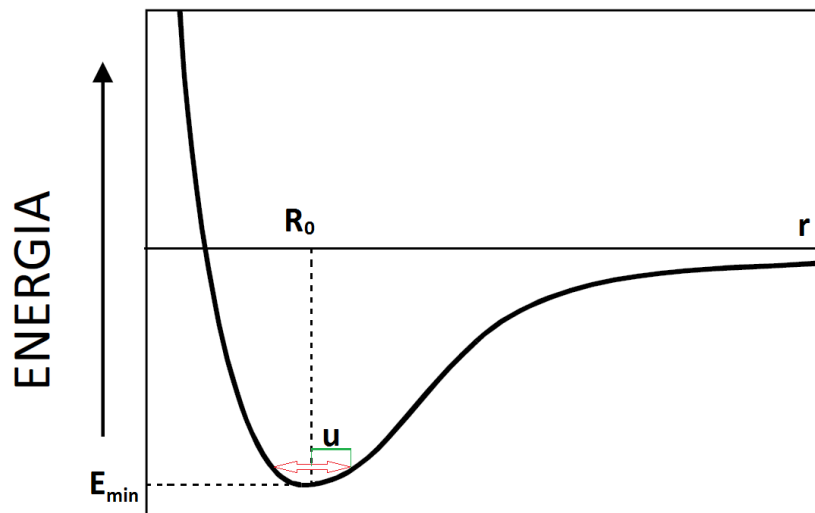


6. Dynamika kryształów

Na zajęciach zajmiemy się drganiami sieci krystalicznej (rozchodzeniem się fal sprężystych). Energia drgań sieci, podobnie jak miało to miejsce w elektromagnetyzmie, jest skwantowana. Analogicznie zatem, pojawia się nam **kwant energii fali sprężystej - fonon**, będący odpowiednikiem kwantu energii fali EM - fotonu. Mówiąc inaczej, fale rozchodzące się w ośrodkach stałych, drgania cieplne kryształów itd. składają się z fononów.

Wróćmy na moment do wykresu, przedstawiającego energię oddziaływania atomów:



Rys.6.1. Wykres energii oddziaływania dwóch sąsiadujących atomów.

Jak pamiętamy, dla każdego układu tego typu jesteśmy w stanie wyznaczyć pewną odległość równowagową R_0 , dla której energia układu osiąga minimum. **Nie oznacza to jednak, że atom spoczywa w tej pozycji, wręcz przeciwnie, podlega ciągłym drganiom termicznym wokół położenia równowagowego, jak również na skutek rozchodzenia się w ośrodku fal sprężystych.** Jeśli drgania te mają niewielką amplitudę, to w pierwszym przybliżeniu siłę działającą na dany atom możemy zapisać jako:

$$\vec{F} = -C\vec{u} \quad (6.1)$$

Gdzie: C - stała siłowa

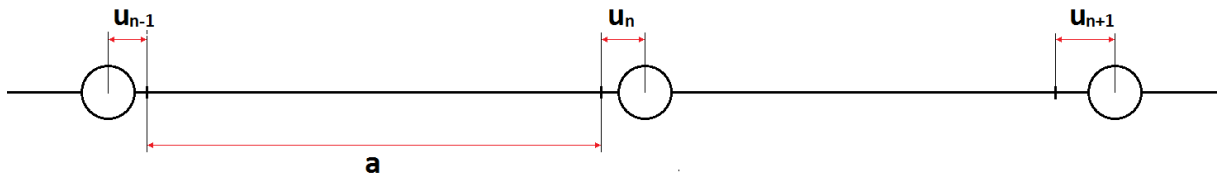
\vec{u} - odchylenie od punktu równowagi

Zauważmy, że równanie (6.1) ma dokładnie taką samą postać jak równanie na siłę sprężystości znane z kursu fizyki:

$$\vec{F} = -k\vec{x} \quad (6.2)$$

6.1. Dynamika 1-wymiarowego łańcucha atomów

Rozważmy teraz łańcuch połączonych ze sobą atomów, wychylonych z położenia równowagowego:



Rys.6.2. Atomy wychylone z położenia równowagi.

