische Dichtefluktuation

$$\Delta^2 = G(0) = \frac{1}{V} \int d^3 u \frac{\overline{\Delta\rho(\vec{u}) \Delta\rho(\vec{u})}}{\bar{\rho}^2}. \quad (\text{A.3})$$

In gleicher Weise erhält man für die Funktion $\rho_a(\vec{q} - \vec{q}') = \rho(\vec{q} - \vec{q}') - \langle \rho(\vec{q} - \vec{q}') \rangle$ (vgl.(2.2) in Abschnitt 3.1.1) deren zweites Moment :

$$\begin{aligned} \langle \rho_a(\vec{q} - \vec{q}') \rho_a(\vec{q}' - \vec{q}) \rangle &= \langle \rho(\vec{q} - \vec{q}') \rho(\vec{q}' - \vec{q}) \rangle - \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \\ &= S(\vec{q} - \vec{q}') \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

und für

$$\langle \rho_a(\vec{q} - \vec{k}) \rho_a(\vec{k} - \vec{q}') \rangle = \delta_{\vec{q}\vec{q}'} S(\vec{q} - \vec{k}) \quad (\text{A.5})$$

A.2 Kurzdarstellung der experimentellen Methoden zur Strukturuntersuchung

Bei Strukturuntersuchungen werden (möglichst parallele, monochromatische) Röntgen-, und Neutronenstrahlen an amorphen Festkörpern gestreut und die Streuintensität winkel- und energieaufgelöst gemessen. Dabei wird zur Untersuchung der statischen Struktur der elastische Anteil der Streuung verwendet. Röntgen- und Neutronenstrahlen bieten aufgrund ihrer großen Eindringtiefe die Möglichkeit zur Strukturaufklärung im Festkörperinneren.

In Kleinwinkelstreuexperimenten (Anomalous Small Angle X-Ray Scattering: (A)SAXS) verwendete monochromatische Röntgenstrahlung hat üblicherweise eine Wellenlänge im Bereich von $\lambda \sim 1\text{\AA}$. Die Röntgenquanten wechselwirken mit den Elektronenschalen der Festkörperatome. Zur elastischen, kohärenten Streuung tragen nur die inneren, lokalisierten Elektronenschalen bei [102]. Das Wechselwirkungspotential für die Streuung an einem Atom am Ort \vec{r}_i lautet $\hat{U}_i(\vec{r}) = b_i^{(X)} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$ mit der Streulänge $b_i^{(X)} = r_0 Z_i$; $r_0 = \frac{e^2}{m_e c^2}$ ist der klassische Thomson'sche Elektronenradius und Z_i die Anzahl der streuenden Elektronen [127].

Bei Neutronenstreuexperimenten (Anomalous Small Angle Neutron Scattering: (A)SANS) unterscheidet man, je nach Neutronen-Energie, zwischen kalten ($0.1 \text{ meV} \lesssim E \lesssim 10 \text{ meV}$), thermischen ($10 \text{ meV} \lesssim E \lesssim 100 \text{ meV}$) und heißen und epithermischen Neutronen [114]. Die üblicherweise verwendeten thermischen Neutronen haben eine de Broglie-Wellenlänge von $3\text{\AA} \lesssim \lambda \lesssim 30\text{\AA}$. Einfallende Neutronen wechselwirken mit den Kernen der Festkörper-Atome mit der Streulänge $b_i^{(N)} = b_i^0 - \frac{\Gamma}{2qE_R}$, wobei b_i^0 in etwa dem Kernradius entspricht, Γ die Energiebreite des Neutronenstrahls, q dessen Wellenzahl und E_R die Resonanzenergie bei der Neutron-Kern-Wechselwirkung bedeutet. Die Röntgen- und Neutronen-Streulängen $b_i^{(X)}$ und $b_i^{(N)}$ sind, z.B. in [127], für eine Reihe von Elementen tabelliert und liegen typischerweise im Bereich von $b_i^{(X/N)} \sim 10^{-12} \text{ cm}$.

