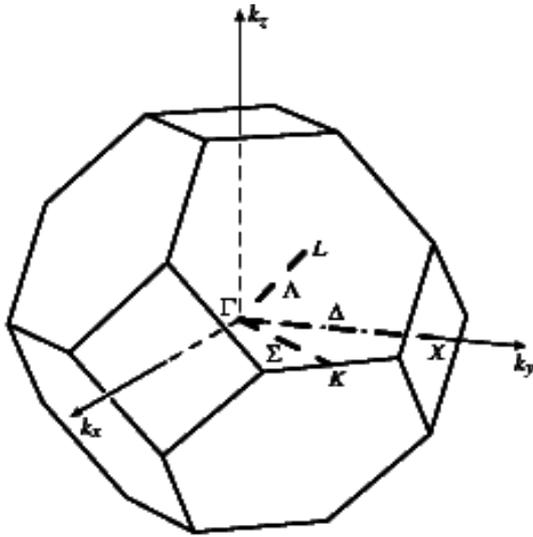
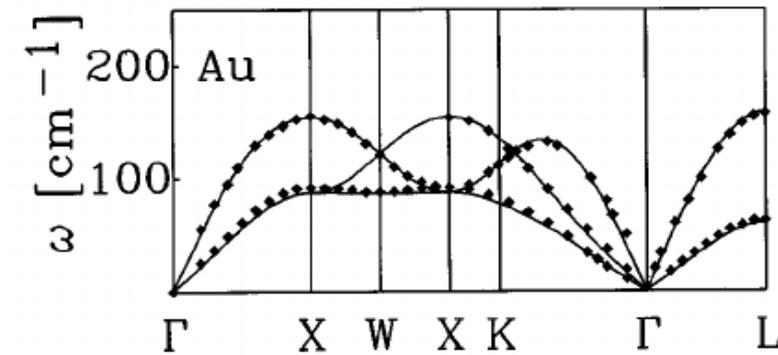
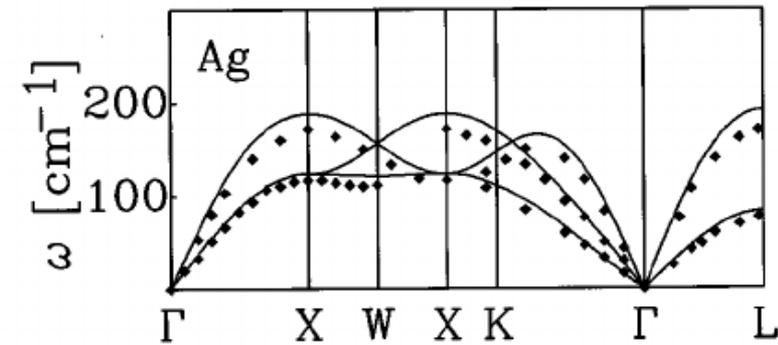
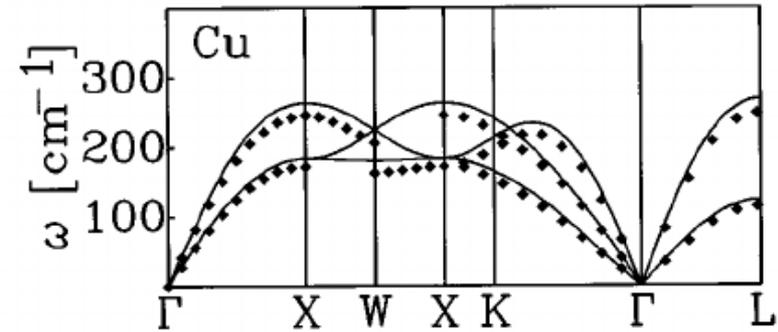


5.5 Phononen

Phononen in fcc-Gitter

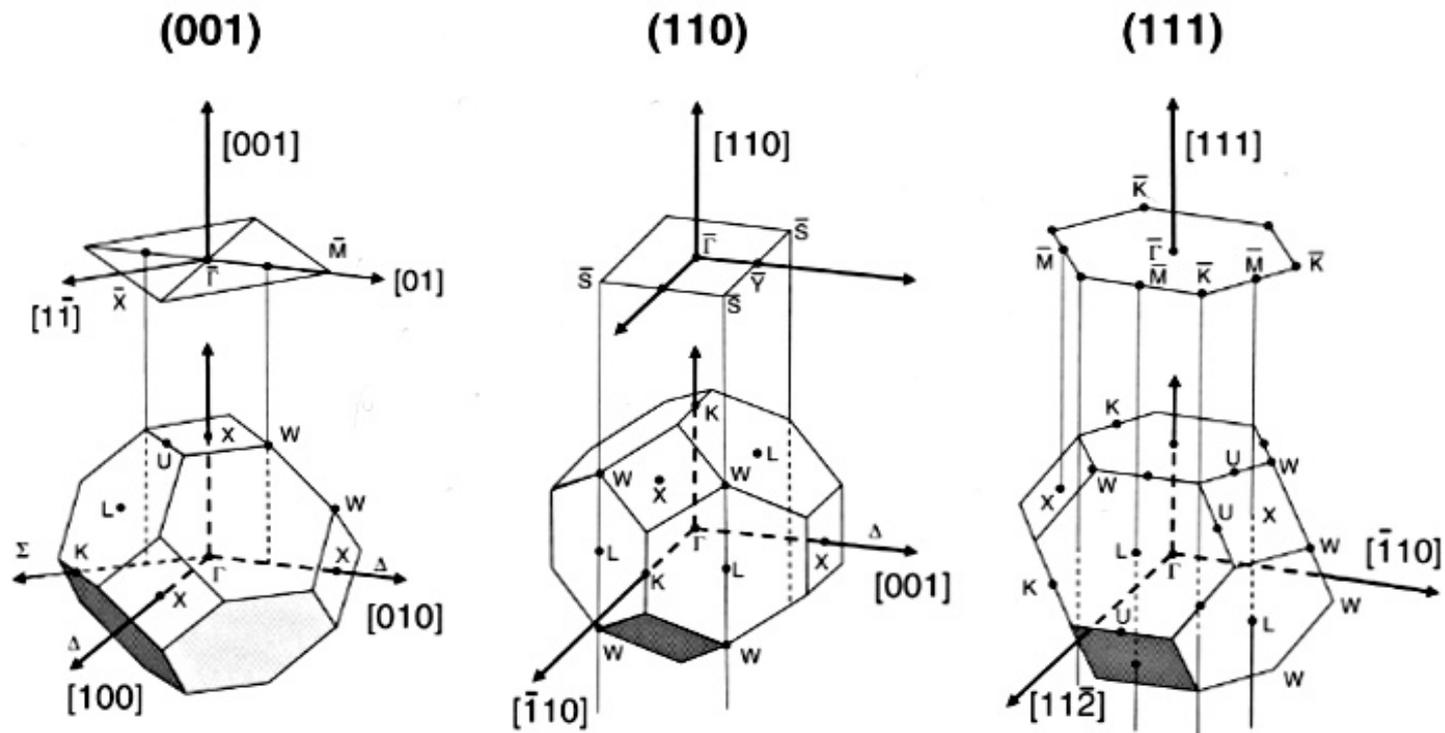


- Die fcc Einheitszelle enthält 4 Atome. Somit sind 4x3 Phononenbänder zu erwarten.
- 3 akustische Bänder (1 longitudinales und 2 transversale) und 3x3 optische.
- Alle 4 Atome sind identisch und alle 3 Raumrichtungen, so daß viele der Bänder entartet sind.



Projektion auf die Oberflächenbrillouinzone

Surface Brillouin Zones for fcc



- Oberflächen- und Bulk-Brillouinzone haben unterschiedliche Formen.

