

- 1D - Kette 2 Basisatome:

$$\omega^2 = \frac{C+D}{m} \pm \frac{1}{m} \sqrt{C^2 + D^2 + CD \cos(ka)}$$

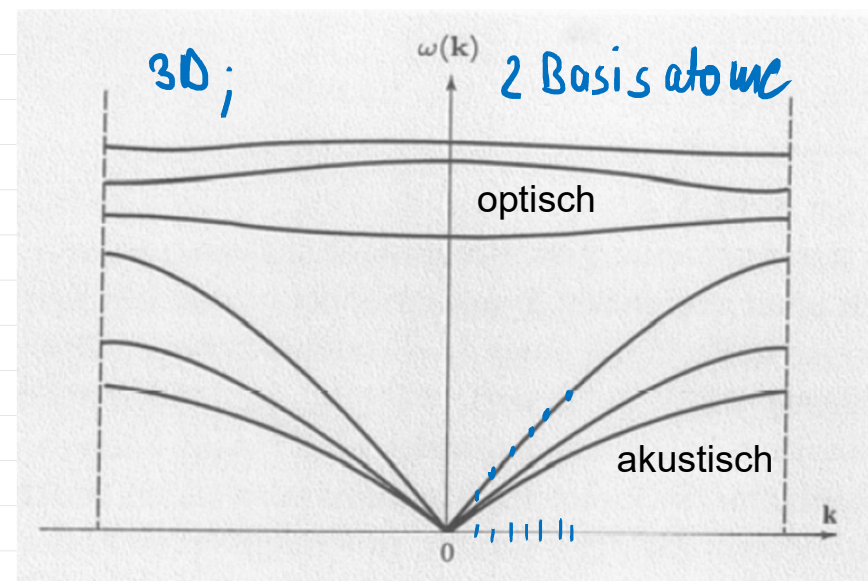
- 3D - Fall, 1 Basisatome

3 akustische Zweige
3 optische Zweige

- experimentelle + theoretische Plots: entlang Hochsymmetriegerichtungen von 1. BZ
- periodische oder Born - von Karman Randbedingungen

=> diskrete k Werte, N - Streifen wo $N = \#$ Elementarzellen

- Zustandsdichte $\mathcal{Z}(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$ hängt nicht von \vec{k} ab



5.5 Quantisierung der Gitterschwingung

Theorie der kleinen Schwingungen

$\left. \begin{array}{l} 3N_g \text{ gekoppelte Oszillatoren} \\ \text{Wellen mit diskreten } \vec{k} \\ \text{und Frequenz } \omega_p(\vec{k}) \end{array} \right\} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} 3N_g \text{ entkoppelte Oszillatoren} \\ \text{in Normalkoordinaten (nicht Auslenkungen } \vec{u}) \\ \text{mit Eigenfrequenzen } \omega_p(\vec{k}) \end{array} \right.$

Quantenmechanik: diskrete Energieeigenwerte $\left(n_{\vec{k},p} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_p(\vec{k}) ; p=1..3g$

Der dynamische Zustand ist durch Angabe der Besetzungszahlen $n_{\vec{k},p}$ aller Oszillatoren, bzw der Amplituden der Gitterwellen eindeutig bestimmt.

gesamtenergie $E = \sum_{\vec{k}, p} \left(n_{\vec{k}, p} + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \omega_p(\vec{k})$

In der Quantenmechanik ordnet man den Energiequanten der Normalschwingungen Teilchen zu.

Phononen sind die Quanten des Auslenkungsfeldes in einem Kristall

- Phononen können erzeugt und vernichtet werden (Amplitude der Welle ändert sich)
- Phononenbesetzungszahlen $n_{\vec{k}, p}$ steigen mit T .
- Ein Phonon mit Energie $\hbar \omega_p(\vec{k})$ hat den Kristallimpuls $\hbar \vec{k}$, formal analog zum Impuls $\hbar \vec{k}$ eines freien Teilchens
- Während der Translationsinvarianz des Raumes die Impulserhaltung

hervorrufen, so ruft die diskrete Translationsinvarianz im Gitter den Kristallimpuls hervor. Der Kristallimpuls ist nur bis auf reziproke Gittervektoren erhalten, d.h. \vec{k}' und \vec{k} haben den selben Kristallimpuls wenn $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$

- Bei Stoßprozessen in Kristallen gilt

$$\sum_i \hbar \vec{k}_i = \sum_i \hbar \vec{k}_i' + \hbar \vec{G}$$

Wellenvektoren vor Stoß

Wellenvektoren nach dem Stoß

i indiziert alle am Stoßprozess beteiligten Teilchen

- $\hbar \vec{k}$ eines Phonons ist kein linearer Impuls, da Gitterschwingungen nur Relativkoordinaten enthalten.

