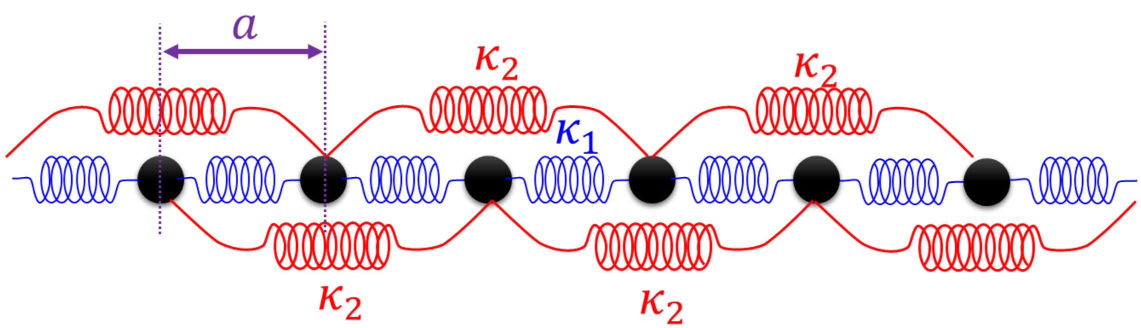
תרגיל בית מספר 10: פונונים

שאלה 1: פונונים

נתונה שרשרת אטומים המרוחקים זה מזה במרחק הממוצע a.התנועה של כל אטום מתוארת באמצעות מתנד הרמוני כך שאטום נתון מקושר לשני השכנים הקרובים הנמצאים במרחק a ממנו באמצעות קפיץ עם קבוע קפיץ κ_1 ולשני שכנים הרחוקים יותר הנמצאים במרחק $2a$ באמצעות קבוע קפיץ κ_2. המרחק הממוצע בין אטומים הינו a



א. כמה אופנים אקוסטיים וכמה אופנים אופטיים ישנם במודל? חשבו את יחס הנפיצה במודל כזה.
ב. חשבו את מהירות הקול ומהירות החבורה. הראו שמהירות החבורה מתאפסת בקצה של אזור Brillouin. מדוע זה קורה?
ג. ציירו יחס הנפיצה ומהירות החבורה עבור $\kappa_1 = 2\kappa_2$. איפה מהירות החבורה מתאפסת ומדוע זה קורה?
ד. כעת מוסיפים קפיצים נוספים עם קבוע κ_3 לשכן השלישי הנמצא במרחק $3a$. מבלי לפתח מחדש את המודל כתבו ביטוי עבור יחס הנפיצה, מהירות החבורה ומהירות הקול. ציירו את יחס הנפיצה ומהירות החבורה.

פתרון

The potential energy of the system is given by

$$V(x) = \frac{1}{2}\kappa_1 \sum_{n=1}^{N} (\delta x_{n+1} - \delta x_n)^2 + \frac{1}{2}\kappa_2 \sum_{n=1}^{N} (\delta x_{n+2} - \delta x_n)^2$$

Therefore, the equation of motion is

$$m\delta\ddot{x}_n = \kappa_1(\delta x_{n+1} - 2\delta x_n + \delta x_{n-1}) + \kappa_2(\delta x_{n+2} - 2\delta x_n + \delta x_{n-2})$$

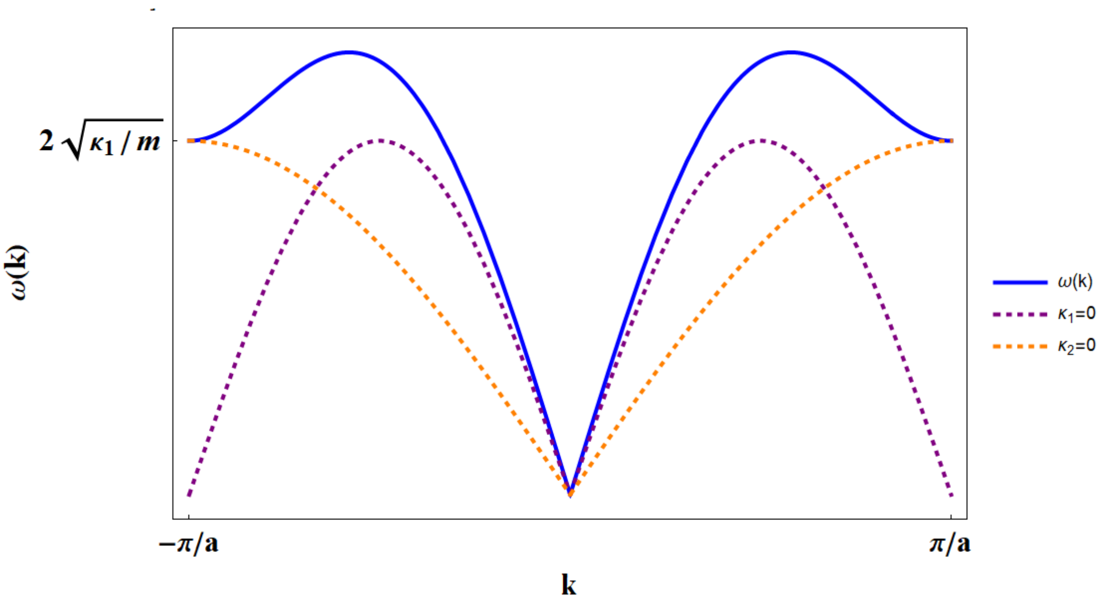
The trial solution is a normal mode of the form

