

$$A_{\text{Binelement}} \sim \sum_i f_{\alpha} \exp[-i(\vec{k} \cdot \vec{r}_i - \omega t)] + i \vec{k} \cdot \vec{e} \cdot \exp[-i\omega(\omega_0 \pm \omega)t]$$

$\omega_0$ : Frequenz der einlaufenden Welle

$\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}_0$  Streuvektor

mit  $\vec{r}_i(t) = \sum \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i - \omega t)$  Gitterwelle

• Streuwellen deren Frequenz  $\omega' \neq \omega_0$  ist:

$$\omega' = \omega_0 \pm \omega(\vec{k})$$

• Summation über alle Gitterpunkte  $\vec{r}_i$  mer dann konstr. Bedingung wenn

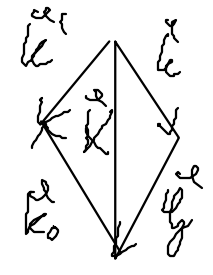
$$\vec{k}' \pm \vec{k} = \vec{G}$$

Also zwei Erhaltungssätze:

1)  $\omega' = \omega_0 \pm \omega(\vec{k})$  Energieerhaltung

2)  $\vec{k}' = \vec{k}_0 + \vec{k} + \vec{G}$  Quasimpulserhaltung

für konstruktive Interferenz



• Einfallende Welle wird inelastisch gestreut, Phonon wird emittiert (-) oder absorbiert (+), auslaufende Welle hat weniger (-) oder mehr (+) Energie („Stokes Anti-Stokes“)

### 4.8. Bestimmung von Phononen-Dispersionsrelationen

wie bei Strukturanalyse: elektrom. Strahlung oder Materiewellen

• Elektronen nur für Oberflächen

• Neutronen für großen Impulsübertrag (bis  $\frac{\pi}{a}$  umger. Brillouin Zone ausmess)

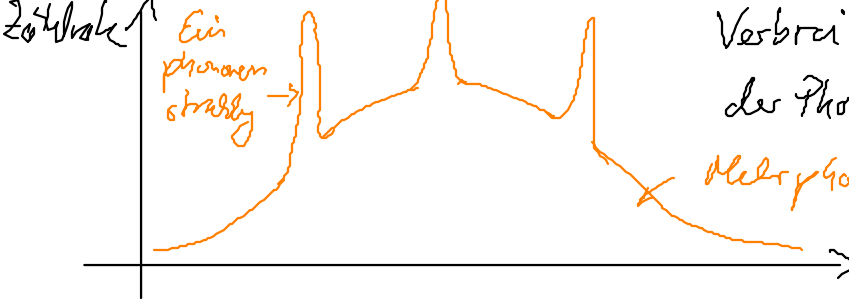
erhalten man Energiebetrag  $\sim \hbar \omega_D \sim 30 \text{ meV}$

d.h. für „thermische Neutronen“ ( $kT = 25 \text{ meV}$  bis  $30 \text{ keV}$ )  $\Rightarrow$  gute Energieauflösung

Möglichkeiten: Drehstreuenspektrometer (Einkristalle)

Flugzeit-spektrometer (Polykristalle)

Für gegebene Einfallrichtung und monochrom. Strahlung: in Spektrum



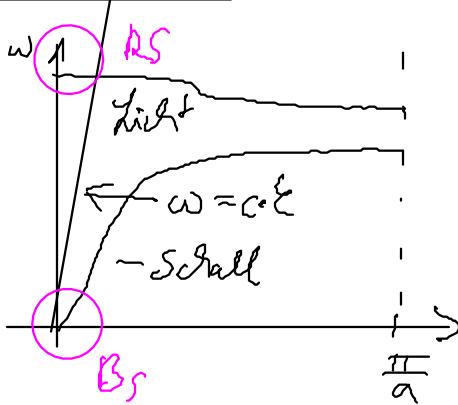
Verbreitete Peaks durch Lebensdauer der Phononen Ursache: ① Anharmonizitäten ② El-Ph-Wh

# Elektromagnetische Strahlung

Röntgen:  $K\alpha \approx 10^4 \text{ eV}$ , Gitterschwingungen  $K\omega_D \sim 30 \text{ meV}$

Auflösung  $\sim 10^{-7} \text{ eV}$  erforderlich, möglich mit Synchrotronstrahlung

Sichtbares Licht: Photonenwellenzahl  $\sim 10^5 \text{ cm}^{-1} \ll$  Brillouin-Zonen-Durchmesser



- WW mit Phononen im Zonenmitt ( $k \approx 0$ ) mit akustischen Phononen: „Brillouin-Strahlung“
- mit optischen : „Raman-Strahlung“
- nur mit intensiven Lichtquellen: Laser, Synchrotronstrahlung

## 5. Thermische Eigenschaften des Gitters

### 5.1 Mittler thermische Energie eines harm. Oszillators

Therm. Oszillators mit Wärmebad der Temperatur  $T$ :

- befindet sich nicht in einem festen Quantenzustand  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$  sondern man kann nur Wahrscheinlichkeit  $P_n$  angeben, mit der dieses eingenommen wird.

