

Лекция 3: Динамика кристаллической решётки. Фононы.

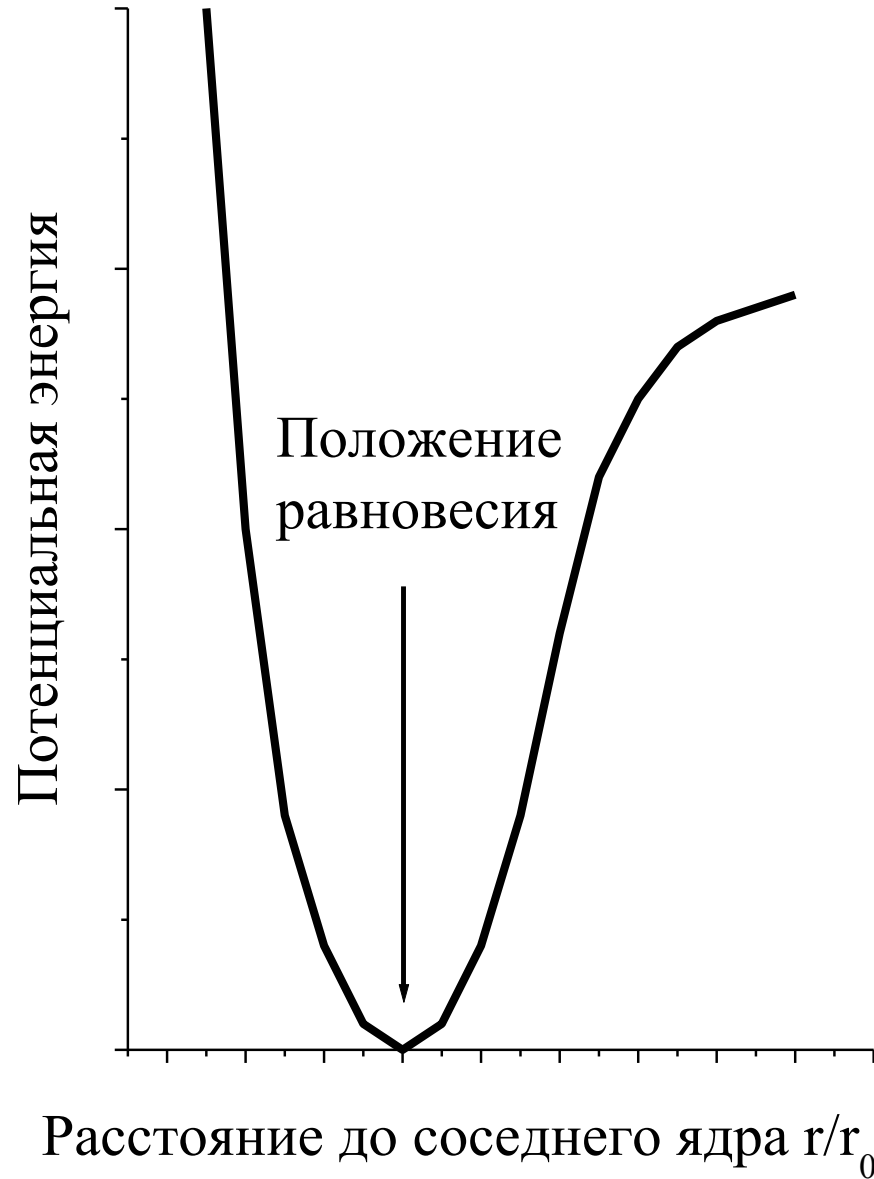
- **Типы связей в кристаллах – металлическая, валентная и ионная связи.**
- **Гармоническое приближение, эффекты ангармонизма.**
- **Модель одномерной цепочки, закон дисперсии, поперечные и продольные колебания. Понятие фонона как квазичастицы.**
- **Двухатомная линейная цепочка. Акустические и оптические фононы.**
- **Локальные фононы в кристаллах с дефектами, поверхностные и интерфейсные колебания.**

