

Zur Erweiterung der Poulet-Loudon-Näherung in der Theorie der optischen Gitterschwingungen

L. MERTEN und G. LAMPRECHT

Fachbereich Physik und Rechenzentrum der Universität Münster

(Z. Naturforsch. **26 a**, 215—219 [1971]; eingegangen am 20. November 1970)

In einachsigen Kristallen sind die Frequenzen der sog. außerordentlichen optischen Gitterschwingungen richtungsabhängig (Richtungsdispersion). Diese Richtungsabhängigkeit wurde in der Literatur bisher fast ausnahmslos durch die Poulet-Loudon-Näherung beschrieben. Im folgenden werden zwei erweiterte Näherungslösungen angegeben. Da inzwischen auch die exakten Lösungen (im Rahmen der harmonischen Näherung) bekannt sind, läßt sich die Genauigkeit dieser beiden Näherungen wie auch der Poulet-Loudon-Näherung jetzt gut beurteilen.

Als Beispiele werden je zwei Schwingungszweige starker Richtungsdispersion von α -Quarz und dem tetragonalem BaTiO₃ im einzelnen diskutiert.

I. Einleitung

Die Frequenzen der polaren ultrarot-aktiven Gitterschwingungen in ein- und zweiachsigen Kristallen zeigen eine mehr oder weniger stark ausgeprägte Richtungsabhängigkeit (Richtungsdispersion). Diese Richtungsdispersion läßt sich, wie in ¹ und später in ² gezeigt wurde, für Kristalle mit einer beliebigen Anzahl von Atomen in der Elementarzelle im Rahmen der harmonischen Näherung streng berechnen.

Im folgenden seien speziell einachsige Kristalle betrachtet, in denen nur die außerordentlichen Schwingungen richtungsabhängig sind. Für ihre Richtungsabhängigkeit gilt:

$$\varepsilon_{\parallel} s_{\parallel}^2 + \varepsilon_{\perp} s_{\perp}^2 = 0 \quad (1)$$

mit ³

$$\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\parallel}^{\infty} \frac{\prod_{k=1}^w ((\omega_{\parallel k}^1)^2 - \omega^2)}{\prod_{k=1}^w (\omega_{\parallel k}^2 - \omega^2)} \quad (1 \text{ a})$$

und entsprechend für ε_{\perp} . Die Dispersionsgleichung lautet daher ausführlich:

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{\parallel}^{\infty} s_{\parallel}^2 \prod_{j=1}^v (\omega_{\perp j}^2 - \omega^2) \prod_{k=1}^w ((\omega_{\parallel k}^1)^2 - \omega^2) \\ & + \varepsilon_{\perp}^{\infty} s_{\perp}^2 \prod_{j=1}^v ((\omega_{\perp j}^1)^2 - \omega^2) \prod_{k=1}^w (\omega_{\parallel k}^2 - \omega^2) = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Dabei bedeuten $s_{\parallel} = \cos \vartheta$, $s_{\perp} = \sin \vartheta$ die Richtungskosinus bezogen auf die optische Achse bzw.

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. L. MERTEN, Fachbereich Physik der Westfäl. Wilhelms-Universität, D-4400 Münster (Westf.), Schloßplatz 7.

¹ L. MERTEN, a) Habilitationsschrift Münster 1967; b) Z. Naturforsch. **22 a**, 359 [1967]; c) Phys. Stat. Sol. **25**, 125 [1968].

² R. LOUDON, in: Light Scattering Spectra of Solids, Proceedings of the International Scattering Spectra of Solids, Sept. 1968, Springer-Verlag, Berlin 1969, S. 25 ff.

eine dazu senkrechte Richtung, ε_{\parallel} bzw. ε_{\perp} bedeuten die Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstanten, $\omega_{\parallel k}^1$ bzw. $\omega_{\perp j}^1$ die Frequenzen der longitudinalen, $\omega_{\perp j}$ bzw. $\omega_{\parallel k}$ die Frequenzen der transversalen Schwingungen * bezogen auf diese Richtungen. ϑ ist dabei der Winkel zwischen Wellenvektor und optischer Achse.

Für Kristalle mit einer größeren Anzahl von Atomen in der Elementarzelle läßt sich Gl. (2) nicht explizit nach ω auflösen, so daß die exakten Lösungen von (2) nur numerisch angegeben werden können. Dies erschwert die praktische Handhabung der Gleichung für Kristalle mit einer größeren Anzahl von Atomen pro Elementarzelle.

