

## Drgania sieci krystalicznej – FONONY

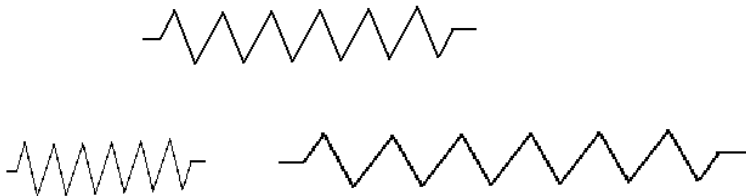
### 1. model klasyczny (niekwantowy)

a) model ośrodka ciągłego (model Debye'a)

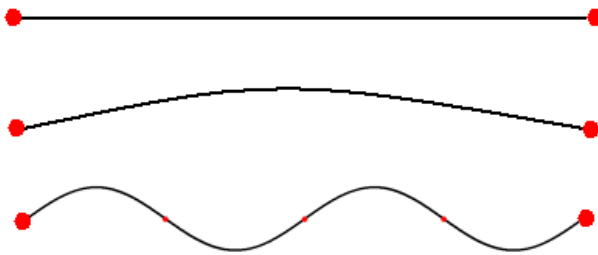
- przypadek jednowymiarowy - drgania struny

drgania mogą być podłużne (guma, sprężyna) i  
dwie prostopadłe do siebie fale podłużne

podłużne:



poprzeczne



fale opisane przez równanie falowe:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

$u(x,t)$  - **odkształcenie**,  $v$  - prędkość rozchodzenia się odkształceń  
(charakterystyczna dla danego ośrodka)

dla struny o długości  $L$  i usztywnionych końcach - fale stojące

$$u(x,t) = A \sin(kx) \cos(\omega t)$$

$A$  – amplituda,  $k = n\pi / L$  ,  $n \lambda / 2 = L$  ,

(największe  $\lambda/2 = L$  ; zauważmy zbieżność  $k$  z wektorem falowym dla swobodnych elektronów w 1D w studni o długości  $L$  )

liniowa zależność  $\omega(k)$  ,  $\omega = vk$  ,  $v$  – prędkość ( $v = \lambda\omega/2\pi$  )

$\omega$  - opisuje jak zmienia się  $u$  w ustalonym miejscu ( $x$ ) w funkcji czasu  $t$

$k$  - opisuje jak wygląda periodyczne odkształcenie w przestrzeni dla zamrożonej chwili czasu  $t$

w trójwymiarowym ośrodku sprężystym (3D), rozwiązanie dla fali biegnącej jest

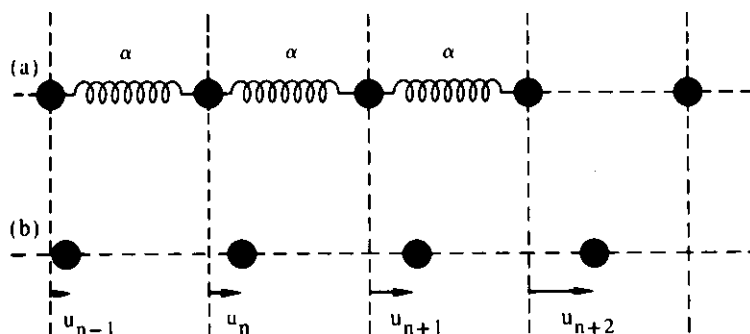
$$u(\mathbf{r}, t) = A \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)]$$

(fale poprzeczne i podłużne mogą charakteryzować się innymi  $\mathbf{V}$ )

### Model drgających węzłów atomowych (Born, Karman, Blackman)

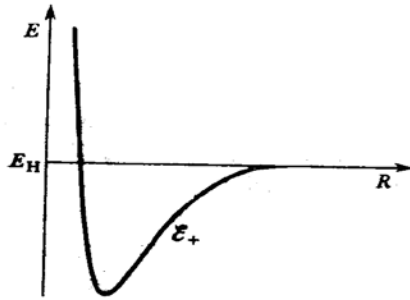
#### **jednowymiarowa sieć monoatomowa (łańcuch 1D)**

załóżmy drgania „podłużne”  
drgający ruch atomów wokół położenia równowagi atomów



