

Fachbereich 07

I. Physikalisches Institut

AG Mikro- und Nanostrukturphysik

Justus-Liebig-Universität Gießen

JUSTUS-LIEBIG-



UNIVERSITÄT
GIESSEN

Physikalisches Praktikum für Fortgeschrittene I

BSc. Physik

BSc. Materialwissenschaften

Lehramt Physik

Raman-Streuung an Festkörpern

Prof. Dr. Peter J Klar

21. Oktober 2023

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Vorbereitung	4
2.1	Lineare Kette	4
2.2	Phononen	4
2.3	Kristallstrukturuntersuchungen	5
2.4	Ramanspektroskopie.....	5
2.5	Praktische Durchführung	7
3	Sicherheitsbelehrung	8
4	Hinweise zur Versuchsdurchführung	9
4.1	Fokussierung des Anregungslasers	9
4.2	Verwendung der Messsoftware	10
5	Experimentelle Aufgaben	13
6	Auswertung	18
7	Literatur	19

1. Einleitung



Nachdem der Raman-Effekt 1923 von Adolf Smekal vorhergesagt wurde, konnte er 1928 von Chandrasekhara Venkata Raman (geb. 07.11.1888 – gest. 21.11.1970) bei der spektroskopischen Untersuchung von Flüssigkeiten nachgewiesen werden. Raman erhielt dafür 1930 den Nobelpreis in Physik.

Der Effekt beschreibt die inelastische Streuung von elektro-magnetischer Strahlung an Molekül- oder Kristallschwingungen. Dabei kann ein Lichtquant (Photon) Energie an das Zielsystem abgeben oder von diesem aufnehmen. Man spricht auch von der Erzeugung oder Vernichtung von Schwingungsquanten (Phononen).

Die Schwingungsmoden eines Moleküls sind abhängig von der Symmetrie des Moleküls, der Bindung zwischen den Atomen und der Atommassen. Auch in Festkörpern bestimmen diese Größen die möglichen Schwingungsmoden. Durch Raman- und Infrarot-Spektroskopie kann fast jeder Substanz bzw. vielen Festkörpern ein eindeutiges Schwingungsspektrum zugeordnet werden – ein chemischer Fingerabdruck.

Ziel dieses Versuchs ist die Erlangung eines tieferen Verständnisses für Kristallstrukturen und Gitterschwingungen sowie das Erlernen spektroskopischer Charakterisierungsmethoden, insbesondere der Raman-Spektroskopie

2 Vorbereitung

Zu Beginn des Versuchs ist ein Kolloquium vorgesehen um ihren Wissensstand zu überprüfen, sowie eventuelle Vorgehensweisen während des Versuchs zu erläutern und aufkommende Fragen ihrerseits zu beantworten.

Um den Versuch durchzuführen ist es erforderlich, einige Grundkenntnisse über elektromagnetische Streuprozesse, insbesondere den Raman-Effekt, zu besitzen. Weiterhin ist es notwendig, das Konzept von Molekül- und Gitterschwingungen, vor allem im Kontext mit Kristallstrukturen und Gittersymmetrien, verinnerlicht zu haben. Dabei kann das Erlernen von einfachen mathematischen Idealmodellen wie der unendlich langen, linearen Kette hilfreich sein. Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, arbeiten sie sich in folgende Themen ein [1, 2, 3, 4, 5, 6].

2.1 Das Modell der unendlich langen, linearen Kette

- Erläutern sie den Aufbau einer unendlich langen, linearen Kette. Welche Größen sind für die Beschreibung von Eigenschwingungen relevant? Stellen sie die Bewegungsgleichungen auf.
- Leiten sie die Dispersion einer zweiatomigen unendlich langen, linearen Kette her. Zeichnen sie diese im Bereich von $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$! Warum beschränkt man sich im Allgemeinen auf diesen Definitionsbereich?
- Erklären sie die auftretenden Schwingungsmoden (Gesamtheit aller Eigenschwingungen mit gleichem Charakter). Skizzieren sie die Unterschiede an einem Ausschnitt der unendlich langen, linearen Kette.
- Bestimmen sie die charakteristischen Werte für ω_{\pm} bei $k=0, \pi/a$! Beschreiben sie die zugehörigen Schwingungen.
- Was passiert, wenn man anstatt zweier unterschiedlicher Massen, zwei verschiedene Federkonstanten bzw. zwei verschiedene Gitterkonstanten (Abstand zwischen zwei Atomen) untersucht?
- Was passiert beim einatomigen Fall?
- Wie viele Eigenschwingungen besitzt eine endlich lange, lineare Kette mit n Schwingern? (Wie viele Schwingungsmoden existieren beim N -atomigen Fall?)