Aus diesem Grunde interessiert die Frage, ob sich nicht explizite Näherungsausdrücke für ω aufstellen lassen, durch die die Dispersion schon hinreichend genau beschrieben wird.

Der einfachste, bisher in der Literatur fast ausschließlich benutzte Näherungsausdruck ist die Poulet-Loudon-Näherung ^{4, 5}:

$$\omega^2 = \omega_a^2 \cos^2 \vartheta + \omega_b^2 \sin^2 \vartheta. \quad (3)$$

Dabei bedeuten ω_a entweder eine der Frequenzen $\omega_{\perp j}$ oder $\omega_{\parallel k}^1$ und ω_b eine der Frequenzen $\omega_{\parallel k}$ oder $\omega_{\perp j}^1$. Gleichung (1) umfaßt also die folgenden vier Möglichkeiten, wobei die zu dem betrachteten Zweig gehörigen Frequenzen durch $j=J$ bzw. $k=K$ gekennzeichnet seien:

³ T. KUROSAWA, J. Phys. Soc. Japan **16**, 1298 [1961].

* Der elektrische Vektor, auf den sich der Index \perp bzw. \parallel bezieht, liegt bei den transversalen Schwingungen in der jeweils anderen Hauptrichtung.

⁴ H. POULET, a) C. R. Acad. Sci. Paris **234**, 2185 [1952]; b) Ann. Phys. Paris **10**, 908 [1955].

⁵ R. LOUDON, Adv. Phys. **13**, 423 [1964], speziell S. 429 bis 434.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

$$\begin{aligned}
 (t \rightarrow l) \text{-Zweig: } & \omega_\alpha = \omega_{\perp J}, \quad \omega_\beta = \omega_{\perp J}^1, \\
 (l \rightarrow t) \text{-Zweig: } & \omega_\alpha = \omega_{\parallel K}^1, \quad \omega_\beta = \omega_{\parallel K}, \\
 (t \parallel t) \text{-Zweig: } & \omega_\alpha = \omega_{\perp J}, \quad \omega_\beta = \omega_{\parallel K}, \\
 (l \parallel l) \text{-Zweig: } & \omega_\alpha = \omega_{\parallel K}^1, \quad \omega_\beta = \omega_{\perp J}. \tag{4}
 \end{aligned}$$

Für außerordentliche optische Zweige mit sehr geringer Dispersion stellt die Poulet-Loudon-Näherung bereits eine gute Näherung dar (vgl. z. B. ⁶ und ⁷). Offensichtlich ergibt sich die Poulet-Loudon-Näherung aus der exakten Gl. (2), indem man dort $\varepsilon_{\parallel}^{\infty} = \varepsilon_{\perp}^{\infty}$ setzt und ebenfalls die Frequenzen $\omega_{\perp j}$, $\omega_{\parallel k}$ und $\omega_{\perp j}^1$, $\omega_{\parallel k}$ als paarweise gleich annimmt, mit Ausnahme von $\omega_\alpha = \omega_{\perp J}$ bzw. $= \omega_{\parallel K}^1$ und $\omega_\beta = \omega_{\parallel K}$ bzw. $= \omega_{\perp J}^1$.

Für Zweige mit starker Richtungsdispersion ist die Poulet-Loudon-Näherung jedoch im allgemeinen keine gute Näherung. Solche Zweige starker Dispersion wurden z. B. in α -Quarz ⁸, LiJO_3 ⁹ und im tetragonalen BaTiO_3 ¹⁰ gefunden. Insbesondere ist für die Zweige der außerordentlichen soft-mode der Ferroelektrika unterhalb des Curie-Punktes eine im allgemeinen extrem starke Richtungsdispersion zu erwarten.

An Hand einiger Zweige starker Dispersion im α -Quarz und im tetragonalen BaTiO_3 sollen im letzten Abschnitt schließlich die verschiedenen Näherungslösungen miteinander verglichen werden.

