

Zustandsdichte von Polaritonen in kubischen und einachsigen Kristallen *

K. Rath (a), G. Borstel (a), G. Lamprecht (b) und L. Merten (a)

Fachbereich Physik der Universität Münster (a)
Rechenzentrum der Universität Bremen (b)

(Z. Naturforsch. **30 a**, 1385–1394 [1975]; eingegangen am 31. Mai 1975)

Density of States of Polaritons in Cubic and Uniaxial Crystals

The density of states of polaritons in cubic and uniaxial crystals is calculated. It is shown that closed mathematical expressions for the density of states of polaritons may be given. For uniaxial crystals the density of states of ordinary and extraordinary polaritons must be distinguished. With respect to extraordinary polaritons four different cases are possible.

I. Einleitung

Unter einem Polariton versteht man nach Hopfield¹ ein Polarisationsquant, das mit einem Lichtquant gekoppelt ist. Ist das Polarisationsquant speziell ein (ultrarot-aktives langes optisches) Phonon, so spricht man von einem Phonon-Polariton.

Die Zustandsdichte dieser Phonon-Polaritonen soll im folgenden behandelt werden. Wenn wir dabei kurz vor Polaritonen sprechen, so sollen damit immer Phonon-Polaritonen gemeint sein. Wegen der Eigenschaften der Phonon-Polaritonen im einzelnen sei auf die Literatur verwiesen^{2–4}.

Bisher lag das Schwergewicht des Interesses an den Polaritonen auf den Eigenschaften der stationären Zustände. In zunehmendem Maße werden jedoch auch Wechselwirkungsprozesse, bei denen Polaritonen erzeugt oder vernichtet werden, untersucht. Für die quantitative Berechnung solcher Wechselwirkungsprozesse ist jedoch die Kenntnis der Zustandsdichte der Polaritonen erforderlich.

Wir berechnen im folgenden die Zustandsdichte in kubischen und einachsigen Kristallen. Bei den einachsigen Kristallen hat man die Zustandsdichte der ordentlichen und außerordentlichen Polaritonen zu unterscheiden. Bei den außerordentlichen Polaritonen sind überdies vier wesentlich verschiedene Frequenzbereiche zu unterscheiden, je nachdem, ob a) $\varepsilon_{\perp}(\omega) > 0$, $\varepsilon_{\parallel}(\omega) > 0$, b) $\varepsilon_{\perp}(\omega) < 0$, $\varepsilon_{\parallel}(\omega) > 0$, c) $\varepsilon_{\perp}(\omega) > 0$, $\varepsilon_{\parallel}(\omega) < 0$, d) $\varepsilon_{\perp}(\omega) < 0$, $\varepsilon_{\parallel}(\omega) < 0$ gilt. Hierbei bedeuten $\varepsilon_{\perp}(\omega)$ und $\varepsilon_{\parallel}(\omega)$ die dielektrischen Funktionen senkrecht (\perp) und parallel (\parallel) zur optischen Achse.

Sonderdruckanforderungen an Prof. L. Merten, Physikalisches Institut der Universität, D-4400 Münster (Westf.), Schloßplatz 7.

Zur Berechnung der Zustandsdichte von Phononen benötigt man im allgemeinen numerische Verfahren, da sich geschlossene Ausdrücke für die Zustandsdichte nicht angeben lassen. Wie im folgenden jedoch gezeigt werden soll, lässt sich die Zustandsdichte der Polaritonen durch geschlossene Ausdrücke darstellen. Wir schließen uns dabei der allgemeinen Definition einer Zustandsdichte von Quasiteilchen im Festkörper an (vgl. z. B.⁵, S. 219, und⁶, S. 46): Die Zustandsdichte $Z(\omega)$ der Polaritonen ist die Zahl der Schwingungszustände der Polaritonen pro Einheitsfrequenzintervall, dividiert durch die Gesamtzahl $N(k_m)$ der Zustände in dem betrachteten Bereich im \mathbf{k} -Raum und dividiert durch die Anzahl r der Dispersionskurven:

$$Z(\omega) d\omega = A \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega}^{\omega + d\omega} d^3k \quad (1)$$

mit $A = 1/r N(k_m)$ (1 a)

und $N(k_m) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_m^3$. (1 b)

k_m ist dabei der Betrag eines Grenzwellenvektors \mathbf{k}_m , der den Polariton-Bereich im \mathbf{k} -Raum abgrenzt. Auf seine genaue Bedeutung und Wahl werden wir später noch eingehen. Führt man dS_{ω} als Oberflächenelement auf den Flächen konstanter Frequenz ω ein, so lässt sich die Zustandsdichte auch in der Form darstellen

$$Z(\omega) = A \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS_{\omega}}{|\nabla_{\mathbf{k}} \omega|} \quad (2)$$

Die Zustandsdichte ist dabei so normiert, daß

$$\int_0^{\omega_m} Z(\omega) d\omega = 1, \quad (3)$$

* Diese Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziell unterstützt.



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.

wobei ω_m die Frequenz zum Grenzwellenvektor \mathbf{k}_m auf dem obersten Polariton-Zweig (Lichtzweig) ist.

II. Zustandsdichte der Polaritonen in kubischen Kristallen

In kubischen Kristallen sind die Polaritonen entweder streng transversal oder streng longitudinal. Die Dispersionsrelation für die transversalen Polaritonen ist gegeben durch

$$n^2 \equiv c^2 k^2 / \omega^2 = \varepsilon(\omega), \quad (4 \text{ a})$$

wobei wir für die dielektrische Funktion $\varepsilon(\omega)$ die Darstellung nach Kurosawa⁷ benutzen:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon^\infty \prod_{j=1}^n [(\omega_j^1)^2 - \omega^2] / \prod_{j=1}^n [(\omega_j^t)^2 - \omega^2]. \quad (4 \text{ b})$$

Die Dispersionsrelation für die longitudinalen Schwingungen wird dagegen gegeben durch

$$\omega = \omega_j^1 \quad (j = 1, 2, \dots, n), \quad (5)$$

d. h. die Dispersionszweige sind horizontale Geraden. ω_j^t sind dabei die Frequenzen der transversalen langen optischen Gitterschwingungen (Dispersionsfrequenzen), ω_j^1 die der longitudinalen Gitterschwingungen.

Die Frequenzen erfüllen die Anordnungsrelation

$$\omega_{j-1}^t < \omega_{j-1}^1 < \omega_j^t < \omega_j^1 < \omega_{j+1}^t < \omega_{j+1}^1. \quad (6)$$

Da die Dispersionszweige der longitudinalen Schwingungen nach Gl. (5) streng horizontal verlaufen, wird ihre Zustandsdichte durch δ -Funktionen beschrieben:

$$Z_P^1(\omega) = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^n \delta(\omega - \omega_j^1), \quad (7)$$

wobei der Faktor $1/r$ wegen der Normierungsbedingung nach Gl. (3) hinzuzufügen ist. $r = 3n + 2$ ist dabei die Gesamtzahl der Polariton-Zweige.