2.2 Das Konzept der Phononen – Gitterschwingungen im Festkörper

- Befassen sie sich kurz mit den wichtigsten Kristallstrukturen und deren Symmetrien!
- Was ist ein Phonon?

- Übertragen sie das Modell der unendlich langen, linearen Kette auf einen Kristall mit zweiatomiger Basis! Welche Bedeutung hat die Federkonstante im realen Kristall? Wie viele Schwingungsmoden existieren?
- Warum sind die Moden in einem Kristall mit zweiatomiger Basis im kubischen System entartet? Warum genügt es auch im Festkörper die Dispersion nur für $|k| \leq \pi/a$ zu betrachten? Wie nennt man diesen Bereich? Bei der unendlich langen, linearen Kette entspricht dieser Bereich einer Strecke. Welche Gestalt nimmt diese Zone im realen Kristall an?
- Betrachten sie einen Gruppe-IV-Halbleiter (i.A. Diamantstruktur) genauer! Warum existieren dort auch optische Phononen? Erklären Sie dies mit Hilfe der unendlich langen, linearen Kette!
- Welchen Unterschied zur unendlich langen, linearen Kette hat man bei den Wellenzahlen durch die endliche Ausdehnung eines realen Kristalls zu erwarten?
- Erörtern sie weitere Abweichungen vom idealen Modell bei einem realen Kristall!

2.3 Methoden zur Untersuchung von Kristallstrukturen

- Nennen sie beugungsbasierte und streubasierte Untersuchungsmethoden von Kristallstrukturen! Mit welcher Klasse von Methoden lassen sich Gitterschwingungen beobachten?
- Welche Methode interagiert direkt mit allen möglichen Phononen? Was sind die Probleme dieser Methode.
- Gibt es weitere Methoden zur Analyse von Gitterschwingungen? Welche Einschränkungen existieren bei diesen Methoden?

2.4 Klassische und quantenmechanische Beschreibung des Raman-Effekts

- Erläutern sie die klassische Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Welle und Dipolen im Festkörper bzw. Molekülen.
- Betrachten sie die inelastischen Streuprozesse detaillierter! Was ist der Unterschied zwischen Infrarot- und Raman-Streuung?
- Leiten sie die klassische Formel für den Raman-Effekt mit Hilfe einer Taylorentwicklung der Polarisierbarkeit oder Suszeptibilität her! Welche Unterteilung für den Raman-Effekt ergibt sich aus der eben betrachteten Abhängigkeit?
- Veranschaulichen sie sich Raman- bzw. IR-aktive Schwingungsmoden bei Molekülen anhand des Kohlenstoffdioxidmoleküls! Skizzieren sie die möglichen Schwingungen als Abhängigkeit der Polarisierbarkeit von der Schwingungsnormalkoordinate: $\alpha(q)$! Welche Moden sind Raman-

bzw. IR-aktiv? Warum?

- Stellen sie das Energieniveauschema für die Infrarot-, Rayleigh- und Raman-Streuung quantenmechanisch dar! Warum spricht man von virtuellen Niveaus?
- Stellen sie den Impuls- und Energieerhaltungssatz für Ein- und Zwei- Phononen-Prozesse auf! In welchem Verhältnis stehen maximaler Phononenquasiimpuls und realistischer Photonenimpuls? Welche Konsequenzen ergeben sich deswegen für den Impulserhaltungssatz? Beachten sie die Vektorschreibweise, wenn nötig!
- Welche Einschränkungen folgen aus obigen Überlegungen für Ein-Phononen-Prozesse? Bei welchen Frequenzen und bei welchen Raman-shifts erwartet man für die Beispieldispersion (Abb. 1) Ein-Phononen-Prozesse? Wiederholen sie die Überlegungen für Zwei-Phononen-Prozesse. In welchen Raman-shift-Bereichen sind starke Signale von Zwei-Phononen-Prozessen zu erwarten?
- Befassen sie sich mit dem Streuwirkungsgrad I_s des Raman-Prozesses. Wie hängt dieser mit dem Raman-Tensor \underline{R} und den Polarisierungen \vec{e}_i bzw. \vec{e}_s des einfallenden bzw. ausfallenden Lichts zusammen?
- Was ist der Raman-Tensor?