$$\delta x_n = Ae^{i\omega(k)t - ik\times n\times a}$$

The substitution results in

$$-m\omega(k)^2 = \kappa_1\left(e^{-ika} - 2 + e^{ika}\right) + \kappa_2\left(e^{-i2ka} - 2 + e^{i2ka}\right)$$
$$\omega(k)^2 = 4\kappa_1/m \sin(ka/2)^2 + 4\kappa_2/m \sin(ka)^2$$

$$\omega(k) = \sqrt{4\kappa_1/m \sin(ka/2)^2 + 4\kappa_2/m \sin(ka)^2}$$



There is an additional point, except the Brillouin zone boundary, where the group velocity goes to zero, created due to the second spring. If $2\kappa_1 = \kappa_2$ then the group velocity is zero at $k = 2\pi/3$. At the limit when $\kappa_2 \gg \kappa_1$ the group velocity is zero around $k = \pm\frac{\pi}{2a}$

To evaluate the sound wave velocity, we approximate the sine in the expression of the dispersion

$$\omega(k) = \sqrt{4\kappa_1/m\sin(ka/2)^2 + 4\kappa_2/m\sin(ka)^2} \approx \sqrt{\frac{\kappa_1 k^2 a^2}{m} + \frac{4\kappa_2 k^2 a^2}{m}} = \sqrt{\frac{\kappa_1 + 4\kappa_2}{m}a^2} \times k$$

$$v_{sound} = \sqrt{\frac{\kappa_1 + 4\kappa_2}{m}a^2}$$

The factor "4" in the numerator comes from the second spring contribution since the distance between the neighbors which contribute to the velocity is twice larger than the chosen unit cell.

To show that the group velocity vanishes around the Brillouin zone boundary we approximate the dispersion near $k = \pi/a$, where $\sin(ka/2) \approx 1 + 0 + O(k)^2$ and $\sin(ka) \approx 0 - a(k - \pi/a) + O(k)^2$

$$\omega(k) = \sqrt{4\kappa_1/m\sin(ka/2)^2 + 4\kappa_2/m\sin(ka)^2} \approx \sqrt{4\kappa_1/m - 4\kappa_2/m(ka-\pi)^2}$$

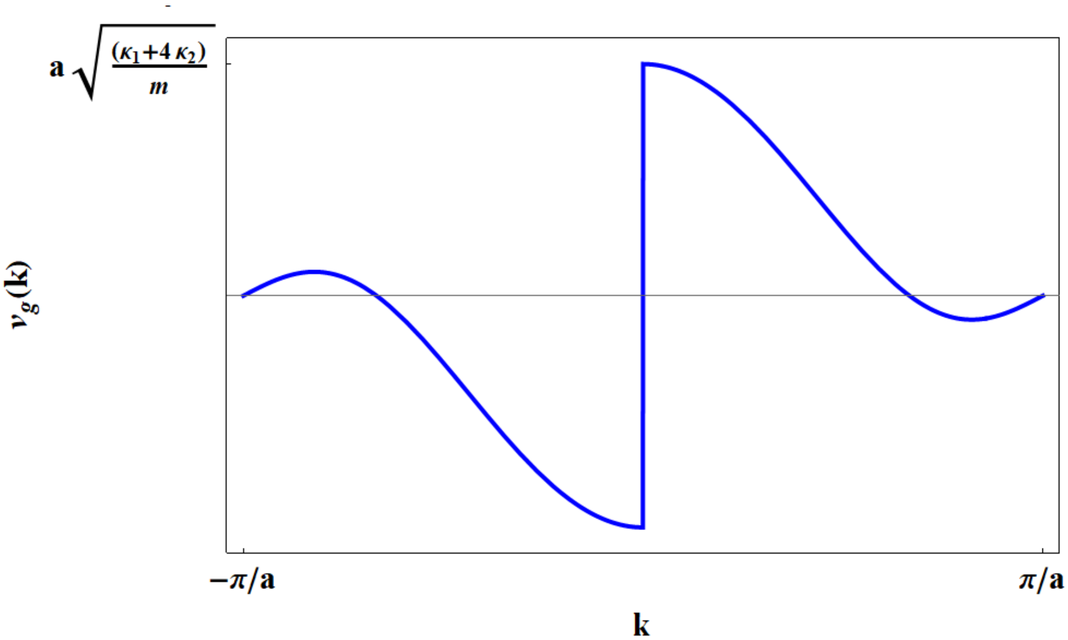
$$v_g(k) = \frac{-4\kappa_2/m \times (ka - \pi)}{\omega(k)}$$