II. Lineare und quadratische Approximation

a) Lineare Approximation

Die Frequenzen ω_α und ω_β seien wie oben definiert. In der Bestimmungsgleichung (2) ersetzen wir in allen Faktoren mit Ausnahme der Faktoren $\omega_\alpha^2 - \bar{\omega}^2$, $\omega_\beta^2 - \bar{\omega}^2$ die Frequenz ω durch einen geeigneten Mittelwert $\bar{\omega}$, z. B. durch *

$$\bar{\omega} = \frac{1}{2} (\omega_\alpha + \omega_\beta), \tag{5}$$

so daß Gl. (2) übergeht in die Näherung:

$$d_{\parallel}^{(m)} s_{\parallel}^2 (\omega_\alpha^2 - \bar{\omega}^2) + d_{\perp}^{(n)} s_{\perp}^2 (\omega_\beta^2 - \bar{\omega}^2) = 0 \tag{6}$$

mit $m, n = 1, 2$.

* Die Näherung ist gegenüber der speziellen Art der Mittelwertbildung relativ unempfindlich, so daß man statt (5) z. B. auch den arithmetischen Mittelwert der Frequenzquadrate $\bar{\omega}^2 = \frac{1}{2} (\omega_\alpha^2 + \omega_\beta^2)$ oder das geometrische Mittel $\bar{\omega} = \sqrt{\omega_\alpha \cdot \omega_\beta}$ wählen könnte. Falls im Einzelfall sinnvoll, kann man in $d_{\parallel}^{(m)}$ und $d_{\perp}^{(n)}$ auch verschiedene Mittelwerte $\bar{\omega}_\alpha$ und $\bar{\omega}_\beta$ einführen, ohne daß sich an der Gestalt von Gl. (8) etwas ändert.

⁶ a) T. C. DAMEN, S. P. S. PORTO u. B. TELL, Phys. Rev. **142**, 570 [1966]; b) C. A. ARGUELLO, D. L. ROUSSEAU u. S. P. S. PORTO, Phys. Rev. **181**, 1351 [1969].

Dabei wurde zur Abkürzung gesetzt:

$$d_{\parallel}^{(1)} = \varepsilon_{\parallel}^{\infty} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq J}}^v (\omega_{\perp j}^2 - \bar{\omega}^2) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq K}}^w ((\omega_{\parallel k}^1)^2 - \bar{\omega}^2), \tag{7 a}$$

$$d_{\parallel}^{(2)} = \varepsilon_{\parallel}^{\infty} \prod_{j=1}^v (\omega_{\perp j}^2 - \bar{\omega}^2) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq K}}^w ((\omega_{\parallel k}^1)^2 - \bar{\omega}^2) \tag{7 a}$$

und

$$d_{\perp}^{(1)} = \varepsilon_{\perp}^{\infty} \prod_{j=1}^v ((\omega_{\perp j}^1)^2 - \bar{\omega}^2) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq K}}^w (\omega_{\parallel k}^2 - \bar{\omega}^2), \tag{7 b}$$

$$d_{\perp}^{(2)} = \varepsilon_{\perp}^{\infty} \prod_{j=1}^v ((\omega_{\perp j}^1)^2 - \bar{\omega}^2) \prod_{\substack{k=1 \\ j \neq J}}^w (\omega_{\parallel k}^2 - \bar{\omega}^2). \tag{7 b}$$

Aus Gl. (6) ergibt sich daher die Näherungslösung ($s_{\parallel} = \cos \vartheta$, $s_{\perp} = \sin \vartheta$):

$$\omega^2(\vartheta) = \frac{d_{\parallel}^{(m)} \omega_\alpha^2 \cos^2 \vartheta + d_{\perp}^{(n)} \omega_\beta^2 \sin^2 \vartheta}{d_{\parallel}^{(m)} \cos^2 \vartheta + d_{\perp}^{(n)} \sin^2 \vartheta} \quad (m, n = 1, 2). \tag{8}$$

Durch die eingeführte Näherung sind die Eigenfrequenzen des Systems von $v + w$ Schwingungsgleichungen nach Gl. (8) auf die Eigenfrequenzen formal entkoppelter Schwingungsgleichungen reduziert worden. Die Kopplung mit den anderen Gitterschwingungen drückt sich implizit nur noch in den Koeffizienten $d_{\parallel}^{(m)}$ und $d_{\perp}^{(n)}$ aus.

Im Spezialfall $d_{\parallel}^{(m)} = d_{\perp}^{(n)}$ geht Gl. (8) offensichtlich in die Poulet-Loudon-Näherung über.

b) Quadratische Approximation

Wennleich in den meisten Fällen die lineare Approximation bereits eine hinreichend gute Näherung darstellt, so läßt sich im allgemeinen die Genauigkeit durch Übergang zu einer quadratischen Näherung noch erheblich steigern, ohne daß der Rechenaufwand sich dabei wesentlich erhöht. Eine wesentliche Verbesserung ist vor allem dann zu erwarten, wenn zwei Zweige starker Dispersion sehr eng beieinander liegen (Beispiel: Zweig 5 und Zweig 6 in α -Quarz).

