

Fizyka Materii Skondensowanej

Fonony



Wydział Fizyki UW
Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl




Projekt: POKL 04.01.01-00-100/10-00 "Chemia, fizyka i biologia na potrzeby społeczeństwa XXI wieku: nowe makroierunki studiów I, II i III stopnia"

Wstęp

Mamy:
Kryształ
Strukturę pasmową (f. Blocha)
Gęstości stanów elektronowych (prawie swobodny elektron, LCAO)

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R})$$

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = [\hat{T}_N + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R})]\Psi(\vec{r}, \vec{R}) =$$

$$= \sum_k \{ \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) \left[\sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right] \chi^k(\vec{R}) + \dots \}$$

Równanie Schrödingera dla ruchu jąder!

2013-06-02 2

Opis teoretyczny materii skondensowanej

Przybliżenie Borna Oppenheimera



Max Born
(1882-1970)



Jacob R. Oppenheimer
(1904-1967)

3

Opis teoretyczny materii skondensowanej

Przybliżenie Borna Oppenheimera

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R})$$

$$H_{el}(\vec{r}, \vec{R})\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) = [\hat{T}_e + V(\vec{r}, \vec{R}) + V_e(\vec{r})]\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) = E_{el}^k(\vec{R})\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})$$

Rozwiązania dla pełnego hamiltonianu układu elektronów i jąder (jonów) poszukujemy teraz w postaci kombinacji liniowej $\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})$ odpowiadających różnym możliwym funkcjom elektronowym:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_k \chi^k(\vec{R}) \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})$$

Operatory pędu dla jonów będą działały także na $\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})$:

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = [\hat{T}_N + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R})]\Psi(\vec{r}, \vec{R}) =$$

$$= \sum_k \{ \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) \left[\sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right] \chi^k(\vec{R}) +$$

$$+ \sum_N \frac{\hbar^2}{2M_N} [2\nabla_{R_N} \chi^k(\vec{R}) \nabla_{R_N} \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) + \chi^k(\vec{R}) \Delta_{R_N} \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})] \}$$

2013-06-02 4

Opis teoretyczny materii skondensowanej

Przybliżenie Borna Oppenheimera

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R})$$

$$H_{el}(\vec{r}, \vec{R})\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) = [\hat{T}_e + V(\vec{r}, \vec{R}) + V_c(\vec{r})]\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) = E_{el}^k(\vec{R})\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})$$

Rozwiązania dla pełnego hamiltonianu układu elektronów i jąder (jonów) poszukujemy teraz w postaci kombinacji liniowej $\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})$ odpowiadających różnym możliwym funkcjom elektronowym:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_k \chi^k(\vec{R}) \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})$$

Operatory pędu dla jonów będą działały także na $\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})$:

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = [\hat{T}_N + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R})]\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_k \{ \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) \left[\sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right] \chi^k(\vec{R}) + \sum_N \frac{\hbar^2}{2M_N} [2V_{RN}\chi^k(\vec{R})\nabla_{RN}\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) + \chi^k(\vec{R})\Delta_{RN}\Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R})] \}$$

Sprzężenie elektron-fonon

2013-06-02

5

Opis teoretyczny materii skondensowanej

Przybliżenie Borna Oppenheimera

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R})$$



$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = [\hat{T}_N + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R})]\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_k \{ \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) \left[\sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right] \chi^k(\vec{R}) + \dots \}$$

Równanie Schrödingera dla ruchu jąder!

$\chi^k(\vec{R})$ ma sens funkcji falowej opisującej ruch jąder (jonów) w potencjale wzajemnego ich oddziaływania $G(\vec{R})$ oraz adiabatyicznego wkładu elektronów w energię ruchu jąder/ionów (energii sieci) $E_{el}^k(\vec{R})$

Pomiary sprzężenia elektron-fonon

2013-06-02

6

Opis teoretyczny materii skondensowanej

Przybliżenie Borna Oppenheimera

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R})$$



$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = [\hat{T}_N + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R})]\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_k \{ \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) \left[\sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right] \chi^k(\vec{R}) + \dots \}$$

Równanie Schrödingera dla ruchu jąder!

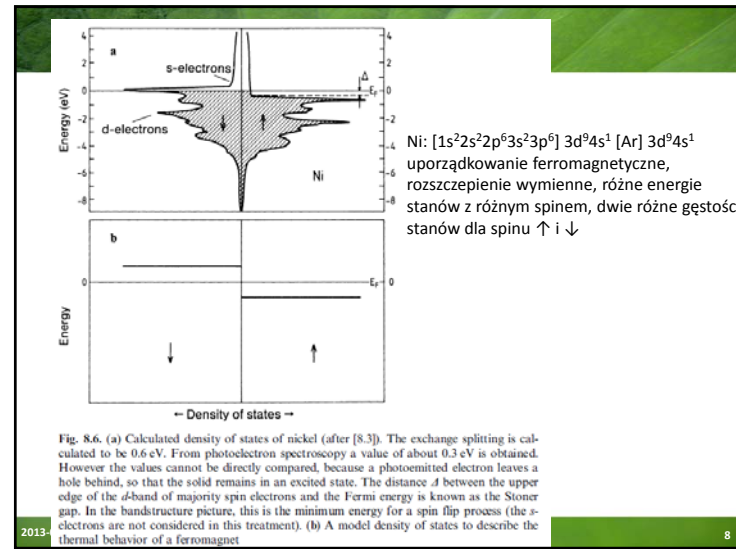
Równowagowy układ położeń jąder/jonów (równowagowa wartość stałej sieci) odpowiada minimum efektywnego potencjału dla ruchu jąder:

$$U_{eff}^k(\vec{R}) = E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \approx U_{eff}^k(\vec{R}_0) + U_{eff}^k(\delta\vec{R})$$

Energia potencjalna sieci zawierają człony co najmniej kwadratowe we względnych przesunięciach jonów. Ograniczenie się do członów kwadratowych daje nam obraz drgań sieci jako zbioru sprzężonych oscylatorów harmoniczných. Dołożenie wyższych członów rozwinięcia daje efekty anharmoniczne (np. rozszerzalność termiczną, oddziaływanie fonon-fonon)

2013-06-02

7



2013-

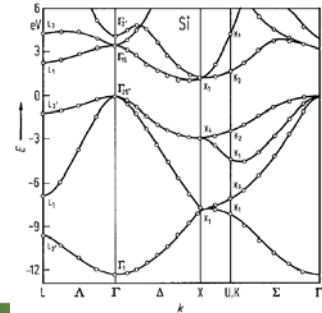
8

Półprzewodniki

Półprzewodniki grupy IV (Si, Ge) – struktura diamentu

Związki półprzewodnikowe AIIIBV (np. GaAs, GaN) i AIIBVI (np. ZnTe, CdSe) – struktura blendy cynkowej lub wurcytu

Związki półprzewodnikowe AIVBVI (np. SnTe, PbSe) – struktura NaCl



Si
Przerwa energetyczna skośna, $E_g = 1,1 \text{ eV}$
Minimum pasma przewodnictwa na kierunku Δ , powierzchni stałej energii – elipsoidy obrotowe (6 sztuk), $m_{||}=0,92 m_0$, $m_{\perp}=0,19 m_0$,
Maksimum pasma walencyjnego w punkcie Γ , $m_{lh}=0,153 m_0$, $m_{hh}=0,537 m_0$, $m_{so}=0,234 m_0$, $\Delta s_0=0,043 \text{ eV}$

2013-06-02

9

Wstęp

Mamy:

Kryształ

Strukturę pasmową (f. Blocha)

Gęstości stanów elektronowych (prawie swobodny elektron, LCAO)

A co z tą siecią atomową?

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R})$$

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = [\hat{T}_N + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R})]\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_k \{ \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) \left[\sum_N \frac{P_N^k}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right] \chi^k(\vec{R}) + \dots \}$$

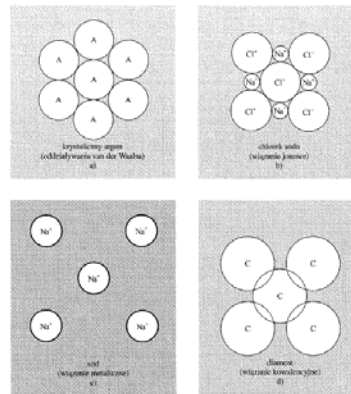
Równanie Schrödingera dla ruchu jąder!

2013-06-02

10

Współczynniki sprężystości

Za spójność ciał stałych całkowicie odpowiedzialne jest elektrostatyczne oddziaływanie przyciągające między dodatnio naładowanymi jądrami i ujemnymi elektronami.



Rys. 1. Podstawowe rodzaje wiązań krystalicznych: a) obojętne atomy z całkowicie zapełnionymi powłokami elektronowymi połączone są za pośrednictwem słabych oddziaływań van der Waalsa, związanych z fluktuacjami rozkładu ładunku, b) elektrony przenieszone są z atomów sodu do atomów chloru, powstaje w ten sposób jon dodatni i ujemnie przyciągają się elektrostatycznie, c) elektrony walencyjne poszczególnych atomów litowców tworzą wspólne „morze” elektronów, w którym rozmieszczone są dodatnie jony, d) obojętne atomy są związane ze sobą w wyniku częściowego przekrywania się ich rozkładów elektronów

2013-06-02

90

11

Współczynniki sprężystości

Energia kohezji (spójności) kryształu to energia, jaką trzeba dostarczyć, by rozłożyć kryształ na zbiór swobodnych atomów o tej samej konfiguracji elektronów, znajdujący się w spoczynku, w nieskończonej odległości od siebie.