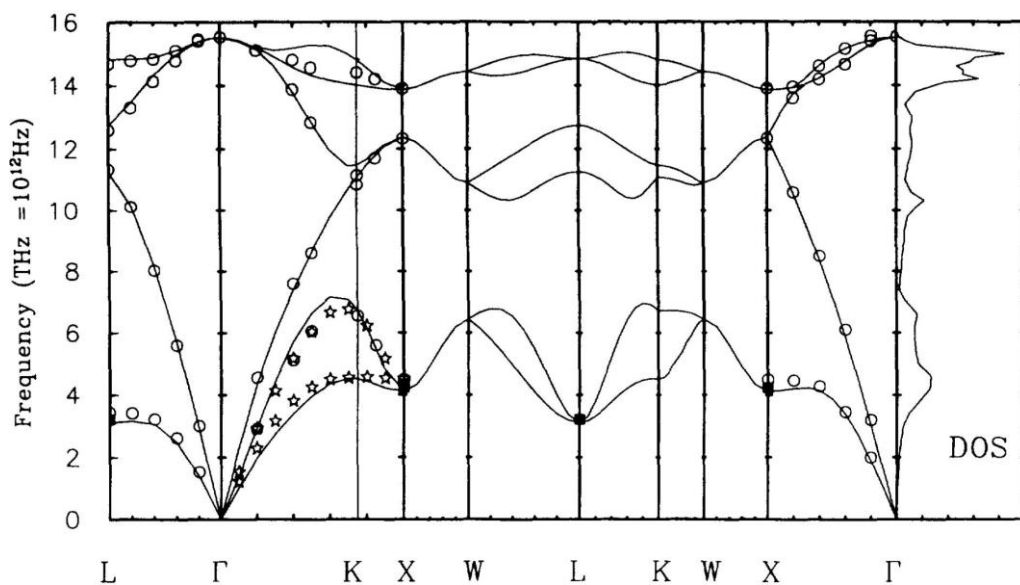


Abbildung 1: Phononendispersion und -zustandsdichte von Silizium. Die durchgezogenen Linien entsprechen theoretischen Rechnungen. Die Punkte sind experimentell gemessen. Entnommen aus [7].

2.5 Fragen zur praktischen Durchführung des Versuchs

- Beschreiben und skizzieren sie einen grundlegenden experimentellen Aufbau eines Raman-Spektroskops! Befassen sie sich eingehend mit den verwendeten Bauteilen!
- Welche Größe wird bei der Raman-Spektroskopie wirklich gemessen? Wie steht diese in Relation zu den eigentlichen Observablen, d.h. der Energie und der Wellenzahl der Gitterschwingungen?
- Wie kann man die spektroskopischen Messgrößen Energie E , Frequenz ν , Wellenzahl k und Wellenlänge λ untereinander umrechnen? In welchem Bezug dazu steht die Größe des Raman-shifts $\bar{\nu}$?
- Erläutern sie die Porto-Notation! Was bedeutet dies für die Interpretation von Messdaten bei einer definierten Messgeometrie?

3 Sicherheitsbelehrung



Im physikalischen Praktikum für Fortgeschrittene I - Raman-Spektroskopie werden Laser mit hoher Intensität verwendet.

Direkt oder indirekt ins Auge gelenkte Strahlung kann zu bleibenden Schäden führen.

Beachten sie deswegen immer folgende Hinweise:

- Das Praktikum darf erst begonnen werden, nachdem sie vom Betreuer in den Messaufbau eingewiesen worden sind.
- Schauen sie nicht direkt in den Laser.
- Schauen sie nicht direkt auf die Probe, während der Laser-Shutter geöffnet ist!
- Ist der Laser-Shutter geöffnet, darf die Probe nicht gewechselt werden.
- Bringen sie keine Gegenstände in den Strahlengang des Lasers.
- Fassen sie nicht in den Strahlengang, während der Laser-Shutter geöffnet ist.
- Achten sie darauf, dass keine Laser-Strahlung (direkt oder indirekt) in ihr Auge gelenkt wird.
- Arbeiten sie vorsichtig!

4 Hinweise zur Versuchsdurchführung

Im folgenden Kapitel wird stichpunktartig erläutert, wie ein Spektrum mit dem Raman-Mikroskop von der Firma *Renishaw Inc.* aufgenommen und analysiert werden kann. Dazu muss zunächst der polarisierte, grüne Anregungslaser (515nm) mit Hilfe des optischen *Leica DML* Mikroskops auf die Probe fokussiert werden. Dies wird im Unterabschnitt 4.1 erläutert. Diesem Teil folgt eine kurze Einführung in die Bedienung der Messsoftware *Wire 5.5* in Unterabschnitt 4.2.