Wir wenden uns nun der Zustandsdichte der transversalen Polaritonen zu. Die Dispersionskurven $\omega(k)$ der transversalen Schwingungen hängen nach Gl. (4) nur vom Betrage k , nicht von der Richtung des Wellenvektors \mathbf{k} ab. Daher sind die Flächen $\omega(k) = \text{const.}$ Oberflächen von Kugeln im \mathbf{k} -Raum um den Ursprung mit dem Radius k . Da nach Gl. (4)

$$|\nabla_{\mathbf{k}} \omega| = \left| \frac{1}{k/\omega - \omega k D(\omega)} \right|, \quad (8)$$

wobei

$$D(\omega) \equiv \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{1}{(\omega_j^1)^2 - \omega^2} - \frac{1}{(\omega_j^t)^2 - \omega^2} \right\}, \quad (8 \text{ a})$$

folgt für die Zustandsdichte (2) der transversalen Polaritonen (hier ist zunächst nur ein Freiheitsgrad berücksichtigt):

$$Z_P^t(\omega) = \frac{n+1}{r} A \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{k}} \omega|} \int dS_\omega \\ = \frac{n+1}{r} A \frac{V}{(2\pi)^3} \left| \frac{k}{\omega} - \omega k D(\omega) \right| 4\pi k^2 \quad (9)$$

oder schließlich wegen $k = (\omega/c) \sqrt{\varepsilon(\omega)}$

$$Z_P^t(\omega) = \frac{n+1}{r} A \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3} \\ \cdot [\varepsilon(\omega)]^{3/2} [1 - \omega^2 D(\omega)]. \quad (10)$$

Der Faktor $(n+1)/r$ ist wieder wegen der Normierungsbedingung hinzuzufügen.

In den Frequenzintervallen $\omega_j^t < \omega < \omega_j^1$ wird $\varepsilon(\omega)$ nach Gl. (4 b) negativ, d. h. $Z_P^t(\omega)$ nach (10) formal rein imaginär. Da zu negativem $\varepsilon(\omega)$ jedoch keine reellen \mathbf{k} -Vektoren gehören, liegen in diesen Intervallen keine Zustände, d. h. in diesen Intervallen ist zu setzen:

$$Z_P^t(\omega) = 0. \quad (11)$$

In den Intervallen

$$\omega_j^1 < \omega < \omega_{j+1}^t$$

ist dagegen $\varepsilon(\omega) > 0$ und ebenfalls $1 - \omega^2 D(\omega) > 0$. Letzteres folgt daraus, daß $D(\omega)$ im ganzen Intervall nach Gl. (8 a) negativ ist (denn jeder Summand einzeln ist negativ). Nach Gl. (10) existiert daher eine (positiv reelle) Zustandsdichte.

Für die Anwendungen ist Gl. (10) noch etwas genauer zu betrachten:

Für $\omega = \omega_j^1$ wird $Z_P^t(\omega_j^1) = 0$. [Der Pol von $D(\omega)$ wird durch die Nullstelle von $[\varepsilon(\omega)]^{3/2}$ kompensiert, unmittelbar oberhalb ω_j^1 verhält sich $-[\varepsilon(\omega)]^{3/2} D(\omega)$ wie $V(\omega_j^1)^2 - \omega^2$.] Bei $\omega = \omega_{j+1}^t$ liegt jedoch eine Polstelle [sowohl $\varepsilon(\omega)$ wie $D(\omega)$ besitzen einen Pol], die nicht normierbar ist. Tatsächlich darf $Z_P^t(\omega)$ jedoch auch gar nicht bis $\omega = \omega_{j+1}^t$ fortgesetzt werden, weil die Polariton-Zweige überhaupt nur bis $k_m \lesssim 10^7 \text{ cm}^{-1}$ physikalisch realistisch sind. Die Fortsetzung bis $\omega = \omega_{j+1}^t$ würde aber bedeuten, daß die Polariton-Zweige sich bis $\mathbf{k} = \infty$ erstrecken. Die Funktion $Z_P^t(\omega)$ ist also jeweils etwas unterhalb der Pole bei $\omega = \omega_{j+1}^t(k_m)$

abzuschneiden, d. h. Gl. (10) gilt nur in den Intervallen

$$\begin{aligned} 0 &\leq \omega \leq \omega_1(k_m) < \omega_1^t, \\ \omega_1^t &\leq \omega \leq \omega_2(k_m) < \omega_2^t, \\ &\vdots && \vdots \\ \omega_n^t &\leq \omega \leq \omega_{n+1}(k_m) < \infty. \end{aligned} \quad (12)$$

Der Zweig $n+1$ ist dabei der Lichtzweig. Durch das Abschneiden der Pole wird die Zustandsdichte jetzt auch normierbar. In den Zwischenbereichen sind keine Polaritonen-Zustände vorhanden, d. h. hier ist $Z_P^t(\omega) = 0$. Die Zustände für $k \gg k_m$ sind Phononen-Zustände, die nach der gewöhnlichen Gitterschwingungstheorie zu berechnen sind. Durch diese Zustände werden die Frequenzlücken in der Polaritonentheorie zum Teil ausgefüllt. Da die Erfassung dieser Zustände jedoch über die eigentliche Polaritonentheorie hinausführt, sollen sie hier nicht weiter betrachtet werden.

Es sei noch bemerkt, daß für $\omega \ll \omega_1^t$ (unterster Zweig $j=1$) die Zustandsdichte Debyesches Verhalten zeigt:

$$Z_P^t(\omega) \sim \omega^2. \quad (13 \text{ a})$$

Dies entspricht dem linearen Anstieg

$$\omega = c k / \sqrt{\epsilon^0} \quad (13 \text{ b})$$

des untersten Zweiges.

Die Zustandsdichte der transversalen Polaritonen eines fiktiven kubischen Kristalls zeigt Abbildung 1a. Die Gesamt-Zustandsdichte der Polaritonen (longitudinale + transversale) ergibt sich nach

$$Z_P(\omega) = 2 Z_P^t(\omega) + Z_P^1(\omega) \quad (14)$$

mit $Z_P^t(\omega)$ nach Gl. (10) und $Z_P^1(\omega)$ nach Gl. (7), wobei der Faktor 2 die zweifache Entartung der transversalen Schwingungen berücksichtigt.

III. Zustandsdichte der Polaritonen in einachsigen Kristallen

In einachsigen Kristallen hat man ordentliche und außerordentliche Polaritonen zu unterscheiden (wegen der Einzelheiten siehe z. B. die zusammenfassende Darstellung in 2-4).

Die ordentlichen Polaritonen sind streng transversal und zeigen nur Betragsdispersion. Ihr Dis-

persionsverlauf entspricht dem Dispersionsverlauf der transversalen Polaritonen in kubischen Kristallen:

$$n^2 = c^2 k^2 / \omega^2 = \epsilon_{\perp}(\omega), \quad (15)$$

wobei $\epsilon_{\perp}(\omega)$ wieder durch die Kurosawa-Beziehung gegeben ist:

$$\epsilon_{\perp}(\omega) = \epsilon_{\perp}^{\infty} \frac{\prod_{j=1}^{n_{\perp}} [(\omega_{\perp j}^1)^2 - \omega^2]}{\prod_{j=1}^{n_{\perp}} [(\omega_{\perp j}^t)^2 - \omega^2]}. \quad (15 \text{ a})$$

Dabei werden alle Größen, die sich auf Richtungen senkrecht zur optischen Achse beziehen, durch den Index \perp , alle Größen, die sich auf die Richtung parallel zur optischen Achse beziehen, mit dem Index \parallel gekennzeichnet.