Schwingungseigenschaften von Oberflächen

Aus Festkörperphysik bekannt: Phononen

An Oberflächen: Keine Periodizität \perp zur Oberfläche \rightarrow lokalisierte Oberflächenanregungen
Rekonstruktion, Relaxation \rightarrow veränderte Schwingungseigenschaften

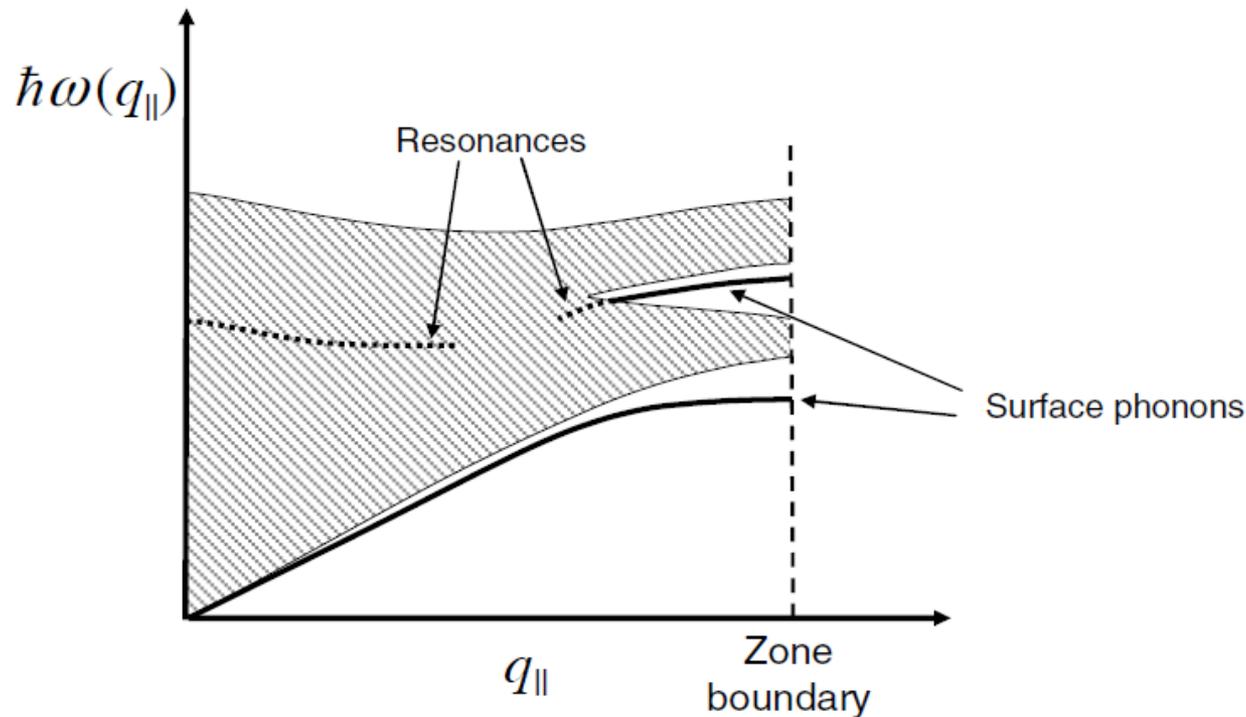
Aus Molekülphysik bekannt: Molekülschwingungen

An Oberflächen: Bindung zur Oberfläche \rightarrow frustrierte Translationen und Rotationen
chem. WW mit Oberfläche \rightarrow verschobene Schwingungsfrequenzen
charakteristische Gruppenfrequenzen \rightarrow Identifikation von Atomen und Molekülen
verschiedene Adsorptionsplätze \rightarrow Unterscheidung verschiedener Spezies

Schwingungseigenschaften von Oberflächen

Aus Festkörperphysik bekannt: Phononen

An Oberflächen: Keine Periodizität \perp zur Oberfläche \rightarrow lokalisierte Oberflächenanregungen
Rekonstruktion, Relaxation \rightarrow veränderte Schwingungseigenschaften

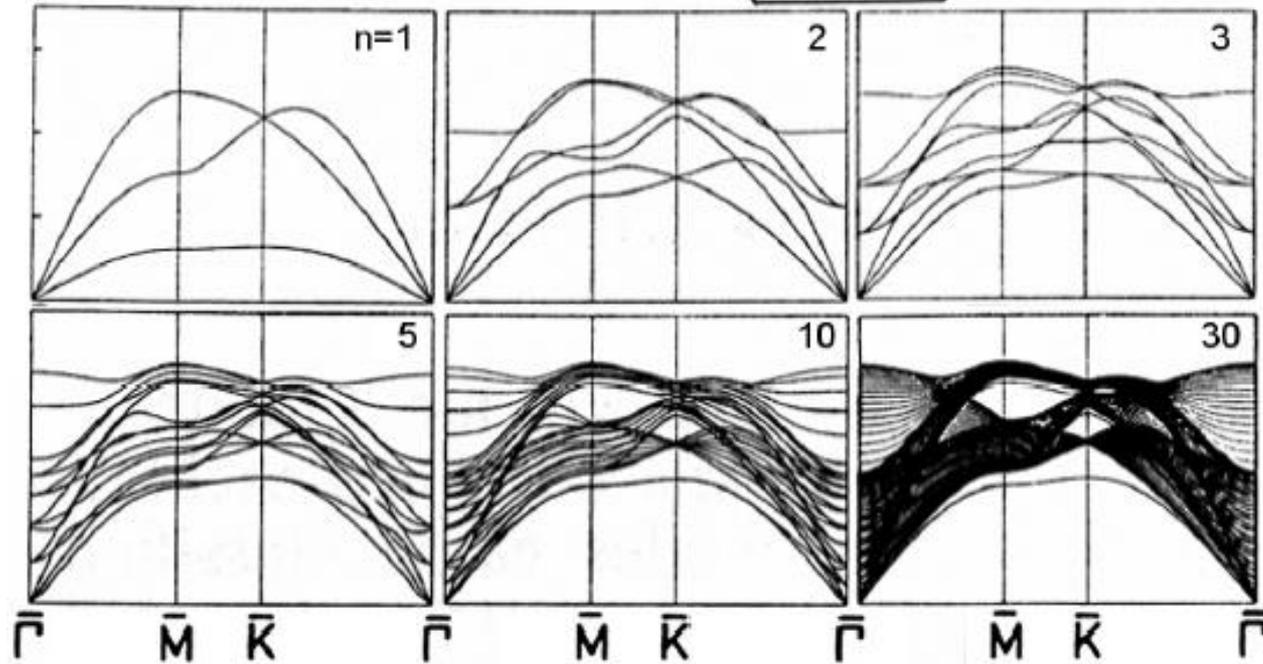
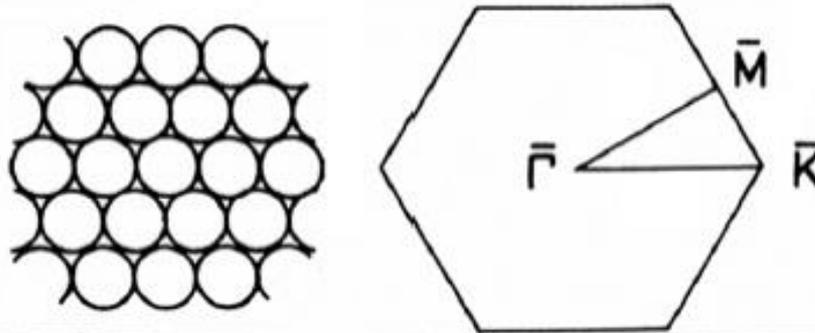


- 3D Phononenbänder werden über q_{\perp} integriert.
- Reine Oberflächenphononen existieren nur in der projizierten Bandlücke.