Energia sieci (dla kryształów jonowych) – to energia, jaką należy dostarczyć, by rozłożyć kryształ na zespół swobodnych, nieskończenie odległych od siebie jonów.

L1		L2		L3		L4		L5		L6		L7		L8		L9		L10	
Grupa	Symbol	Grupa	Symbol	Grupa	Symbol	Grupa	Symbol	Grupa	Symbol	Grupa	Symbol	Grupa	Symbol	Grupa	Symbol	Grupa	Symbol	Grupa	Symbol
1	H	2	He	3	Li	4	Be	5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne
11	Na	12	Mg	13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar	19	K	20	Ca
21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn
31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr	37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr
41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Hg
51	Tl	52	Pb	53	Bi	54	Po	55	At	56	Fr	57	Ra	58	Ac	59	Th	60	Pa
61	U	62	Np	63	Pu	64	Am	65	Cm	66	Bk	67	Cf	68	Es	69	Fm	70	Md
71	No	72	Lr	73	Rf	74	Db	75	Sg	76	Bh	77	Hs	78	Mt	79	Ds	80	Cn

Ch. Kittel Wstęp do fizyki ciała stałego

2013-06-02

12

Współczynniki sprężystości

Przemieszczenie \mathbf{R} punktu $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}$ do $\mathbf{r}' = xx' + yy' + zz'$ spowodowane deformacją:

$$\mathbf{R} \equiv \mathbf{r}' - \mathbf{r} = x(x' - \hat{x}) + y(y' - \hat{y}) + z(z' - \hat{z})$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{r}' - \mathbf{r} = (x\epsilon_{xx} + y\epsilon_{xy} + z\epsilon_{xz})\hat{\mathbf{x}} + (x\epsilon_{yx} + y\epsilon_{yy} + z\epsilon_{yz})\hat{\mathbf{y}} + (x\epsilon_{zx} + y\epsilon_{zy} + z\epsilon_{zz})\hat{\mathbf{z}}$$

Co można zapisać w ogólnej postaci wprost

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})\hat{\mathbf{x}} + v(\mathbf{r})\hat{\mathbf{y}} + w(\mathbf{r})\hat{\mathbf{z}}$$

Zatem $x\epsilon_{xx} = x \frac{\partial u}{\partial x}$, $y\epsilon_{xy} = y \frac{\partial u}{\partial x}$, itd.

$$\text{Składowe odkształcenia } \epsilon_{xx} = \epsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \epsilon_{yy} = \epsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \epsilon_{zz} = \epsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}$$

Pozostałe składowe odkształceń dane są przez zmiany kątów pomiędzy osiami

$$\begin{aligned} \epsilon_{xy} &\equiv \hat{\mathbf{x}}' \cdot \hat{\mathbf{y}}' \equiv \epsilon_{yx} + \epsilon_{xy} = \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \\ \epsilon_{yz} &\equiv \hat{\mathbf{y}}' \cdot \hat{\mathbf{z}}' \equiv \epsilon_{zy} + \epsilon_{yz} = \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \\ \epsilon_{zx} &\equiv \hat{\mathbf{z}}' \cdot \hat{\mathbf{x}}' \equiv \epsilon_{xz} + \epsilon_{zx} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \end{aligned}$$

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

2013-06-02

17

Sprawdzić przed wykładem!!!
 $y\epsilon_{xy} = y \frac{\partial u}{\partial x}$ itp

Współczynniki sprężystości

Względny przyrost objętości związany z odkształceniem nazywany jest **rozszerzalnością**.

$$V' = \mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' \times \mathbf{z}' = \begin{vmatrix} 1 + \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & 1 + \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & 1 + \epsilon_{zz} \end{vmatrix} \cong 1 + e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$$

(pomijamy iloczyn dwóch składowych odkształcenia). Rozszerzalność δ jest dana przez:

$$\delta = \frac{V' - V}{V} \cong e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$$

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

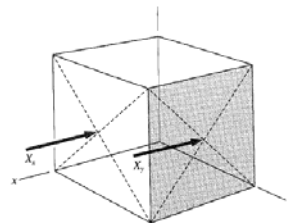
2013-06-02

18

Naprężenie

Naprężenie to siła działająca na jednostkę powierzchni ciała stałego. Mamy 9 składowych naprężeń: $X_x, X_y, X_z, Y_x \dots$ itd.

kierunek siły kierunek \perp płaszczyzny



Uwaga: oznaczenia X_y lub σ_{xy} itp.

Rys. 15. Składowa naprężenia X_x oznacza siłę działającą w kierunku x , przyłożoną do jednostkowej powierzchni, do której prostopadła ma również kierunek x ; X_y oznacza siłę działającą w kierunku x , przyłożoną do jednostkowej powierzchni, do której prostopadła ma kierunek y

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

2013-06-02

19

Naprężenie

Naprężenie to siła działająca na jednostkę powierzchni ciała stałego. Mamy 9 składowych naprężeń: $X_x, X_y, X_z, Y_x \dots$ itd.

kierunek siły kierunek \perp płaszczyzny

Naprężenie – miara gęstości powierzchniowej sił wewnętrznych występujących w ośrodku ciągłym. Jednostką naprężenia jest paskal.

$$\lim_{S \rightarrow 0} \frac{\vec{F}}{S} = \hat{\sigma} \vec{n} = \begin{vmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{vmatrix} \vec{n}$$

Naprężenie w dowolnym punkcie zależy od kierunku, w którym jest rozpatrywane.

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

2013-06-02

20

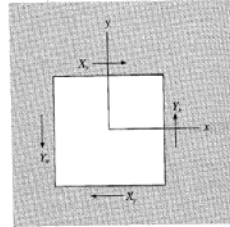
Naprężenie

Naprężenie to siła działająca na jednostkę powierzchni ciała stałego. Mamy 9 składowych naprężeń: $X_x, X_y, X_z, Y_x, Y_y, Y_z, Z_x, Z_y, Z_z$... itd.

kierunek siły kierunek \perp płaszczyzny

$$X_y = Y_x \text{ itd..}$$

Rys. 16. Ilustracja faktu, że dla ciała znajdującego się w równowadze siła $Y_x = X_y$. Suma sił działających w kierunku x jest równa zero, również suma sił działających w kierunku y jest równa zero. Znika także siła całkowita. Całkowity moment obrotowy względem początku układu współrzędnych jest również równy zero, jeśli $Y_x = X_y$.



Ostatecznie jest 6 składowych naprężenia. Współczynniki sprężystości są określone w warunkach statycznych (bez np. przyspieszeń kątowych)

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

2013-06-02

21

Naprężenie

Zgodnie z prawem Hooke'a dla dostatecznie małych deformacji odkształcenie jest wprost proporcjonalne do naprężenia:

$$\begin{aligned} e_{xx} &= S_{11}X_x + S_{12}Y_y + S_{13}Z_z + S_{14}Y_z + S_{15}Z_x + S_{16}X_y, \\ e_{yy} &= S_{21}X_x + S_{22}Y_y + S_{23}Z_z + S_{24}Y_z + S_{25}Z_x + S_{26}X_y, \\ e_{zz} &= S_{31}X_x + S_{32}Y_y + S_{33}Z_z + S_{34}Y_z + S_{35}Z_x + S_{36}X_y, \\ e_{yz} &= S_{41}X_x + S_{42}Y_y + S_{43}Z_z + S_{44}Y_z + S_{45}Z_x + S_{46}X_y, \\ e_{zx} &= S_{51}X_x + S_{52}Y_y + S_{53}Z_z + S_{54}Y_z + S_{55}Z_x + S_{56}X_y, \\ e_{xy} &= S_{61}X_x + S_{62}Y_y + S_{63}Z_z + S_{64}Y_z + S_{65}Z_x + S_{66}X_y. \end{aligned}$$

Zatem składowe naprężenia są linowymi funkcjami składowych odkształcenia:

$$\begin{aligned} X_x &= C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz} + C_{14}e_{yz} + C_{15}e_{zx} + C_{16}e_{xy}, \\ Y_y &= C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz} + C_{24}e_{yz} + C_{25}e_{zx} + C_{26}e_{xy}, \\ Z_z &= C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz} + C_{34}e_{yz} + C_{35}e_{zx} + C_{36}e_{xy}, \\ Y_z &= C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz} + C_{44}e_{yz} + C_{45}e_{zx} + C_{46}e_{xy}, \\ Z_x &= C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz} + C_{54}e_{yz} + C_{55}e_{zx} + C_{56}e_{xy}, \\ X_y &= C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} + C_{64}e_{yz} + C_{65}e_{zx} + C_{66}e_{xy}. \end{aligned}$$

Współczynniki S_{11}, S_{12}, \dots itd. nazywane są **współczynnikami podatności sprężystej**, lub **współczynnikami sprężystości**. Wielkości C_{11}, C_{12}, \dots itd. **współczynnikami sztywności sprężystej** albo **modułem sprężystości**.

