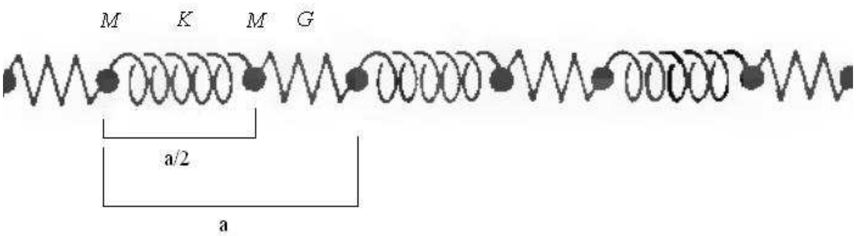
Fizika trdne snovi

Nihanje 1D mreže z bazo

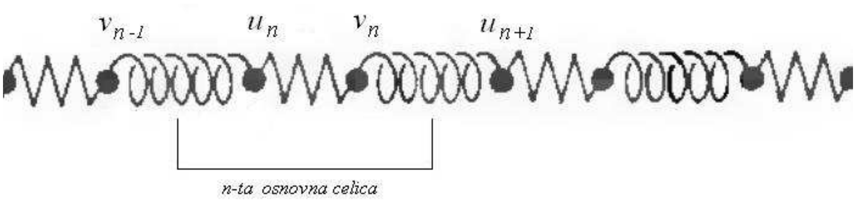
Nuša Pukšič

Naloga:

Obravnavamo nihanje eno-dimenzionalne mreže enakih atomov na razdalji $a/2$, ki so izmenično povezani z vzmetmi s koeficientoma K in G, kot kaže slika 1. Kakšna je fononska disperzija take verige?



Slika 1: Prikaz verige z označbami (slika ni v merilu). Razdalje med atomi so $a/2$, osnovna celica vsebuje dva atoma (dolžina osnovne celice je a). Koeficienta vzmeti označimo s K in G, maso atomov z M.



Slika 2: Prikaz verige z označbami (slika ni v merilu). Osnovne celice oštevilčimo. V vsaki celici prvemu atomu pripišemo odmik u in drugemu odmik v.

Rešitev:

Potencialno energijo sistema zapišemo z vsoto po osnovnih celicah:

$$U = \frac{1}{2} \sum_n \Big(K(u_n - v_{n-1})^2 + G(v_n - u_n)^2 \Big) \,, \tag{1}$$

iz tega pa dobimo gibalne enačbe z odvajanjem po u_n in v_n:

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_n &= -\frac{\partial U}{\partial u_n} = -K(u_n - v_{n-1}) + G(v_n - u_n), \\ M\ddot{v}_n &= -\frac{\partial U}{\partial v_n} = K(u_{n+1} - v_n) - G(v_n - u_n). \end{aligned} \tag{2}$$

Rešitve iščemo v obliki:

$$u_n = A\, e^{ikna - i\omega t}, \quad v_n = B\, e^{ikna - i\omega t}, \tag{3}$$

kjer sta A in B konstanti, katerih razmerje bo določalo relativno amplitudo in fazo nihanja atomov v osnovni celici. Nastavka vstavimo v zgornji enačbi gibanja in dobimo:

$$\begin{aligned} -\omega^2 MA + K(A - B\, e^{-ika}) - G(B - A) &= 0, \\ -\omega^2 MB - K(A\, e^{ika} - B) + G(B - A) &= 0. \end{aligned} \tag{4}$$

Tak par sklopljenih homogenih enačb za A in B ima netrivialne rešitve, ko je determinanta matrike koeficientov enaka nič.

$$M = \begin{pmatrix} -\omega^2 M + K + G & -Ke^{-ika} - G \\ -Ke^{ika} - G & -\omega^2 M + K + G \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$\det M = 0 = \left(K + G - M\omega^2\right)^2 - (Ke^{ika} + G)(Ke^{-ika} + G). \tag{6}$$

