

Postersitzung P 1

Mittwoch, 25. 9. 1985, 15:30 - 17:00 Uhr
(Festkörperphysik, Physik der Hochpolymere)

P 1.01

Theorie struktureller Energien und Phononen in Ionenkristallen⁺
J. MAJEWSKI und P. VOGL (Institut für Theoretische Physik,
Universität Graz, 8010 Graz)

Im Rahmen einer selbstkonsistenten Tight-Binding Methode haben wir ein Modell für die Gesamtenergie von Ionenkristallen entwickelt, das die relative Stabilität verschiedener Kristallstrukturen liefert. Die strukturellen Energieunterschiede lassen sich aus Effekten wie Ladungstransfer, Coulomb-Korrelationen, kovalente Wechselwirkungen verstehen und voraussagen. Im Falle von MgO als typisches Beispiel werden darüberhinaus transversale optische Phononen berechnet und die Unterschiede von Erdalkali-Oxyden zu ferroelektrischen Oxyden, die "weiche" Phononen haben, diskutiert.

⁺Unterstützt von Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung in Österreich, Projekt Nr. 5197.

P 1.02

Renormierungsgruppentheorie und die paramagnetische Neutronenstreuung an isotropen Ferromagneten bei T_c .

R. FOLK, H. IRO (Institut f. theoretische Physik, Universität Linz, A-4040 Linz)

Bisherige Untersuchungen der Neutronenstreuung analysierten die experimentellen Ergebnisse unter Zugrundelegung des Resultats der van-Hove-Theorie für die Form der dynamischen Streufunktion, wobei jedoch für die auftretenden kritischen Exponenten die Resultate der Renormierungsgruppentheorie (RG) verwendet wurden. Dies führt zu Inkonsistenzen in dem Bereich der Wellenzahlvektoren und Frequenzen, die großen Skalenvariablen entsprechen. Im Gegensatz dazu liefert die Verwendung der im Rahmen der RG-Theorie berechneten asymptotischen dynamischen Korrelationsfunktion befriedigende Übereinstimmung mit den Daten.