Bei Neutronenstreuexperimenten an amorphen Ferromagneten wird polarisierte Neutronenstrahlung verwendet, um den magnetischen Anteil der Streuung vom Anteil der Kernstruktur zu unterscheiden. Die einfallenden Neutronen wechselwirken zusätzlich zur Neutron-Kern-Wechselwirkung mit den magnetischen Momenten der Atome, wobei die Streulänge $b_i^{(M)} = \frac{\gamma}{2} g b_i^{(X)}$ eng mit der Röntgen-Streulänge $b_i^{(X)}$ verknüpft ist und das magnetische Moment γ der Neutronen, den Landé-Faktor g und die Elektronen-Gesamtdrehimpuls-Quantenzahl J enthält.

Bei der Streuung werden Röntgenquanten oder Neutronen vom Anfangszustand $|\vec{q}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{q}\vec{r}}$ in den Endzustand $|\vec{q}'\rangle \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{q}'\vec{r}}$ gestreut. Bei elastischer Streuung ist $|\vec{q}| = |\vec{q}'|$ und der Streuvektor $\vec{k} = \vec{q} - \vec{q}'$ hat den Betrag $k = 2|\vec{q}|\sin\vartheta$ mit dem Streuwinkel $\vartheta = \frac{1}{2}\angle_{\vec{q}\vec{q}'}$. Die Streuamplitude ist in Born'scher Näherung gleich $\langle \vec{q}' | \hat{U} | \vec{q} \rangle$ mit dem Wechselwirkungspotential $\hat{U}(\vec{r})$, das nach der Debye-Hypothese aus den Streupotentialen der einzelnen Atome superponiert wird: $\hat{U}(\vec{r}) = \sum_i U_i(\vec{r})$ [114]. Es folgt für die Streuamplitude $\langle \vec{q}' | \hat{U} | \vec{q} \rangle = \frac{1}{V} \sum_i b_i e^{-i\vec{k}\vec{r}_i}$ und für die (strukturgemittelte) Streuintensität: $I(\vec{k}) = \left\langle \frac{\vec{p}^2}{N^2} \sum_{i,j} b_i b_j e^{-i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right\rangle$. Bei einkomponentigen Festkörpern bzw. Ferromagneten folgt mit $b_i = b_j = b$ $I(\vec{k}) = b^2 \frac{\vec{p}^2}{N} S(\vec{q})$ mit dem statischen Strukturfaktor $S(\vec{q})$.

A.3 Magnonen- und Phononen-Zustandsdichte aus der Greenfunktion in Ortsdarstellung

Bei der Behandlung der Zustandsdichte ist zu berücksichtigen, daß die Fourier-Transformation und -Rücktransformation in amorphen Festkörpern keine unitären Operationen darstellen. Dieser Sachverhalt führt in

$$\delta_{ji} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, |\vec{q}| \leq n_{qD}} e^{i\vec{q}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)} - \rho^n(\vec{r}_j - \vec{r}_i) \quad (\text{A.6})$$

zur Entstehung des Korrekturterms $\rho^n(\vec{r}_j - \vec{r}_i)$. Dieser Ausdruck ist die Abweichung von dem Kronecker-Delta δ_{ij} , die aus der amorphen Struktur stammt, während in kristallinen Systemen $\rho^n(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = 0$ für alle (\vec{r}_i, \vec{r}_j) gewährleistet ist.

Die Magnonen-Zustandsdichte $D^{(m)}(E)$ lautet, ausgedrückt durch die Magnonen-Greenfunktion $G_{ij}^{(m)}(E)$ in Orts- (\vec{r}_i, \vec{r}_j) -Darstellung

$$D^{(m)}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\langle \sum_i G_{ii}^{(m)}(E) \right\rangle = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\langle \sum_{i,j} \delta_{ji} G_{ij}^{(m)}(E) \right\rangle \quad (\text{A.7})$$

Mit Gl. (A.6) wird aus (A.7)

$$D^{(m)}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, |\vec{q}| \leq n_{qD}} \left\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(m)}(E) \right\rangle + \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\langle \sum_{i,j} \rho^n(\vec{r}_i - \vec{r}_j) G_{ji}^{(m)}(E) \right\rangle \quad (\text{A.8})$$