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

2013-06-02

22

Naprężenie

Zgodnie z prawem Hooke'a dla dostatecznie małych deformacji odkształcenie jest wprost proporcjonalne do naprężenia:

$$\begin{aligned} [S] &= [\text{powierzchnia}]/[\text{siła}] \\ [S] &= [\text{objętość}]/[\text{energia}] \end{aligned}$$

lub notacja $\epsilon_{kl} = S_{klj} \sigma_{ij}$

$$\begin{aligned} e_{xx} &= S_{11}X_x + S_{12}Y_y + S_{13}Z_z + S_{14}Y_z + S_{15}Z_x + S_{16}X_y, \\ e_{yy} &= S_{21}X_x + S_{22}Y_y + S_{23}Z_z + S_{24}Y_z + S_{25}Z_x + S_{26}X_y, \\ e_{zz} &= S_{31}X_x + S_{32}Y_y + S_{33}Z_z + S_{34}Y_z + S_{35}Z_x + S_{36}X_y, \\ e_{yz} &= S_{41}X_x + S_{42}Y_y + S_{43}Z_z + S_{44}Y_z + S_{45}Z_x + S_{46}X_y, \\ e_{zx} &= S_{51}X_x + S_{52}Y_y + S_{53}Z_z + S_{54}Y_z + S_{55}Z_x + S_{56}X_y, \\ e_{xy} &= S_{61}X_x + S_{62}Y_y + S_{63}Z_z + S_{64}Y_z + S_{65}Z_x + S_{66}X_y. \end{aligned}$$

Zatem składowe naprężenia są linowymi funkcjami składowych odkształcenia:

$$\begin{aligned} X_x &= C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz} + C_{14}e_{yz} + C_{15}e_{zx} + C_{16}e_{xy}, \\ Y_y &= C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz} + C_{24}e_{yz} + C_{25}e_{zx} + C_{26}e_{xy}, \\ Z_z &= C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz} + C_{34}e_{yz} + C_{35}e_{zx} + C_{36}e_{xy}, \\ Y_z &= C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz} + C_{44}e_{yz} + C_{45}e_{zx} + C_{46}e_{xy}, \\ Z_x &= C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz} + C_{54}e_{yz} + C_{55}e_{zx} + C_{56}e_{xy}, \\ X_y &= C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} + C_{64}e_{yz} + C_{65}e_{zx} + C_{66}e_{xy}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [C] &= [\text{siła}]/[\text{powierzchnia}] \\ [C] &= [\text{energia}]/[\text{objętość}] \end{aligned}$$

lub notacja $\sigma_{kl} = C_{klj} \epsilon_{ij}$

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

2013-06-02

23

Naprężenie

Gęstość energii sprężystej (w zakresie stosowalności prawa Hooke'a):

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^6 \sum_{\mu=1}^6 \tilde{C}_{\lambda\mu} e_{\lambda} e_{\mu}$$

Gdzie wskaźniki od 1 do 6 są zdefiniowane jako:

$1 \equiv xx, 2 \equiv yy, 3 \equiv zz, 4 \equiv yz, 5 \equiv zx, 6 \equiv xy$

tensor czwartego rzędu (36 składowych)

Notacja Voigta:

$$S_{ij} = \sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix}$$

Składowe naprężenia to pochodne energii względem odkształcenia:

$$X_x = \sigma_{xx} = \frac{\partial U}{\partial e_{xx}} \equiv \frac{\partial U}{\partial e_1} = \tilde{C}_{11}e_1 + \frac{1}{2} \sum_{\beta=2}^6 (\tilde{C}_{1\beta} - \tilde{C}_{\beta 1}) e_{\beta}$$

Stąd $C_{\alpha\beta} = C_{\beta\alpha} = \frac{1}{2} (\tilde{C}_{\alpha\beta} - \tilde{C}_{\beta\alpha})$ - ostatecznie „tylko” 21 składowych.

dalej pominiemy ~

2013-06-02

24

Naprężenie

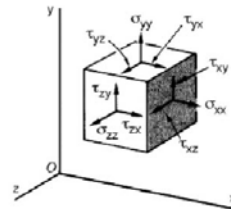
Notacja Voigta:

$$S_{ij} = \sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix}$$

3 naprężenia osiowe: $\sigma_1 \equiv \sigma_{xx}$, $\sigma_2 \equiv \sigma_{yy}$, $\sigma_3 \equiv \sigma_{zz}$ i 3 ścinania: $\sigma_5 \equiv \sigma_{xz} = \sigma_{zx}$ itp. (na rysunku zaznaczono τ_{xz} itp.)

Naprężenie dla ciśnienia hydrostatycznego

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix}$$



Ch. Kittel Wstęp do fizyki ciała stałego

2013-06-02

25

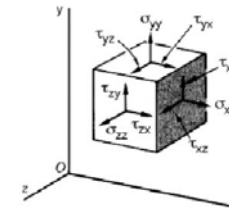
Naprężenie

Przemieszczenie R punktu $r = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}$ do $r' = xx' + yy' + zz'$ spowodowane deformacją:

Tensor odkształceń (deformacji – inna definicja $\rightarrow \frac{1}{2}$):

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial R_i}{\partial e_j} + \frac{\partial R_j}{\partial e_i} \right) = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \frac{1}{2}\varepsilon_5 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_5 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix}$$

$1 \equiv xx$, $2 \equiv yy$, $3 \equiv zz$, $4 \equiv yz$, $5 \equiv zx$, $6 \equiv xy$



Ch. Kittel Wstęp do fizyki ciała stałego

2013-06-02

26

Naprężenie

Przemieszczenie R punktu r deformacją:

Tensor odkształceń (deformacji):

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial R_i}{\partial e_j} + \frac{\partial R_j}{\partial e_i} \right) =$$

$1 \equiv xx$, $2 \equiv yy$, $3 \equiv zz$, $4 \equiv yz$, $5 \equiv zx$, $6 \equiv xy$

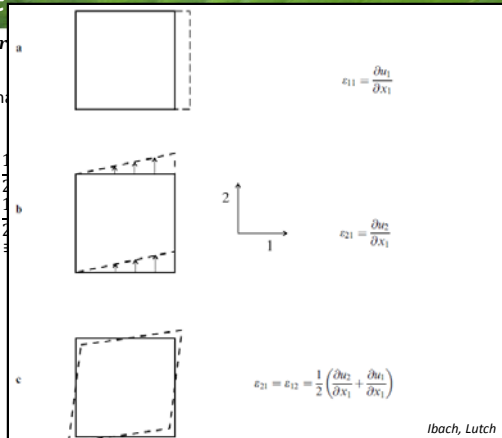


Fig. 4.6. Illustrations to elucidate the terminology in the theory of elasticity. (a) Strain along the x_1 -axis; (b) shear along the x_2 -axis, without separation of the rotational part of ε_{21} ; (c) the same shear after splitting off the rotational component by symmetrizing the strain tensor

2013-06-02

Naprężenie

Liniowa teoria sprężystości (prawo Hooke'a)

Tensory naprężeń i odkształceń są powiązane relacjami liniowymi $\varepsilon_{kl} = S_{klij}\sigma_{ij}$, oraz $\sigma_{kl} = C_{klij}\varepsilon_{ij}$ (patrz poprzednie slajdy).

W notacji Voigta $\varepsilon_i = S_{ij}\sigma_j$ oraz $\sigma_i = C_{ij}\varepsilon_j$ (UWAGA: konwencja sumowania po wskaźnikach) gdzie ε_i i σ_i są 6-wymiarowymi wektorami odpowiednio naprężeń i odkształceń, zaś S_{ij} i C_{ij} są macierzami 6x6 odpowiednio **współczynników podatności sprężystej** i **modułów sprężystości** (współczynników sztywności).

Liczba niezależnych współczynników sztywności sprężystej może być zmniejszona, jeśli kryształ ma elementy symetrii. Np. dla kryształu regularnego:

$$U = \frac{1}{2}C_{11}(e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2}C_{44}(e_{yz}^2 + e_{zx}^2 + e_{xy}^2) + \frac{1}{2}C_{12}(e_{yy}e_{zz} + e_{zz}e_{xx} + e_{xx}e_{yy})$$

(tylko takie wyrażenie jest niezmiennie względem przekształceń symetrii! Np. kąt $\frac{2}{3}\pi$)

M. Baj

2013-06-02

28

Naprężenie

Liniowa teoria sprężystości (prawo Hooke'a)

Tensory naprężeń i odkształceń są powiązane relacjami liniowymi $\epsilon_{kl} = S_{kl ij} \sigma_{ij}$, oraz $\sigma_{kl} = C_{kl ij} \epsilon_{ij}$ (patrz poprzednie slajdy).

W notacji Voigta $\epsilon_i = S_{ij} \sigma_j$ oraz $\sigma_i = C_{ij} \epsilon_j$ (UWAGA: konwencja sumowania po wskaźnikach) gdzie ϵ_i i σ_i są 6-wymiarowymi wektorami odpowiednio naprężeń i odkształceń, zaś S_{ij} i C_{ij} są macierzami 6x6 odpowiednio **współczynników podatności sprężystej** i **modułów sprężystości** (współczynników sztywności).

