

MAY 15 1967

BALC-E 66-0039

*Nicht im Handel*

Sonderabdruck aus Band XXIII, 1966, Heft 1-4, der

**ACTA PHYSICA AUSTRIACA**

Unter Mitwirkung der Österreichischen Akademie der Wissenschaften herausgegeben von  
Fritz Regler, Wien, und Hans Thirring, Wien  
Schriftleitung: Paul Urban, Graz

Springer-Verlag in Wien

Alle Rechte vorbehalten

Ewald Balcar

**Berechnung der Frequenz von lokalisierten  
Gitterschwingungen**

*Calculation of the Frequency of  
Localized Lattice Vibrations.*

# Berechnung der Frequenz von lokalisierten Gitterschwingungen\*

Von

Ewald Balcar

Physik-Institut, Reaktorzentrum Seibersdorf

## 1. Einführung

Durch die Substitution eines gitterfremden Atoms in einem ansonst regelmäßigen Kristall wird dessen Periodizität zerstört. Dadurch werden gleichzeitig die Eigenschwingungen und die dazugehörigen Eigenfrequenzen verändert [1, 2, 3].

Die Frequenzen des ungestörten Kristalls (eintomares, Bravaisches Gitter) liegen in einem relativ schmalen Bereich, dem (akustischen) Frequenzband. Je nach der Art des Defektatoms werden diese Eigenfrequenzen zu höheren oder tieferen Werten verschoben. Die Verschiebungen innerhalb des Frequenzbandes sind von der Größenordnung des Abstandes zwischen zwei Eigenfrequenzen [4].

Führt das Einbringen des Defekts zu einer Verschiebung zu höheren Frequenzen, dann kann es zu der interessanten Situation kommen, daß eine Frequenz auftritt, die für den betrachteten Kristall „zu hoch“ ist. Ebene Wellen dieser Frequenz werden vom Gitter nicht mehr transportiert. Die zu dieser Frequenz gehörige Eigenschwingung des gestörten Kristalls kann nicht mehr wellenförmig sein.

Die Verhältnisse bei einer linearen Kette von Atomen (mit Federkräften zwischen nächsten Nachbarn) mögen zur Veranschaulichung dienen: Die Dispersionsrelation lautet in diesem Fall [5]

$$\omega^2 = \frac{2\gamma}{m} (1 - \cos ka). \quad (1)$$

Man erhält diese Beziehung aus den Bewegungsgleichungen durch den Ansatz einer periodischen, wellenförmigen Bewegung der Atome der Ketten (Atome der Masse  $m$  im Abstand  $a$ ,  $\gamma$ -Kraftkonstante der Federbindung).

Die Amplitude des  $l$ -ten Atoms ist dabei durch

$$u_l = u_0 \cdot e^{-i\omega t} \cdot e^{ikla} \quad (2)$$

\* Vortrag, gehalten auf der Herbsttagung der Österreichischen Physikalischen Gesellschaft in Wien, 1965. — Diese Arbeit wurde teilweise durch einen Forschungsauftrag der U.S.-Regierung unterstützt.