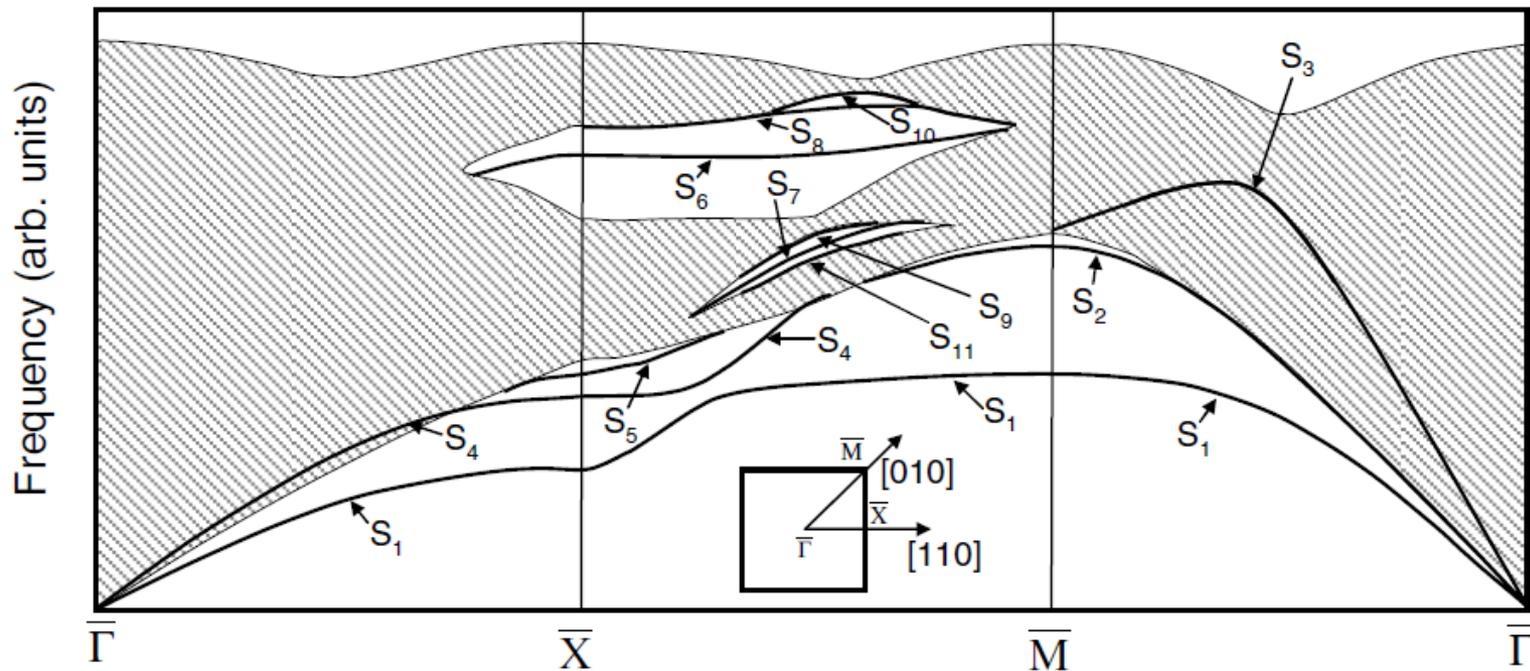
5.5 Phononen

Oberflächenphononen: Von der Monolage zum Festkörper

Dispersionskurven für eine endliche Anzahl (1, 2, 3, 5, 10 und 30) von fcc(111)-Lagen



Oberflächenphononen von fcc(100) Flächen



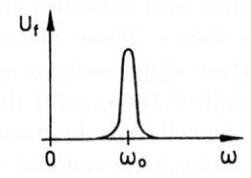
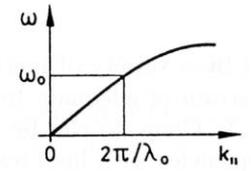
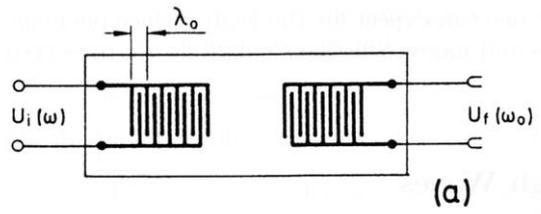
- S_1 horizontale Schermode zwischen $\bar{\Gamma}$ und \bar{X} und vertikal zwischen \bar{M} und $\bar{\Gamma}$.
- S_3 und S_4 sind zwischen $\bar{\Gamma}$ und \bar{X} bzw. \bar{M} und $\bar{\Gamma}$ in der Sagittalebene polarisiert.
- S_2 und S_5 sind in der 2. Lage lokalisiert.
- S_1 horizontale Mode mit starker Lokalisierung in der 1. Lage.

5.5 Phononen

Akustische Mode unterhalb der Festkörper-Moden

- Auslenkung in der Sagittal-Ebene (gegeben durch OF-Normale und Richtung von \mathbf{k})
- Atome führen elliptische Bewegungen durch Eindringtiefe hängt von Wellenvektor k ab (größer bei kleinen k)
- Schwingungsamplitude fällt ins Innere hinein ab

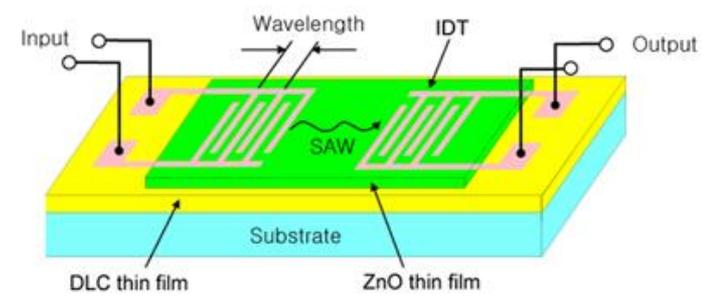
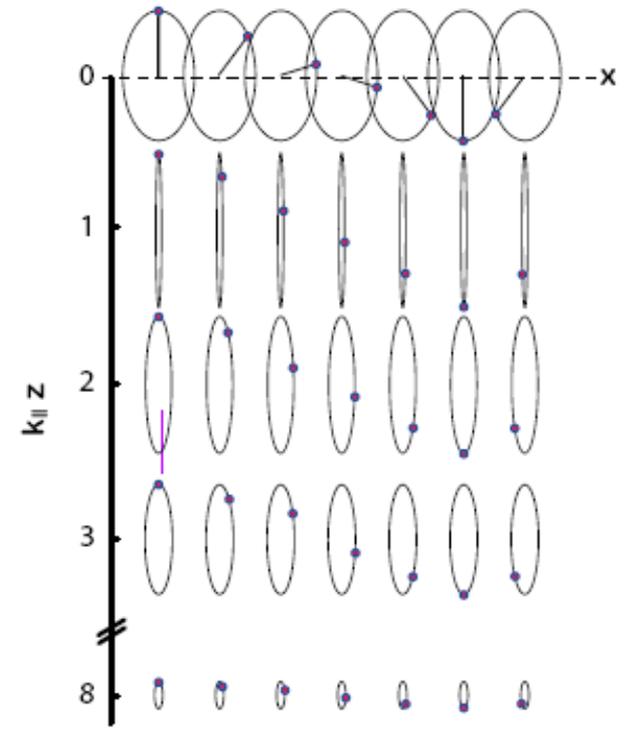
Prinzip: Rayleigh-Oberflächenwellenfilter



Ohne sie würden heutige Mobiltelefone überhaupt nicht erst funktionieren: Die Rede ist von den zahlreichen akustischen Oberflächenwellenfiltern (OFWs) – neben den aktiven Halbleiterchips die Schlüsselkomponenten der modernen Kommunikationstechnik. Was sind nun

Baier, Epcos; *elektronik industrie* 10 - 2000

Rayleigh-Phonon



5.5 Phononen

Fuchs- Kiewer Phononen

Ionische Kristalle z.B. ZnO, SrTiO₃ , ...