5.6 Messung der Phonondispersionsrelation

Für die inelastische Streuung eines Sondenteilchens am Kristall bei Erzeugung oder Vernichtung eines Phonons gilt:

Energiesatz

$$E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'} = \pm \hbar \omega_{\text{pho}}$$

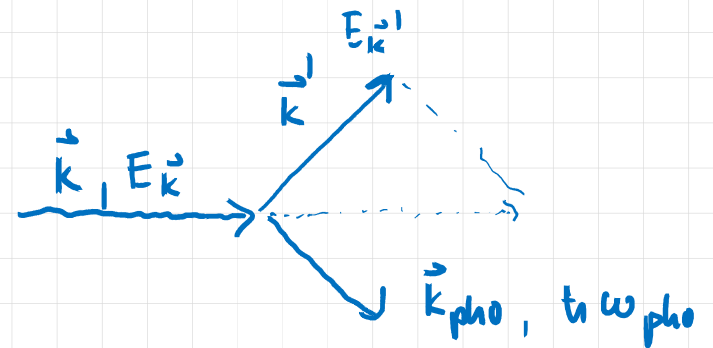
+ Erzeugung

Kristallimpulssatz

$$\vec{k} - \vec{k}' = \pm \vec{k}_{\text{pho}} + \vec{G}$$

- Vernichtung

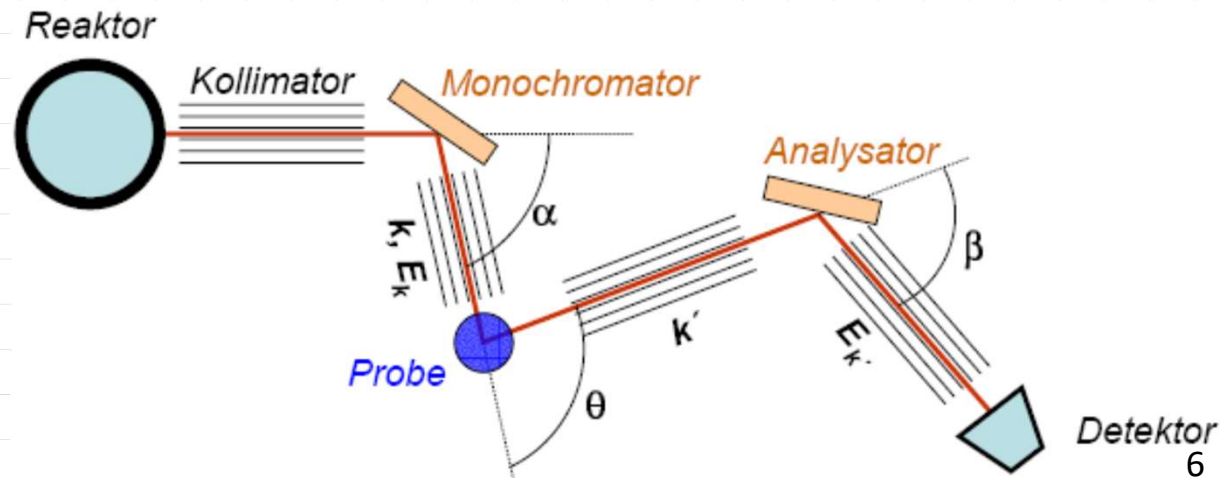
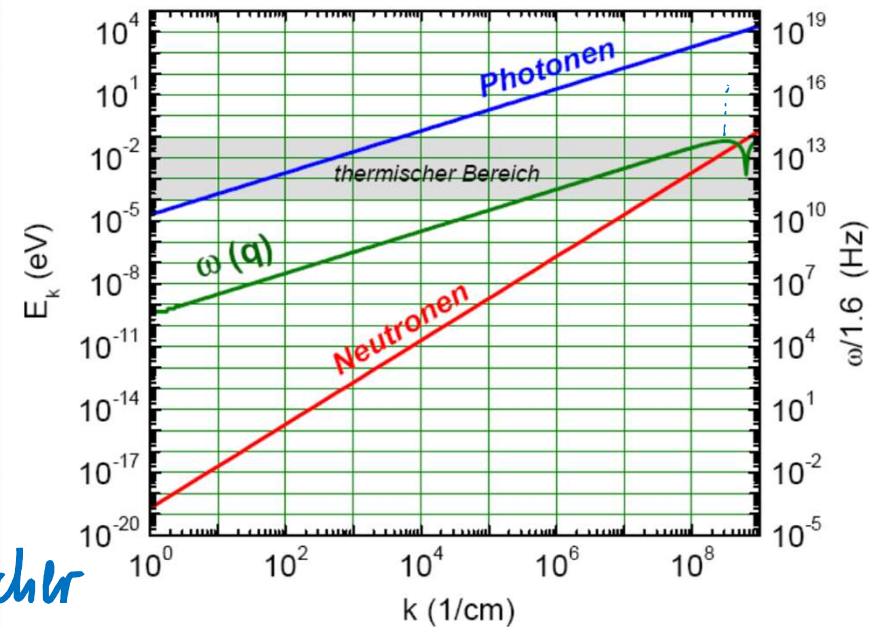
- Wenn kein Phonon erzeugt oder vernichtet ist der Kristallimpulssatz identisch mit der Lauegleichung
- Misst man $E_{\vec{k}}, \vec{k}$ und $E_{\vec{k}'}, \vec{k}'$, so kann im Streuexperiment \vec{k}_{pho} und $\hbar \omega_{\text{pho}}$ ermittelt werden.