Die außerordentlichen Polaritonen sind für allgemeine Richtungen gemischt transversal-longitudinal und zeigen sowohl Betrags- als auch Richtungsdispersion. Ihr Dispersionsverlauf wird gegeben durch:

$$n^2 = \frac{c^2 k^2}{\omega^2} = \frac{\epsilon_{\perp}(\omega) \epsilon_{\parallel}(\omega)}{\epsilon_{\perp}(\omega) s_{\perp}^2 + \epsilon_{\parallel}(\omega) s_{\parallel}^2} \quad (16)$$

mit $\mathbf{s} \equiv \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$, $\epsilon_{\perp}(\omega)$ nach (15 a) und

$$\epsilon_{\parallel}(\omega) = \epsilon_{\parallel}^{\infty} \frac{\prod_{k=1}^{n_{\parallel}} [(\omega_{\parallel k}^1)^2 - \omega^2]}{\prod_{k=1}^{n_{\parallel}} [(\omega_{\parallel k}^t)^2 - \omega^2]}. \quad (15 \text{ b})$$

Da die Dispersionsgleichung für die ordentlichen Polaritonen die gleiche Form hat wie die Dispersionsgleichung der transversalen Polaritonen in kubischen Kristallen, ergibt sich ihre Zustandsdichte nach Gl. (10) :

$$Z_P^0(\omega) = \frac{n_{\perp} + 1}{r} A \frac{V}{2 \pi^2 c^3} \frac{\omega^2}{[\epsilon_{\perp}(\omega)]^{3/2}} [1 - \omega^2 D_{\perp}(\omega)], \quad (17)$$

wobei $r = 2 n_{\perp} + n_{\parallel} + 2$ die Gesamtzahl der Polaritonenzweige im einachsigen Kristall ist. Wegen der weiteren Folgerungen kann ebenfalls auf die Diskussion bei den transversalen Polaritonen in kubischen Kristallen verwiesen werden.

Wir wenden uns nun der Zustandsdichte der außerordentlichen Polaritonen zu. Aus Gl. (16) folgt zuerst:

$$\frac{1}{|\nabla_{\mathbf{k}} \omega|} = \frac{V \sqrt{\epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel}}}{c} \frac{|(1 - \omega^2 D_{\parallel}) \epsilon_{\perp} s_{\perp}^2 + (1 - \omega^2 D_{\perp}) \epsilon_{\parallel} s_{\parallel}^2|}{V \epsilon_{\perp}^2 s_{\perp}^2 + \epsilon_{\parallel}^2 s_{\parallel}^2 V |\epsilon_{\perp} s_{\perp}^2 + \epsilon_{\parallel} s_{\parallel}^2|} \quad (18 \text{ a})$$

$$= \frac{V |\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}|}{c} \frac{|(1 - \omega^2 D_{\parallel}) \varepsilon_{\perp} | s_{\perp}^2 + |(1 - \omega^2 D_{\perp}) \varepsilon_{\parallel} | s_{\parallel}^2}{V \varepsilon_{\perp}^2 s_{\perp}^2 + \varepsilon_{\parallel}^2 s_{\parallel}^2} \sqrt{|\varepsilon_{\perp} s_{\perp}^2 + \varepsilon_{\parallel} s_{\parallel}^2|}. \quad (18 \text{ b})$$

D_{\perp} und D_{\parallel} sind dabei wieder durch Gl. (8 a) definiert, wobei auf der rechten Seite ω_j^1 und ω_j^t durch $\omega_{\perp j}^1, \omega_{\perp j}^t$ bzw. $\omega_{\parallel j}^1, \omega_{\parallel j}^t$ zu ersetzen sind.

Die Berechtigung, im Zähler die Beträge der Ausdrücke $(1 - \omega^2 D_{\parallel}) \varepsilon_{\perp}$ und $(1 - \omega^2 D_{\perp}) \varepsilon_{\parallel}$ einzeln zu bilden, folgt daraus, daß $\varepsilon_{\perp}(\omega)$ und $[1 - \omega^2 D_{\perp}(\omega)]$ und $\varepsilon_{\parallel}(\omega)$ und $[1 - \omega^2 D_{\parallel}(\omega)]$ für alle ω das gleiche Vorzeichen besitzen. Für diejenigen Frequenzintervalle, in denen $\varepsilon_{\perp}(\omega)$ und $\varepsilon_{\parallel}(\omega)$ positiv sind, nämlich

$$\omega_{\perp j}^1 < \omega < \omega_{\perp, j+1}^t \quad \text{bzw.} \quad \omega_{\parallel k}^1 < \omega < \omega_{\parallel, k+1}^t,$$

folgt dies in derselben Weise wie für kubische Kristalle.

Für diejenigen Frequenzintervalle, in denen $\varepsilon_{\perp}(\omega)$ bzw. $\varepsilon_{\parallel}(\omega)$ negativ ist, nämlich

$$\omega_{\perp j}^t < \omega < \omega_{\perp, j+1}^1 \quad \text{und} \quad \omega_{\parallel k}^t < \omega < \omega_{\parallel, k+1}^1,$$

folgt dies aus dem im Anhang I gegebenen elementaren, aber längeren Beweis.

Bei der Berechnung der Zustandsdichte für die außerordentlichen Polaritonen nach Gl. (18) sind insgesamt vier Bereiche zu unterscheiden:

- a) $\varepsilon_{\perp}(\omega) > 0$ und $\varepsilon_{\parallel}(\omega) > 0$,
- d. h. $\omega_{\perp j}^1 < \omega < \omega_{\perp, j+1}^t, \quad \omega_{\parallel k}^1 < \omega < \omega_{\parallel, k+1}^t$,
- b) $\varepsilon_{\perp}(\omega) < 0$ und $\varepsilon_{\parallel}(\omega) > 0$,
- d. h. $\omega_{\perp j}^t < \omega < \omega_{\perp, j+1}^1, \quad \omega_{\parallel k}^1 < \omega < \omega_{\parallel, k+1}^t$,
- c) $\varepsilon_{\perp}(\omega) > 0$ und $\varepsilon_{\parallel}(\omega) < 0$,
- d. h. $\omega_{\perp j}^1 < \omega < \omega_{\perp, j+1}^t, \quad \omega_{\parallel k}^t < \omega < \omega_{\parallel, k+1}^1$,
- d. h. $\omega_{\perp j}^t < \omega < \omega_{\perp, j+1}^1, \quad \omega_{\parallel k}^t < \omega < \omega_{\parallel, k+1}^1$.