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\omega_0^2 (\epsilon_{st} - \epsilon_{\infty})}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$$

Longitudinal:

$$\nabla \cdot \mathbf{P} \neq 0 \quad \nabla \times \mathbf{P} = 0$$



$$\epsilon(\omega = \omega_L) = 0$$

Transversal:

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = 0 \quad \nabla \times \mathbf{P} \neq 0$$



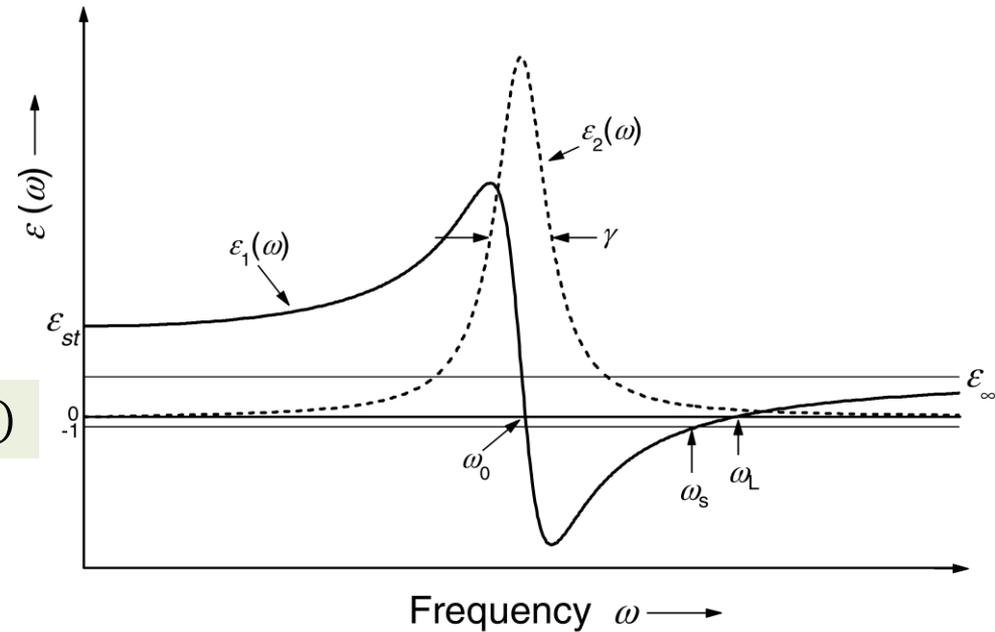
$$\epsilon(\omega = \omega_T) = \infty$$

Fuchs- Kiewer (FK)

Randbedingungen:



$$\epsilon(\omega_{FK}) = -1$$



Vakuum $\epsilon = 1$

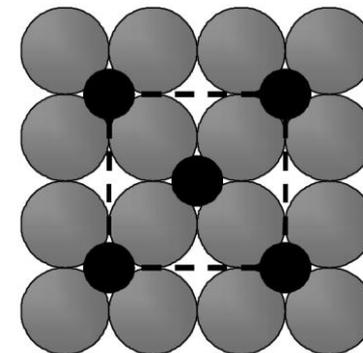
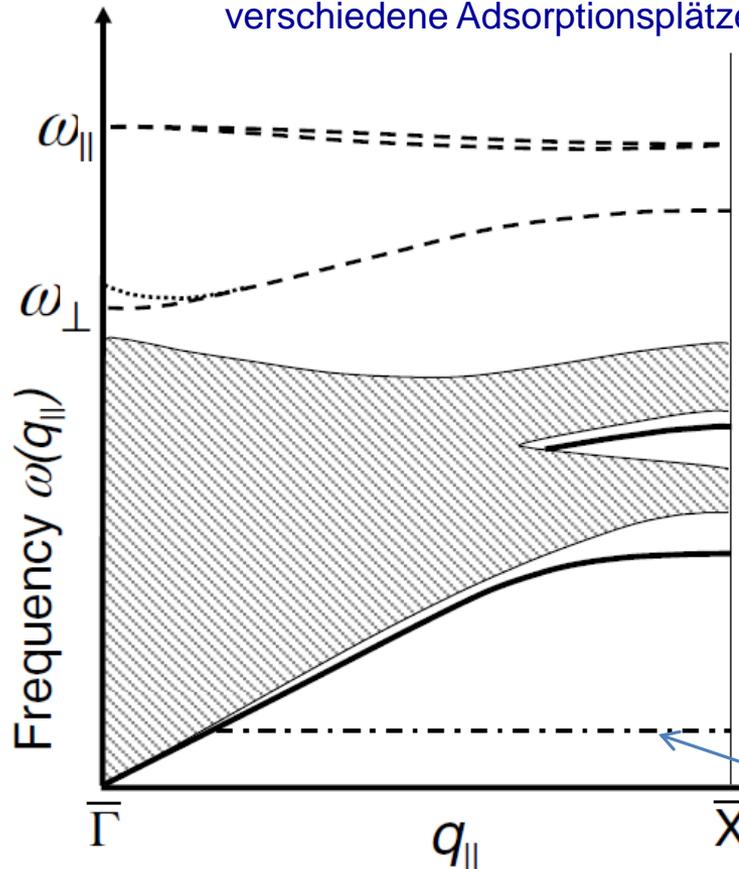


Schwingungseigenschaften von Oberflächen

Aus Molekülphysik bekannt: Molekülschwingungen

An Oberflächen: Bindung zur Oberfläche
chem. WW mit Oberfläche
charakteristische Gruppenfrequenzen
verschiedene Adsorptionsplätze

- frustrierte Translationen und Rotationen
- verschobene Schwingungsfrequenzen
- Identifikation von Atomen und Molekülen
- Unterscheidung verschiedener Spezies



fcc(001) c(2x2)

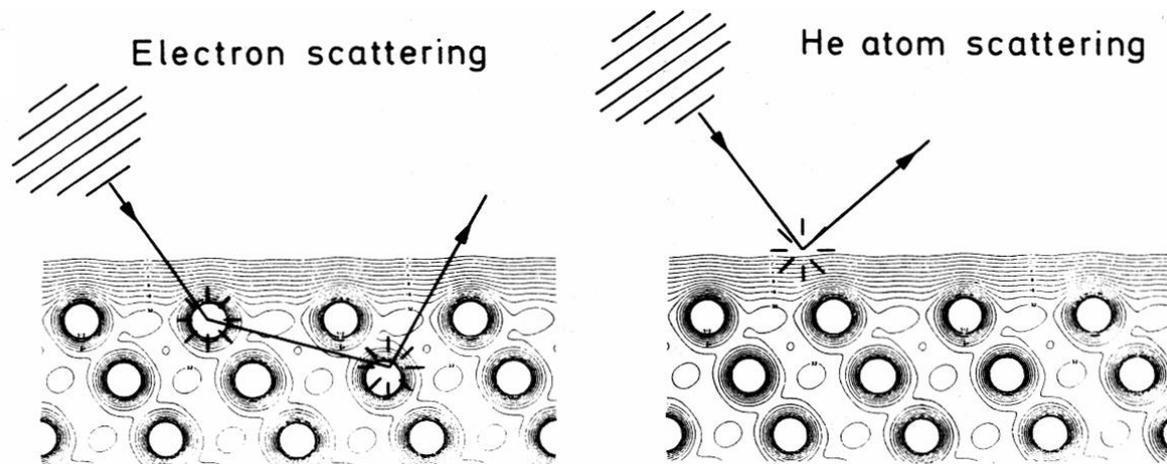
vertikale Bewegung einer adsorbierten Schicht aus Edelgasatomen

Methoden

Energiebereich von Phononen und Molekülschwingungen:
5 – 500 meV (40 – 4000 cm^{-1})