⁷ J. F. SCOTT u. S. P. S. PORTO, Phys. Rev. **161**, 903 [1967].

⁸ L. MERTEN, Phys. Stat. Sol. **28**, 111 [1968].

⁹ a) W. OTAGURA, C. A. ARGUELLO u. S. P. S. PORTO, Phys. Rev. **B 1**, 2818 [1970]; b) R. CLAUS, private Mitteilung.

¹⁰ a) A. PINCZUK, W. TAYLOR, E. BURSTEIN u. I. LEFKOWITZ, Solid State Commun. **5**, 429 [1967]; b) L. MERTEN, Phys. Stat. Sol. **25**, 125 [1968]; c) L. MERTEN, Proceedings of the European Meeting on Ferroelectricity, Saarbrücken 1969, Wissenschaftliche Verlagsanstalt mbH Stuttgart 1970, S. 273.

Unter quadratischer Näherung soll dabei diejenige Näherung verstanden sein, die man erhält, wenn in Gl. (2) ω nur in den je zwei Faktoren, die zu den beiden betrachteten Zweigen gehören, variabel gelassen wird, in allen anderen Faktoren jedoch wieder durch einen geeigneten Mittelwert ersetzt wird.

Um in der Bezeichnung nicht unnötige Fallunterscheidungen treffen zu müssen, denken wir uns in Gl. (2) alle Frequenzen $\omega_{\perp j}$, $\omega_{\parallel k}^l$ der Größe nach geordnet und als ω_n fortlaufend durchnumeriert, entsprechend alle $\omega_{\parallel k}$, $\omega_{\perp j}^l$ als ω_m durchnumeriert. Mit diesen Bezeichnungen lautet dann Gl. (2) :

$$\varepsilon_{\parallel}^{\infty} s_{\parallel}^2 \prod_{n=1}^{v+w} (\omega_n^2 - \omega^2) + \varepsilon_{\perp}^{\infty} s_{\perp}^2 \prod_{m=1}^{v+w} (\omega_m^2 - \omega^2) = 0. \quad (2a)$$

Bezeichnen wir die zwei Frequenzen aus den $\{\omega_n\}$, die zu den betrachteten Zweigen gehören, mit ω_{α_1} und ω_{α_2} , die zwei aus den $\{\omega_m\}$ mit ω_{β_1} , ω_{β_2} , so ergibt sich aus Gl. (2) als quadratische Näherung:

$$D_{\parallel} s_{\parallel}^2 (\omega_{\alpha_1}^2 - \omega^2) (\omega_{\alpha_2}^2 - \omega^2) + D_{\perp} s_{\perp}^2 (\omega_{\beta_1}^2 - \omega^2) (\omega_{\beta_2}^2 - \omega^2) = 0 \quad (9)$$

Tab. 1. Richtungsdispersion der außerordentlichen optischen Phononen von α -Quarz (Zweige 5 und 6).

ϑ	Zweig 5 ω in cm^{-1}							Zweig 6 ω in cm^{-1}									
	Poulet- Loudon- exakt nach Gl. (2)		Näherg. nach Gl. (3)		Nähe- rung I nach Gl. (8)			Nähe- rung II nach Gl. (10)			Poulet- Loudon- exakt nach Gl. (2)		Näherg. nach Gl. (3)		Nähe- rung I nach Gl. (8)		
	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	Δ	
0°	450,0	450,0	0	450,0	0	450,0	0	547,7	547,7	0	547,7	0	547,7	0	547,7	0	
10°	451,0	451,4	-0,4	450,8	+0,2	451,0	0,0	547,2	546,6	+0,6	547,2	0,0	546,8	+0,4			
20°	453,7	455,5	-1,8	453,1	+0,6	453,8	-0,1	545,2	543,4	+1,8	545,5	-0,3	544,9	+0,3			
30°	458,1	461,7	-3,6	457,0	+1,1	458,3	-0,2	541,8	538,5	+3,3	542,6	-0,8	541,4	+0,4			
40°	463,7	469,1	-5,4	462,6	+1,1	464,0	-0,3	537,7	532,4	+5,3	538,4	-0,7	536,9	+0,8			
50°	470,2	476,9	-6,7	469,8	+0,4	470,6	-0,4	532,3	525,8	+6,5	532,6	-0,3	531,5	+0,8			
60°	477,3	484,1	-6,8	478,1	-0,8	477,7	-0,4	526,1	519,5	+6,6	525,6	+0,5	525,5	+0,6			
70°	484,7	489,9	-5,2	486,3	-1,6	485,0	-0,3	519,7	514,4	+5,3	518,2	+1,5	519,1	+0,6			
80°	491,5	493,7	-3,2	492,6	-1,1	491,6	-0,1	513,4	511,0	+2,4	512,2	+1,2	513,0	+0,4			
90°	495,0	495,0	0	495,0	0	495,0	0	509,8	509,8	0	509,8	0	509,8	0			