najważniejsze jest **przybliżenie HARMONICZNE**

energia oddziaływania dwóch jonów (np.  $H_2^+$  )



w otoczeniu położenia równowagi (tzn. dla małych wychyleń) można opisać za pomocą parabolii – oscylator harmoniczny;

energia potencjalna będzie zatem **kwadratową** funkcją wychylenia, a co za tym idzie – siła działająca na każdy (n-ty) węzeł będzie liniowo proporcjonalna do wychylenia,

tzn. będzie liniowo zależna od tego jak skrócą się lub wydłużą sąsiednie „sprężynki”

$$F_n = \alpha(u_{n+1} - u_n) + \alpha(u_{n-1} - u_n)$$

po wstawieniu do równania Newtona : **(A)**

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \alpha[(u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1})]$$

dla każdego  $n = 0, 1, \dots, N$

możemy zażądać aby węzły brzegowe były nieruchome, lub wprowadzić **periodyczne warunki brzegowe**:  $U(0) = U(N)$

**rozwiązania szukamy w postaci**

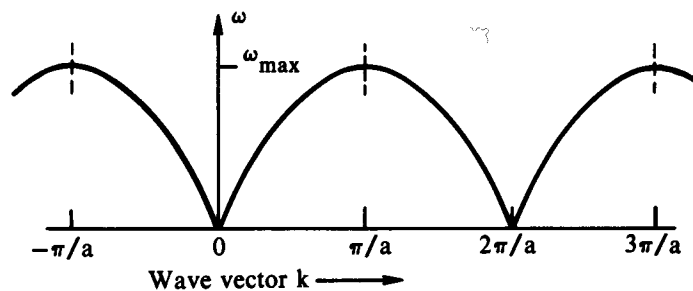
$$u_n = u * \exp[ i (kna - \omega t) ] \quad \text{(B)}$$

periodyczny warunek brzegowy ( $kNa=2\pi n$ ) daje  $k = 2\pi n / (Na)$   
 $a$  – odległość spoczynkowa między węzłami

wstawienie (B) do (A) daje

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \left| \sin(ka / 2) \right|$$

(analogicznie dla drgań poprzecznych, inne  $\alpha$ )



różnice w stosunku do modelu ciągłego ośrodka

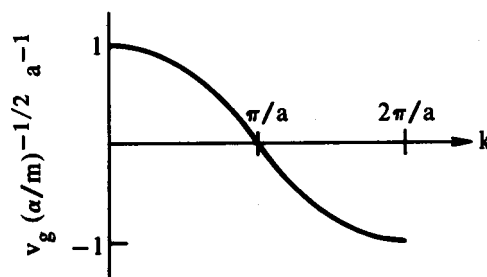
- $\omega(k)$  nie jest liniowe
- istnieje  $\omega_{\max}$  !

czym jest  $\omega_{\max}$  ? jak wówczas drgają węzły ?



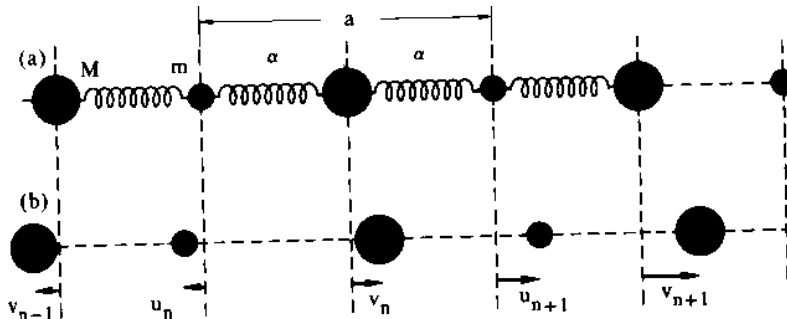
prędkość grupowa:  $v_g = d\omega / dk$  - prędkość przemieszczania się paczki falowej (sygnału, wychylenia od położenia równowagi) jest teraz funkcją  $k$

$$v_g = a \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \left| \cos(ka/2) \right|$$



prędkość fali biegnącej o  $\omega_{\max}$  jest = 0

## 1. jednowymiarowa sieć dwu-atomowa (łańcuch 1D z bazą)



- dwie różne masy :  $m$ ,  $M$
- $N$  komórek elementarnych
- $2N$  atomów

niech:

$U_n$  - wychylenie atomu o masie  $m$

$v_n$  - wychylenie atomu o masie  $M$

załóżmy takie same stałe siłowe dla każdej „sprężyny”

równania wyglądają tak:

$$M \frac{d^2 v_n}{dt^2} = \alpha(u_{n+1} + u_n - 2v_n)$$

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \alpha(v_n + v_{n-1} - 2u_n)$$

rozwiązania muszą mieć podobną postać jak poprzednio;  
szukając w postaci

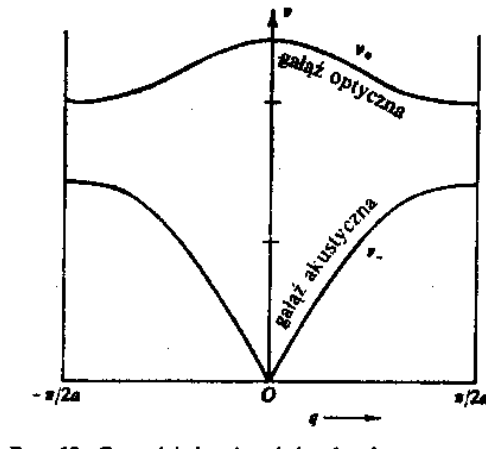
$$u_n = u \exp[i(2nka - \omega t)]$$

$$v_n = v \exp[i((2n + 1)ka - \omega t)]$$

wstawienie do równań da dwa rozwiązania na częstotliwość

$$\omega^2 = \alpha \left( \frac{m+M}{mM} \right) \pm \left[ \left( \frac{m+M}{mM} \right)^2 - \frac{\sin^2(ka)}{mM} \right]^{1/2}$$

... cwiczenia ...

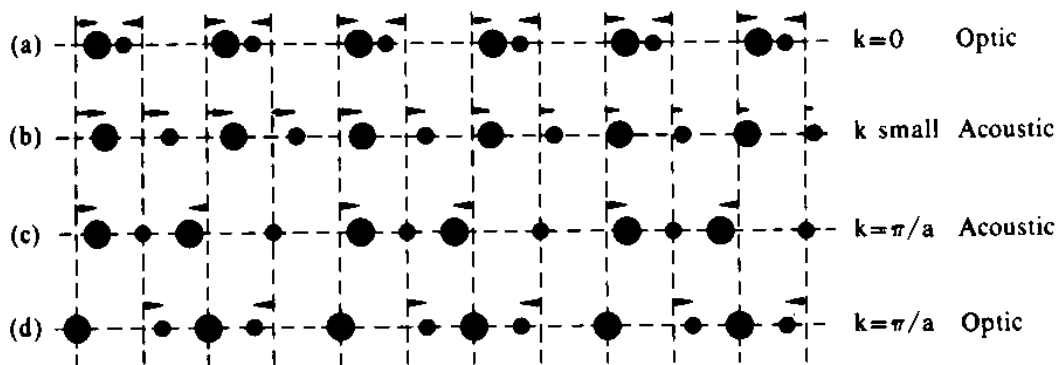


dwie gałęzie (pasma możliwych częstotliwości drgań):

- akustyczna - ( $k \approx 0$ )  $u \approx v$
- optyczna - ( $k \approx 0$ )  $mu = -Mv$

pamiętajmy, że pasma (podobnie jak dla elektronów) przy periodycznych warunkach brzegowych sprowadzają się z dużej liczby gęsto położonych wartości  $\omega(k)$  [ gęste ale dyskretne  $k \rightarrow$  gęste ale dyskretne  $\omega$  ]

[ dla  $k \approx 0$  ,  $\cos(ka) \approx 1 - (ka)^2/2$  ]



dla małych wychyleń:

**drżania akustyczne** (obydwa atomy w fazie)

**drgania optyczne** (jonowe wiązanie – drgający dipol elektryczny, drgania podobne do drgań oscylacyjnych molekuly dwu-atomowej – podczerwień)

$$k \approx 0 \text{ - gałąź optyczna } \omega \approx \sqrt{\frac{2\alpha}{\mu}}$$