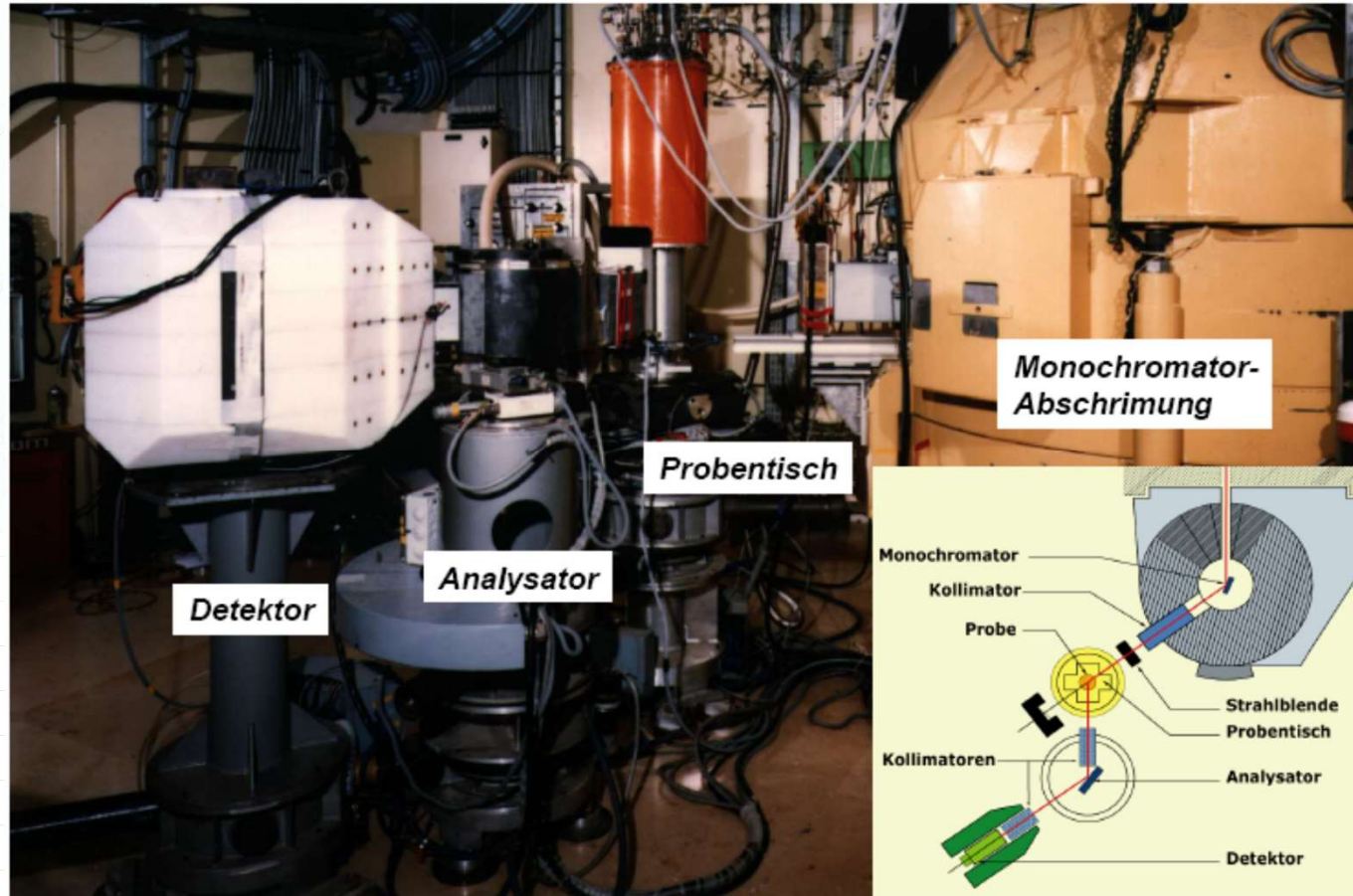
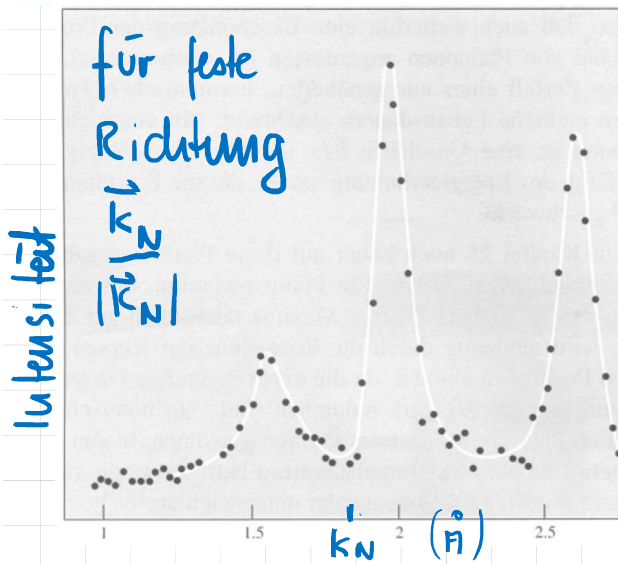
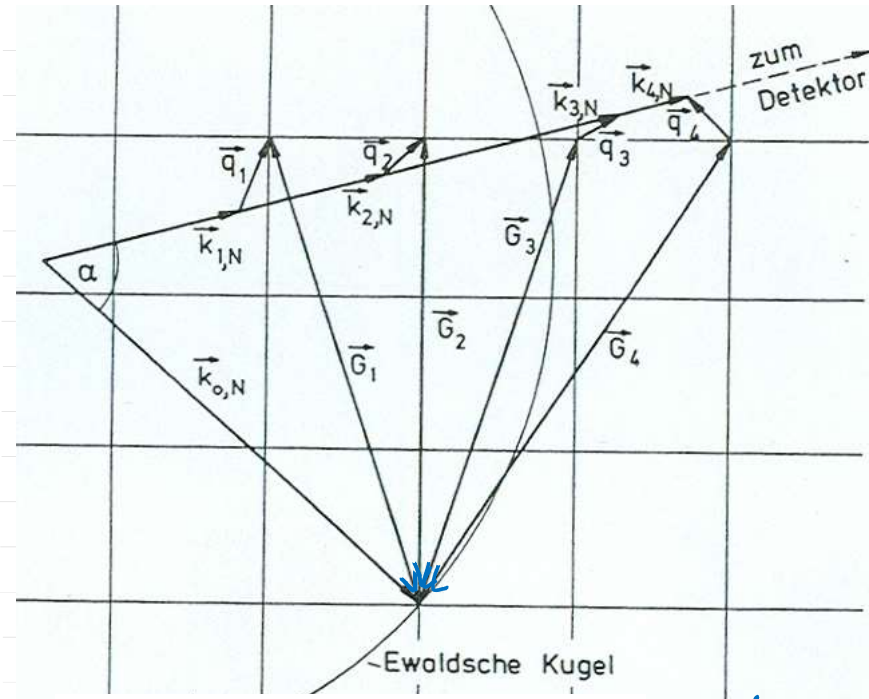
- Sondenkürchen können n , γ und He sein.
- Erkundung von 1.BZ erfordert $\Delta k \approx 10^8 \text{ cm}^{-1}$
- Photonen mit $\Delta k \approx 10^8 \text{ cm}^{-1}$ haben $E \approx 10^3 \text{ eV}$
schlechte Empfindlichkeit $\frac{\Delta E}{E} \approx 10^{-5}$
- Neutronen mit $\frac{\Delta E}{E} \approx 1$, sehr viel empfindlicher