Erläuterungen zu Tab. 1: Δ gibt den absoluten Fehler gegenüber der exakten Lösung (jeweils erste Spalte) an. Als Mittelwerte der Näherung I wurden benutzt:

$$\text{Zweig 5: } \bar{\omega} = \frac{\omega_{\alpha} + \omega_{\beta}}{2} = \frac{\omega_{\perp 4} + \omega_{\parallel 2}}{2} = 472,5 \text{ cm}^{-1},$$

$$\text{Zweig 6: } \bar{\omega} = \frac{\omega_{\alpha} + \omega_{\beta}}{2} = \frac{\omega_{\parallel 2} + \omega_{\perp 4}}{2} = 523,8 \text{ cm}^{-1},$$

und als Mittelwerte der Näherung II:

$$\bar{\omega}_{\parallel} = \frac{\omega_{\alpha 1} + \omega_{\alpha 2}}{2} = \frac{\omega_{\perp 4} + \omega_{\parallel 2}}{2} = 498,9 \text{ cm}^{-1}, \quad \bar{\omega}_{\perp} = \frac{\omega_{\beta 1} + \omega_{\beta 2}}{2} = \frac{\omega_{\parallel 2} + \omega_{\perp 4}}{2} = 502,4 \text{ cm}^{-1}.$$

Bezeichnungen $\omega_{\parallel 2}$, $\omega_{\perp 4}$, $\omega_{\perp 4}$, $\omega_{\parallel 2}$ nach Tab. 1 und Tab. 2 (S. 115/116) in ⁸.

mit

$$D_{\parallel} = \varepsilon_{\parallel}^{\infty} \prod_{n=1}^{v+w} (\omega_n^2 - \bar{\omega}_{\parallel}^2) \quad \text{und} \quad D_{\perp} = \varepsilon_{\perp}^{\infty} \prod_{m=1}^{v+w} (\omega_m^2 - \bar{\omega}_{\perp}^2). \quad (10)$$

Die Mittelwerte $\bar{\omega}_{\parallel}$, $\bar{\omega}_{\perp}$ brauchen dabei nicht notwendig als gleich angesehen zu werden.

Die beiden Lösungen der quadratischen Gl. (9) lauten:

$$\omega_{1,2}^2(\vartheta) = \frac{1}{2} (A \pm \sqrt{A^2 - 4B}) \quad (10)$$

mit

$$A = \frac{D_{\parallel} (\omega_{\alpha 1}^2 + \omega_{\alpha 2}^2) \cos^2 \vartheta + D_{\perp} (\omega_{\beta 1}^2 + \omega_{\beta 2}^2) \sin^2 \vartheta}{D_{\parallel} \cos^2 \vartheta + D_{\perp} \sin^2 \vartheta}$$

und

$$B = \frac{D_{\parallel} \omega_{\alpha 1}^2 \omega_{\alpha 2}^2 \cos^2 \vartheta + D_{\perp} \omega_{\beta 1}^2 \omega_{\beta 2}^2 \sin^2 \vartheta}{D_{\parallel} \cos^2 \vartheta + D_{\perp} \sin^2 \vartheta}.$$

III. Diskussion und Anwendung auf α -Quarz und BaTiO₃

Beispiele für Zweige starker Dispersion sind die Zweige 5 und 6 von α -Quarz und die Zweige 1 und 3 vom tetragonalen BaTiO₃.