( $\mu$  - masa zredukowana)

gałąź akustyczna

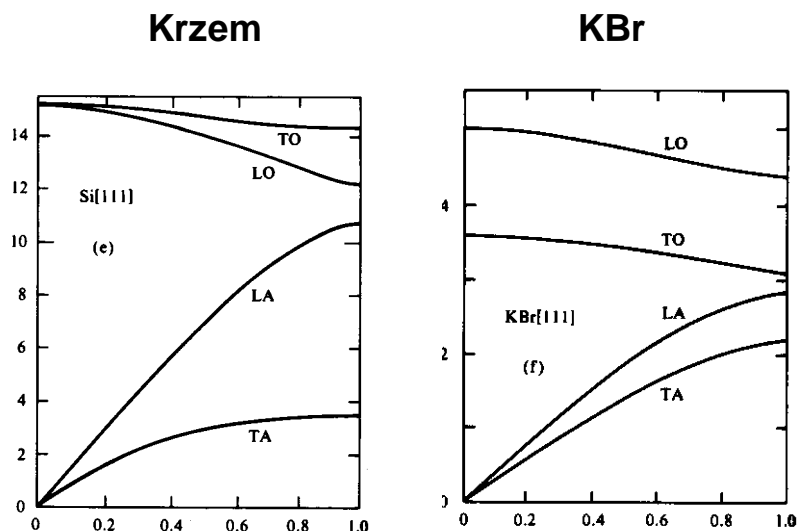
**UWAGA! - WAŻNE** (przy nadprzewodnictwie) –

$$\omega \approx \left( \sqrt{\frac{\alpha/2}{m+M}} \right) ka$$

zauważmy, że częstość drgań (tym samym też energia) zależą od masy jak  $m^{-1/2}$

w rzeczywistych kryształach dla drgań każdego typu (akustycznego i optycznego) mogą być różne gałęzie dla modów poprzecznych i podłużnych (nomenklatura)

### Przykłady



### Kwantowanie fal sprężystych – fonony

Gdy mamy  $Z$  atomów w komórce elementarnej (numerujemy je indeksem  $s$ ) to równania na ich wychylenia

$$M_s \ddot{\mathbf{u}}_s(\mathbf{k}) = - \sum_{s'} \mathbf{G}_{ss'}(\mathbf{k}) \mathbf{u}_{s'}(\mathbf{k})$$

szukając rozwiązań typu

$$\mathbf{u}_s(\mathbf{k}) = \mathbf{u}_s(\mathbf{k}) e^{i\omega t}$$

po wsatwieniu otrzymamy

$$\sum_{s'j'} \left\{ \mathbf{G}_{ss'}^{jj'}(\mathbf{k}) - \omega^2 M_s \delta_{ss'} \delta_{jj'} \right\} u_{s'}^{j'}(\mathbf{k}) = \mathbf{0} \quad (\text{XX})$$

$j$  - składowe kartezjańskie

jest to układ równań na  $3z$  niewiadomych ( $z$  atomów w komórce) rozwiązując dostaniemy

$3z$  wartości  $\omega_i$  (zależnych od  $k$ )

te właśnie  $\omega_i$  - to mody normalne

- oczywiście zależą od  $\mathbf{k}$ ,  $\omega_i(\mathbf{k})$

można pokazać, że energię całkowitą drgającej sieci,  $E_{\text{kin}} + V$ , w takim przybliżeniu HARMONICZNYM można zapisać jako

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, i} \left[ \left| \frac{d\hat{\mathbf{u}}^{(i)}(\mathbf{k})}{dt} \right|^2 + (\omega_i(\mathbf{k}))^2 |\hat{\mathbf{u}}^{(i)}(\mathbf{k})|^2 \right] \quad (\text{XXX})$$

$\mathbf{u}$  – z daszkiem - oznacza rozwiązania (XX)

(XXX) – ma postać energii układu oscylatorów harmonicznyc

przechodząc do opisu kwantowego będziemy mieli



układ kwantowych oscylatorów harmoniczych (KOH)

z energią

$$E_s = \sum_{\mathbf{k}i} \left( n_{\mathbf{k}s}^i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i(\mathbf{k})$$

$s$  - oznacza stan układu (KOH)

$n_s$  - ilość **fononów** w stanie  $\mathbf{k}, i$  ( $i$  – numeruje mod normalny)

.... trochę dodać o interpretacji kwazicząstek jako „wzbudzeń” ...