Macierze sprężystości:



M. Baj

2013-06-02

29

Właściwości mechaniczne

W ogólności współczynniki macierzy S_{ij} i C_{ij} można wyrazić przez siebie poprzez odwrócenie macierzy

• Dla struktury regularnej:

$$C_{44} = S_{44}^{-1}$$

$$C_{11} - C_{12} = (S_{11} - S_{12})^{-1}$$

$$C_{11} + 2C_{12} = (S_{11} + 2S_{12})^{-1}$$

• **Ścisłość dla struktury regularnej.** Ciśnienie hydrostatyczne:

$$\sigma_i = \begin{bmatrix} -p \\ -p \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \epsilon_i = -p \begin{bmatrix} S_{11} + 2S_{12} \\ S_{11} + 2S_{12} \\ S_{11} + 2S_{12} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \frac{\Delta V}{V} = -p3(S_{11} + 2S_{12})$$

Ścisłość:

$$\kappa = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = 3(S_{11} + 2S_{12})$$

Moduł sprężystości objętościowej

$$B = \kappa^{-1} = \frac{1}{3} (S_{11} + 2S_{12})^{-1}$$

1 \equiv xx, 2 \equiv yy, 3 \equiv zz, 4 \equiv yz, 5 \equiv zx, 6 \equiv xy

Ch. Kittel Wstęp do fizyki ciała stałego

2013-06-02

30

Właściwości mechaniczne

Moduł Younga E i współczynnik Poissona ν dla struktury regularnej (naprężenia osiowe).

Moduł Younga (E) – inaczej moduł odkształcalności liniowej albo moduł (współczynnik) sprężystości podłużnej (w układzie jednostek SI) – wielkość określająca sprężystość materiału. Wyraża ona, charakterystyczną dla danego materiału, zależność względnego odkształcenia liniowego ϵ materiału od naprężenia σ , jakie w nim występuje w zakresie odkształceń sprężystych.

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon}$$

Współczynnik Poissona (ν) jest stosunkiem odkształcenia poprzecznego do odkształcenia podłużnego przy osiowym stanie naprężenia. Współczynnik Poissona jest wielkością bezwymiarową i nie określa sprężystości materiału, a jedynie sposób, w jaki się on odkształca. Jeżeli pręt o średnicy d (lub dowolnym innym charakterystycznym wymiarze, np. szerokości) i długości L zostanie poddany rozciąganiu tak, że wydłuży się o ΔL , to jego średnica zmieni się (zmniejszy się, stąd dla uniknięcia wartości ujemnych współczynnika znak minus we wzorze) o:

$$\Delta d = -d \nu \frac{\Delta L}{L} \Rightarrow \nu = -\frac{\Delta d}{d} \frac{L}{\Delta L}$$

1 \equiv xx, 2 \equiv yy, 3 \equiv zz, 4 \equiv yz, 5 \equiv zx, 6 \equiv xy

[Wikipedia]

2013-06-02

31

Właściwości mechaniczne

Moduł Younga E i współczynnik Poissona ν dla struktury regularnej (naprężenia osiowe).

Moduł Younga (E) – inaczej moduł odkształcalności liniowej albo moduł (współczynnik) sprężystości podłużnej (w układzie jednostek SI) – wielkość określająca sprężystość materiału. Wyraża ona, charakterystyczną dla danego materiału, zależność względnego odkształcenia liniowego ϵ materiału od naprężenia σ , jakie w nim występuje w zakresie odkształceń sprężystych.

Współczynnik Poissona (ν) jest stosunkiem odkształcenia poprzecznego do odkształcenia podłużnego przy osiowym stanie naprężenia. Współczynnik Poissona jest wielkością bezwymiarową i nie określa sprężystości materiału, a jedynie sposób, w jaki się on odkształca [Wikipedia].

$$\epsilon_1 = \sigma_1 S_{11} = \frac{\sigma_1}{E}$$

$$\epsilon_2 = \epsilon_3 = \sigma_1 S_{12} = -\nu \epsilon_1$$

Moduł Younga $E = \frac{1}{S_{11}}$

Współczynnik Poissona: $\nu = -\frac{S_{12}}{S_{11}}$

1 \equiv xx, 2 \equiv yy, 3 \equiv zz, 4 \equiv yz, 5 \equiv zx, 6 \equiv xy

Ch. Kittel Wstęp do fizyki ciała stałego

2013-06-02

32

Właściwości mechaniczne

Moduł ścinania G dla struktury regularnej (naprężenia ścinające).

Moduł Kirchhoffa (G) (inaczej *moduł odkształcalności postaciowej* albo *moduł sprężystości poprzecznej*) - współczynnik uzależniający odkształcenie postaciowe materiału od naprężenia, jakie w nim występuje. Jednostką modułu Kirchhoffa jest paskal. Jest to wielkość określająca sprężystość materiału. [Wikipedia].

$$\sigma_i = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \Rightarrow \varepsilon_i = \sigma_6 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ S_{44} \end{bmatrix} \Rightarrow \varepsilon_6 = \sigma_6 S_{44} = \frac{\sigma_6}{G}$$

Moduł Kirchhoffa: $G = \frac{1}{S_{44}}$

1 \equiv xx, 2 \equiv yy, 3 \equiv zz, 4 \equiv yz, 5 \equiv zx, 6 \equiv xy

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

2013-06-02

33

Właściwości mechaniczne

Podsumowanie:

Struktura regularna:

$$E = \frac{1}{S_{11}}$$

$$v = -\frac{S_{12}}{S_{11}}$$

$$B = \kappa^{-1} = \frac{1}{3}(S_{11} + 2S_{12})^{-1} = \frac{E}{3(1-2v)}$$

$$G = \frac{1}{S_{44}}$$

Ciało izotropowe:

$$E = \frac{1}{S_{11}}$$

$$v = -\frac{S_{12}}{S_{11}}$$

$$B = \kappa^{-1} = \frac{1}{3}(S_{11} + 2S_{12})^{-1} = \frac{E}{3(1-2v)}$$

$$G = \frac{1}{2(1+v)}$$

1 \equiv xx, 2 \equiv yy, 3 \equiv zz, 4 \equiv yz, 5 \equiv zx, 6 \equiv xy

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

2013-06-02

34

Właściwości mechaniczne

Cisnienia hydrostatyczne:

zmieniają strukturę pasmową (energie stanów, a więc np. przerwy energetyczne, masy efektywne etc.)

Naprężenia osiowe, planarne etc.:

mogą zmieniać symetrię, co prowadzi do rozszczepień stanów zdegenerowanych (np. pasm walencyjnych w strukturze diamentu i blendy cynkowej, bocznych minimum pasm przewodnictwa, stanów domieszkowych etc. etc.)

Potencjał deformacyjny:

Zmiana energii danego stanu pod wpływem deformacji jest w przybliżeniu liniowym proporcjonalna do deformacji, np. zmiana energii ekstremum pasma pod wpływem deformacji zmieniającej objętość:

$$\delta E_{nk} = a_{nk} \left(\frac{\delta V}{V} \right)$$

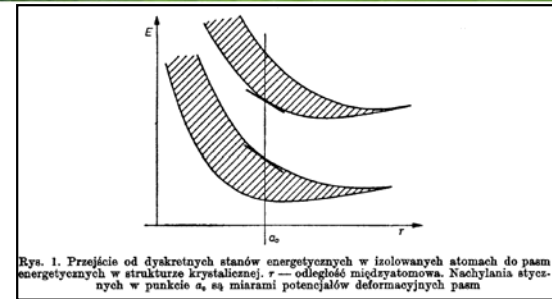
podobnie dla innych deformacji, w tym ścinających

M. Baj

2013-06-02

35

Właściwości mechaniczne



Marian Grynberg

Leonard Sosnowski

Institut Fizyki Doświadczalnej UW
Warszawa Instytut Fizyki PAN, Warszawa

Cisnieniowe metody badania struktury pasmowej półprzewodników *

Pressure Methods in Investigation of the Band Structure of Semiconductors

M. Baj

2013-06-02

36

Efekt piezoelektryczny

W kryształach bez środka inwersji naprężenia prowadzą do zjawisk piezoelektrycznych:

$$D_i = d_{i\alpha}\sigma_\alpha + \epsilon_{ij}E_j$$

\vec{D} - wektor indukcji elektrycznej

\vec{E} - wektor natężenia pola elektrycznego

ϵ_{ij} - tensor przenikalności elektrycznej

$d_{i\alpha}$ - macierz współczynników piezoelektrycznych ($\alpha = xx, yy, zz, yz, zx, xy$)

σ_α - naprężenie

$$\begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix}$$

Kryształy piezoelektryczne charakteryzują się tym, że posiadają wiązania jonowe, a ich komórka elementarna nie posiada środka symetrii. Spośród 32 klas symetrii we wszystkich układach krystalograficznych istnieje 20 spełniających ten warunek. Pod wpływem naprężenia w takich kryształach dochodzi różnego przesunięcia "środków ciężkości" ładunku dodatniego i ujemnego, co powoduje polaryzację elektryczną kryształu. Pojawiający się na krawędziach kryształu ładunek jest proporcjonalny do odkształcenia.

Wikipedia

2013-06-02

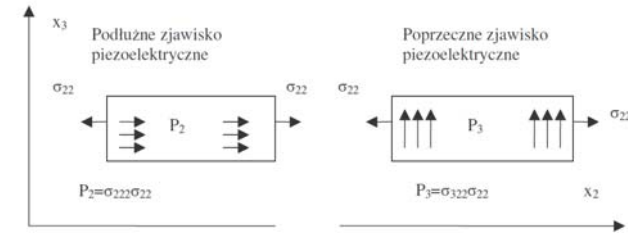
37

Piotr i Jakub Curie

Efekt piezoelektryczny

W kryształach bez środka inwersji naprężenia prowadzą do zjawisk piezoelektrycznych:

$$D_i = d_{i\alpha}\sigma_\alpha + \epsilon_{ij}E_j$$



Rys.2.1-2. Ilustracja podłużnego i poprzecznego zjawiska piezoelektrycznego oraz sens fizyczny modułów piezoelektrycznych d_{222} i d_{322}

Wikipedia

2013-06-02

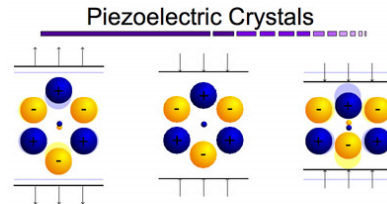
38

Efekt piezoelektryczny

W kryształach bez środka inwersji naprężenia prowadzą do zjawisk piezoelektrycznych:

$$D_i = d_{i\alpha}\sigma_\alpha + \epsilon_{ij}E_j$$

Np. kwarc:



<http://dydaktyka.fizyka.umk.pl/zabawki/files/zrodla/piezoelekt.html>

2013-06-02

39

Fale sprężyste

2013-06-02

40

Naprężenie

Naprężenie to siła działająca na jednostkę powierzchni ciała stałego. Mamy 9 składowych naprężeń: $X_x, X_y, X_z, Y_x \dots$ itd.