4.1 Fokussierung des Anregungslasers

Um den Anregungslaser auf die Probenoberfläche zu fokussieren, gehen sie wie folgt vor:

1. Vergewissern sie sich, dass keine Laser-Strahlung auf die Probe fällt! Der Laser-Shutter (Laser Blende. siehe Abbildung 2) muss zuerst geschlossen sein!
2. Verschieben sie den Mikroskop-Tisch an den unteren Anschlagspunkt, um ausreichend Platz für den Einbau der Probe zu haben.
3. Drehen sie den oberen Auflichtreflektor-Revolver auf Position **2** und den unteren auf Position **1**.
4. Es ist wichtig, dass die Probe nicht gegen das Objektiv verfahren während sie die Probe fokussieren. Vergewissern sie sich, dass kein Objektiv im Strahlengang ist. Sonst drehen sie den Objektiv-Revolver in eine Position, so dass kein Objektiv im Strahlengang ist. Fassen sie dabei nicht das Objektiv an, sondern drehen sie direkt den Objektiv-Revolver.
5. Legen sie die Probe auf einen geeigneten Objektträger und positionieren sie diesen auf dem Mikroskop-Tisch.
6. Drehen sie zuerst das optische Objektiv mit 5facher Vergrößerung in den Strahlengang. Fassen sie dabei nicht das Objektiv an, sondern drehen sie direkt den Objektiv-Revolver.
7. Mit Hilfe des Grob- und Feintriebs am Mikroskop fokussieren sie Ihre Probe, so dass der Rand der achteckigen Leuchtfeldblende (Schieber *F* am Mikroskop) scharf im Okular zu erkennen ist. Achten sie darauf, dass sie die Probe nicht gegen das Objektiv verfahren.
8. Mit Hilfe der Steuerungseinheit der XYZ-Stage positionieren sie ihre Probe.
9. Wiederholen sie die Schritte 6 & 7, zuerst für das 20x Objektive, einschließlich für das 50x Objektive. Achten sie darauf, dass sie die Probe nicht gegen das Objektiv verfahren.

10. Drehen sie nun den oberen Auflichtreflektor-Revolver auf Position **1** und den unteren auf Position **2**. Anstatt der Weißlichtquelle wird nun der Laser-Strahl auf die Probe gelenkt.



Achtung: Laser-Strahlung!
Nicht direkt in den Laser schauen!

11. Öffnen sie den Laser-Shutter (siehe Abbildung 2) des Anregungslasers und korrigieren sie den Fokus ggf., so dass der Laser-Spot scharf im Bild der Videokamera in der Software *Wire 5.5* zu sehen ist.
12. Schließen sie den Laser-Shutter.

4.2 Verwendung der Messsoftware

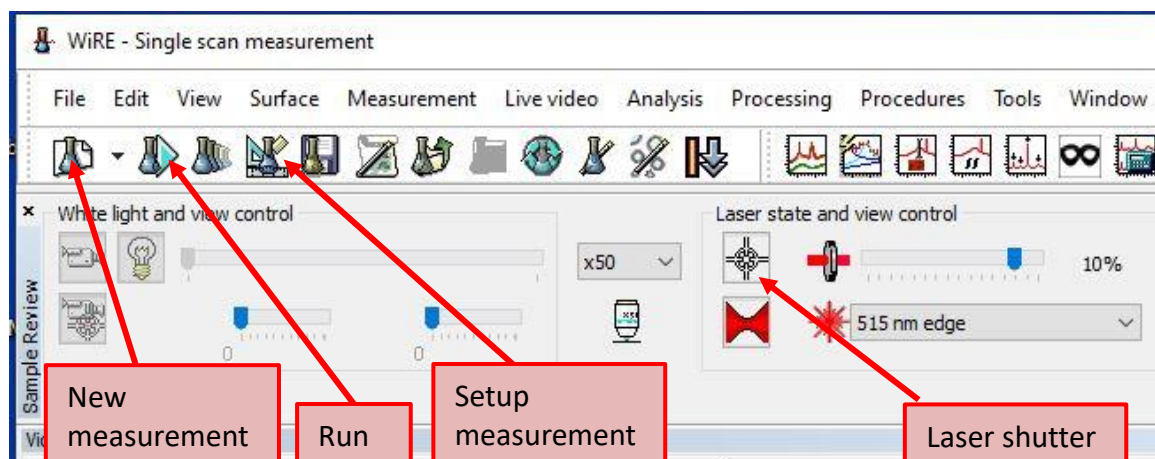


Abbildung 2: Screenshot von der Messsoftware *Wire 5.5* -ausgewählte Schaltflächen.

Nachdem der Anregungslaser auf die Probe fokussiert wurde, kann ein Raman- Spektrum mit Hilfe der Messsoftware *Wire 5.5* aufgenommen werden. Dazu gehen sie wie folgt vor:

1. Klicken sie auf **New measurement** (siehe Abbildung 2) und wählen sie *Spectral acquisition*.
2. Um die gewünschten Messparameter für die Messung einzustellen, klicken sie auf die Schaltfläche **Setup measurement** (siehe Abbildung 2).
3. Im **Spectral acquisition setup (Setup measurement)** Fenster haben sie nun die Möglichkeit alle Messparameter zu variieren. Die für sie relevanten Reiter mit ihren Eigenschaften sind:

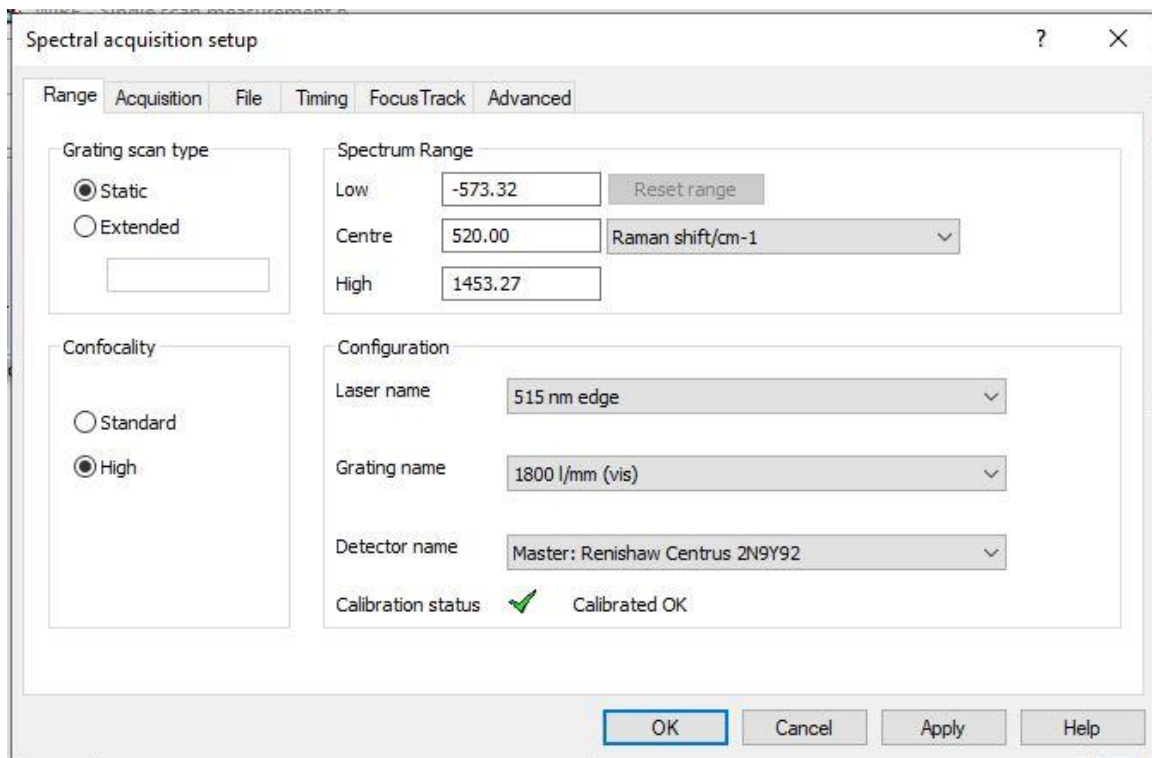


Abbildung 3: Screenshot von der Messsoftware *Wire 5.5* - Range-Reiter im *Spectral acquisition setup* Fenster.

(a) Reiter: **Range** (siehe Abbildung 3)


Im Feld *Grating scan type* können sie auswählen, ob eine statische Messung (*Static*), deren Zentrum im *Spectrum range* Feld bei *Center* eingetragen werden kann, oder ob eine ausgedehnte Messung (*Extended*) durchgeführt wird. Bei letzterer können sie den Messbereich frei im Feld *Spectrum range* auswählen.

(b) Reiter: **Acquisition**

- *Exposure time /s*: Belichtungszeit in Sekunden pro Messpunkt.
- *Accumulations*: Anzahl der Wiederholungen einer Messung mit der oben angegebenen Belichtungszeit. Dabei werden die Ergebnisse jeder Wiederholung auf die vorherige addiert.
- *Laser power /%*: Ungefähre Laser-Intensität in Prozent.
- *Title*: Einen Namen für die Datei innerhalb von *Wire 5.5* angeben.
- Diese Parameter sind so zu variieren, dass ein gutes Messsignal erhalten wird, d. h. ein hohes Signal-zu-Rausch-Verhältnis. Die Intensität einer *einzelnen* Messung (*accumulations* = 1) darf dabei 80000 Counts nicht übersteigen, da sonst der maximale Anregungsbereich der CCD überschritten wird. In der Messsoftware wird das Überschreiten des Anregungsbereiches durch eine gepunktete Messkurve dargestellt, während die Intensität im Bereich der Sättigung auf null gesetzt wird.

(c) Reiter: **File**

In der Zeile *File* geben sie den Speicherort und Dateiname ihrer Messung an. Bestätigen sie die ausgewählten Messparameter mit *OK*.

Achtung  Laser-Strahlung!
Nicht in den Laser schauen.