$$v_g(k = \pi/a) = \frac{-4\kappa_2/m \times (\pi/a \times a - \pi)}{\omega(k)} = \frac{0}{\sqrt{4\kappa_1/m}} = 0$$

The easiest way to investigate the $\omega(k)$ is actually to differentiate $\omega^2(k)$ directly in the characteristic equation

$$\frac{\partial}{\partial k}\omega^2(k) = 2\omega(k) \times \frac{\partial\omega}{\partial k} = 2\omega(k) \times v_g(k) = \frac{\partial}{\partial k}\left(4\kappa_1/m\sin(ka/2)^2 + 4\kappa_2/m\sin(ka)^2\right)$$
$$= 4a\kappa_1/m\cos(ka) + 4a\kappa_2/m\cos(2ka)$$

Now we can see that the group velocity goes to zero at several points in the first Brillouin zone.

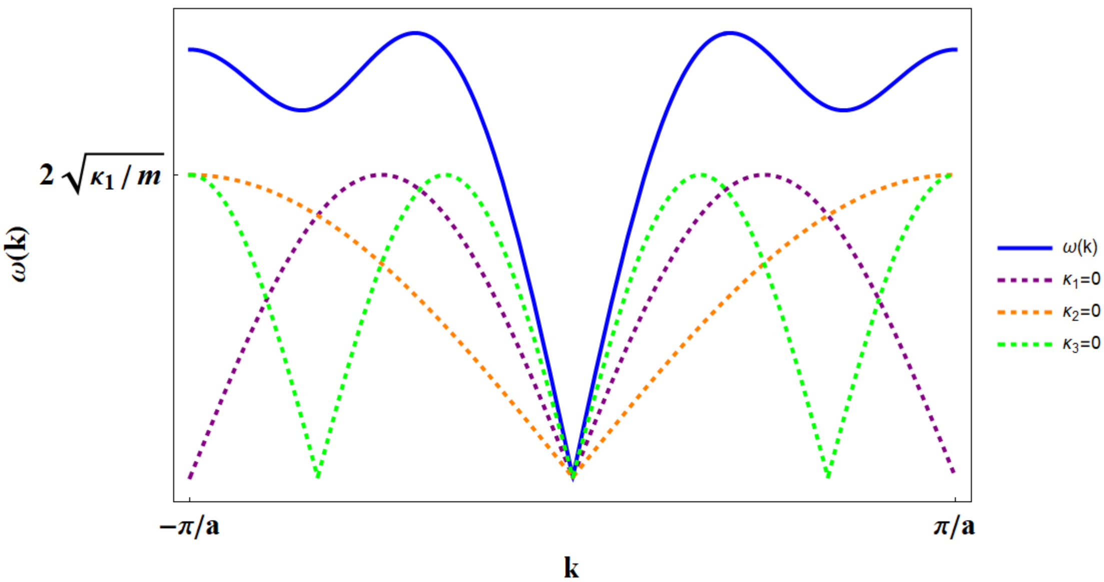


If we introduce more coupling terms to the overall 6 nearest neighbors we will get another point where the group velocity is zero.

$$\omega(k) = \sqrt{4\kappa_1/m\sin(ka/2)^2 + 4\kappa_2/m\sin(ka)^2 + 4\kappa_3/m\sin(3ka/2)^2}$$
$$v_g(k) = \frac{4a\kappa_1/m\cos(ka) + 4a\kappa_2/m\cos(2ka) + 4a\kappa_3/m\cos(3ka/2)}{\omega(k)}$$

While the sound velocity is given by

$$v_{sound} = \sqrt{\frac{\kappa_1 + 4\kappa_2 + 9\kappa_3}{m}}a$$


$2\sqrt{\kappa_1/m}$
ω(k)
−π/a
π/a
k
ω(k)
κ1=0
κ2=0
κ3=0

שאלה 2 : צפיפות אופני התנודה וקירוב דבאיי

נתון גביש דו מימדי שגודלו L^2 בו יחס הנפיצה הוא

$$\omega = \omega_0 \left(\sin(a|k_x|) + \sin\left(a|k_y|\right)\right)$$

הניחו כי מספר האטומים הוא N.