Naprężenie – miara gęstości powierzchniowej sił wewnętrznych występujących w ośrodku ciągłym. Jednostką naprężenia jest paskal.

$$\lim_{S \rightarrow 0} \frac{\vec{F}}{S} = \partial \vec{n} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \vec{n}$$

Naprężenie w dowolnym punkcie zależy od kierunku, w którym jest rozpatrywane.

Przypomnienie

Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

2013-06-02

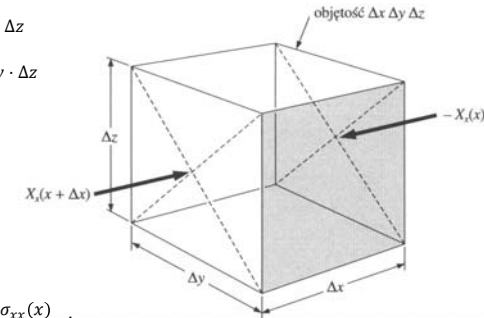
41

Fale sprężyste

Równanie ruchu:

Kostka o wymiarach $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$

$$F_x \sim \sigma_{xx}(x) \cdot S = \sigma_{xx}(x) \cdot \Delta y \cdot \Delta z$$



$$\sigma_{xx}(x + \Delta x) \cong \sigma_{xx}(x) + \frac{\partial \sigma_{xx}(x)}{\partial x} \cdot \Delta x$$

$$F_x = [\sigma_{xx}(x + \Delta x) - \sigma_{xx}(x)] \cdot \Delta y \cdot \Delta z \approx \frac{\partial \sigma_{xx}(x)}{\partial x} \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$$

2013-06-02

42

Fale sprężyste

analogicznie można napisać dla x -owych składowych sił działających na pozostałe powierzchnie, co prowadzi do wyrażenia na x -ową składową siły wypadkowej:

$$F_x = \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \right) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$$

Równanie ruchu na x -ową składową wektora wychylenia $\vec{u}(\vec{r}, t)$:

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a} = (\rho \cdot \Delta V) \cdot \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2}$$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z}$$

Składowe tensora naprężeń σ_{ij} , w ramach liniowej teorii sprężystości dają się wyrazić przez składowe tensora odkształceń ε_{ij} (które z kolei są odpowiednimi pochodnymi wychyleń u_i)

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

oraz macierz współczynników sztywności C_{ij}

2013-06-02

43

Fale sprężyste

Dla różnych kryształów otrzymane wzory będą się różniły; dla kryształu kubicznego:

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} \right)$$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = \dots$$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = \dots$$

Jest to klasyczne równanie falowe!

2013-06-02

44

Fale sprężyste

Dla różnych kryształów otrzymane wzory będą się różniły; dla kryształu kubicznego:

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} \right)$$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = \dots$$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = \dots$$

Fale w kierunku [100] – $\vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}_0 e^{i(k_x x - \omega t)}$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} \quad \leftarrow \text{Fala podłużna o prędkości } v_{\parallel} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}$$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = C_{44} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \quad \leftarrow 2 \text{ zdegenerowane fale poprzeczne o prędkości}$$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = C_{44} \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} \quad v_{\perp} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} < v_{\parallel}$$

(prędkość fal poprzecznych jest mniejsza)

2013-06-02

45

Fale sprężyste

Fale w kierunku [110] – $\vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}_0 e^{i\left(\frac{k_x}{\sqrt{2}}x + \frac{k_y}{\sqrt{2}}y - \omega t\right)}$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + (C_{12} + C_{44}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y}$$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + (C_{12} + C_{44}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y}$$

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right)$$

Fala podłużna $u \parallel [110]$ o prędkości $v_{\parallel} = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}}$

Fala poprzeczna $u \parallel [1\bar{1}0]$ o prędkości $v_{1\perp} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{\rho}}$

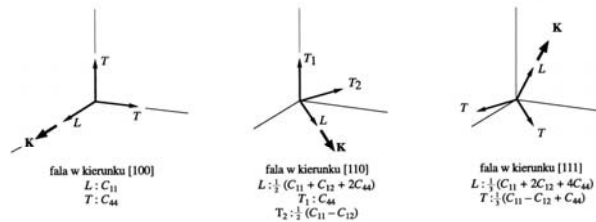
Fala poprzeczna $u \parallel [001]$ $v_{2\perp} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$

Wyznaczenie 3 prędkości fal rozchodzących się w kierunku [110] umożliwi wyznaczenie wszystkich współczynników C_{ij}

2013-06-02

46

Fale sprężyste



Rys. 20. Efektywne moduły sprężystości dla trzech rodzajów fal sprężystych, rozchodzących się wzdłuż trzech głównych kierunków w kryształach o strukturze regularnej. Dwie fale poprzeczne, które rozchodzą się w kierunkach [100] i [111], są zdegenerowane

Ch. Kittel Wstęp do fizyki ciała stałego

2013-06-02

47

Fale sprężyste

Podsumowanie:

- Dla każdego kierunku rozchodzenia się fali (wersora propagacji) istnieją 3 rodzaje fal – 1 „podłużna” i 2 „poprzeczne” z klasycznymi (liniowymi) relacjami dyspersyjnymi
- W ogólności wszystkie te fale mają różne prędkości
- Czasami fale poprzeczne są zdegenerowane (tzn. mają te same prędkości, a więc i takie same relacje dyspersyjne)
- Dla dowolnego kierunku propagacji fale *nie są ani ściśle podłużne, ani ściśle poprzeczne*

M. Baj

2013-06-02

48

Fonony

Przy omawianiu przybliżenia Borna-Oppenheimera doszliśmy do wniosku, że ruch jonów/jąder atomowych odbywa się w efektywnym potencjale: gdzie jest adiabatycznym wkładem elektronów w energię ruchu jonów/jąder, a jest zbiorem wektorów położeń wszystkich jonów/jąder

Równowagowy układ położeń jąder/jonów (równowagowa wartość stałej sieci) odpowiada minimum efektywnego potencjału dla ruchu jąder:

$$U_{eff}^k(\vec{R}) = E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \approx U_{eff}^k(\vec{R}_0) + U_{eff}^k(\delta\vec{R})$$

$E_{el}^k(\vec{R})$ jest adiabatycznym wkładem elektronów w energię ruchu jonów/jąder, a $\vec{R} = (\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3, \vec{R}_4, \dots)$ jest zbiorem wektorów położeń wszystkich jonów/jąder

Energia potencjalna sieci zawierają człony co najmniej kwadratowe we względnych przesunięciach jonów. Ograniczenie się do członów kwadratowych daje nam obraz drgań sieci jako zbioru sprzężonych oscylatorów harmonicznch. Dołożenie wyższych członów rozwinięcia daje efekty anharmoniczne (np. rozszerzalność termiczną, oddziaływanie fonon-fonon).

M. Baj

2013-06-02

49

Opis teoretyczny materii skondensowanej

Przybliżenie Borna Oppenheimera



$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R})$$

$$H(\vec{r}, \vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = [\hat{T}_N + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R})]\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_k \{ \Psi_{el}^k(\vec{r}, \vec{R}) \left[\sum_N \frac{P_N^k}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right] \chi^k(\vec{R}) + \dots \}$$

Równanie Schrödingera dla ruchu jąder!