4. Wenn sie alle Parameter eingestellt haben, können sie mit der Schaltfläche **Run** (siehe Abbildung 2) die Messung starten. Am Ende der Messung schließt die Software automatisch die Blende, so dass der Laser nicht mehr auf die Probe gelenkt wird.

5 Experimentelle Aufgaben

In diesem Kapitel werden die durchzuführenden Messungen beschrieben und die in ihrer Auswertung zu behandelnden Aufgaben gestellt. Überlegen sie sich sinnvolle Messparameter bzw. testen sie verschiedene Einstellungen bevor sie ihre endgültige Messung durchführen.

Achtung: Laser-Strahlung!

Nicht direkt in den Laser schauen.



1. **Kalibrieren** sie zusammen mit Ihrem Betreuer das Raman-Mikroskop mit Hilfe der Si-Kalibrierprobe. Danach justieren sie den Mikroskop- Tisch für die Proben, die sich auf einem Objektträger befinden. Dieser Punkt muss nicht in ihrer Auswertung behandelt werden.
2. Bestimmen sie den Transmissionsbereich des im Raman-Mikroskops verwendeten **Laserfilters**. Fokussieren sie dazu den Laser auf einen Si-Einkristall. Gehen sie analog zu Kapitel 4.1 vor. Dann drehen sie den oberen Auflichtreflektor-Revolver auf Position **1** und den unteren auch auf Position **1**. Sowohl das Weißlicht des Auflichtilluminators als auch der Laser-Strahl werden in dieser Einstellung der Auflichtreflektoren auf die Probe gelenkt. Wählen sie einen geeigneten Messbereich aus, der es ermöglicht Stokes- und Anti-Stokes-Streuung gleichzeitig zu detektieren. Führen sie eine Messung an einem Si-Einkristall wie im Kapitel 4.2 beschrieben durch und beantworten sie folgende Fragen:
 - (a) Welche Funktion hat der Laser-Filter im Messaufbau?
 - (b) Kann mit dem hier verwendeten Raman-Mikroskop Stokes-Streuung und/oder Anti-Stokes-Streuung gemessen werden?
 - (c) Welcher Messbereich (in Wellenzahlen) ist für ihre folgenden Messungen von Bedeutung?Für alle weiteren Experimente verwenden sie die Einstellungen der Auflichtreflektoren wie sie in Kapitel 4 beschrieben wurden.
3. Die Elemente der IV-Hauptgruppe **Diamant (C), Germanium (Ge) und Silizium (Si)** kristallisieren in der gleichen Kristallstruktur. Nehmen sie von einem C- , Ge- und einem Si-Einkristall Raman-Spektren auf und beantworten sie folgende Fragestellungen:
 - (a) In welcher Kristallstruktur kristallisieren die drei Halbleiter?
 - (b) Die Basis der Kristallstruktur der drei Halbleiter setzt sich aus zwei gleichen Atomen bei $(0, 0, 0)$ und $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ zusammen. In solch einem Fall reduziert sich das Modell der linearen zweiatomigen Kette auf das der linearen einatomigen Kette. Im Modell der linearen

einatomigen Kette existieren keine optischen Phononen. Warum sind dennoch optische Phononen erlaubt?

- (c) Wie viele optische Ein-Phonon-Prozesse erwartet man für die drei Materialien? Warum?
- (d) Warum beobachtet man experimentell eine andere Anzahl von Ein-Phonon-Prozessen und wo liegen diese?
- (e) Diskutieren sie die experimentell beobachteten Ein-Phonon-Prozesse von C, Ge und Si in Bezug auf die Dispersionsrelation nach dem Modell der unendlich langen, linearen Kette.

4. Führen sie eine Reihe von Messungen an einem **Ge-Einkristall** durch [8, 9]. Nehmen sie zusätzlich zum Übersichtsspektrum genauere Messungen im Bereich der Zwei-Phononen-Prozesse ober- und unterhalb des Ein-Phonon-Signals auf. Diskutieren sie die beobachteten Strukturen. Ordnen sie den Moden bei ca. 160, 300, 570 und 600 cm^{-1} die jeweiligen Ein- und Zwei-Phononen-Prozesse zu. Dazu finden sie in Quelle [7] die Phononendispersion von Germanium. Mit Hilfe dieses Spektrums können sie sich mögliche Kombinationen von Zwei-Phononen-Prozessen überlegen, die die beobachteten Moden erklären. Welche Gesetze müssen dabei beachtet werden?