„Mittlere thermische Energie“

$$E(\omega, T) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n E_n = \hbar\omega \left( \frac{1}{\exp[\frac{\hbar\omega}{kT}] - 1} + \frac{1}{2} \right)$$

$$= \hbar\omega \left( \langle n \rangle + \frac{1}{2} \right)$$

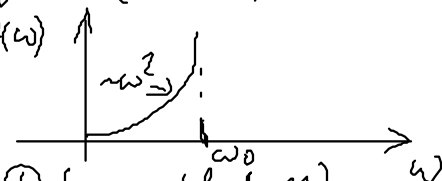
mit  $\langle n \rangle = \frac{1}{\exp[\frac{\hbar\omega}{kT}] - 1}$

„Bose-Einstein-Statistik“

### 5.2 Spezifische Wärme des Gitters

Summation über alle Eigenschwingungsenergien ( $E(\omega, T)$ ) erhält man die Gesamte Schwingungsenergie dichte  $Z(\omega)$

$$U(T) = \int Z(\omega) E(\omega, T) d\omega$$



Ableitung nach  $T$ : spez. Wärme (hier: Debye-Modell)

$$C_V(T) = \frac{dU}{dT} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{1}{C_L^3} + \frac{1}{C_T^3} \right) \int_0^{\omega_D} \frac{\partial}{\partial T} E(\omega, T) d\omega$$

$\omega_D$  so gewählt, dass  $\int_0^{\omega_D} Z(\omega) d\omega = 3 \cdot p \cdot N$

$N$ : Anzahl der Atome

$$c_v(T) = \frac{V}{2\pi^3} \left( \frac{1}{a^3} + \frac{2}{c_T^3} \right) \int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega \quad (\text{d.h. gemeinsame } \omega_D \text{ für alle Zweige angenommen})$$

$$= \frac{9pNk}{V} \frac{1}{\omega_D^3} \frac{2}{\partial T} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega^3 d\omega}{\exp[\frac{\hbar \omega}{kT}] - 1}$$

$\Theta_D$  = Debye-Temperatur  $\Theta_D: \hbar \omega_D = k \Theta_D$ , mit Integrationsvariablen

$$y = \frac{\hbar \omega}{kT} \Rightarrow c_v = \frac{9pNk}{V} \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} y^4 \frac{e^y}{(e^y - 1)^2} dy$$

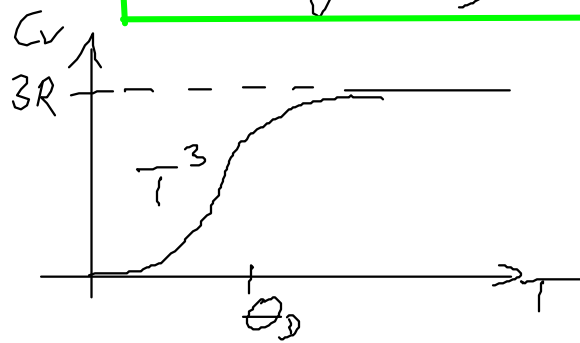
**Discussion:**

①  $kT \gg \hbar \omega_D: \exp[\frac{\hbar \omega}{kT}] \approx 1 + \frac{\hbar \omega}{kT} \Rightarrow c_v = \frac{3pNk}{V}$

**Dulong-Beht-Gesetz:** für 1 Mol Atome  $c_v = 3R$

②  $kT \ll \hbar \omega_D$ : dieses Limit des Integrals  $\rightarrow \infty$ , Integral  $\frac{4\pi^4}{15}$

$$\Rightarrow c_v = \frac{3pNk}{V} \frac{4\pi^4}{15} \frac{T^3}{\Theta_D^3} \quad c_v \propto T^3 \text{ „Debye-Gesetz“}$$



	$\Theta_D$ [K]
Ne	158
Mg	400
Au	165
Be	1400
C	2200
Si	840
NaCl	320
Ar	92

Korrelation von  $\Theta_D$  und  $T_{\text{Schmelz}}$

Gitterschwingungen „frieren ein“ für  $T \rightarrow 0$  deshalb  $c \rightarrow 0$