In den Intervallen d) existieren für reelle Vektorren \mathbf{k} keine reellen Werte von ω , da nach Gl. (16) $n^2 = c^2 k^2 / \omega^2$ negativ wird. Also ist in diesen Intervallen $Z_{P,d}^{ao}(\omega) = 0$. Wir behandeln nun der Reihe nach die Intervalle a), b) und c).

a) $\varepsilon_{\perp}(\omega) > 0$ und $\varepsilon_{\parallel}(\omega) > 0$

In diesem Fall sind die Oberflächen konstanter Frequenzen im \mathbf{k} -Raum nach Gl. (16) Rotationsellipsoide mit der optischen Achse als Rotationsachse. Die Berechnung der Zustandsintegrale (zur Ausführung siehe Anhang II) führt auf

$$Z_{P,a}^{ao}(\omega) = \frac{n_{\perp} + n_{\parallel} + 1}{r} A \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{2}{3} \varepsilon_{\parallel}(\omega) \sqrt{\varepsilon_{\perp}(\omega)} \frac{\omega^2}{c^3} [2(1 - \omega^2 D_{\parallel}(\omega)) + 1 - \omega^2 D_{\perp}(\omega)]. \quad (19)$$

Die Gl. (19) enthält wieder wie Gl. (10) Pole an den Stellen $\omega_{\perp j}^t$ und $\omega_{\parallel k}^t$, die nicht normierbar sind. Dies hängt wieder wie bei den kubischen Kristallen damit zusammen, daß die Polaritonenzweige nur bis $k_m \lesssim 10^7 \text{ cm}^{-1}$ physikalisch realistisch sind. Man muß also die Frequenzen wieder in der Umgebung der transversalen Frequenzen $\omega_{\perp j}^t$ und $\omega_{\parallel k}^t$ abschneiden. Hinzu kommt hier noch folgende Problematik: Wählt man wieder eine Abschneidekugel mit dem Radius k_m und betrachtet nur die Zustände innerhalb dieser Kugel als realistisch, so existieren natürlich auch solche Ellipsoide, bei denen eine

Hauptachse kleiner, die andere größer als k_m ist. Für solche Ellipsoide dürften dann streng genommen nur solche Zustände zur Zustandsdichte mitgezählt werden, die auf dem im Innern der Kugel gelegenen Oberflächenteil des Ellipsoids liegen, d. h. es dürfte nicht mehr wie in Gl. (19) über die gesamte Oberfläche des Ellipsoids integriert werden. Da aber solche Ellipsoide nur zu Frequenzen gehören, die in der unmittelbaren Umgebung der Abschneidefrequenz liegen, machen sich die Fehler auch nur in der Umgebung bemerkbar, in der die Zustandsdichte sowieso wenig realistisch ist.

b) $\varepsilon_{||}(\omega) < 0$ und $\varepsilon_{\perp}(\omega) > 0$

Nach Gl. (16) sind die Flächen konstanter Frequenz Rotationshyperbole um die optische Achse. Bei derartigen nicht geschlossenen Flächen muß man einen Grenzwellenvektor k_m der Größenordnung 10^7 cm^{-1} einführen. Gl. (16) führt bez. der

$$Z_{P,b}^{ao}(\omega) = \frac{n_{\perp} + n_{||} + 1}{r} A \frac{V}{(2\pi)^2} 2 |\varepsilon_{||}| \sqrt{\varepsilon_{\perp}} \frac{\omega^2}{c^3} \left\{ \left| 1 - \omega^2 D_{||} \right| \frac{1}{3} \left(\left(\frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(a^2 \cot^2 \vartheta_m - 1)^{3/2}} - 1 \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \left(\frac{a \cot \vartheta_m}{\sqrt{a^2 \cot^2 \vartheta_m - 1}} - 1 \right) \right) + (1 - \omega^2 D_{\perp}) \frac{1}{3} \left(\frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(a^2 \cot^2 \vartheta_m - 1)^{3/2}} - 1 \right) \right\}. \quad (21)$$

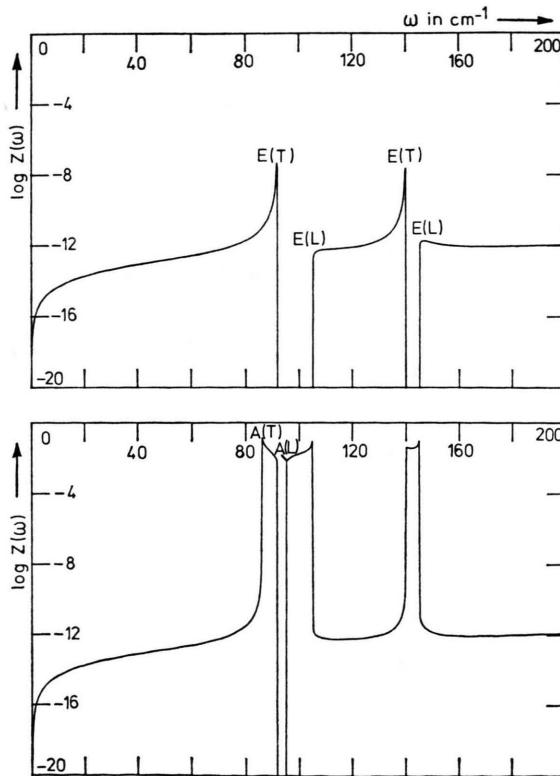
c) $\varepsilon_{||}(\omega) > 0$ und $\varepsilon_{\perp}(\omega) < 0$

Für die Flächen konstanter Frequenz in diesem Frequenzbereich führt Gl. (16) auf Rotationshyperbole mit der optischen Achse als Rotationsachse. Ebenfalls Gl. (16) liefert uns den Grenzwinkel

$$\vartheta_m = \arcsin \left(\sqrt{\varepsilon_{||}} \sqrt{\frac{|\varepsilon_{\perp}| \omega^2 / c^2 k_m^2 + 1}{|\varepsilon_{\perp}| + \varepsilon_{||}}} \right) \quad (22)$$

zur optischen Achse. Sei $a^2 = \varepsilon_{||} / |\varepsilon_{\perp}|$; als Ergebnis der in Anhang II durchgeführten Berechnung der Zustandsdichte erhalten wir:

$$Z_{P,c}^{ao}(\omega) = \frac{n_{\perp} + n_{||} + 1}{r} A \frac{V}{(2\pi)^2} 2 \varepsilon_{||} \sqrt{|\varepsilon_{\perp}|} \frac{\omega^2}{c^3} \left\{ (1 - \omega^2 D_{||}) \left(\frac{1}{3} \frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(1 - a^2 \cot^2 \vartheta_m)^{3/2}} + \frac{a \cot \vartheta_m}{\sqrt{1 - a^2 \cot^2 \vartheta_m}} \right) \right. \\ \left. + |1 - \omega^2 D_{\perp}| \frac{1}{3} \frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(1 - a^2 \cot^2 \vartheta_m)^{3/2}} \right\}. \quad (23)$$



Fläche konstanter Frequenz ω auf den Grenzwinkel

$$\vartheta_m = \arccos \left(\sqrt{\varepsilon_{\perp}} \sqrt{\frac{|\varepsilon_{||}| \omega^2 / c^2 k_m^2 + 1}{|\varepsilon_{||}| + \varepsilon_{\perp}}} \right) \quad (20)$$

zur optischen Achse. Sei $a^2 = |\varepsilon_{||}| / \varepsilon_{\perp}$; die Berechnung der Zustandsdichte ist wieder in Anhang II durchgeführt. Es ergibt sich:

$$\vartheta_m = \arcsin \left(\sqrt{\varepsilon_{||}} \sqrt{\frac{|\varepsilon_{\perp}| \omega^2 / c^2 k_m^2 + 1}{|\varepsilon_{\perp}| + \varepsilon_{||}}} \right) \quad (22)$$

Abbildung 1 b zeigt die Zustandsdichte der außerordentlichen Polaritonen in Tellur, Abb. 2 die der außerordentlichen Polaritonen in α -Quarz.