In (A.8) bedeutet n_{qD} die Grenzwellenzahl bei der \vec{q} -Summation, mit der Debye-Wellenzahl q_D und N als der Anzahl der magnetischen Atome in der Probe mit dem Volumen V . Mit der Fourier-Transformation dieser Abweichung $B_n(\vec{q}) \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \rho^n(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right\rangle$, lautet $D^{(m)}(E)$:

$$D^{(m)}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, |\vec{q}| \leq n_{qD}} \left\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(m)}(E) \right\rangle (1 - O(B_n(\vec{q}))) \quad (\text{A.9})$$

mit einem Korrekturterm $\sim O(B_n(\vec{q}))$. Der Korrekturterm $\sim \left\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(m)}(E) \right\rangle O(B_n(\vec{q}))$ bzw. $\sim \left\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(ph)}(E) \right\rangle O(B_n(\vec{q}))$ hängt von der Energie E bzw. ω und der Grenzwellenzahl n_{qD} ab. Es stellt sich heraus, daß für kleine Energie ($E \lesssim 0.64 D_r q_D^2$, D_r ist die renormierte Stiffness Konstante (s.u.)) $D^{(m)}(E)$ unabhängig von der Grenzwellenzahl n_{qD} ($n \geq 1$) ist. In gleicher Weise ist für niederenergetische Phononen-Zustände ($\omega \lesssim 0.8 u_r q_D$, u_r die renormierte quasi-kristalline Schallgeschwindigkeit), $D^{(ph)}(\omega)$ unabhängig von der Grenzwellenzahl n_{qD} ($n \geq 1$).

Die Phononen-Zustandsdichte $D^{(ph)}(\omega)$, aus der Greenfunktion in Orts- (\vec{r}_i, \vec{r}_j) -Darstellung, $G_{ij}^{(ph)}(\omega)$, lautet

$$\begin{aligned} D^{(ph)}(\omega) &= -\frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \left\langle \sum_i G_{ii}^{(ph)}(\omega) \right\rangle \\ &= -\frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, |\vec{q}| \leq n_{qD}} \left\langle G_{\vec{q}\vec{q}}^{(ph)}(\omega) \right\rangle (1 - O(B_n(\vec{q}))) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

analog zur Magnonen-Zustandsdichte.

Für die Gesamtzahl der Magnonen-Zustände gilt:

$$\begin{aligned}
Z^{(m)} &= \int dE D^{(m)}(E) \\
&= \int dE \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \delta(E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})) (1 - O(B_n(\vec{q}))) \\
&\quad + \int dE \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \delta(E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})) \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{E - \varepsilon_m(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \times (1 - O(B_n(\vec{q}))) \\
&\quad + \int dE \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(E - \varepsilon_m(\vec{k})) \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{E - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})} S(\vec{q} - \vec{k}) \times (1 - O(B_n(\vec{q}))) \\
&= \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} (1 - O(B_n(\vec{q}))) \\
&\quad + \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{\tilde{\varepsilon}_m(\vec{q}) - \varepsilon_m(\vec{k})} S(\vec{q} - \vec{k}) \times (1 - O(B_n(\vec{q}))) \\
&\quad + \frac{V}{N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{V}{N} \mathcal{P} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\varepsilon_m(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{q} - \vec{k})}{\varepsilon_m(\vec{k}) - \tilde{\varepsilon}_m(\vec{q})} S(\vec{q} - \vec{k}) \times (1 - O(B_n(\vec{q}))) \\
&= \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} (1 - O(B_n(\vec{q})))
\end{aligned}$$

Durch wiederholtes Anwenden von (A.6) in (A.8) bzw. (A.10) erhält man für den Korrekturterm

$$O(B_n(\vec{q})) = B_n(q) - B_n^2(q) + B_n^3(q) - \dots + \dots$$

Wird in der Summation $\sum_{\vec{q}} O(B_n(\vec{q}))$ die Beziehung (A.6) ausgenutzt, so erhält man aufgrund der Bildung von $B_n(q)$ eine Summe aus den Gliedern