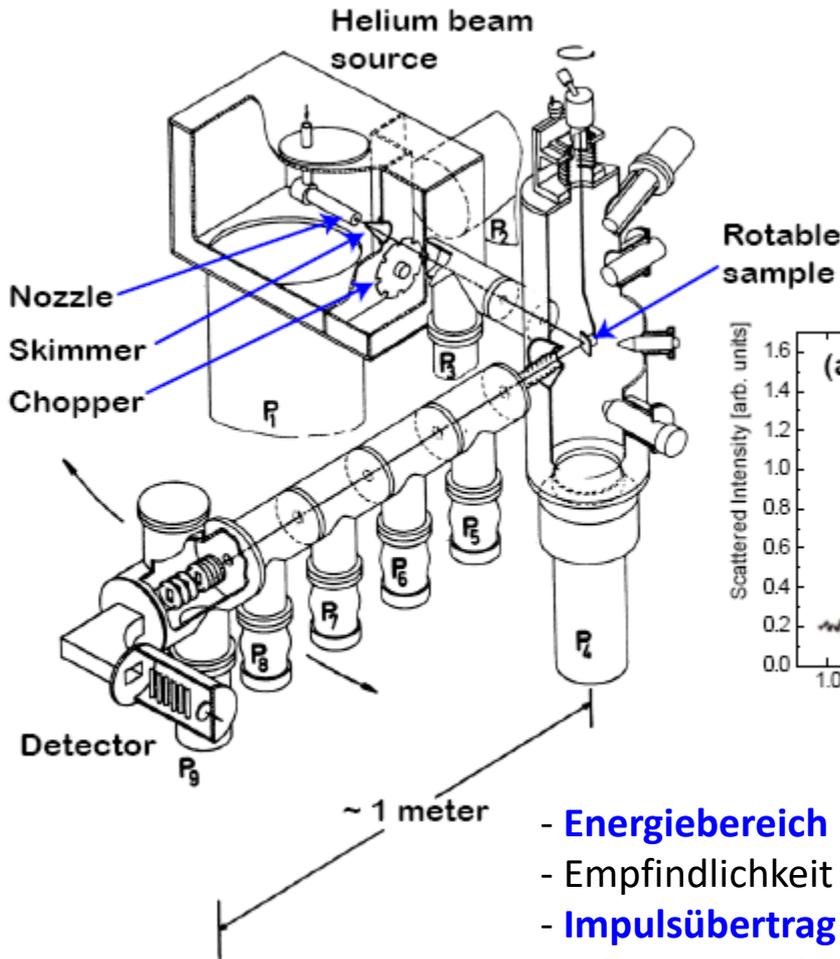
Typische Linienbreiten:
0,1 – 3 meV

Bsp.: Streuung von Elektronen und Atomen

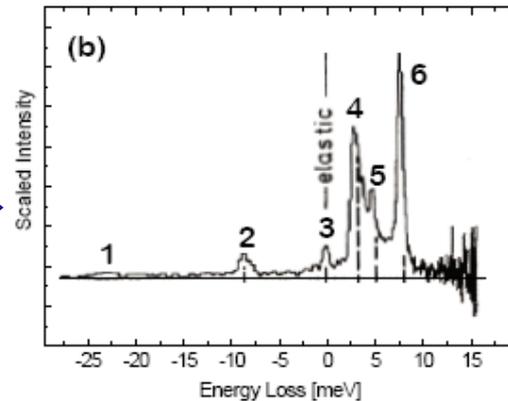
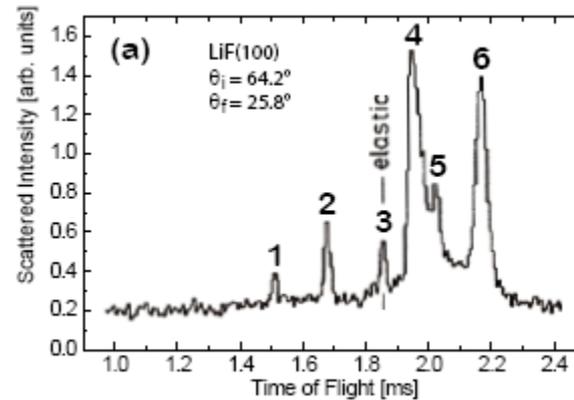


5.5 Phononen

Exp. Methoden: 1- Inelastische Heliumatomstrahlstreuung (HAS)



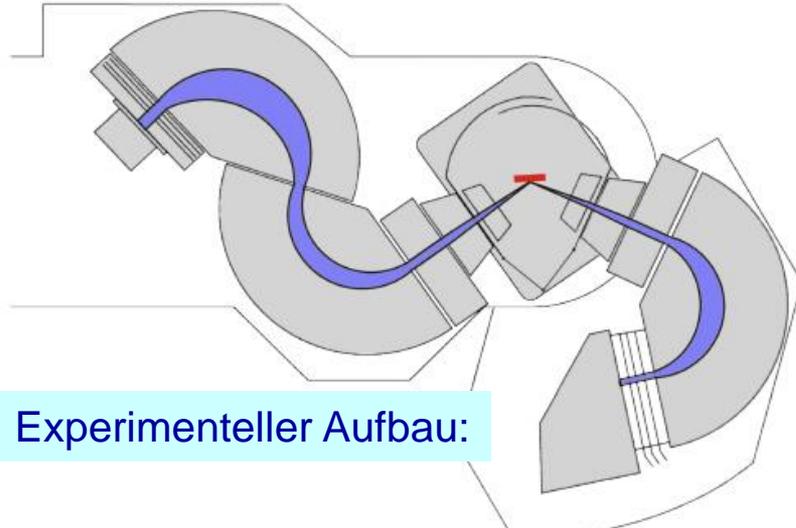
- Teilchen regt Oberflächenschwingung an (inelastische Streuung)
- Charakteristischer **Energieverlust**
- Bestimmung der kinetischen Energie über Flugzeitmessung



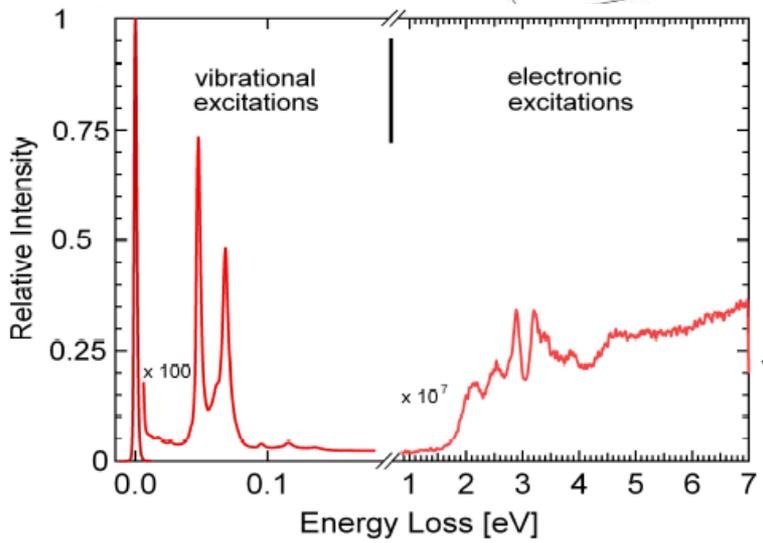
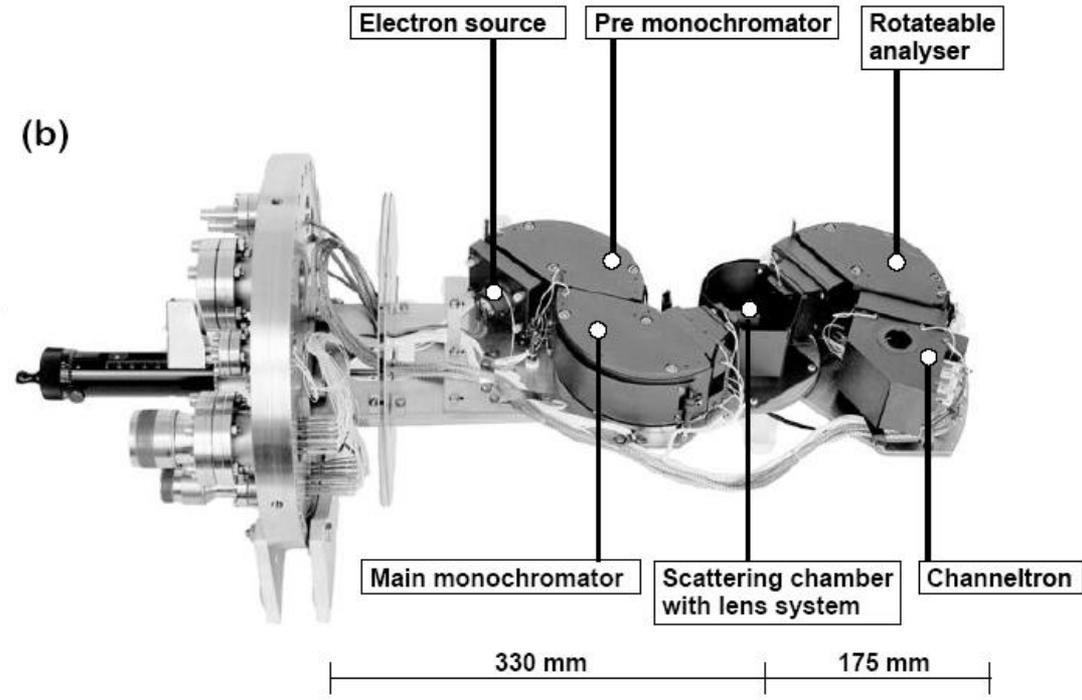
- **Energiebereich 2 - 50 meV** mit spektraler Auflösung $\Delta E \approx 0.5 \text{ meV}$
- Empfindlichkeit hoch für Moden, die mit Korrugation der OF korreliert sind
- **Impulsübertrag möglich**
- sehr gutes Vakuum erforderlich ($< 10^{-7} \text{ mbar}$)
- hohe Streuintensität nur bei sehr guter OF - Qualität