Die Gesamtzustandsdichte der Polaritonen (ordentliche + außerordentliche) ergibt sich nach

$$Z_P(\omega) = Z_{P,0}(\omega) + Z_{P,\alpha}^{ao}(\omega),$$

worin $Z_{P,0}(\omega)$ nach Gl. (17) und $Z_{P,\alpha}^{ao}(\omega)$ je nach dem Wert von ω nach Gl. (19) ($\alpha=a$), nach Gl. (21) ($\alpha=b$) oder nach Gl. (23) ($\alpha=c$) gegeben ist. Für Frequenzen mit $\alpha=d$ ist $Z_{P,\alpha}^{ao}(\omega) = 0$.

Anhang I

Beweis, daß im Intervall

$$\omega_{\alpha m}^t < \omega < \omega_{\alpha m}^1 \quad (A, I, 1)$$

die Ungleichung

$$1 - \omega^2 D_a(\omega) < 0 \quad (A, I, 2)$$

gilt:

Abb. 1 a. Zustandsdichte der ordentlichen Polaritonen in Te, zugleich Zustandsdichte in einem fiktiven kubischen Kristall (Abscheideradius $k_m = 10^7 \text{ cm}^{-1}$).

Abb. 1 b. Zustandsdichte der außerordentlichen Polaritonen in Te (Abscheideradius $k_m = 10^7 \text{ cm}^{-1}$).

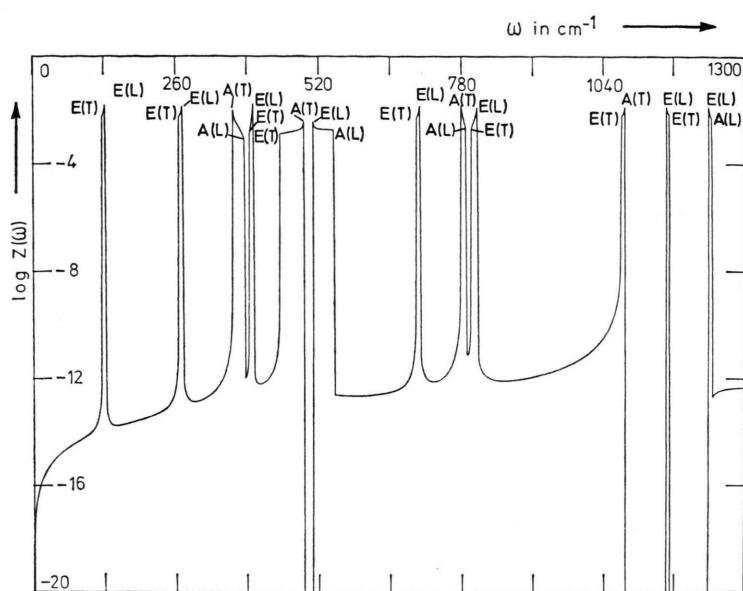


Abb. 2. Zustandsdichte der außerordentlichen Polaritonen in α -Quarz (Abschneide-
radius $k_m = 10^7 \text{ cm}^{-1}$).

Es genügt, den Beweis für die zu Gl. (A, I, 2) äquivalente Ungleichung

$$\omega^2 D_a(\omega) > 1 \quad (\text{A, I, 2a})$$

zu führen.

Wir setzen

$$f(\omega) \equiv \omega^2 D_a(\omega) = \sum_{j=1}^{n_\alpha} \left(\frac{\omega^2}{(\omega_{\alpha j}^1)^2 - \omega^2} - \frac{\omega^2}{(\omega_{\alpha j}^t)^2 - \omega^2} \right) = \sum_{j=1}^{n_\alpha} \left(\frac{1}{d_{\alpha j}^1(\omega)} - \frac{1}{d_{\alpha j}^t(\omega)} \right) \quad (\text{A, I, 3})$$

mit den Abkürzungen

$$d_{\alpha j}^1(\omega) = (\omega_{\alpha j}^1/\omega)^2 - 1, \quad (\text{A, I, 3a})$$

$$d_{\alpha j}^t(\omega) = (\omega_{\alpha j}^t/\omega)^2 - 1. \quad (\text{A, I, 3b})$$

Wegen der Anordnungsrelation (6) und wegen (A, I, 1) gilt offensichtlich die Ungleichung (den Index α lassen wir vorübergehend fort)

$$-1 < d_1^t < d_1^1 < \dots < d_{m-1}^1 < d_m^t \\ < 0 < d_m^1 < d_{m+1}^t < \dots < d_n^t < d_n^1, \quad (\text{A, I, 4})$$

die sich aufspalten lässt in

$$\frac{1}{d_m^t} < \frac{1}{d_{m-1}^1} < \dots < \frac{1}{d_1^1} < \frac{1}{d_1^t} < -1, \quad (\text{A, I, 5a})$$

und

$$0 < \frac{1}{d_n^1} < \frac{1}{d_{n-1}^t} < \dots < \frac{1}{d_{m+1}^t} < \frac{1}{d_m^1}. \quad (\text{A, I, 5b})$$

Durch Umordnen der Summe (A, I, 3) folgt nun sofort

$$f(\omega) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{d_j^1(\omega)} - \frac{1}{d_j^t(\omega)} \right) = -\frac{1}{d_1^t} + \sum_{j=1}^{m-1} \left(\frac{1}{d_j^1} - \frac{1}{d_{j+1}^t} \right) + \sum_{j=m}^{n-1} \left(\frac{1}{d_j^1} - \frac{1}{d_{j+1}^t} \right) + \frac{1}{d_n^1} > 1 + 0 + 0 + 0 = 1,$$

$$\text{also} \quad f(\omega) \equiv \omega^2 D_a(\omega) > 1, \quad (\text{A, I, 6})$$

was zu zeigen war.

Anhang II

Berechnung der Integrale $\int dS_\omega / |\nabla_k \omega|$ für die Frequenzbereiche

- a) $\omega_{\perp j}^1 < \omega < \omega_{\perp, j+1}^1$ und $\omega_{\parallel k}^1 < \omega < \omega_{\parallel, k+1}^t$,
- b) $\omega_{\perp j}^1 < \omega < \omega_{\perp, j+1}^t$ und $\omega_{\parallel k}^t < \omega < \omega_{\parallel, k}^1$,
- c) $\omega_{\perp j}^t < \omega < \omega_{\perp j}^1$ und $\omega_{\parallel k}^1 < \omega < \omega_{\parallel, k+1}^t$:

a) Im Frequenzbereich a) ist sowohl $\varepsilon_\perp(\omega) > 0$ als auch $\varepsilon_\parallel(\omega) > 0$. Für diese Frequenzen liefert die Dispersionsrelation (16) der außerordentlichen Polaritonen die Ellipsengleichung

$$\frac{(k s_\perp)^2}{\varepsilon_\parallel \omega^2 / c^2} + \frac{(k s_\parallel)^2}{\varepsilon_\perp \omega^2 / c^2} = 1 \quad (\text{A, II, 1})$$

mit $s_\perp = \sin \vartheta$ und $s_\parallel = \cos \vartheta$, worin ϑ den Winkel zwischen Wellenvektor und optischer Achse bezeichnet. Die Oberfläche konstanter Frequenz ω ist ein Rotationsellipsoid um die optische Achse. Bezeich-

nen wir mit dS_ω ein Oberflächenelement dieser Oberfläche, dann erhalten wir dS_ω nach der folgenden Beziehung zur Berechnung der Oberfläche von Rotationskörpern:

$$dS_\omega = 2\pi k s_\perp \sqrt{[(ks_{||})']^2 + [(ks_\perp)']^2} d\vartheta. \quad (\text{A, II, 2})$$