$$\begin{aligned}
\dots + B_n^h(q) - B_n^{h+1}(q) + \dots &= \dots + \left\langle \sum_{i,j,\dots,k} \rho^n(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \dots \rho^n(\vec{r}_k - \vec{r}_i) \right\rangle \\
&\quad + \left\langle \sum_{i,j,\dots,k,l} \rho^n(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \dots \rho^n(\vec{r}_k - \vec{r}_l) \rho^n(\vec{r}_l - \vec{r}_i) \right\rangle \\
&\quad - \left\langle \sum_{i,j,\dots,k,l} \rho^n(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \dots \rho^n(\vec{r}_k - \vec{r}_l) \rho^n(\vec{r}_l - \vec{r}_i) \right\rangle \\
&\quad - \left\langle \sum_{i,j,\dots,k,l,m} \rho^n(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \dots \rho^n(\vec{r}_k - \vec{r}_l) \rho^n(\vec{r}_l - \vec{r}_m) \rho^n(\vec{r}_m - \vec{r}_i) \right\rangle + \dots
\end{aligned}$$

Die Terme der einzelnen Glieder heben sich mit den vorhergehenden bzw. nachfolgenden Termen gerade auf. Berücksichtigt man noch $\rho^n(0) = 0$ für den ersten Summanden, so folgt schließlich

$$\frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} O(B_n(\vec{q})) = 0 \text{ für den Korrekturterm } O(B_n(\vec{q})).$$

Die Gesamtzahl der Magnonen-Zustände lautet also:

$$Z^{(m)} = \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}$$

und ist damit gleich der Gesamtzahl der Magnonen-Zustände eines kristallinen Ferromagneten.

In analoger Weise erhält man für die Gesamtzahl der Phononen-Zustände einer Polarisationsrichtung

$$\begin{aligned} Z^{(ph)} &= \int d\omega D^{(ph)}(\omega) = \int d\omega^2 \frac{D^{(ph)}(\omega)}{2\omega} \\ &= \frac{V}{N} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} (1 + O(B_n(\vec{q}))) \end{aligned}$$

was der Anzahl der Debye-Phononen-Zustände in einem kristallinen Festkörper entspricht. Man sieht, daß die Erhaltung der Gesamtzahl der Phononen- und Magnonen-Zustände genau dann gewährleistet ist, wenn sowohl der Amorphonen-Anteil als auch der durch die Inhomogenitäten modifizierte Anteil der Zustandsdichte berücksichtigt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] K. Handrich, S. Kobe : *Amorphe Ferro -und Ferrimagnete*, Akademie -Verlag, Berlin (1980)
- [2] M.Schaal, P. Lamparter, S. Steeb: *Z. Naturforsch.* **44A**, 4-6 (1988)
- [3] R.M. Hagenmayer, C.M.E. Zeyen, P. Lamparter : *Z. Naturforsch.* **49a**, 1203-6 (1994)
- [4] J. Kohlbrecher et al.: *Physica B* **213-214**, 579-581 (1995)
- [5] A. Sturm, A. Wiedenmann: *Physica B* **213-214**, 576-8 (1995)
- [6] P. Andonov, P. Rougier, R. Krishnan: *Mat. Sci. Eng.* **A226-228**, 56-61 (1997)
- [7] D.R. dos Santos, I.L. Torriani, A.Y. Ramos, M. Knobel: *J. Appl. Cryst.* **30** Iss. 5 no. 2, 633-36 (1997)
- [8] J. Kohlbrecher et al.: *Z. Phys. B* **104**, 1-4 (1997)
- [9] F. Malizia et al.: *Physica B* **234-236**, 1003-4 (1997)
- [10] S.N. Kaul, P.D. Babu: *J. Phys.: Condensed Matter* **10**, 1563-1597 (1998)
- [11] C.G. Montgomery, J.I. Krugler, R.M. Stubbs: *Phys. Rev. Lett.* **25**, 669 (1970)
- [12] S.F. Edwards, R.C. Jones: *J. Phys. C: Solid State Phys.* **4**, 2109-26 (1971)
- [13] K. Handrich: *phys. stat. sol. (b)* **44**, K123 (1971)
- [14] T. Kaneyoshi, R. Honmura: *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, L65-69 (1972)
- [15] T. Kaneyoshi : *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, L107-9 (1972)