5.5 Phononen

Exp. Methoden: 2- Hochaufgelöste Elektronenenergieverlustspektroskopie (HREELS)



Experimenteller Aufbau:

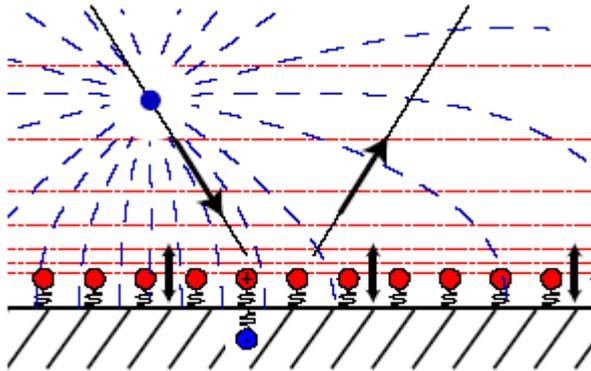


- **Energiebereich 5 - 1000 meV** mit spektraler Auflösung $\Delta E > 1$ meV
- Empfindlichkeit sehr hoch
- **Impulsübertrag möglich**
- gutes Vakuum erforderlich ($< 10^{-6}$ mbar)
- hohe Streuintensität und Empfindlichkeit nur bei sehr guter Oberflächenqualität

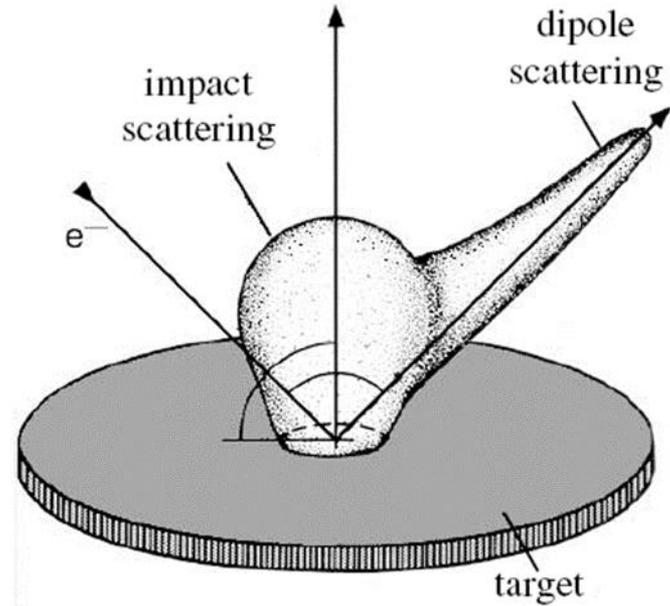
5.5 Phononen

Exp. Methoden: 2- Hochaufgelöste Elektronenenergieverlustspektroskopie (HREELS)

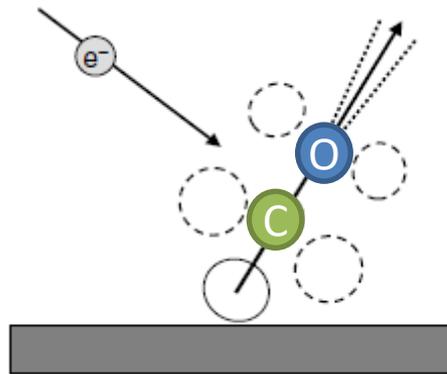
Langreichweitige Dipolstreuung:



Kurzreichweitige Stoßstreuung:

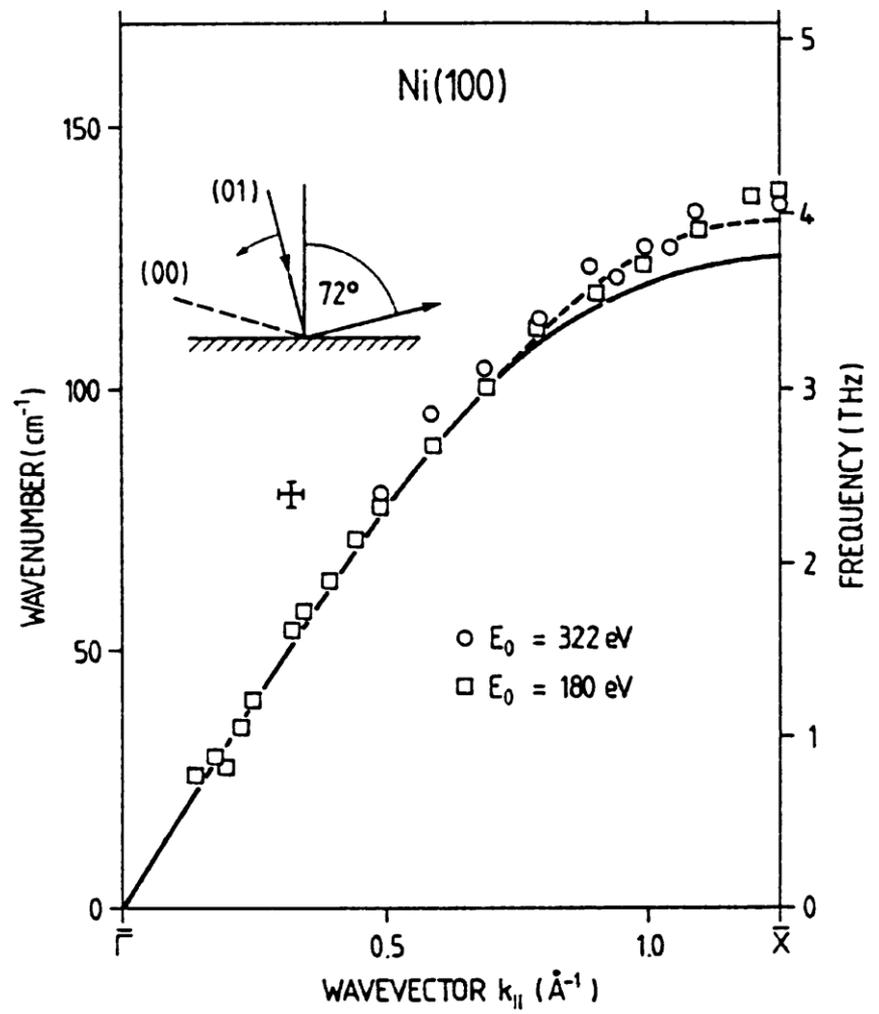
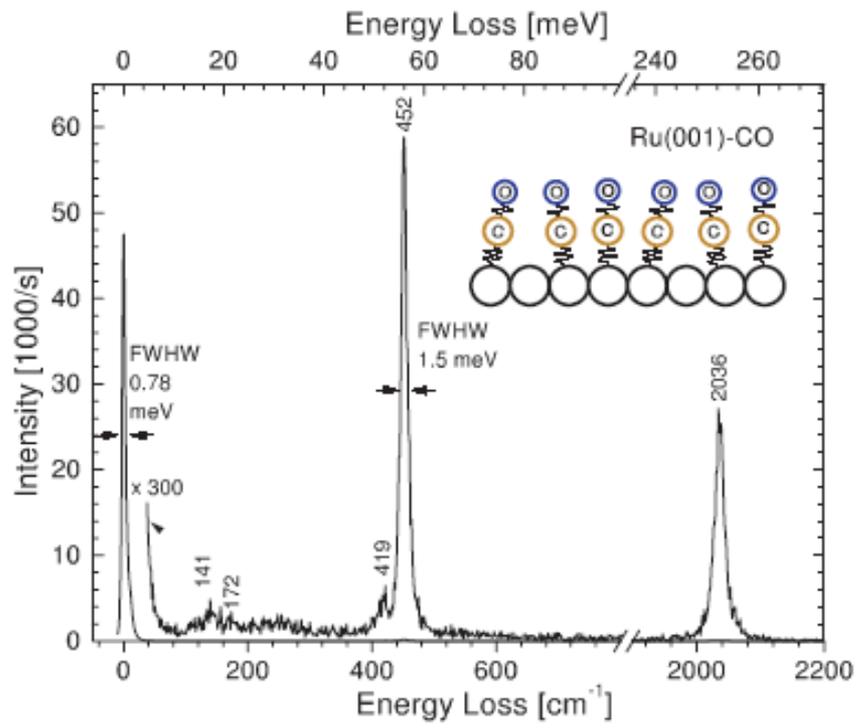