=> Photonen spektroskopie typischerweise mit n.

Nobelpreis 1994 für Entwicklung
der 3-Achsen-Spektrometer.



3 - Achsenspektrometer am Reaktor



Ewald-Konstruktion für inelastische Streuung

- Phononenspektroskopie auch mit Licht möglich

$$E \approx 3 \text{ eV} \Rightarrow \Omega \approx 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

$$\frac{\Omega - \Omega'}{\Omega} = \frac{\Delta \Omega}{\Omega} = \frac{\omega_{\text{pho}}}{\Omega} = \text{gut messbar}$$

$$\text{für } \omega_{\text{pho, opt}} \approx 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

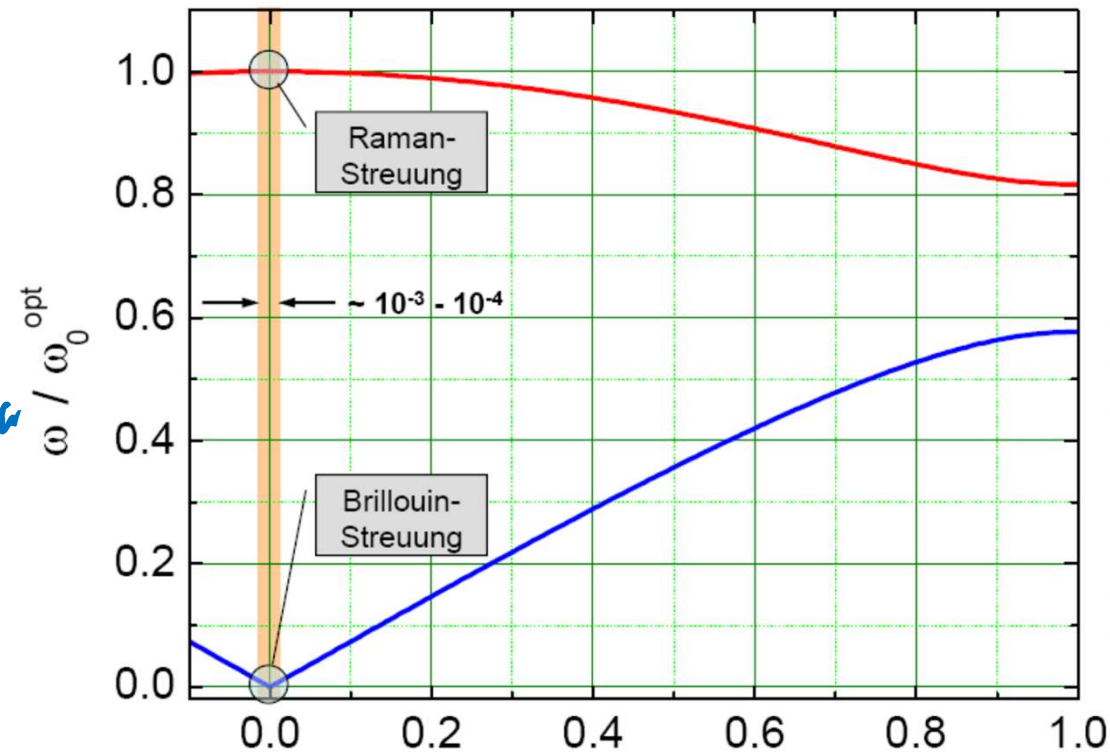
$$\text{Für } E \approx 3 \text{ eV} \text{ ist } k < 10^{-3} \text{ 1.BZ}$$