5. Die III-V Halbleiter **Galliumphosphid (GaP)**, **Galliumnitrid (GaN)** und **Galliumarsenid (GaAs)** kristallisieren in einer ähnlichen Struktur wie die Elemente der IV-Hauptgruppe. Nehmen sie von einem GaP-, GaN- und GaAs-Kristall Raman-Spektren auf und beantworten sie folgende Fragestellungen:

- (a) In welcher Kristallstruktur kristallisieren die drei Halbleiter?
- (b) Wie viele optische Ein-Phonon-Prozesse erwartet man für die drei Materialien? Warum?
- (c) Warum beobachtet man experimentell eine andere Anzahl von Ein-Phonon-Prozessen und wo liegen diese?
- (d) Warum spalten die TO- und LO-Moden unterschiedlich stark auf?
- (e) Diskutieren sie die experimentell beobachteten Ein-Phonon-Prozesse von GaP, GaN und GaAs in Bezug auf die unendlich lange, lineare Kette. Bestimmen sie mit Hilfe ihrer experimentellen Daten die Federkonstanten von GaP, GaN und GaAs im Modell der unendlich langen, linearen Kette.

6. Das Halbleitermaterial **Zinkoxid (ZnO)** kann in drei verschiedenen Anordnungen kristallisieren: kubische Zinkblendestruktur, kubische Kochsalzstruktur und hexagonale Wurtzitstruktur. Letztere besitzt bei Normalbedingungen (Raumtemperatur und Umgebungsdruck) die größte Stabilität. Die Kristallstruktur der ihnen vorliegenden Proben ist hexagonal. Die

Schichtoberfläche steht entweder senkrecht zur c-Achse (c-plane) oder senkrecht zur a-Achse (a-plane), siehe Zeichnung 4. Je nach Probenorientierung sind nur bestimmte Raman-Moden auf Grund der Kristallsymmetrie erlaubt. Ihre Aufgabe ist es herauszufinden, wie die ihnen vorliegenden Proben orientiert sind.

Dazu bauen sie mit Hilfe des Betreuers den Polarisationsfilter in den Strahlengang des reflektierten Lichtes ein. Der Polarisationsfilter dient dazu, nur Strahlung zu detektieren deren Polarisation parallel zur einfallenden Strahlung polarisiert ist.

Nehmen sie eine Reihe von Spektren auf, wobei sie die Probe in der Probenebene rotieren. Messen sie in 30° -Schritten. Es genügt, den Drehwinkel abzuschätzen. Stellen sie die aufgenommene

Spektren in ihrer Auswertung in geeigneter Weise dar. Weiterhin schätzen sie die Signalhöhe der Ein-Phonon-Prozesse ab und tragen sie diese gegen den Rotationswinkel auf.

Die erlaubten Ein-Phonon-Prozesse können sie mit Hilfe der Raman- Tensoren für Kristalle mit Wurtzitstruktur

$$\underline{\underline{A}}_1(z) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{E}}_1(-x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -c \\ 0 & 0 & 0 \\ -c & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{E}}_1(y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c \\ 0 & c & 0 \end{pmatrix},$$

$$\underline{\underline{E}}_2 = \begin{pmatrix} d & 0 & 0 \\ 0 & -d & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{E}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

und der Näherung für den Raman-Streuwirkungsgrad

$$I_s \propto |\vec{e}_i^T \cdot \underline{\underline{R}} \cdot \vec{e}_s|^2, \quad (2)$$

Wobei $\underline{\underline{R}}$ der Raman-Tensor, \vec{e}_i die Polarisation des einfallenden und \vec{e}_s die Polarisation des gestreuten Lichtes sind, berechnen [1, 10, 11]. Die Größen x, y und z in Klammern in Gleichung 1 geben die Polarisations-richtung der Phononen an.