Resonanz Stoßstreuung:



5.5 Phononen

Exp. Methoden: 2- Hocho aufgelöste Elektronenenergieverlustspektroskopie (HREELS)



Identifikation von Schwingungen durch Isotopenaustausch:

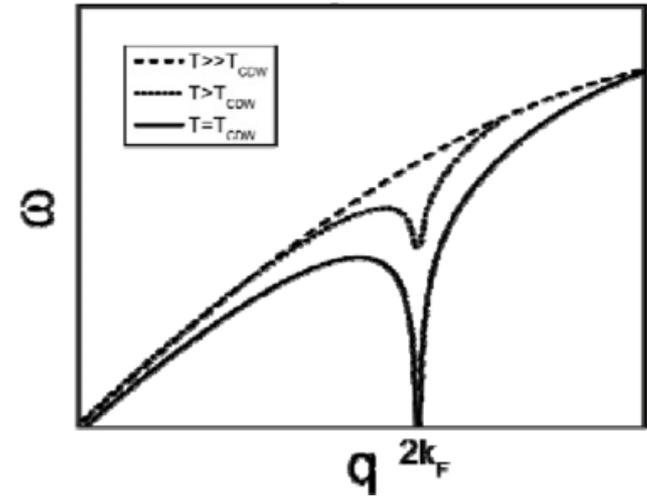
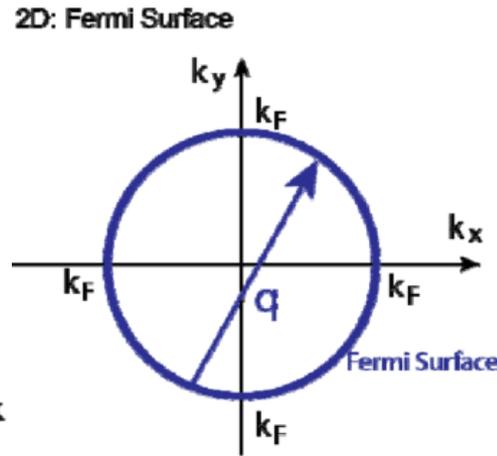
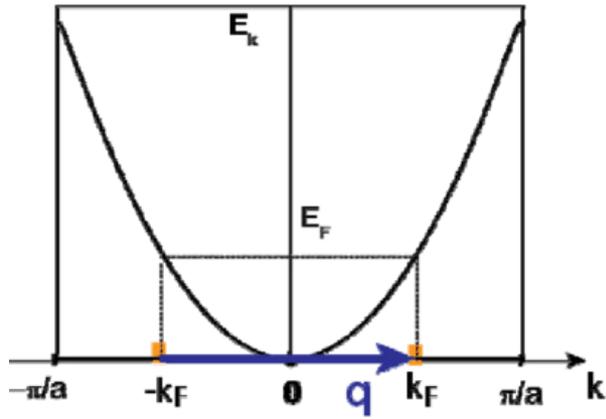
Identische chem. WW, aber unterschiedliche Masse

$$\frac{\omega_H}{\omega_D} \approx \sqrt{\frac{m_D}{m_H}} = \sqrt{2}$$

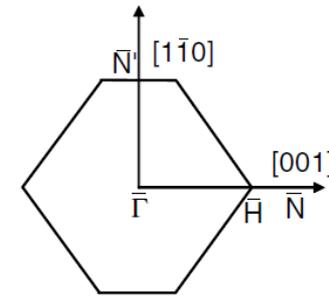
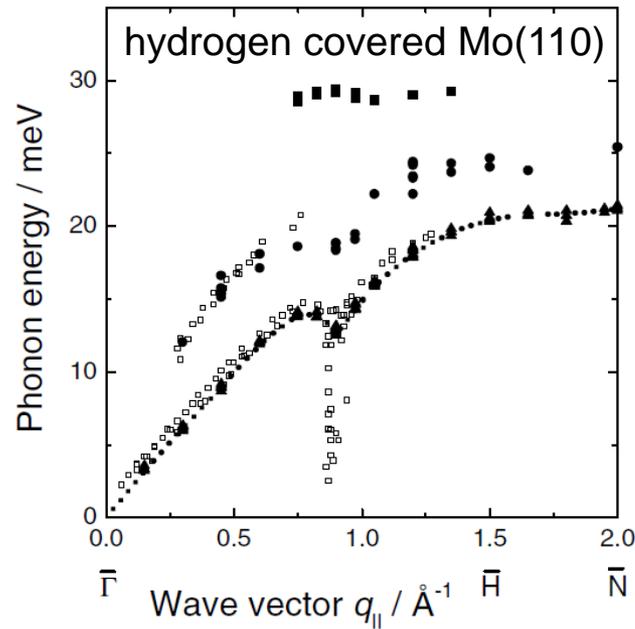
(z.B. D, ¹³C, ¹⁸O)