-
- [16] T. Kaneyoshi: *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, 3504-3520 (1972)
- [17] K. Handrich: *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **64**, 1383 (1973)
- [18] R.A.Tahir-Kheli, in H.O. Hooper, A. M. de Graaf (Ed.) *Amorphous Magnetism*, Proc. Int. Symposium on Amorphous Magnetism, 413, Plenum Press, New York (1973)
- [19] R.S. Ishakov: *Sov. Phys. Solid State* **19** (1), 1-3 (1977)
- [20] V.A. Ignatchenko, R.S. Ishakov: *Sov. Phys. JETP* **45**(3), 526-32 (1977)
- [21] V.A. Ignatchenko, R.S. Ishakov: *Sov. Phys. JETP* **47**(4), 725-29 (1978)
- [22] V.A. Ignatchenko, R.S. Ishakov: *Sov. Phys. JETP* **48**(4), 726-29 (1978)
- [23] M.V. Medvedev: *Sov. Phys. Solid State* **22**(7) 1134-8 (1980)
- [24] T. Kaneyoshi : *Amorphous Magnetism*, CRC Press, Boca Raton, Fla. (1984)
- [25] L.I. Deich, V.A. Ignatchenko: *Sov. Phys. JETP* **71**(3), 453-60 (1991)
- [26] Y.P. Krasny, N.P. Kovalenko, V.V. Mikho, E.P. Gurnitskaya: *Physica B* **183** 130-4 (1993)
- [27] E.V. Kuzmin, G.A. Petrowskii, S.S. Aplesnin: *J. Mag. Magn. Mat.* **15-18** 1347-48 (1980)
- [28] E.M. Lifschitz, L.P. Pitajewski: *Lehrbuch der theoretischen Physik*, **IX**, 287 ff, Akademie-Verlag, Berlin (1992)
- [29] A.R. Ferchmin, S. Kobe, M. Sostarich: *Magnetic Properties of Metals (h)* Springer-Verlag, Berlin (1991)
- [30] S.C. Yu, H. Kepa, W.T. Kim, T. Zeiske, H.A. Graf: *Jpn. J. Appl. Phys.* **35** (1) no. 5A, 2642-45 (1996)
- [31] J. Schreiber: *Dissertation*, TU Dresden (1973)
- [32] J.-B. Suck: *Int. J. Mod. Phys. B* **7**, (16&17), 3003-3028 (1993)
- [33] C.J. Benmore, B.J. Oliver, J.-B. Suck, R.A. Robinson, P.A. Egelstaff: *J.Phys.: Cond. Matter* **7**, 4775-4785 (1995)
- [34] C.J. Benmore, S. Sweeney, R.A. Robinson, P.A. Egelstaff, J.-B. Suck: *J. Phys.: Cond. Matter* **11**, 7079-7088 (1999)
- [35] J. Hafner: *J. Phys. C: Sol. State Phys.* **16**, 5773-5792 (1983)
- [36] L.G. Hwa: *J. Raman Spectrosc.* **29**, 268-272 (1998)
- [37] S. Takeno, M. Goda: *Prog. Theor. Phys.* **45** (2), 331-352 (1971)
- [38] V.B. Kashirin: *Russ. Phys. J.* **37** (4), 332-336 (1994)
- [39] A. Pratap, D. Bhandari, N.S. Saxena, M.P. Saksena: *phys. stat. sol. (b)* **185**, 131-135 (1994)
- [40] H. Sato, S. Tanimori, A. Ishida, M. Itoh: *Mat. Sci. Eng.* **A181/A182**, 1043-1046 (1994)