Darin bedeutet ' die Ableitung nach ϑ . Wir erhalten

$$dS_\omega = -2\pi \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{||} \varepsilon_\perp \frac{\sqrt{\varepsilon_\perp^2 s_\perp^2 + \varepsilon_{||}^2 s_{||}^2}}{(\varepsilon_\perp s_\perp^2 + \varepsilon_{||} s_{||}^2)^{5/2}} ds_{||}. \quad (\text{A, II, 3})$$

Mit Gl. (18b) führt die Berechnung des Zustandsintegrals auf

$$\int \frac{dS_\omega}{|\nabla_k \omega|} = -4\pi \frac{(\varepsilon_\perp \varepsilon_{||})^{3/2}}{c^3} \omega^2 \left\{ (1 - \omega^2 D_{||}) \varepsilon_\perp \int_1^0 \frac{ds_{||}}{[\varepsilon_\perp + (\varepsilon_{||} - \varepsilon_\perp) s_{||}^2]^{5/2}} \right. \\ \left. + [(1 - \omega^2 D_\perp) \varepsilon_{||} - (1 - \omega^2 D_{||}) \varepsilon_\perp] \int_1^0 \frac{s_{||}^2 ds_{||}}{[\varepsilon_\perp + (\varepsilon_{||} - \varepsilon_\perp) s_{||}^2]^{5/2}} \right\}. \quad (\text{A, II, 4})$$

Wir berechnen die bestimmten Integrale durch Substitution. Die erste Substitute $s_{||} = \operatorname{tgh} \varphi$ führt auf

$$\int_1^0 \frac{ds_{||}}{[\varepsilon_\perp + (\varepsilon_{||} - \varepsilon_\perp) s_{||}^2]^{5/2}} = \int_{\infty}^0 \frac{\cosh^3 \varphi d\varphi}{(\varepsilon_\perp + \varepsilon_{||} \sinh^2 \varphi)^{5/2}} \quad (\text{A, II, 5a})$$

und

$$\int_1^0 \frac{s_{||}^2 ds_{||}}{[\varepsilon_\perp + (\varepsilon_{||} - \varepsilon_\perp) s_{||}^2]^{5/2}} = \int_{\infty}^0 \frac{\sinh^2 \varphi \cosh \varphi d\varphi}{(\varepsilon_\perp + \varepsilon_{||} \sinh^2 \varphi)^{5/2}}. \quad (\text{A, II, 5b})$$

Die Substitution $\sinh \varphi = x$ liefert für beide Integrale

$$\int_{\infty}^0 \frac{\cosh^3 \varphi d\varphi}{(\varepsilon_\perp + \varepsilon_{||} \sinh^2 \varphi)^{5/2}} = \int_{\infty}^0 \frac{(1+x^2) dx}{(\varepsilon_\perp + \varepsilon_{||} x^2)^{5/2}} \quad (\text{A, II, 6a})$$

und

$$\int_{\infty}^0 \frac{\sinh^2 \varphi \cosh \varphi d\varphi}{(\varepsilon_\perp + \varepsilon_{||} \sinh^2 \varphi)^{5/2}} = \int_{\infty}^0 \frac{x^2 dx}{(\varepsilon_\perp + \varepsilon_{||} x^2)^{5/2}}. \quad (\text{A, II, 6b})$$

Definieren wir $a^2 \equiv \varepsilon_{||}/\varepsilon_\perp$, so ergibt die dritte Substitution $a x = \operatorname{tg} \varphi$

$$\int_{\infty}^0 \frac{dx}{(\varepsilon_\perp + \varepsilon_{||} x^2)^{5/2}} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{||} \varepsilon_\perp^2}} \int_{\pi/2}^0 \cos^3 \varphi d\varphi = -\frac{2}{3} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{||} \varepsilon_\perp^2}} \quad (\text{A, II, 7a})$$

und

$$\int_{\infty}^0 \frac{x^2 dx}{(\varepsilon_\perp + \varepsilon_{||} x^2)^{5/2}} = \frac{1}{\varepsilon_{||}^{3/2} \varepsilon_\perp} \int_{\pi/2}^0 \sinh^2 \varphi \cos \varphi d\varphi = -\frac{1}{3} \frac{1}{\varepsilon_{||}^{3/2} \varepsilon_\perp}. \quad (\text{A, II, 7b})$$

Daraus erhalten wir schließlich

$$\int_1^0 \frac{ds_{||}}{[\varepsilon_\perp + (\varepsilon_{||} - \varepsilon_\perp) s_{||}^2]^{5/2}} = -\frac{1}{3} \frac{2 \varepsilon_{||} + \varepsilon_\perp}{\varepsilon_\perp^2 \varepsilon_{||}^{3/2}} \quad (\text{A, II, 8a})$$

bzw.

$$\int_1^0 \frac{s_{||}^2 ds_{||}}{[\varepsilon_\perp + (\varepsilon_{||} - \varepsilon_\perp) s_{||}^2]^{5/2}} = -\frac{1}{3} \frac{1}{\varepsilon_{||}^{3/2} \varepsilon_\perp}. \quad (\text{A, II, 8b})$$

Für das Zustandsintegral ergibt sich somit:

$$\int \frac{dS_\omega}{|\nabla_k \omega|} = \frac{4\pi}{3} \frac{\varepsilon_{||} \sqrt{\varepsilon_{\perp}}}{c^3} \omega^2 [2(1 - \omega^2 D_{||}) + 1 - \omega^2 D_{\perp}] . \quad (\text{A, II, 9})$$

b) im Frequenzbereich b) ist $\varepsilon_{||} < 0$ und $\varepsilon_{\perp} > 0$. Nach Gl. (16)

$$-\frac{(ks_{\perp})^2}{|\varepsilon_{||}| \omega^2/c^2} + \frac{(ks_{||})^2}{\varepsilon_{\perp} \omega^2/c^2} = 1 \quad (\text{A, II, 10})$$

sind die Flächen konstanter Frequenz ω Rotationshyperboloide um die optische Achse. Gleichung (A, II, 2) liefert

$$dS_\omega = -2\pi \frac{\omega^2}{c^2} |\varepsilon_{||}| \varepsilon_{\perp} \frac{\sqrt{\varepsilon_{\perp}^2 s_{\perp}^2 + \varepsilon_{||}^2 s_{||}^2}}{(|\varepsilon_{||}| s_{||}^2 - \varepsilon_{\perp} s_{\perp}^2)^{5/2}} ds_{||} . \quad (\text{A, II, 11})$$