Równowagowy układ położeń jąder/jonów (równowagowa wartość stałej sieci) odpowiada minimum efektywnego potencjału dla ruchu jąder:

$$U_{eff}^k(\vec{R}) = E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \approx U_{eff}^k(\vec{R}_0) + U_{eff}^k(\delta\vec{R})$$

Energia potencjalna sieci zawierają człony co najmniej kwadratowe we względnych przesunięciach jonów. Ograniczenie się do członów kwadratowych daje nam obraz drgań sieci jako zbioru sprzężonych oscylatorów harmonicznch. Dołożenie wyższych członów rozwinięcia daje efekty anharmoniczne (np. rozszerzalność termiczną, oddziaływanie fonon-fonon)

Przypomnienie

2013-06-02

50

Fonony

Drgania sieci krystalicznej – drgania układu dyskretnego o $3rN$ stopniach swobody, gdzie r – liczba atomów bazy (liczba atomów w najmniejszej komórce elementarnej), N – liczba komórek elementarnych kryształu

Nowe oznaczenia, wprowadzające explicite:

- numerowanie komórek elementarnych $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$, $n_i = 1, 2, 3 \dots N_i$, $N_1 N_2 N_3 = N$ gdzie położenie komórki dane jest wektorem:

$$\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

- numerowanie atomów w bazie $\alpha = 1, 2, \dots r$
- wychylenia atomów z położeń równowagi: $\vec{u}_{n\alpha}$ oznacza wychylenie z położenia równowagi atomu α znajdującego się w komórce elementarnej opisanej wektorem \vec{n}

M. Baj

2013-06-02

51

Fonony

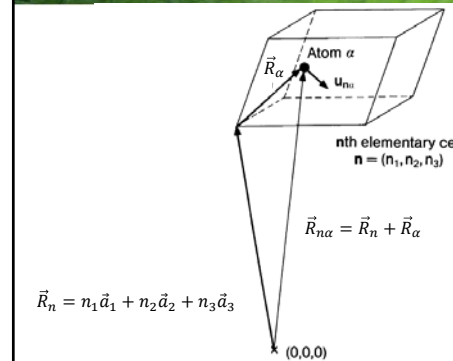


Fig. 4.1. Explanation of the vector nomenclature used to describe lattice vibrations in a three-dimensional periodic crystal: The lattice vector \mathbf{r}_n extends from an arbitrarily chosen lattice point $(0,0,0)$ to the origin of the n th unit cell $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$, from which the positions of the atoms α in cell n is then $\mathbf{r}_{n\alpha}$. The displacement from equilibrium of atom α in cell n is then $\mathbf{u}_{n\alpha}$. Thus the time-dependent position of this atom relative to $(0,0,0)$ is $\mathbf{r}_{n\alpha} + \mathbf{u}_{n\alpha}(t)$ where $\mathbf{r}_{n\alpha} = \mathbf{r}_n + \mathbf{r}_\alpha$.

Ibach, Luth

2013-06-02

52

Fonony

Zmieniając oznaczenie energii $U_{eff}^k(\vec{R})$ na $\Phi(\vec{R})$ (kolizja z $\vec{u}_{\vec{n}\alpha}$) i rozwijając na szereg z dokładnością do członów kwadratowych w wychyleniach (**przybliżenie harmoniczne**) otrzymujemy:

$$U_{eff}^k(\vec{R}) \equiv \Phi(\vec{R}) = \Phi(\vec{R}_0 + \delta\vec{R}) = \Phi(\vec{R}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n}\alpha i \\ \vec{m}\beta j}} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_{\vec{n}\alpha i} \partial x_{\vec{m}\beta j}} u_{\vec{n}\alpha i} u_{\vec{m}\beta j}$$

gdzie i oraz j oznaczają składowe kartezjańskie odpowiednich wektorów

„Stale siłowe”:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_{\vec{n}\alpha i} \partial x_{\vec{m}\beta j}} \equiv \Phi_{\vec{n}\alpha i}^{\vec{m}\beta j}$$

muszą być niezmiennicze względem operacji translacji sieciowych i operacji grupy punktowej kryształu i zależą tylko od względnego położenia komórek. Np. warunek niezmienniczości względem translacji sieci:

$$\Phi_{\vec{n}\alpha i}^{\vec{m}\beta j} = \Phi_{0\alpha i}^{(\vec{m}-\vec{n})\beta j}$$

M. Baj

2013-06-02

53

Fonony

Równanie ruchu atomu α z komórki elementarnej \vec{n} (i -ta składowa):

$$M_\alpha \ddot{u}_{\vec{n}\alpha} + \sum_{\vec{m}\beta j} \Phi_{\vec{n}\alpha i}^{\vec{m}\beta j} u_{\vec{m}\beta j} = 0$$

gdzie siły pochodzą od oddziaływań **ze wszystkimi pozostałymi atomami**. Należy zwrócić uwagę, że przeważnie w tym równaniu wystarczy się ograniczyć do stałych siłowych związanych z oddziaływaniami z bliskimi sąsiadami

Rozwiązania, zależnego wyłącznie od położenia danej komórki elementarnej, poszukujemy w postaci fal płaskich:

$$u_{\vec{n}\alpha i} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} u_{\alpha i}(\vec{q}) e^{i(\vec{q}\vec{R}_n - \omega t)}$$

Dla $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ mamy $\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$

(wstawiamy teraz do równania ruchu)

M. Baj

2013-06-02

54

Fonony

Podstawienie powyższej postaci do równania ruchu daje:

$$-\omega^2 u_{\alpha i}(\vec{q}) + \sum_{\beta j} \sum_{\vec{m}} \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \Phi_{\vec{n}\alpha i}^{\vec{m}\beta j} e^{i\vec{q}(\vec{R}_m - \vec{R}_n)} u_{\beta j}(\vec{q}) = 0$$

Oznaczamy

$$D_{\alpha i}^{\beta j}(\vec{q}) \equiv \sum_{\vec{m}} \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \Phi_{\vec{n}\alpha i}^{\vec{m}\beta j} e^{i\vec{q}(\vec{R}_m - \vec{R}_n)}$$

$$-\omega^2 u_{\alpha i}(\vec{q}) + \sum_{\beta j} D_{\alpha i}^{\beta j}(\vec{q}) = 0$$

Jest to równanie liniowe, jednorodne, rzędu $3r$ – tzw. *macierz dynamiczna*. Równanie to nie zależy od \vec{n} , bo $\Phi_{\vec{n}\alpha i}^{\vec{m}\beta j} = \Phi_{0\alpha i}^{(\vec{m}-\vec{n})\beta j}$

Układ jednorodnych równań liniowych ma rozwiązanie własne tylko wtedy, gdy

$$\det \{ D_{\alpha i}^{\beta j}(\vec{q}) - \omega^2 \hat{1} \} = 0$$

($3r$ różnych rozwiązań – numerowanie atomów w bazie $\alpha = 1, 2, \dots, r$)

lbach, Luth

2013-06-02

55

Fonony

$$\det \{ D_{\alpha i}^{\beta j}(\vec{q}) - \omega^2 \hat{1} \} = 0$$

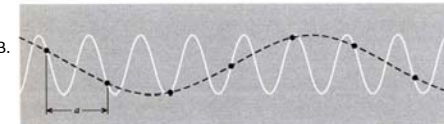
($3r$ różnych rozwiązań – numerowanie atomów w bazie $\alpha = 1, 2, \dots, r$)

⇒ Dostaniemy **relację dyspersyjną** $\omega(\vec{q})$.

Powyższa procedura oznacza przejście do współrzędnych normalnych, dzięki czemu wyjściowy układ $3rN$ jednowymiarowych, sprzężonych oscylatorów harmonicznich opisujących ruch poszczególnych atomów staje się układem N niezależnych jednowymiarowych oscylatorów harmonicznich opisujących **ruchy kolektywne** o wektorach falowych \vec{q} .

Dla każdego \vec{q} otrzymujemy $3r$ niezależnych drgań normalnych (**modów własnych**) w postaci fal. Mamy więc $3r$ relacji dyspersyjnych dla różnych rodzajów fal i $3rN$ **jednowymiarowych oscylatorów harmonicznich**.

Wektor falowy \vec{q} należy do 1SB.



Kittel

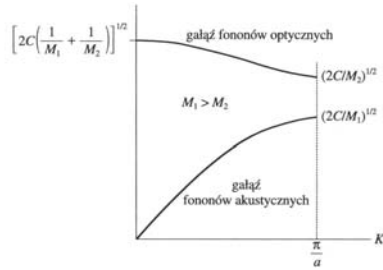
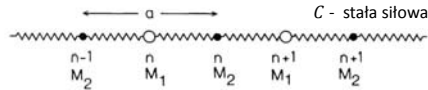
Rys. 5. Fala przedstawiona za pomocą linii ciągłej nie zawiera żadnych dodatkowych informacji w stosunku do fali przedstawionej za pomocą linii przerywanej. Do opisanego ruchu cząstek potrzebne są tylko fale o długości większej niż $2a$

2013-06-02

56

Fonony

Przypomnienie – ruch jednowymiarowego łańcucha złożonego na przemian z różnych mas $M_1 > M_2$:



2013-06-02

57

Fonony

Dla każdego \vec{q} otrzymujemy $3r$ niezależnych drgań normalnych (**modów własnych**) w postaci fal. Mamy więc $3r$ relacji dyspersyjnych dla różnych rodzajów fal i $3rN$ **jednowymiarowych oscylatorów harmoniczych**.

kwantowanie oscylatorów \Rightarrow oscylatory „numerowane” numerem **gałęzi** s (jest ich $3r$) oraz wektorem falowym \vec{q} :

$$E_{osc} = \left(n_{s\vec{q}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega(\vec{q})$$

kwant wzbudzenia danego oscylatora nazywamy **fononem** (kwazicząstka). Stan kwantowy fononu opisują liczby kwantowe s i \vec{q} . Dowolnie dużo fononów może obsadzać ten sam stan kwantowy (bo dany oscylator może być w dowolnie wysokim stanie kwantowym) \Rightarrow **fonon jest bozonem**:

Energia $E_{s\vec{q}}$ fononu:

$$E_{s\vec{q}} = \hbar \omega(\vec{q})$$

Kwazipęd \vec{p} fononu:

$$\vec{p} = \hbar \vec{q}$$

2013-06-02

58

Fonony

W równowadze z termostatem o temperaturze T obsadzenie stanu fononowego (średnia liczba fononów w danym stanie fononowym):

$$\langle n_{s\vec{q}}(T) \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_s(\vec{q})}{kT}} - 1} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \left(\frac{kT}{\hbar \omega_s(\vec{q})} \right) \propto T$$

w wysokich temperaturach liczba fononów jest proporcjonalna do temperatury.