- [41] K. Handrich, J. Resch: *phys. stat. sol. (b)* **152**, 377-394 (1989)
- [42] K. Handrich: *phys. stat. sol. (b)* **116**, 533-538 (1983)
- [43] Z. Xianyu, J.Z. Li, Z.C. Lu, J. Kang, C.T. Ye, Z.Q. Li, *Physica B* **213&214**, 535-537 (1995)
- [44] E.Courtens, M. Foret, B. Hehlen, R. Vacher, *Sol. State Comm.* **117** (3), 187-200 (2001)
- [45] J.-B. Suck, *J. Non-Cryst. Solids* **293-295**, 370-376 (2001)
- [46] P. Vashishta, A. Nakano, R.K. Kalia, I. Ebbsjö, *J. Non-Cryst. Solids* **182**, 59-67 (1995)
- [47] J. Hafner, M. Krajči, *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 4631-4654 (1994)
- [48] K. Handrich: *phys. stat. sol. (b)* **97**, K71-K75 (1980)
- [49] A.C. Anderson, in: W.A. Phillips (Ed.): *Amorphous Solids* 65-78, Springer, Berlin (1981)
- [50] R.C. Zeller, R.O. Pohl, *Phys. Rev. B* **4**, 2029 (1971)
- [51] R.B. Stephens, *Phys. Rev. B* **8**, 2896, (1973)
- [52] D.-M. Zhu, K.-I. Cheong, *Physica B* **219&220**, 317-319 (1996)
- [53] W. Wasserbäch, S. Alben, S. Sahling, R.O. Pohl, E. Thompson, *phys. stat. sol. (b)* **228**, 3 799-823 (2001)
- [54] J.E. de Oliveira, A. Azevedo, F.L.A. Machado, *Solid State Comm.* **95**(1), 781-785 (1995)
- [55] R. Schmidt, Th. Franke, P. Häussler, *J. Non-Cryst. Solids*, **250-252**, 811-814 (1999)
- [56] N. P. Kovalenko, Y. P. Krasny, U. Krey, *Physics of Amorphous Metals*, Wiley-VCH, Berlin (2001)
- [57] P.W. Anderson, B.I. Halperin, C.M. Varma, *Philos. Mag.* **25**, 1 (1972)
- [58] W.A. Phillips, *J. Low-Temp. Phys.* **7**, 351 (1972)
- [59] R.O. Pohl, in: W.A. Phillips(Ed.): *Amorphous Solids*, 27-52, Springer, Berlin (1981)
- [60] P.G. Klemens, *Phys. Soc. London* **68**, 1113 (1955)
- [61] M. Omini, A. Sparavigna, *Phys. Rev. B***61**,10, 6677-6688 (2000)
- [62] S.E. Krasavin, V.A. Osipov, *J. Phys: Cond. Matter* **13**, 1023-1040 (2001)
- [63] J.M. Ziman, *Electrons And Phonons*, Clarendon Press, Oxford (1996)
- [64] Y.P. Yoshi, *phys. stat. sol. (b)*, **95**, 317 (1979)
- [65] K. Handrich: *Wiss. Z. d. Hochschule f. Verkehrswesen "Friedrich List"*, Dresden **3/84**, 51 (1984)
- [66] W. Montfrooij et al., *Physica B* **241-243**, 924-928 (1998)
- [67] R.P.Feynman, *Statistical Mechanics*, Perseus Books, Reading, Mass. (1998)
- [68] D.E. Galli et al., *Phys. Rev. Lett.* **77** (27), 5401-5404 (1996)