Die bei der Berechnung der Zustandsdichte zu lösenden Integrale ergeben sich aus der folgenden Gleichung [worin $\nabla_k \omega$ wieder nach Gl. (18 b) einzusetzen ist]:

$$\int \frac{dS_\omega}{|\nabla_k \omega|} = -4\pi \frac{(|\varepsilon_{||}| \varepsilon_{\perp})^{3/2}}{c^3} \omega^2 \left\{ [1 - \omega^2 D_{||}] \varepsilon_{\perp} \int_1^{\cos \vartheta_m} \frac{ds_{||}}{[(|\varepsilon_{||}| + \varepsilon_{\perp}) s_{||}^2 - \varepsilon_{\perp}]^{5/2}} \right. \\ \left. + [(1 - \omega^2 D_{\perp}) |\varepsilon_{||}| - (1 - \omega^2 D_{||}) \varepsilon_{\perp}] \int_1^{\cos \vartheta_m} \frac{s_{||}^2 ds_{||}}{[(|\varepsilon_{||}| + \varepsilon_{\perp}) s_{||}^2 - \varepsilon_{\perp}]^{5/2}} \right\} \quad (\text{A, II, 12})$$

mit dem Grenzwinkel ϑ_m nach Gleichung (20).

Mit der ersten Substitution $s_{||} = \tgh \varphi$ erhalten wir

$$\int_1^{\cos \vartheta_m} \frac{ds_{||}}{[(|\varepsilon_{||}| + \varepsilon_{\perp}) s_{||}^2 - \varepsilon_{\perp}]^{5/2}} = \int_{\infty}^{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m} \frac{\cosh^3 \varphi d\varphi}{(|\varepsilon_{||}| \sinh^2 \varphi - \varepsilon_{\perp})^{5/2}} \quad (\text{A, II, 13a})$$

und

$$\int_1^{\cos \vartheta_m} \frac{s_{||}^2 ds_{||}}{[(|\varepsilon_{||}| + \varepsilon_{\perp}) s_{||}^2 - \varepsilon_{\perp}]^{5/2}} = \int_{\infty}^{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m} \frac{\sinh^2 \varphi \cosh \varphi d\varphi}{(|\varepsilon_{||}| \sinh^2 \varphi - \varepsilon_{\perp})^{5/2}} . \quad (\text{A, II, 13b})$$

Wir führen nun die Substitution $\sinh \varphi = x$ ein und definieren $a^2 \equiv |\varepsilon_{||}| / \varepsilon_{\perp}$. Dann erhalten wir unter Beachtung von $\sinh(\operatorname{artgh} y) = y / \sqrt{1 - y^2}$.

$$\int_{\infty}^{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m} \frac{\cosh^3 \varphi d\varphi}{(|\varepsilon_{||}| \sinh^2 \varphi - \varepsilon_{\perp})^{5/2}} = \frac{1}{\varepsilon_{\perp}^{5/2}} \int_{\infty}^{\cos \vartheta_m} \frac{(1 + x^2) dx}{(a^2 x^2 - 1)^{5/2}} \quad (\text{A, II, 14a})$$

und

$$\int_{\infty}^{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m} \frac{\sinh^2 \varphi \cosh \varphi d\varphi}{(|\varepsilon_{||}| \sinh^2 \varphi - \varepsilon_{\perp})^{5/2}} = \frac{1}{\varepsilon_{\perp}^{5/2}} \int_{\infty}^{\cos \vartheta_m} \frac{x^2 dx}{(a^2 x^2 - 1)^{5/2}} . \quad (\text{A, II, 14b})$$

Setzen wir schließlich $a x = \coth \varphi$, so werden die Integrale endgültig gelöst:

$$\frac{1}{\varepsilon_{\perp}^{5/2}} \int_{\infty}^{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m} \frac{dx}{(a^2 x^2 - 1)^{5/2}} = -\frac{1}{\varepsilon_{\perp}^2 \sqrt{|\varepsilon_{||}|}} \int_0^{\operatorname{arcoth}(a \operatorname{cot} \vartheta_m)} \sinh^3 \varphi d\varphi \\ = -\frac{1}{\varepsilon_{\perp}^2 \sqrt{|\varepsilon_{||}|}} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{a^3 \operatorname{cot}^3 \vartheta_m}{(a^2 \operatorname{cot}^2 \vartheta_m - 1)^{3/2}} - 1 \right) - \left(\frac{a \operatorname{cot} \vartheta_m}{\sqrt{a^2 \operatorname{cot}^2 \vartheta_m - 1}} - 1 \right) \right] \quad (\text{A, II, 15a})$$

und

$$\frac{1}{\varepsilon_{\perp}^{5/2}} \int_{\infty}^{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m} \frac{x^2 dx}{(a^2 x^2 - 1)^{5/2}} = -\frac{1}{\varepsilon_{\perp} \sqrt{|\varepsilon_{||}|^{3/2}}} \int_0^{\operatorname{arcoth}(a \operatorname{cot} \vartheta_m)} \cosh^3 \varphi \sinh \varphi d\varphi = -\frac{1}{\varepsilon_{\perp} \sqrt{|\varepsilon_{||}|^{3/2}}} \frac{1}{3} \left(\frac{a^3 \operatorname{cot}^3 \vartheta_m}{(a^2 \operatorname{cot}^2 \vartheta_m - 1)^{3/2}} - 1 \right) . \quad (\text{A, II, 15b})$$

Wir setzen diese Werte in (A, II, 12) ein und erhalten für das Zustandsintegral:

$$\int \frac{dS_\omega}{|\nabla_k \omega|} = 4\pi \frac{|\varepsilon_{||}| \sqrt{\varepsilon_{\perp}}}{c^3} \omega^2 \left\{ \left| 1 - \omega^2 D_{||} \right| \left[\frac{1}{3} \left(\frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(a^2 \cot^2 \vartheta_m - 1)^{3/2}} - 1 \right) - \left(\frac{a \cot \vartheta_m}{\sqrt{a^2 \cot^2 \vartheta_m - 1}} - 1 \right) \right] \right. \\ \left. + (1 - \omega^2 D_{\perp}) \frac{1}{3} \left(\frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(a^2 \cot^2 \vartheta_m - 1)^{3/2}} - 1 \right) \right\}. \quad (A, II, 16)$$

c) Im Frequenzbereich c ist $\varepsilon_{||} > 0$ und $\varepsilon_{\perp} < 0$. Nach Gl. (16)

$$\frac{(ks_{\perp})^2}{\varepsilon_{||} \omega^2/c^2} - \frac{(ks_{||})^2}{|\varepsilon_{\perp}| \omega^2/c^2} = 1 \quad (A, II, 17)$$

erhalten wir für die Oberflächen konstanter Frequenz ω Rotationshyperbeloide um die optische Achse. Nach Gl. (A, II, 2) folgt

$$dS_\omega = -2\pi \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{||} |\varepsilon_{\perp}| \frac{\sqrt{|\varepsilon_{\perp}|^2 s_{\perp}^2 + \varepsilon_{||}^2 s_{||}^2}}{(|\varepsilon_{\perp}| s_{\perp}^2 - \varepsilon_{||} s_{||}^2)^{5/2}} ds_{||}. \quad (A, II, 18)$$