also ist mit Photonen nur Messung um T möglich $\Rightarrow \vec{G} = 0$

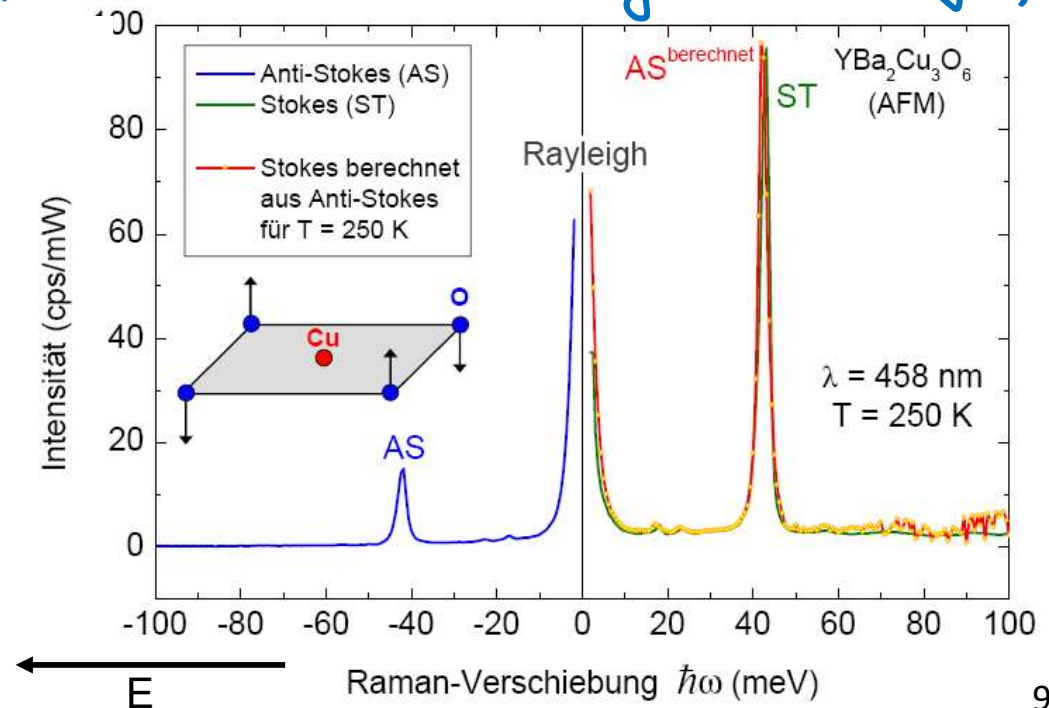
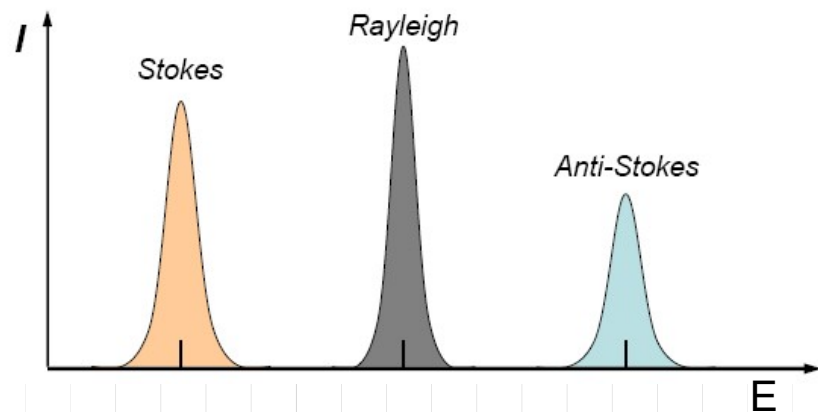
Also

$$\boxed{\begin{aligned} \Omega - \Omega' &= \pm \omega_{\text{pho}} \\ |\vec{k} - \vec{k}'| &= \pm \vec{k}_{\text{pho}} \end{aligned}}$$