-
- [69] A.F.G. Wyatt, *Phys.Scr.* **T49**, 54-64 (1993)
- [70] S. Boharty, *Z. Naturforsch.* **52a**, 561-563 (1997)
- [71] S. Moroni, *Phys. Rev. B* **58** (2), 909-924 (1998)
- [72] F. Dalfovo et al., *Phys. Rev. B* **52** (2), 1193-1209 (1995)
- [73] J. Boronat et al., *Phys. Rev. B* **52** (2), 1236-1241 (1995)
- [74] H. Neumann, J.B. Suck, *J. Non-Cryst. Solids* **250-252**, 368-372 (1999)
- [75] S. Jahn, G. Pratesi, J.B. Suck, *J. Non-Cryst. Solids* **250-252**, 263-266 (1999)
- [76] G. Pratesi, J.B. Suck, *J. Non-Cryst. Solids* **232-234**, 252-256 (1998)
- [77] G. Pratesi, J.B. Suck, *J. Phys.: Cond. Matter* **9** 11035-11043 (1997)
- [78] G. Pratesi, J.B. Suck, P.A. Egelstaff, *J. Non-Cryst. Solids* **250-252** 91-95 (1999)
- [79] H.A.Mook, N. Wakabayashi, D Pan, *Phys. Rev. Lett.* **35** (16), 1029-1033 (1975)
- [80] H.A.Mook, C.C.Tsuei, *Phys. Rev. B* **16**, 2184 (1977)
- [81] J.B. Suck, H. Rudin, H.-J. Güntherodt, H. Beck, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **13** L1045-L1051 (1980)
- [82] J.B. Suck, H. Rudin, H.-J. Güntherodt, H. Beck, *Phys. Rev. Lett.* **50** (1) 49-52 (1983)
- [83] C.J. Benmore et al., *Physica B* **241-243**, 912-914 (1998)
- [84] M. Calvo et al., *J. Non Cryst. Solids* **156-158**, 53-57 (1993)
- [85] T. Otomo et al., *J. Non-Cryst. Solids* **232-234**, 613-618 (1998)
- [86] Häußler, P.: *Physica B* **219&220**, 299-301 (1996)
- [87] Y. Takahashi, H. Shimizu, *Phys. Rev A* **58** (6), 419-420 (1976)
- [88] K. Handrich: *phys. stat. sol. (b)* **92**, K29 (1979)
- [89] J. Hafner, M. Krajčiči, M. Windisch, *J. Non-Cryst. Sol.* **192&193**, 212-221 (1995)
- [90] T. Aihara, T. Matsumoto, *J Phys. Cond. Matter* **7** 1525-1541 (1999)
- [91] J. Resch: *Dissertation*, Technische Hochschule Carl Schorlemmer , Leuna- Merseburg, (1982)
- [92] D.M. Zhu, H.F. Weng, *J. Non-Cryst. Sol* **185**, 262-267 (1995)
- [93] A.P. Sokolov et al., *Phys. Rev. Lett.* **78** (12) 2405-2408 (1997)
- [94] G. D'Angelo et al., *J. Non-Cryst. Solids* **235-237**, 697-703 (1998)
- [95] C. Talon et al., *Phys. Rev. B* **58** (2) 745-755 (1998)
- [96] A. Bartolotta et al., *J. Non-Cryst. Solids* **280**, 249-254 (2001)

- [97] K. Handrich, R. Ötting, Poster DY 46.55, *DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik*, Regensburg (1998)
- [98] K. Handrich, R. Ötting: *phys. stat. sol. (b)* **216**, 1073 -1088 (1999)
- [99] K. Handrich, R. Ötting: *phys. stat. sol. (b)* **255**, 289 -299 (2001)
- [100] K. Handrich, R. Ötting, Poster DY 41.38, *DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik*, Münster (1999)
- [101] P.G. Klemens, *Proc. Roy. Soc.* **A208**, 108 (1951)
- [102] A. Guinier: *X-Ray Diffraction*, Dover Publications Inc., New York, 2. Ed. (1994)
- [103] A. Pierre, D.R. Uhlmann, *J. Non-Cryst. Solids* **16**, 325 (1974)
- [104] A.L. Renninger, D.R. Uhlmann, *J. Polymer Sci. Polymer Phys.* **13**, 1481 (1975)
- [105] R.J. Matyi, D.R. Uhlmann, J.A. Koutsky, *J. Polymer Sci. Polymer Phys.* **18**, 1053 (1980)
- [106] A.L. Renninger, G.G. Wicks, D.R. Uhlmann, *J. Polymer Sci. Polymer Phys.* **13**, 1247 (1975)
- [107] R. Straff, D.R. Uhlmann, *J. Polymer Sci. Polymer Phys.* **14**, 415 (1976)
- [108] A.L. Renninger, D.R. Uhlmann, *J. Polymer Sci. Polymer Phys.* **16**, 2237 (1978)
- [109] O. Yoda, I. Kuriyama, A. Odajima, *Appl. Phys. Lett.* **32**, 1 (1978)
- [110] M. Ozawa, C.-K. Loong: *Physica B* **241-243**, 269-275 (1998)
- [111] S. Schneider, P. Thiyagarajan, U. Geyer, W. L. Johnson: *Physica B* **241-243**, 918-920 (1998)
- [112] W. Liu, W. L. Johnson, S. Schneider, U. Geyer, P. Thiyagarajan: *Phys. Rev. B* **59**, No. 18, 11755-11759 (1999)
- [113] J. Klenke, H. Eckerlebe, V. Wagner, *Physica B* **241-243**, 588-590 (1998)
- [114] J. F. Sadoc, C. N. J. Wagner, in: *Glassy Metals II*, 51-92, Springer, Berlin (1983)
- [115] J.B. Suck, H. Rudin, in: H. Beck, H.-J. Güntherod (ed.), *Glassy Metals II*, 217, Springer, Berlin (1983)
- [116] E. Kartini, M.F. Collins, F. Mezei, E.C. Svensson, *Physica B* **241-243**, 909-911 (1998)
- [117] A. Lee, G. Etherington, C.N.J. Wagner, *J. Non-Cryst. Solids* **61&62** 349-354 (1984)
- [118] P. Lamparter: *Phys. Scr.* **157**, 45-63 (1995)
- [119] T. Ichikawa: *phys. stat. sol. (a)* **19**, 707-716 (1973)
- [120] S.W. Tjablikow, *Quantentheoretische Methoden des Magnetismus*, Teubner-Verlag, Leipzig (1968)
- [121] H. Böttger, *Principles of the theory of Lattice Dynamics*, Akademie -Verlag, Berlin (1983)
- [122] K. Handrich, R. Ötting, Poster DY 17.59, *DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik*, Regensburg, (2000)