Die Integrale zur Berechnung der Zustandsdichte ergeben sich aus

$$\int \frac{dS_\omega}{|\nabla_k \omega|} = -4\pi \frac{(|\varepsilon_{\perp}| \varepsilon_{||})^{3/2}}{c^3} \omega^2 \left\{ (1 - \omega^2 D_{||}) |\varepsilon_{\perp}| \int_{\cos \vartheta_m}^0 \frac{ds_{||}}{[|\varepsilon_{\perp}| - (|\varepsilon_{\perp}| + \varepsilon_{||}) s_{||}^2]^{5/2}} \right. \\ \left. + [(1 - \omega^2 D_{\perp}) \varepsilon_{||} - (1 - \omega^2 D_{||}) |\varepsilon_{\perp}|] \int_{\cos \vartheta_m}^0 \frac{s_{||}^2 ds_{||}}{[|\varepsilon_{\perp}| - (|\varepsilon_{\perp}| + \varepsilon_{||}) s_{||}^2]^{5/2}} \right\}, \quad (A, II, 19)$$

worin $\nabla_k \omega$ durch Gl. (18 b) und der Grenzwinkel ϑ_m durch Gl. (22) gegeben ist. Die erste Substitution $s_{||} = \operatorname{tgh} \varphi$ liefert uns

$$\int_{\cos \vartheta_m}^0 \frac{ds_{||}}{[|\varepsilon_{\perp}| - (|\varepsilon_{\perp}| + \varepsilon_{||}) s_{||}^2]^{5/2}} = \int_{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m}^0 \frac{\cosh^3 \varphi d\varphi}{(|\varepsilon_{\perp}| - \varepsilon_{||} \sinh^2 \varphi)^{5/2}} \quad (A, II, 20a)$$

$$\text{und} \quad \int_{\cos \vartheta_m}^0 \frac{s_{||}^2 ds_{||}}{[|\varepsilon_{\perp}| - (|\varepsilon_{\perp}| + \varepsilon_{||}) s_{||}^2]^{5/2}} = \int_{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m}^0 \frac{\sinh^2 \varphi \cosh \varphi d\varphi}{(|\varepsilon_{\perp}| - \varepsilon_{||} \sinh^2 \varphi)^{5/2}}. \quad (A, II, 20b)$$

Wir definieren $a^2 \equiv \varepsilon_{||}/|\varepsilon_{\perp}|$ und führen die Substitution $\sinh \varphi = x$ ein. Beachten wir wieder, daß

$$\sinh(\operatorname{artgh} y) = \frac{y}{\sqrt{1-y^2}},$$

so erhalten wir

$$\int_{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m}^0 \frac{\cosh^3 \varphi d\varphi}{(|\varepsilon_{\perp}| - \varepsilon_{||} \sinh^2 \varphi)^{5/2}} = \frac{1}{|\varepsilon_{\perp}|^{5/2}} \int_{\cos \vartheta_m}^0 \frac{(x^2 + 1) dx}{(1 - a^2 x^2)^{5/2}} \quad (A, II, 21a)$$

$$\text{und} \quad \int_{\operatorname{artgh} \cos \vartheta_m}^0 \frac{\sinh^2 \varphi \cosh \varphi d\varphi}{(|\varepsilon_{\perp}| - \varepsilon_{||} \sinh^2 \varphi)^{5/2}} = \frac{1}{|\varepsilon_{\perp}|^{5/2}} \int_{\cos \vartheta_m}^0 \frac{x^2 dx}{(1 - a^2 x^2)^{5/2}}. \quad (A, II, 21b)$$

Mit Hilfe der dritten Substitution $ax = \operatorname{tgh} \varphi$ können wir nun die Integrale endgültig berechnen:

$$\frac{1}{|\varepsilon_{\perp}|^{5/2}} \int_{\cos \vartheta_m}^0 \frac{dx}{(1 - a^2 x^2)^{5/2}} = \frac{1}{|\varepsilon_{\perp}|^2 \sqrt{\varepsilon_{||}}} \int_{\operatorname{artgh} (a \cos \vartheta_m)}^0 \cosh^3 \varphi d\varphi \\ = - \frac{1}{|\varepsilon_{\perp}|^2 \sqrt{\varepsilon_{||}}} \left(\frac{1}{3} \frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(1 - a^2 \cot^2 \vartheta_m)^{3/2}} + \frac{a \cot \vartheta_m}{\sqrt{1 - a^2 \cot^2 \vartheta_m}} \right) \quad (A, II, 22a)$$

$$\text{und } \frac{1}{|\varepsilon_{\perp}|^{5/2}} \int_{\cos \vartheta_m}^0 \frac{x^2 dx}{(1 - a^2 x^2)^{5/2}} = \frac{1}{|\varepsilon_{\perp}| \varepsilon_{\parallel}^{3/2} \operatorname{artgh}(a \cos \vartheta_m)} \int_0^0 \sinh^2 \varphi \cosh \varphi d\varphi \\ = - \frac{1}{|\varepsilon_{\perp}| \varepsilon_{\parallel}^{3/2}} \frac{1}{3} \frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(1 - a^2 \cot^2 \vartheta_m)^{3/2}}. \quad (\text{A, II, 22b})$$

Setzen wir die berechneten Werte für die Integrale in (A, II, 12) ein, so ergibt sich

$$\int \frac{dS_{\omega}}{|\nabla_k \omega|} = 4\pi \frac{\varepsilon_{\parallel} \sqrt{|\varepsilon_{\perp}|}}{c^3} \omega^2 \left\{ (1 - \omega^2 D_{\parallel}) \left(\frac{1}{3} \frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(1 - a^2 \cot^2 \vartheta_m)^{3/2}} + \frac{a \cot \vartheta_m}{\sqrt{1 - a^2 \cot^2 \vartheta_m}} \right) \right. \\ \left. + |1 - \omega^2 D_{\perp}| \frac{1}{3} \frac{a^3 \cot^3 \vartheta_m}{(1 - a^2 \cot^2 \vartheta_m)^{3/2}} \right\}. \quad (\text{A, II, 23})$$

¹ J. J. Hopfield, Phys. Rev. **112**, 1555 [1958].

^{2a} R. Loudon, Adv. Phys. **13**, 423 [1964].

^{2b} A. S. Barker, Jr. u. R. Loudon, Rev. Mod. Phys. **44**, 18 [1972].

^{3a} L. Merten, Festkörperprobleme XII, Vieweg, Braunschweig 1972, S. 343.

^{3b} R. Claus, Festkörperprobleme XII, Vieweg, Braunschweig 1972, S. 381.

⁴ R. Claus, L. Merten u. J. Brandmüller, Light Scattering by Phonon-Polaritons, Springer Tracts in Modern Physics, Bd. 75, Springer-Verlag, Berlin 1975.

⁵ C. Kittel, Einführung in die Festkörperphysik, R. Oldenbourg Verlag, München 1969.

⁶ J. M. Ziman, Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press 1965.

⁷ T. Kurosawa, J. Phys. Soc. Japan **16**, 1298 [1961].