Iz tega dobimo kvadratno enačbo za ω^2:

$$M^2\omega^4 - 2M(K+G)\omega^2 + 2KG(1 - \cos ka) = 0 \tag{7}$$

z rešitvijo:

$$\omega^2 = \frac{K+G}{M} \pm \frac{1}{M}\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG\cos ka}\,. \tag{8}$$

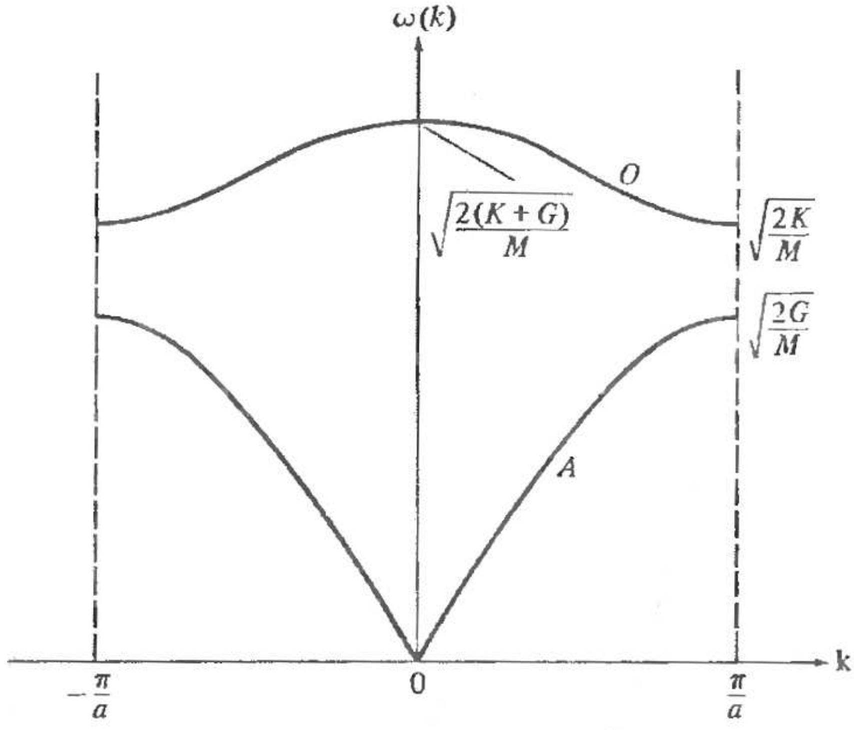
Krivulji $\omega(k)$ imenujemo veji disperzijske zveze (slika 3). Spodnjo vejo imenujemo akustična[1], drugo optična[2].

Razmerje amplitud nihanja atomov v osnovni celici dobimo tako, da dobljeno ω^2 vstavimo v eno od enačbo za A in B (enačbi 4) in izrazimo razmerje:

$$\frac{B}{A} = \mp \frac{Ke^{ika} + G}{\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG\cos ka}} = \mp \frac{Ke^{ika} + G}{|Ke^{ika} + G|}. \tag{9}$$

[1]Akustična veja: Ime je posledica tega, da je disperzija za majhne k oblike $\omega = ck$, ki je značilna za zvočno valovanje.

[2]Optična veja: Nihanja z večjimi valovnimi dolžinami lahko v ionskih kristalih interagirajo z elektromagnetnim valovanjem in prispevajo k optičnim lastnostim kristalov.



Slika 3: Disperzija verige. Spodnja veja je akustična, zgornja optična. Na sliki so označene mejne vrednosti ω.

1. primer: $ka \to 0$

V tem primeru lahko $\cos ka$ nadomestimo s prvima členoma vrste: $1-(ka)^2/2$ in koren razvijemo:

$$\sqrt{K^2+G^2+2KG\left(1-\frac{(ka)^2}{2}\right)} = \sqrt{(K+G)^2-KG(ka)^2} = \tag{10}$$

$$= (K+G)\sqrt{1-\frac{KG(ka)^2}{(K+G)^2}} \quad \to \quad (K+G)\left(1-\frac{KG}{2(K+G)^2}(ka)^2\right). \tag{11}$$