Die verschiedenen Näherungen sind für diese Zweige zusammen mit der exakten Lösung in Abb. 1 und Abb. 2 dargestellt, mit den numerischen Werten

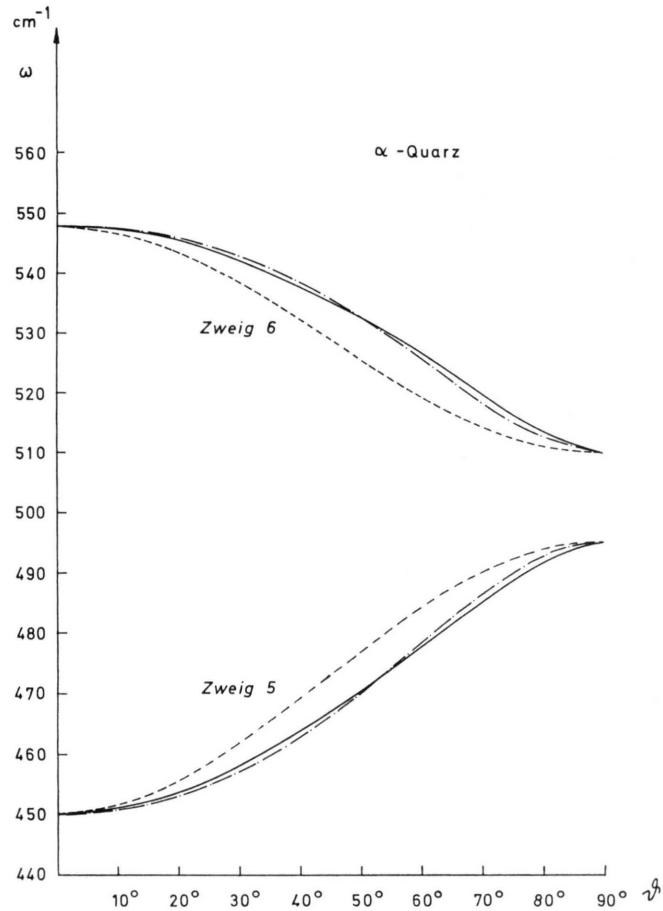


Abb. 1. Richtungsdispersion der außerordentlichen optischen Phononen von α -Quarz nach Tab. 1 (Zweige 5 und 6):

- : strenge Lösung;
- - - : Poulet-Loudon-Näherung;
- · - - : lineare Approximation (Näherung I).

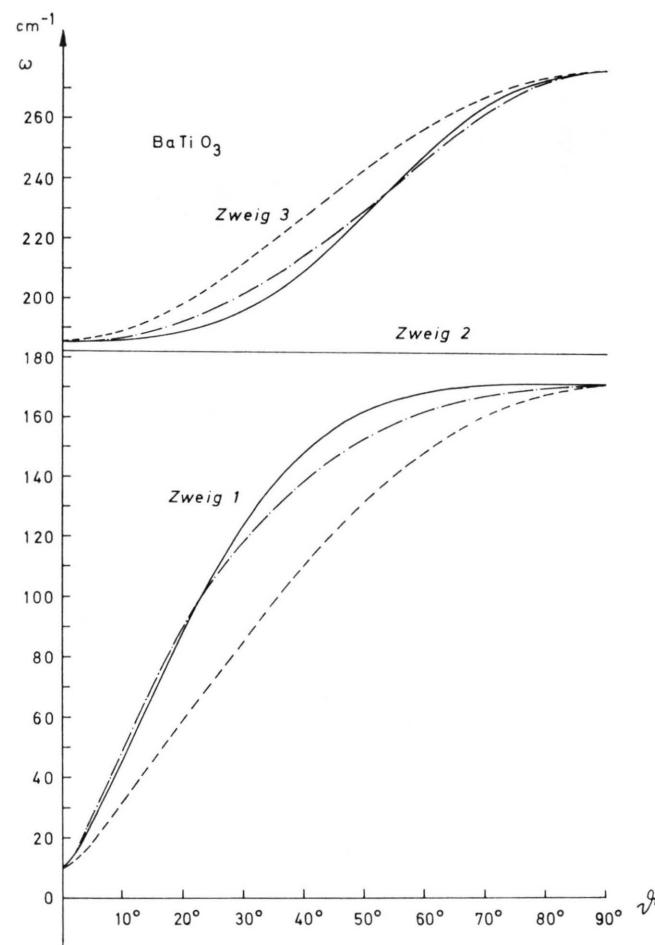


Abb. 2. Richtungsdispersion der außerordentlichen optischen Phononen des tetragonalen BaTiO_3 nach Tab. 2 (Zweige 1, 2 und 3):

- : strenge Lösung;
- - - : Poulet-Loudon-Näherung;
- · - - : lineare Approximation (Näherung I).