5.5 Phononen

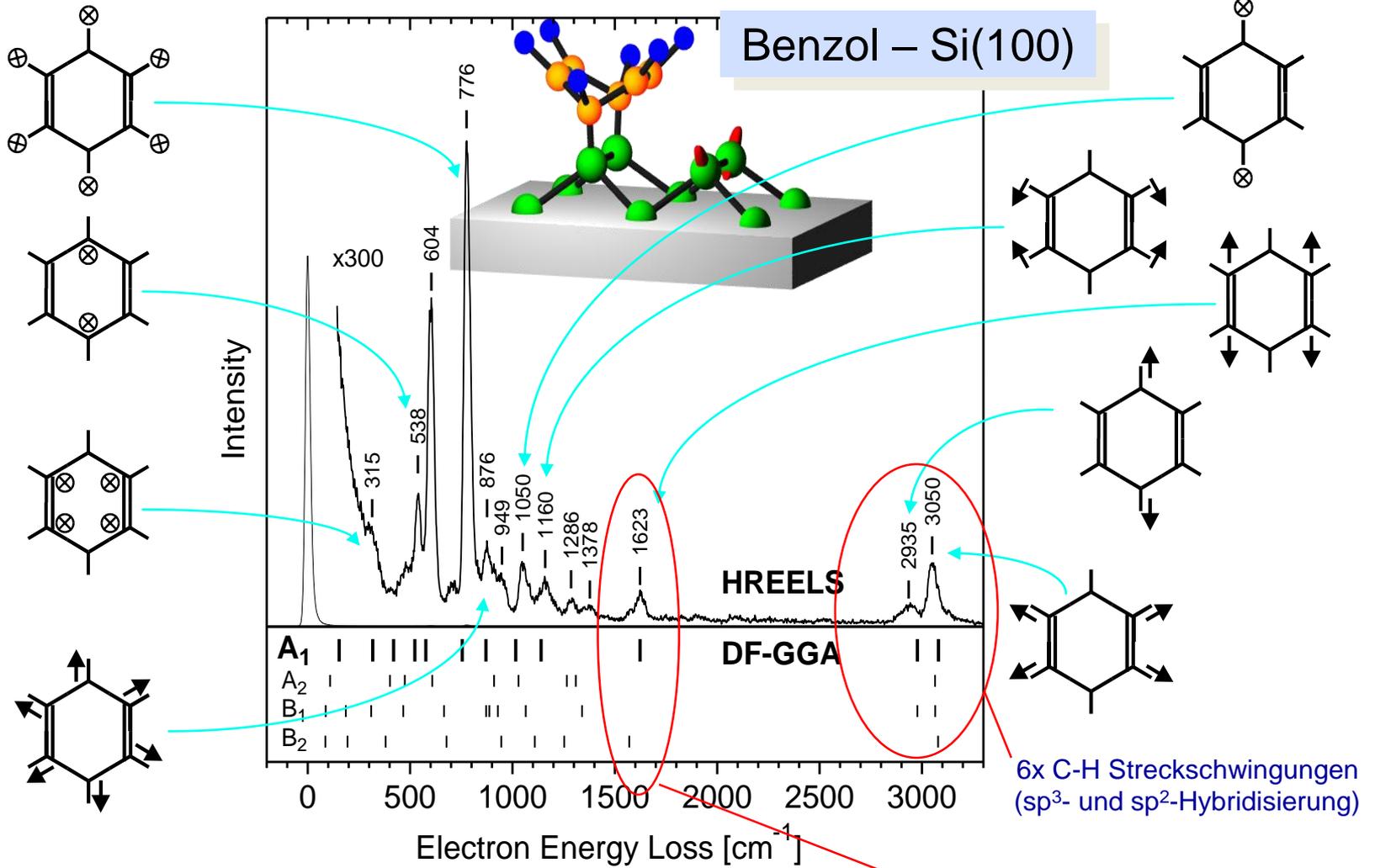
Kohn-Anomalie



BSp.:



HREELS: Beispiel Adsorption eines komplexeren Moleküls

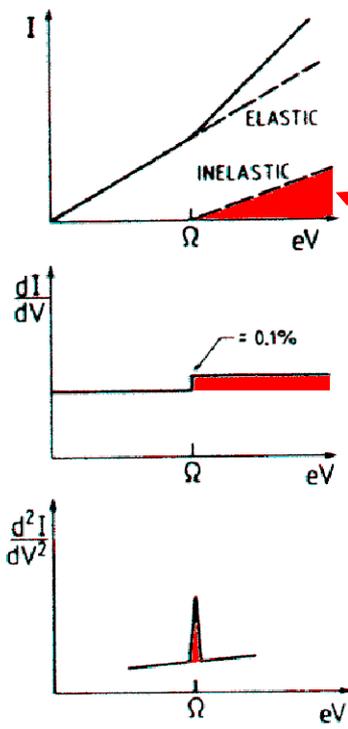
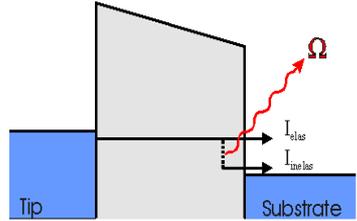


Stauer et al., JCP **112**, 2498-506 (2000).

C=C Streck-
schwingung

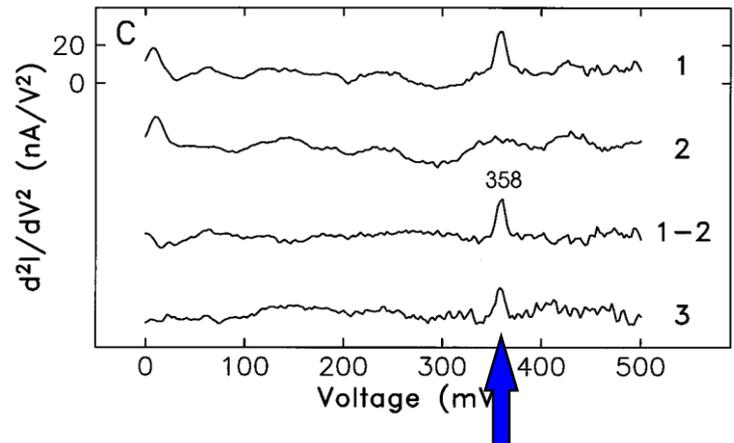
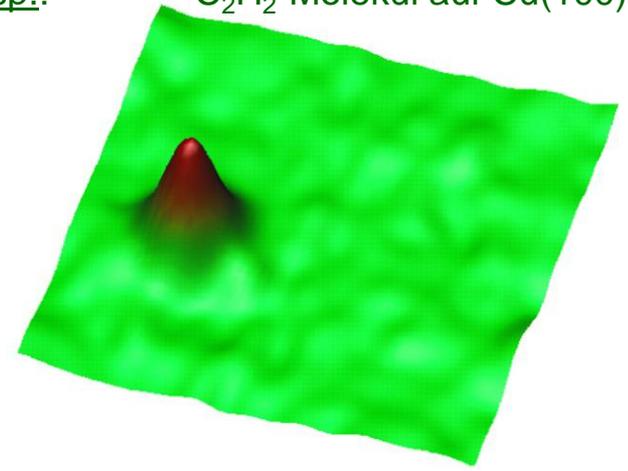
5.5 Phononen

Exp. Methoden: 3- Inelastische Tunnelspektroskopie (IETS)



Strom durch zusätzliche **inelastische Kanäle**

Bsp.: C₂H₂-Molekül auf Cu(100)



Stipe, Rezaei und Ho, Science **280**, 1732 (1998), Science **279**, 1907 (1998)

$\hbar\omega$ (C – H stretch)

5.5 Phononen

Exp. Methoden: 4- Optische Methoden

Alternativ: Anregungen aus dem Schwingungsgrundzustand in den angeregten Zustand können auch mit Licht (IR) erfolgen:

a) Infrarotabsorptionsspektroskopie (IRAS)

- Energiebereich $E \approx 100 - 1000 \text{ meV}$ (optimal auch $40 - 1000 \text{ meV}$) mit spektraler Auflösung $\Delta E \approx 0.1 \text{ meV}$
- Empfindlichkeit sehr hoch (allerdings können nur dipolaktive Moden angeregt werden)
- kein Impulsübertrag möglich
- auch bei hohen Drucken einsetzbar

Fouriertransform-Infrarotabsorptionsspektroskopie (FTIR)

(Anregung mit Weißlicht-Kontinuum (alle λ), Analyse der Absorption über Interferogramm)

b) Raman-Streuung

- Energiebereich $E \approx 10 - 1000 \text{ meV}$ mit spektraler Auflösung $\Delta E \approx 0.1 \text{ meV}$
- Empfindlichkeit meist gering; gut bei resonantem (langlebigen) Zwischenniveau (Halbleiter)
- kein Impulsübertrag möglich
- auch bei hohen Drucken einsetzbar

