ETH zürich

ETH Library

Gitterdynamik von Anthrazen

Doctoral Thesis

Author(s):
Lutz, Ulrich

Publication date:
1970

Permanent link:
https://doi.org/https://doi.org/10.3929/ethz-a-000093852

Rights / license:
In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

This page was generated automatically upon download from the ETH Zurich Research Collection.
For more information, please consult the Terms of use.

Diss. Nr. 4543

Gitterdynamik von Anthrazen

Abhandlung
zur Erlangung der Würde eines
Doktors der Naturwissenschaften

der

Eidgenössischen Technischen Hochschule
Zürich

vorgelegt von

Ulrich Lutz
dipl. Phys. ETH
geboren am 1. April 1941
von Basel und Thal, Kanton St. Gallen

Angenommen auf Antrag von
Prof. Dr. W. Hälg, Referent
Prof. Dr. F. Kneubühl, Korreferent

Würenlingen 1970
Hausdruckerei des Eidg. Instituts für Reaktorforschung

Eine andere Folge der Kopplung ist, dass sich die Polarisationen zum Teil wesentlich ändern (vergleiche Figur 7) und damit unsere Berechnungen des Strukturfaktors für diese Aeste ungültig werden.

5. Schlussbemerkungen

Der Vergleich von Messungen und Rechnungen an deuteriertem Anthrazen zeigt uns, dass unsere Vorstellungen von der Dynamik der Anthrazenmoleküle im Kristall im wesentlichen richtig sind. Wir sehen, dass einige der verwendeten Modelle die Messungen der niederfrequenten Moden recht gut erklären, im Gegensatz zu Pawley[1], der bei den Messungen am Naphthalin grosse Schwierigkeiten bei der Interpretation seiner anomalen Peaks hat (viel zu niedrige Frequenzen gegen den Zonenrand hin).

Die von uns festgestellten Unstimmigkeiten können zum Teil auf die folgenden Ursachen zurückgeführt werden:

1) Die internen Moden sind zum Teil nicht richtig identifiziert. Eine Verbesserung der IR - Messungen und der entsprechenden Interpretation ist daher notwendig.

2) In den Modellrechnungen werden nur die internen oder die externen Moden berechnet. Es wird jedoch nie die Kopplung zwischen internen und externen Auslenkungen berücksichtigt.

Unsere Messergebnisse werden die Schaffung neuer Modelle, die sowohl interne als auch externe Moden beschreiben, ermöglichen und erleichtern.

In unsern Diskussionen haben wir die Anharmonizität der Anthrazengitterschwingungen nur so weit berücksichtigt, als sie sich in einer Verbreiterung der Phononen äussert (Figur 18). Die Anharmonizität äussert sich jedoch auch in einer Verschiebung der Phononenfrequenzen zu tieferen Werten bei hohen Temperaturen (Figur 22). Bei den akustischen Aesten ist diese Aenderung nicht so gross (vgl. Figuren 19 und 20), so dass die Schallgeschwindigkeiten und damit die elastischen Konstanten innerhalb des Messfehlers gleich sind.

Auch bei den Berechnungen thermodynamischer Daten haben wir nur die harmonische Näherung berücksichtigt, so dass auch hier Abweichungen zwischen Rechnung und Messung zu erwarten sind.