Tab. 2. Richtungsdispersion der außerordentlichen optischen Phononen des tetragonalen BaTiO₃ (Zweige 1, 2 und 3).

ϑ	Zweig 1						Zweig 3						Zweig 2	
	exakt nach Gl. (2)			ω in cm ⁻¹			exakt nach Gl. (2)			ω in cm ⁻¹			ω in cm ⁻¹	
	Poulet-Loudon-Näherung n. Gl. (3)	Δ	Näherung I n. Gl. (8)	Δ	Poulet-Loudon-Näherung n. Gl. (3)	Δ	Näherung I n. Gl. (8)	Δ	exakt nach Gl. (2)	Δ	Näherung I n. Gl. (8)	Δ	exakt nach Gl. (2)	Δ
0°	10,0	10,0	0	10,0	0	185,0	185,0	0	185,0	0	185,0	0	182,0	
10°	46,3	31,1	+15,2	48,7	-2,4	186,0	188,3	-2,3	186,8	-0,8	181,8			
20°	88,2	58,9	+29,3	88,3	-0,1	188,9	197,7	-8,8	192,1	-3,2	181,3			
30°	123,9	85,4	+38,5	117,9	+6,0	195,2	211,1	-15,9	201,0	-5,8	180,9			
40°	148,5	109,5	+39,0	138,2	+10,3	208,0	226,6	-18,6	213,1	-5,1	180,7			
50°	160,8	130,4	+30,4	151,8	+9,0	227,3	241,9	-14,6	227,9	-0,6	180,4			
60°	166,2	147,3	+18,9	160,6	+5,6	246,9	255,5	-8,6	244,0	+2,6	180,3			
70°	168,6	159,8	+8,8	166,1	+2,5	262,3	266,0	-3,7	259,4	+2,9	180,1			
80°	169,7	167,4	+2,3	169,1	+0,6	271,9	272,7	-0,8	270,8	+1,1	180,0			
90°	170,0	170,0	0	170,0	0	275,0	275,0	0	275,0	0	275,0	0	180,0	

Erläuterungen zu Tab. 2: Δ gibt den absoluten Fehler gegenüber der exakten Lösung (jeweils erste Spalte) an. Als Mittelwerte der Näherung I wurden benutzt:

$$\text{Zweig 1: } \bar{\omega} = \frac{\omega_\alpha + \omega_\beta}{2} = \frac{\omega_{\perp 1} + \omega_{\parallel 1}}{2} = 90 \text{ cm}^{-1},$$

$$\text{Zweig 3: } \bar{\omega} = \frac{\omega_\alpha + \omega_\beta}{2} = \frac{\omega_{\parallel 1}^1 + \omega_{\parallel 2}}{2} = 230 \text{ cm}^{-1}.$$

Bezeichnungen $\omega_{\perp 1}$, $\omega_{\parallel 1}$, $\omega_{\parallel 1}^1$, $\omega_{\parallel 2}$ nach Tab. 1, S. 127, in ^{10b}.

nach Tab. 1 und Tab. 2. Als Eingangswerte wurden dabei die Werte nach ⁸, Tab. 1 und Tab. 2, und nach ^{10c}, Tab. I, benutzt. Wegen der verwendeten Mittelwerte vgl. die Abbildungsunterschriften.

Wie man sieht, stellt die lineare Approximation gegenüber der Poulet-Loudon-Näherung eine wesentliche Verbesserung dar. Man kann daher Gl. (8) auch dazu benutzen, um empirisch gewonnene Dispersionskurven $\omega(\vartheta)$ theoretisch darzustellen. Gegenüber den zwei Parametern ω_α , ω_β in der Poulet-

Loudon-Näherung hat man dabei zusätzlich die beiden Parameter $d_{\parallel}^{(m)}$ und $d_{\perp}^{(n)}$ anzupassen.

Für α -Quarz ist in Tab. 2 ebenfalls die quadratische Näherung eingetragen. In der graphischen Darstellung unterscheidet sie sich im Rahmen der Zeichengenauigkeit bereits nicht mehr von der exakten Lösung. Die quadratische Näherung lässt sich auf das BaTiO₃ nicht anwenden, weil die Zweige starker Dispersion (Zweige 1 und 3) nicht direkt benachbart sind.