-
- [123] D.-M. Zhu, H. Chen: *J. Non-Cryst. Sol.* **224**, 97-101 (1998)
- [124] A.P. Sokolov et al.: *Phys. Rev. B* **58**,2, 745-755 (1998)
- [125] J.C. Lasjaunias, D. Thouloouze, *solid st. comm*, **10**, 215, (1972)
- [126] C. Talón et al.: *J. Non-Cryst. Sol.* **287**, 226-230 (2001)
- [127] L. A. Feigin, D. I. Svergun: *Structure Analysis by Small-Angle X-Ray and Neutron Scattering*, Plenum Press, New York (1987)
- [128] K. Handrich, R. Öttking, Poster DY 46.37, *DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik*, Regensburg (2002)
- [129] K. Zadro: *J. Mag. Magn. Mat.* **163** (1-2), L5-7 (1996)
- [130] P.E. Sokol, *Physica B* **241-243**, 929-924, (1998)
- [131] A.P. Zhernov, M.N. Khlopkin, *Phys Sol. State* **39** (1), 125-131 (1997)
- [132] Matsumoto, Reynolds, Anderson, *Phys Rev B* **19**, 4277 (1979)
- [133] R.D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-body Problem* (2. Ed.), McGraw-Hill, New York, (1976)

Vielen Dank !

An dieser Stelle möchte ich all jenen Personen meinen Dank aussprechen, die, jeder auf seine oder ihre Weise, zum Gelingen der vorliegenden Arbeit beigetragen haben.

Vor allem gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. Klaus Handrich, der als Initiator und Förderer dieser Arbeit zu einem großen Teil am Gelingen beteiligt war. Seine stete Diskussionsbereitschaft und sein Ideenreichtum waren mir eine ebenso große Hilfe wie sein umfangreiches fachliches Wissen. Unsere gemeinsamen Veröffentlichungen und Tagungsbeiträge sind in hohem Maße auf seine tatkräftige Unterstützung und Beratung zurückzuführen.

Herrn Dr. Dirk Lehmkuhl und Herrn Dr. Bernd Günther gilt mein Dank für die technische Unterstützung, insbesondere in der Anfangsphase meiner Tätigkeit an der technischen Universität Ilmenau.

Herrn Dr. Hartmut Grille danke ich für die fachliche und technische Hilfe während der gesamten Dauer der Arbeit, vor allem in der Schlußphase bei der Erstellung der Dissertation.

Den Kolleginnen und Kollegen an der technischen Universität Ilmenau für das kollegiale und fast familiäre Arbeitsklima.

Mein besonderer Dank gilt meinen Eltern, Gertrud und Horst Ötting, und meiner Lebensgefährtin, Nadine Fuchs, die durch mentale Unterstützung die Höhen und Tiefen überbrücken halfen.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe.

Ilmenau, den