Podobnie jak dla elektronów gęstość stanów fononowych w przestrzeni wektora (patrz poprzedni wykład - gęstość stanów elektronowych) jest stała i wynosi (3D):

$$\rho(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3}$$

W kryształach z bazą składającą się z r atomów mamy 3 gałęzie **fononów akustycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) = 0$ (1 „podłużnych” LA i 2 „poprzecznych” TA) oraz $3r - 3$ gałęzi **fononów optycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) \neq 0$ ($r - 1$ „podłużnych” LO i $2r - 2$ „poprzecznych” TO)

TUTAJ 15.04.2013

2013-06-02

59

Fonony

Fonony akustyczne w $\vec{q} = 0$ odpowiadają drganiom wszystkich r atomów bazy w zgodnych fazach (brak momentu dipolowego związanego z drganiami).

W przypadku **fononów optycznych**, jeśli atomy bazy nie są jednakowe, takie momenty dipolowe się pojawiają – możliwe sprzężenie z falą elektromagnetyczną: dla kryształów jonowych silna absorpcja dla częstotliwości odpowiadających fononom optycznym (Reststrahlen)

W ogólności (dla dowolnego \vec{q}) ani gałęzie „poprzeczne” ani „podłużne” nie odpowiadają ściśle drganiom poprzecznym i podłużnym (patrz fale sprężyste w ośrodkach ciągłych)

W przybliżeniu harmonicznym fonony są kwazicząstkami całkowicie ze sobą nieoddziaującymi

Wyjście poza przybliżenie harmoniczne pozwala np. zrozumieć :

- skąd się bierze rozszerzalność termiczna
- dlaczego (fononowe) przewodnictwo cieplne jest skończone
- Oddziaływania fonon-fonon (rozpraszanie)

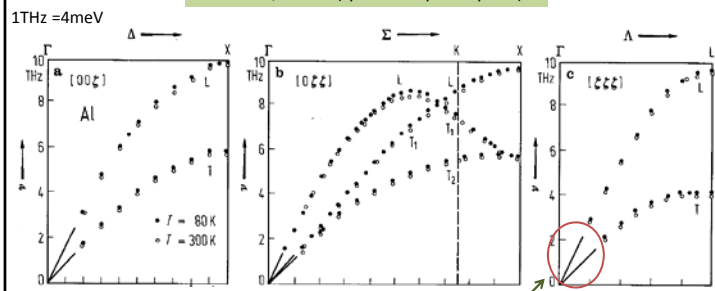
2013-06-02

60

Fonony

W kryształach z bazą składającą się z r atomów mamy 3 gałęzie **fononów akustycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) = 0$ (1 „podłużnych” LA i 2 „poprzecznych” TA) oraz $3r - 3$ gałęzi **fononów optycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) \neq 0$ ($r - 1$ „podłużnych” LO i $2r - 2$ „poprzecznych” TO)

Aluminium, $r = 1$ (tylko fonony akustyczne)



R. Stedman, G. Nilsson, *Physical Review* **145**, 492 (1966) model ośrodka ciągłego M. Baj

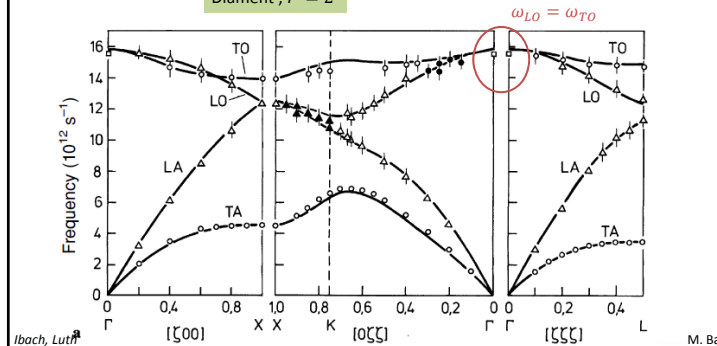
2013-06-02

61

Fonony

W kryształach z bazą składającą się z r atomów mamy 3 gałęzie **fononów akustycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) = 0$ (1 „podłużnych” LA i 2 „poprzecznych” TA) oraz $3r - 3$ gałęzi **fononów optycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) \neq 0$ ($r - 1$ „podłużnych” LO i $2r - 2$ „poprzecznych” TO)

Diamant, $r = 2$



Ibach, Luth *Physical Review* **145**, 492 (1966) M. Baj

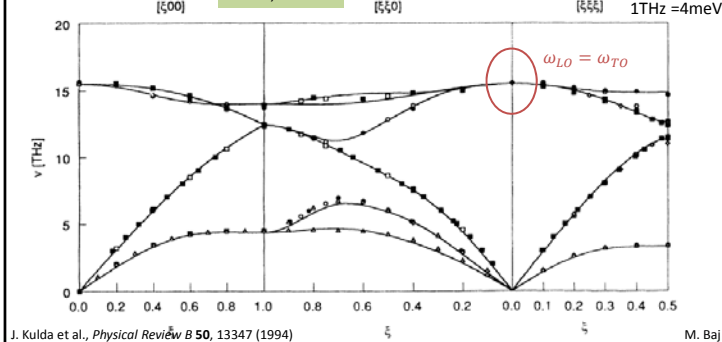
2013-06-02

62

Fonony

W kryształach z bazą składającą się z r atomów mamy 3 gałęzie **fononów akustycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) = 0$ (1 „podłużnych” LA i 2 „poprzecznych” TA) oraz $3r - 3$ gałęzi **fononów optycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) \neq 0$ ($r - 1$ „podłużnych” LO i $2r - 2$ „poprzecznych” TO)

Krzem, $r = 2$



J. Kulda et al., *Physical Review B* **50**, 13347 (1994) M. Baj

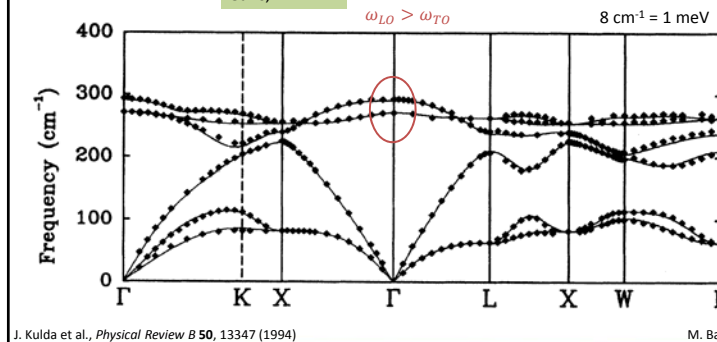
2013-06-02

63

Fonony

W kryształach z bazą składającą się z r atomów mamy 3 gałęzie **fononów akustycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) = 0$ (1 „podłużnych” LA i 2 „poprzecznych” TA) oraz $3r - 3$ gałęzi **fononów optycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) \neq 0$ ($r - 1$ „podłużnych” LO i $2r - 2$ „poprzecznych” TO)

GaAs, $r = 2$



J. Kulda et al., *Physical Review B* **50**, 13347 (1994) M. Baj

2013-06-02

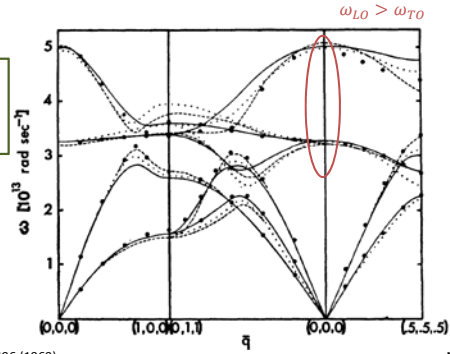
64

Fonony

W kryształach z bazą składającą się z r atomów mamy 3 gałęzie **fononów akustycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) = 0$ (1 „podłużnych” LA i 2 „poprzecznych” TA) oraz $3r - 3$ gałęzi **fononów optycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) \neq 0$ ($r - 1$ „podłużnych” LO i $2r - 2$ „poprzecznych” TO)

NaCl, $r = 2$

Czym bardziej spolaryzowane wiązanie pomiędzy atomami, tym większa różnica pomiędzy ω_{LO} i ω_{TO} .



8 cm⁻¹ = 1 meV

G. Raunio et al., *Physical Review* **178**, 1496 (1969)

M. Baj

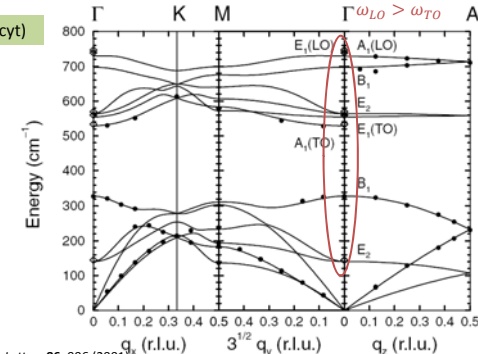
2013-06-02

65

Fonony

W kryształach z bazą składającą się z r atomów mamy 3 gałęzie **fononów akustycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) = 0$ (1 „podłużnych” LA i 2 „poprzecznych” TA) oraz $3r - 3$ gałęzi **fononów optycznych**, dla których $\omega_s(\vec{q} = 0) \neq 0$ ($r - 1$ „podłużnych” LO i $2r - 2$ „poprzecznych” TO)

GaN, $r = 4$ (wurcyt)



8 cm⁻¹ = 1 meV

T. Ruf et al., *Physical Review Letters* **86**, 906 (2001)

M. Baj

2013-06-02

66

Fonony

Relacja Lyddane'a–Sachsa–Teller

$$\frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)} = \frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2}$$

Do tego wróćmy przy dyskusji $\varepsilon(\omega)$

Gdzie $\varepsilon(0)$ i $\varepsilon(\infty)$ są niskoczęstotliwościwą i wysokoczęstotliwościwą stałą dielektryczną.