Gdzie: u_n - wychylenie atomu n z położenia równowagi

a - odległość między położeniami równowagowymi

Bazując na wzorze (6.1), jesteśmy w stanie określić siłę działającą na n -ty atom (zaniedbujemy wpływ atomów nie będących najbliższymi sąsiadami):

$$F = C(u_{n+1} - u_n) - C(u_n - u_{n-1}) = -2Cu_n + C(u_{n+1} + u_{n-1}) \quad (6.3)$$

Zgodnie z dynamiką Newtona, siła to iloczyn masy i przyspieszenia, a zatem:

$$F = m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -2Cu_n + C(u_{n+1} + u_{n-1}) \quad (6.4)$$

Ponieważ rozważamy rozchodzenie się fal sprężystych, to wychylenia z położen równowagowych możemy wyrazić za pomocą odpowiednich równań falowych. Ogólny zapis fali w ośrodku ciągłym, który poznaliśmy jeszcze na pierwszych zajęciach, ma postać:

$$u(x, t) = A \exp[i(kx - \omega t)] \quad (6.5)$$

Gdzie: A - amplituda

k - wartość wektora falowego

ω - częstość kołowa

Musimy jednak pamiętać, że rozważamy rozchodzenie się fali nie w ośrodku ciągłym, ale w ośrodku zbudowanym z pojedynczych atomów oddalonych od siebie o odległość a , zatem musimy przepisać równanie (6.5) w postaci odpowiedniej do ośrodka dyskretnego:

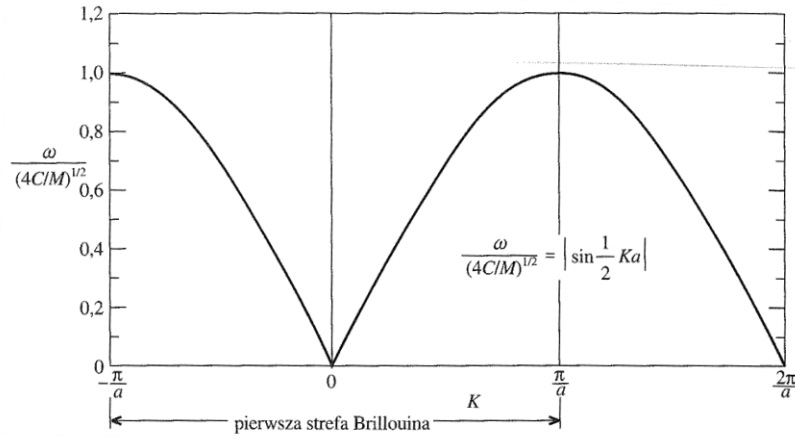
$$\begin{aligned} u_n &= A \exp[i(kna - \omega t)] \\ u_{n+1} &= A \exp[i(k(n+1)a - \omega t)] \\ u_{n-1} &= A \exp[i(k(n-1)a - \omega t)] \end{aligned} \quad (6.6)$$

Podstawiając (6.6) do równania (6.4), po obliczeniu odpowiednich pochodnych oraz przekształceniach, dojdziemy do wzoru:

$$\omega = \sqrt{\frac{2C}{m}(1 - \cos ka)} = \sqrt{\frac{4C}{m} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)} \quad (6.7)$$

Równanie (6.7) jest zwane również **relacją dyspersji**.

Prześledźmy teraz zachowanie funkcji podanej wzorem (6.7) na wykresie:



Rys.6.3. Wykres zależności $\omega(k)$.

Jak można zauważyć, funkcja ta jest periodyczna, przy czym periodem identyczności jest przedział $\pm \frac{\pi}{a}$.

Wartości te wyznaczają zakres pierwszej strefy Brillouina. Oznacza to, iż wartości wektora falowego k przyjmują tylko wartości leżące w granicach pierwszej strefy Brillouina.

6.2. Prędkość grupowa

Prędkość grupowa jest wielkością, która **informuje nas o prędkości przenoszenia energii** w ośrodku. Z definicji:

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \quad (6.8)$$

Na podstawie równania (6.7) możemy zapisać:

$$v_g = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} \cos \frac{1}{2} ka \quad (6.9)$$

Zwróćmy uwagę, że gdy jesteśmy przy końcach strefy Brillouina, czyli gdy $k = \frac{\pi}{a}$, prędkość grupowa równa się 0. Oznacza to, iż **fala jest falą stojącą**, której przekazywana średnia energia jest równa zero.