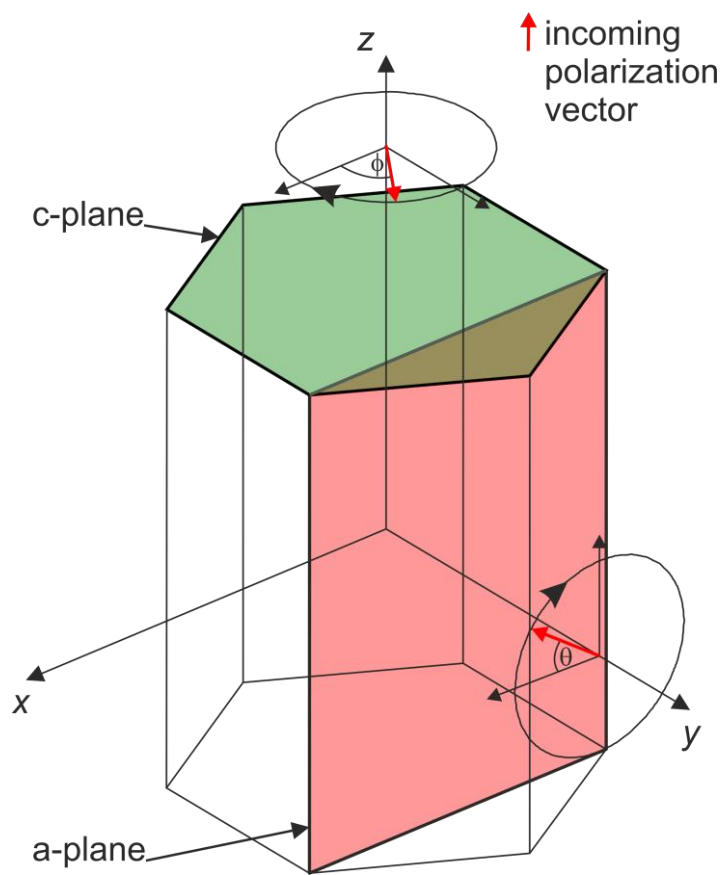


Abbildung 4: Schematische Darstellung der hexagonalen Kristallstruktur. Die rote Fläche stellt die *a*-plane dar, welche senkrecht auf der *a*-Achse steht, das grüne Hexagon beschreibt die *c*-plane, welche senkrecht auf der optischen Achse steht. Rote Pfeile beschreiben die einfallenden Polarizationsvektoren und Kreise deren Rotation

Fällt also das Licht des polarisierten Anregungslasers parallel zur c-Achse (c-plane Oberfläche) auf die Probe, so liegt der Polarisationsvektor in Bezug auf das Koordinatensystem des Kristalls in der xy-Ebene. Wählt man zur Beschreibung der Polarisationsvektoren Polarkoordinaten, so folgt für das obige Beispiel

$$\vec{e}_i = \begin{pmatrix} \cos(\phi) \\ \sin(\phi) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

wobei ϕ der Winkel zur x-Achse ist. Handelt es sich um eine a-plane Oberfläche, so kann man das Koordinatensystem so wählen, dass der Polarisationsvektor des Anregungslasers in der xz-Ebene liegt:

$$\vec{e}_i = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ 0 \\ \sin(\theta) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

Es ist auch möglich, den Vektor in die yz-Ebene zu legen. Damit erhält man aber prinzipiell die gleichen Auswahlregeln wie mit dem Vektor aus Gleichung 4.

Bestimmen sie die Winkel-Abhängigkeiten der Ein-Phonon-Prozesse in ZnO mit Hilfe von Gleichung 2 und vergleichen sie diese qualitativ mit den experimentellen Ergebnissen, um zu entscheiden, in welcher Orientierung die vorliegenden Proben gewachsen wurden.

7. Lassen sie sich vom Betreuer ihre Messdaten aushändigen

6 Auswertung

Neben der Beantwortung der Fragen aus Kapitel 5 und der Diskussion ihrer Messergebnisse, sollte ihre Auswertung aus einer Einleitung, einem theoretischen Teil, dem Versuchsaufbau und einer Zusammenfassung aufgebaut sein. Im theoretischen Teil setzen sie sich unter anderem kurz mit der makroskopischen und mikroskopischen (quantenmechanische) Theorie der Raman- Streuung auseinander. Außerdem sollten sie die 1-dimensionale, unendlich lange Kette und deren Zusammenhang mit Phononen behandeln. Das Protokoll ist zwei Wochen nach der Versuchsdurchführung in schriftlicher Form und als pdf-Dokument beim Betreuer abzugeben.

Literatur

- [1] Peter Y. Yu and Manuel Cardona. *Fundamentals of Semiconductors Physics and Materials Properties*. Springer Berlin Heidelberg New York, 3. edition, 2005.
- [2] H. Ibach and H. Lüth. *Festkörperphysik: Einführung in die Grundlagen*. Springer-Lehrbuch. Springer, 2008.
- [3] C. Kittel. *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenbourg, 2005.
- [4] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Festkörperphysik*. Oldenbourg, 2005.
- [5] S. Hunklinger. *Festkörperphysik*. Oldenbourg, 2007.
- [6] K. Kopitzki and P. Herzog. *Einführung in die Festkörperphysik*. Teubner Studienbücher. Teubner B.G. GmbH, 2007.
- [7] Siqing Wei and M. Y. Chou. Phonon dispersions of silicon and germanium from first-principles calculations. *Phys. Rev. B*, 50(4):2221–, July 1994. Jr. Parker, J. H., D. W. Feldman, and M. Ashkin. Raman scattering by silicon and germanium. *Phys. Rev.*, 155(3):712–, March 1967.
- [9] B. A. Weinstein and Manuel Cardona. Second-order Raman spectrum of germanium. *Phys. Rev. B*, 7(6):2545–, March 1973.
- [10] R. Loudon. The raman effect in crystals. *Advances in Physics*, 13(52):423–482, 1964.
- [11] T. C. Damen, S. P. S. Porto, and B. Tell. Raman effect in zinc oxide. *Phys. Rev.*, 142(2):570–, February 1966.