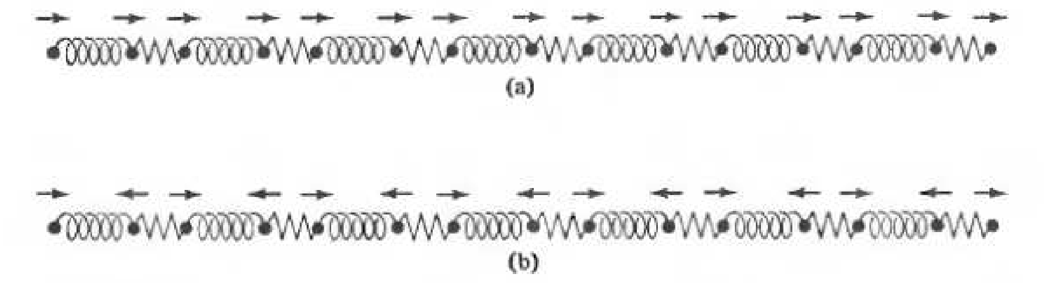
Tedaj lahko zapišemo:

$$\omega^2 = \frac{K+G}{M} \pm \frac{K+G}{M}\left(1-\frac{KG}{2(K+G)^2}(ka)^2\right), \tag{12}$$

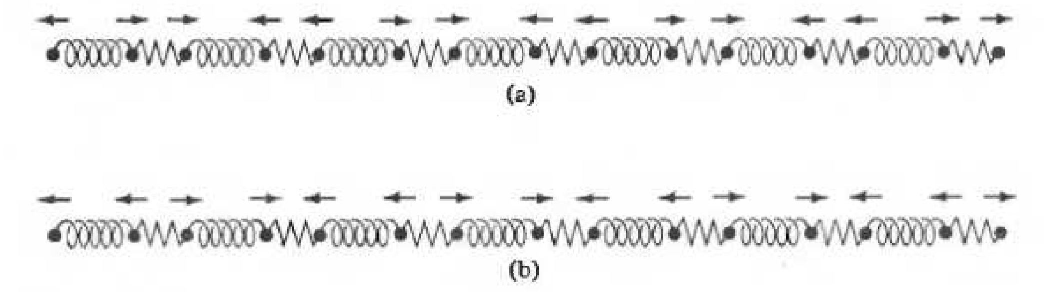
in ločeno za optično in akustično vejo:

$$\omega_{opt} = \sqrt{\frac{2(K+G)}{M}}, \quad \omega_a = ka\sqrt{\frac{KG}{2M(K+G)}}. \tag{13}$$

Hkrati dobimo za razmerje amplitud (enačba 9): $B=\mp A$. Plus ustreza akustični veji in nihanju atomov v osnovni celici z isto fazo, minus pa ustreza optičnemu načinu s faznim zamikom π med atomoma v osnovni celici. (Slika 2.)



Slika 4: Akustični (a) in optični (b) nihajni način v centru Brillouinove cone. Vse osnovne celice nihajo enako. Osnovna celica vsebuje atoma povezana z vzmetjo s koeficientom G (nazobčana črta).



Slika 5: Akustični (a) in optični (b) nihajni način na robu Brillouinove cone. Faza se med sosednjimi celicami spreminja za π, znotraj celice pa je nihanje v obeh primerih isto kot v 1. primeru. Če bi bila koeficienta vzmeti K in G enaka, bi bili gibanji nerazločljivi.

2. primer: $ka \to \pi$
V tem primeru aproksimiramo $\cos ka$ z -1 in dobimo:

$$\omega^2 = \frac{K+G}{M} \pm \frac{K-G}{M}\,, \tag{14}$$

$$\omega_{opt} = \sqrt{\frac{2K}{M}}\,, \quad \omega_a = \sqrt{\frac{2G}{M}}\,. \tag{15}$$

Tudi v tem primeru velja $B = \mp A$, le da je gibanje sosednjih celic fazno zamaknjeno za π. V obeh primerih se razteguje in krči le ena vrsta vzmeti. (Slika 3.)