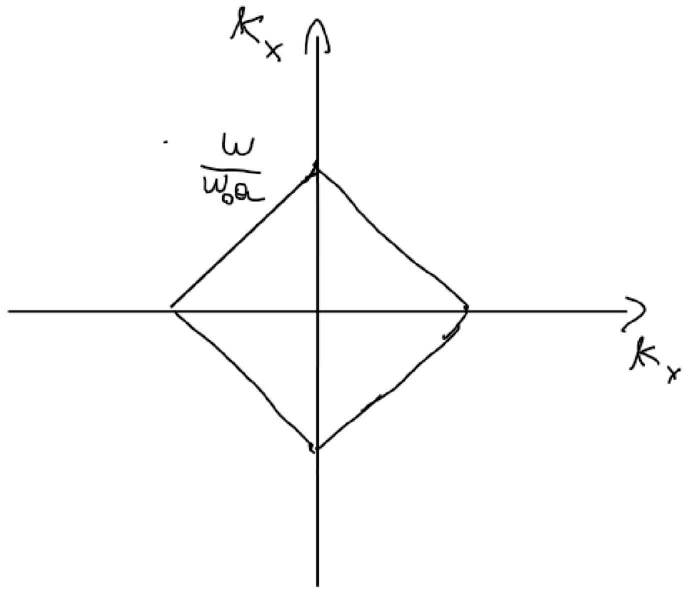
א. קרבו את יחס הנפיצה סביב תחתית הפס.
ב. עבור הקירוב סביב תחתית הפס, מהו משטח שווה תדר?
ג. מצאו את צפיפות אופני התנודה ליחידת אנרגיה ליחידת שטח.
ד. מצאו תדירות *cutoff* לפי קירוב דבאי, וחשבו את קיבול החום בטמפרטורות גבוהות.

פתרון

א. סביב תחתית הפס

$$\omega \approx \omega_0 a(|k_x| + |k_y|)$$

ב. משטח שווה תדר הוא מרובע כאשר מורכב מארבע קטעים החותכים את הצירים ב $\frac{\omega}{\omega_0 a}$



ג. השטח המוכל במשטח שווה תדר הוא 4 פעמים שטח משולש ששטחו

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\omega}{\omega_0 a}\right)^2$$

כלומר $2\left(\frac{\omega}{\omega_0 a}\right)^2$.

במרחב k כל אופן תופס שטח של $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$ ומכאן שמספר אופני התנודה עד לתדר ω הוא

$$N(\omega) = 2 \times 2\left(\frac{\omega}{\omega_0 a}\right)^2 \frac{L^2}{4\pi^2} = \frac{(\omega L)^2}{(\omega_0 \pi a)^2}$$

כעת $\hbar\omega = E$ לכן

$$N(E) = \frac{L^2 E^2}{(\hbar^2 \omega_0 \pi a)^2}$$

כאשר הכפלנו ב2 עבור שתי דרגות החופש.
צפיפות אופני התנודה ליחידת אנרגיה ליחידת שטח אז תהיה

$$g(E) = \frac{1}{L^2}\frac{dN}{dE} = \frac{2E}{(\hbar^2 \pi \omega_0 a)^2}$$

תדירות ה$cutoff$ ω_d לפי קירוב דבאי היא התדירות המקיימת

$$2N = N(\omega_d)$$

כלומר

$$\omega_d^2 = \frac{2N(\omega_0 a \pi)^2}{L^2}$$

נקבל את האנרגיה על ידי

$$E = L^2 \int_0^{\hbar\omega_d} g(E) E f_{BE}(E) dE = L^2 \int_0^{\hbar\omega_d} \frac{2E}{(\hbar \pi \omega_0 a)^2} E \frac{1}{e^{\beta E} - 1} dE$$

בטמפרטורות גבוהות $k_b T \gg \hbar\omega_d$ ומכאן

$$\frac{1}{e^{\beta E}-1} \approx \frac{1}{\beta E}$$

ומכאן נקבל

$$E = L^2 \frac{2k_b T}{(\hbar\pi\omega_0 a)^2}\int_0^{\hbar\omega_d} EdE = L^2 \frac{k_b T}{(\pi\omega_0 a)^2}\frac{2N(\omega_0 a\pi)^2}{L^2} = 2Nk_b T$$

ומכאן שקיבול החום בטמפרטורות גבוהות הוא

$$C = 2k_b N$$