Efektowny, poprzeczny ładunek Borna:

Jedna z „dynamicznych” definicji ładunku efektywnego

$$e^* = \omega_{TO} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \mu}{N} (\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty))}$$

gdzie μ jest masą zredukowaną, a N – koncentracją drgających par atomów

2013-06-02

67

Pojemność cieplna

Doświadczalna obserwacja – w wysokich temperaturach molowe ciepło przy stałej objętości $C_V = 3R$. Jest to zgodne z modelem klasycznym i zasadą ekwipartycji energii – prawo Dulonga-Petita ($\sim 3N_A$ jednowymiarowych oscylatorów na mol, na każdy wypada średnio kT energii \Rightarrow molowa pojemność cieplna $3RT$). Jednak w niskich temperaturach $T \rightarrow 0$ w niemetalach $C_V \sim T^3$ (a prawo Dulonga-Petita przewiduje $C_V = const$)

Wkład fononów do energii wewnętrznej (na jednostkę objętości, bo $\rho(\vec{q})$ jest liczone na jednostkę objętości):

$$U(T) = \sum_s \int_{1SB} \hbar \omega_s(\vec{q}) \langle n_{s\vec{q}}(T) \rangle \rho(\vec{q}) d^3q$$

gdzie s numeruje gałęzie fononów

Znajomość relacji dyspersyjnych dla wszystkich gałęzi fononowych pozwala znaleźć $U(T)$ i ciepło przy stałej objętości liczone na jednostkę objętości:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_T$$

Dwa proste modele fononowego wkładu do pojemności cieplnej sieci krystalicznej – Einsteina i Debya:

2013-06-02

68

Pojemność ciepła

Model Einsteina:

W równowadze z termostatem o temperaturze T obsadzenie stanu fononowego (średnia liczba fononów w danym stanie fononowym):

$$\langle n_{s\vec{q}}(T) \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_s(\vec{q})}{kT}} - 1}$$

Zbiór $3N$ oscylatorów kwantowych, wszystkie o jednakowej energii $\hbar\omega_0$ (model w przybliżeniu słuszny dla fononów optycznych dla których $\omega(\vec{q}) \approx const$)

$$U(T) = 3N \cdot \hbar\omega_0 \cdot \langle n(T) \rangle = 3N \cdot \hbar\omega_0 \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}} - 1}$$

jeśli wziąć $N = N_A$, to molowe ciepło:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_T = 3R \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 3R$$

$x = \frac{\hbar\omega_0}{kT}$ gdzie w ten sposób odtwarzamy prawo Dulonga-Petita, ale w niskich temperaturach otrzymuje się zależność szybszą niż doświadczalna

2013-06-02

69

Pojemność ciepła

Model Debye'a:

fonony akustyczne z uproszczoną (liniową) dyspersją:

$$\omega_{TA} = u_T q \quad (2 \text{ gałęzie})$$

$$\omega_{LA} = u_L q \quad (1 \text{ gałąź})$$

gęstość stanów na jednostkę częstości, na jednostkę objętości, na jedną (i -tą) gałąź:

$$\rho(\omega_i) d\omega_i = \rho(\vec{q}_i) d^3 q_i = \frac{1}{2\pi} 4\pi q_i^2 dq_i = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\omega_i^2}{u_i^3} d\omega_i$$

wszystkie 3 gałęzie (zakładając degenerację obu gałęzi poprzecznych):

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{2}{u_T^3} + \frac{1}{u_L^3} \right) \equiv \frac{3\omega^2}{2\pi^2} \cdot \frac{1}{u^3}$$

u – pewna średnia prędkość

Założenie sferycznej symetrii relacji dyspersyjnych zmusza do ograniczenia się do obszaru, tak aby całkowita liczba (koncentracja) stanów fononowych wyniosła $3N$:

$$3N = \int_0^{\omega_D} \rho(\omega) d\omega = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega_{max}^3}{u^3}$$

$$\text{Stąd } \omega_D = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot u$$

2013-06-02

70

Pojemność ciepła

Model Debye'a:

fonony akustyczne z uproszczoną (liniową) dyspersją:

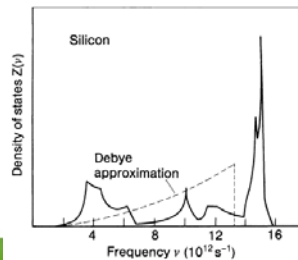
$$\omega_{TA} = u_T q \quad (2 \text{ gałęzie})$$

$$\omega_{LA} = u_L q \quad (1 \text{ gałąź})$$

wszystkie 3 gałęzie (zakładając degenerację obu gałęzi poprzecznych):

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{2}{u_T^3} + \frac{1}{u_L^3} \right) \equiv \frac{3\omega^2}{2\pi^2} \cdot \frac{1}{u^3}$$

$$\text{Stąd } \omega_D = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot u$$



Ibach, Luth

Fig. 5.2. Phonon density of states of Si [5.1] (Fig. 4.4). The dashed line is the density of states that one would obtain for an elastic isotropic continuum (Debye approximation with $\theta = 640$ K; Sect. 5.3)

2013-06-02

71

Pojemność ciepła

Model Debye'a:

$$3N = \int_0^{\omega_D} \rho(\omega) d\omega = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega_{max}^3}{u^3}$$

$$\text{Stąd } \omega_D = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot u$$

Definicja **temperatury Debye'a**:

$$\theta = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot \frac{\hbar u}{k_B}$$

Wkład fononów do energii wewnętrznej (na jednostkę objętości):

$$U(T) = \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \rho(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle d\omega = \frac{3}{2\pi^2} \cdot \frac{\hbar}{u^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega = \frac{3}{2\pi^2} \cdot \frac{\hbar}{u^3} \cdot \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^4 \cdot \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{3}{2\pi^2} \cdot \hbar u \cdot \left(\frac{kT}{\hbar u} \right)^4 \cdot \int_0^{\theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

2013-06-02

72

Pojemność ciepła

Model Debye'a:

Otrzymujemy wkład fononów (akustycznych) do energii wewnętrznej wg. modelu Debye'a

$$U\left(\frac{T}{\Theta}\right) = 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Niskie temperatury:

$$U\left(\frac{T}{\Theta}\right) \approx 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \frac{\pi^4}{15} \sim T^4$$

Zgodnie z doświadczeniem $C_V \sim T^3$

Wysokie temperatury:

$$U\left(\frac{T}{\Theta}\right) \approx 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{1+x-1} dx = 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^3 = 3NkT$$

Prawo Dulonga-Petita $C_V = 3R$, jeśli policzymy U dla N_A oscylatorów.

2013-06-02

73

Pojemność ciepła

Model Debye'a:

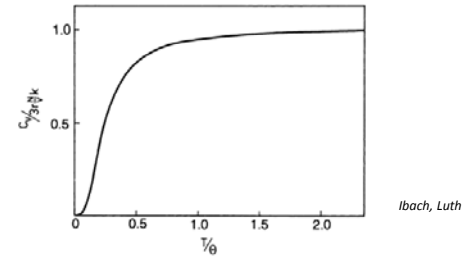
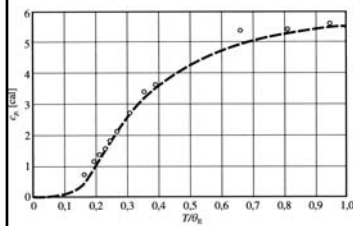


Fig. 5.3. The specific heat capacity per unit volume according to the Debye model. The specific heat is normalized to the Boltzmann constant k , the density of unit cells N/V and the number of atoms in the unit cell r . In this model different materials are only distinguished by their values of Debye temperature Θ

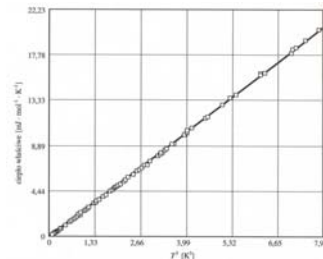
2013-06-02

74

Pojemność ciepła



diamant, linia – model Einsteina



stały argon, linia – model Debye'a

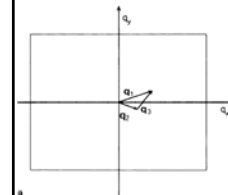
Ch. Kittel, Wstęp do fizyki ciała stałego

2013-06-02

75

Fonony

Na koniec ważna uwaga:



Zasada zachowania energii i kwazipędu:

$$\hbar\omega_1 = \hbar\omega_2 + \hbar\omega_3$$

$$K_1 = K_2 + K_3 + G$$

Procesy umklapp

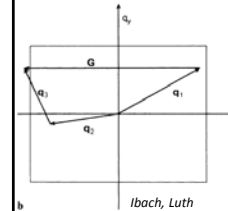


Fig. 5.6. A normal decay process (a) and an umklapp process (b) in q -space. In case (b) the vector q_1 is split with the help of the vector G into two vectors q_2 and q_3 , for which the group velocity is in the negative q_x -direction. This causes a reversal of the direction of energy flow

2013-06-02

76