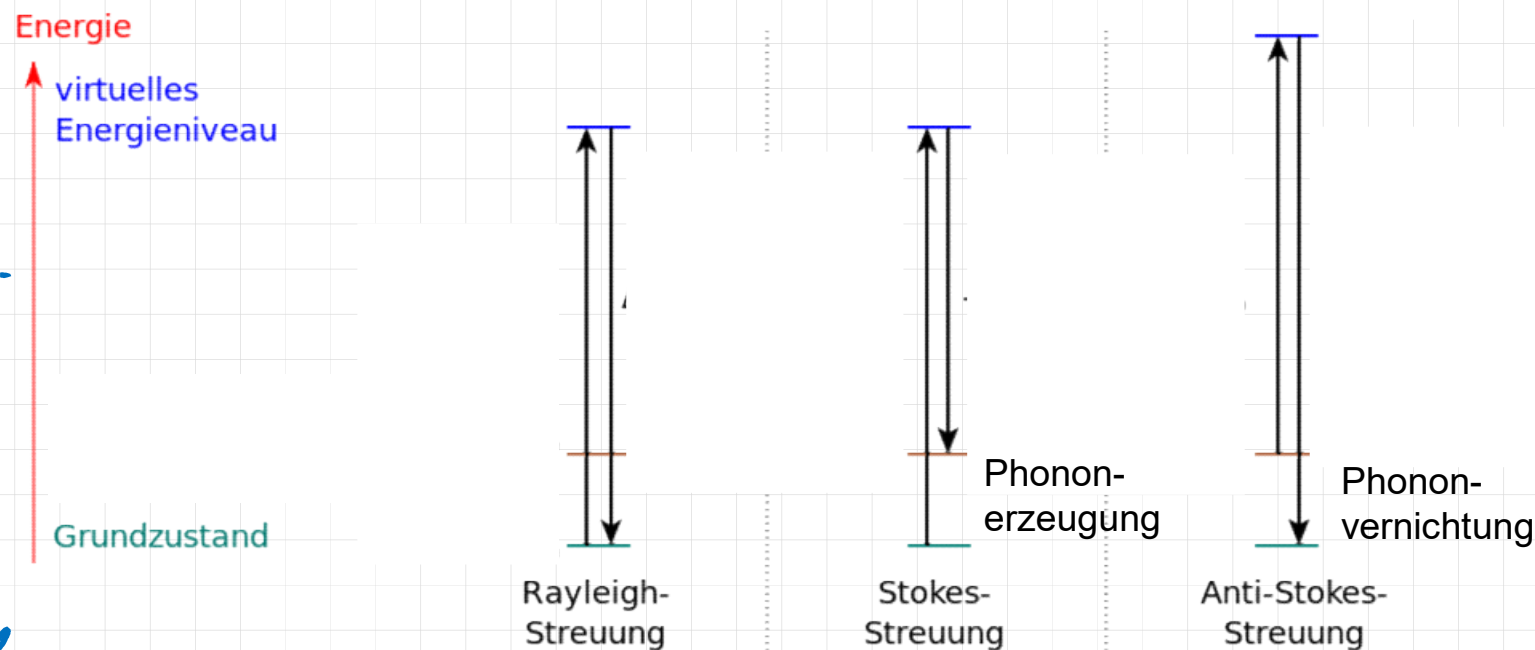
- Vernichtung
+ Erzeugung



- Wechselwirkung von Licht mit optischen Phononen heißt Ramanstreuung (Nobelpreis 1930)
- Wechselwirkung von Licht mit akustischen Phononen heißt Brillouinstreuung
- Aufgrund der Erhaltungssätze sollte nur inelastische Streuung für $\vec{k}' \neq \vec{k}$ beobachtbar sein. Aufgrund von Defekten aber auch stets elastische Streuung in Richtung \vec{k}' , genannt Rayleighstreuung



- Quantenmechanisch wird bei der Raman-Spektroskopie das System in einen virtuellen Zustand höherer Energie angeregt. Die Anregungsenergie wird in Form eines Lichtquants und eines Phonons wieder abgegeben.



- Nur Phononenmoden, die bei Streuung an das elektromagnetische Feld des Lichts an koppeln, sind ramanaktiv
- Die \vec{k} -Vektoren in (*) sind die \vec{k} -Vektoren von Licht im Kristall
 $\vec{k}_{\text{im Kristall}} = n \cdot \vec{k}_{\text{aus Kristall}}$ wo n der Brechungsindex ist.

- Stimmt die Anregungsenergie (durch stimulierter Laser) mit der Energie eines elektronischen Übergangs überein, so spricht man von resonanter Ramanstreuung. Diese besitzt sehr viel höhere Intensität

Ramanspektroskopie von Graphen