6.3. Periodyczne warunki brzegowe

Wyobraźmy sobie kryształ złożony z N komórek. Zastanówmy się teraz, ile możliwych wartości może przyjąć wektor k przy takim założeniu. Aby ułatwić zadanie, wprowadźmy tzw. periodyczne warunki brzegowe:

$$u(n=0) = u(n=N) \quad (6.10)$$

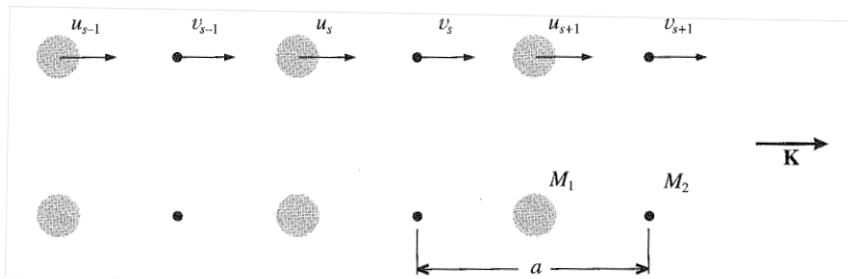
Oznacza to, że wychylenie z położenia równowagi jest takie same dla wszystkich atomów. Na podstawie (6.6) i (6.10) możemy zapisać:

$$A \exp[-i\omega t] = A \exp[i(kNa - \omega t)] \quad (6.11)$$

Po odpowiednim wyprowadzeniu, dostajemy, że liczba stanów (dozwolonych wartości k), wynosi N , czyli **liczba dozwolonych wartości k w danej strefie Brillouina jest równa liczbie komórek prymitywnych w rozpatrywanej objętości kryształu.**

6.4. Sieć krystaliczna zawierająca 2 atomy na komórkę elementarną

W sytuacji gdy mamy dwa różne atomy w komórce elementarnej, wyprowadzona przez nas poprzednio relacja dyspersyjna zmienia swój charakter. Rozważmy kryształ tego typu (np. NaCl):



Rys.6.4. Kryształ zbudowany z dwóch typów atomów.

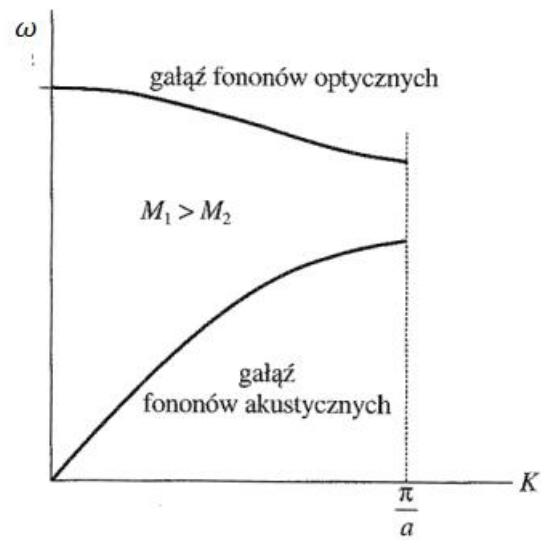
Widzimy, że ze względu na różną masę atomów, ich wychylenia w danej komórce elementarnej są różne. W skutek tego, konieczne jest zapisanie dwóch równań ruchu:

$$\begin{aligned} M_1 \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} &= C(v_n + v_{n-1} - 2u_n) \\ M_2 \frac{\partial^2 v_n}{\partial t^2} &= C(u_{n+1} + u_n - 2v_n) \end{aligned} \quad (6.12)$$

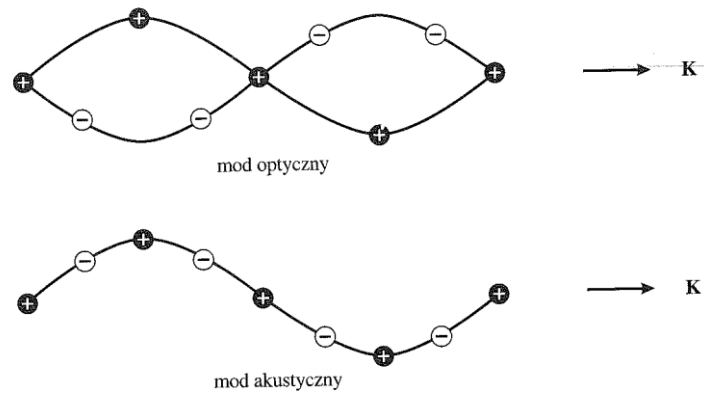
Rozwiązanie tego układu równań prowadzi do zależności:

$$\omega^2 = C \left[\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \left(\frac{ak}{2} \right)}{M_1 M_2}} \right] \quad (6.13)$$

Jak można zauważyć, równanie posiada dwa pierwiastki, w zależności od znaku. Mówimy o występowaniu **dwóch gałęzi fononów: optycznej i akustycznej**. Im więcej mamy atomów w komórce, tym liczniejsze stają się gałęzi relacji dyspersji.



Rys.6.5. Relacja dyspersji w kryształ o dwóch atomach na komórkę elementarną.



Rys.6.6. Poprzeczne fale optyczna i akustyczna w modelu dwuatomowej sieci liniowej, odpowiadające dwóm modom o tej samej długości fali.