Потенциальная энергия атомов в твёрдом теле

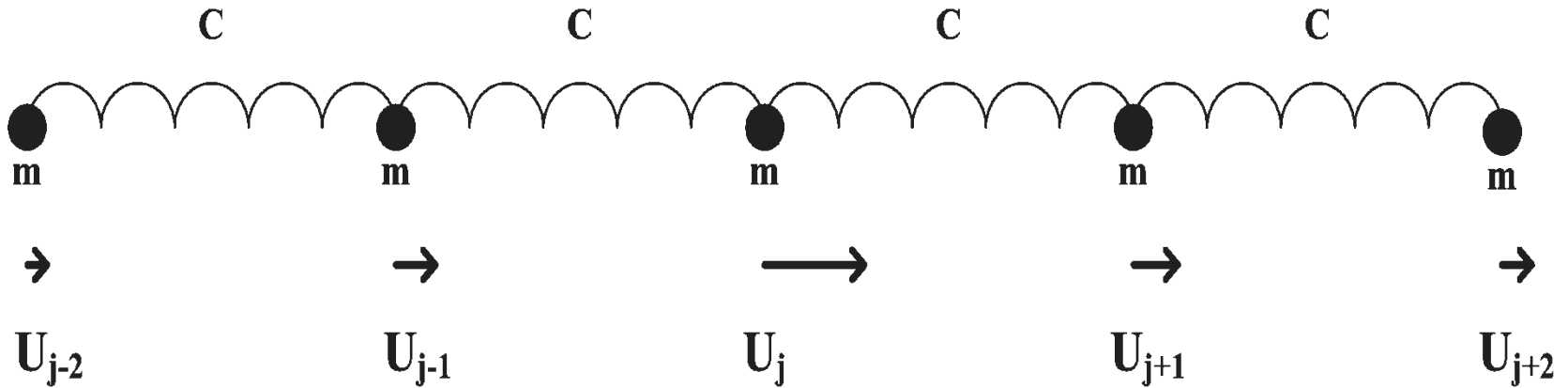
Типы связей

в твёрдом теле:

- 1) Металлическая
- 2) Ионная
- 3) Валентная
- 4) Силы Ван-дер-Ваальса



Линейная цепочка



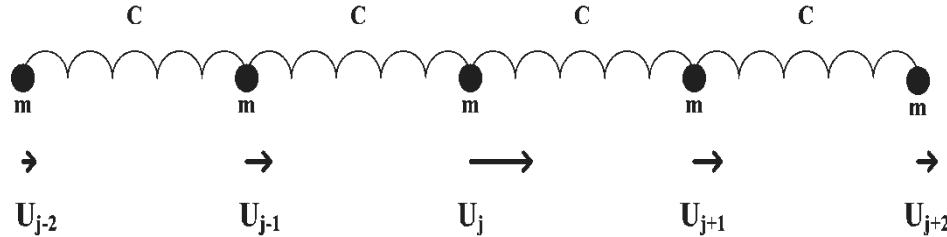
$$\ddot{u}_j = \frac{C}{m} \left((u_{j+1} - u_j) + (u_{j-1} - u_j) \right)$$

решение ищем в виде бегущих волн:

$$u_j = u_0 \cdot e^{i(k \cdot j \cdot a - \omega t)}$$

Решаем

Линейная цепочка - решение



Линейная цепочка с одним атомом в ячейке.

C- жёсткость связи, m- масса ядра, k- волновое число, a- постоянная решётки.

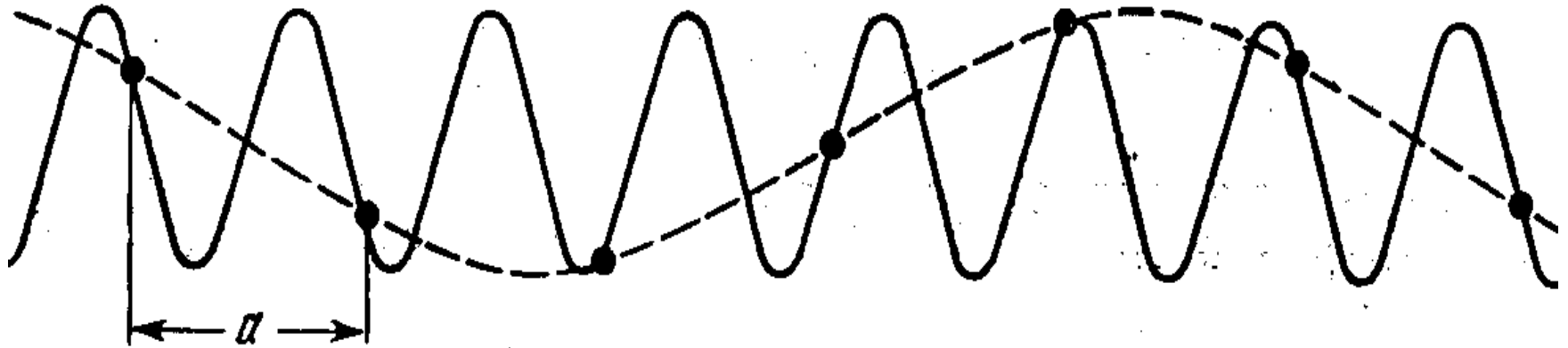
$$\ddot{u}_j = \frac{C}{m} \left((u_{j+1} - u_j) + (u_{j-1} - u_j) \right)$$

Решение ищем в виде -

$$u_i^l(\vec{r}) = u_i^l \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{m}} \cdot \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$

Фонон как квазичастица. Импульс фонона. Зона Бриллюэна.



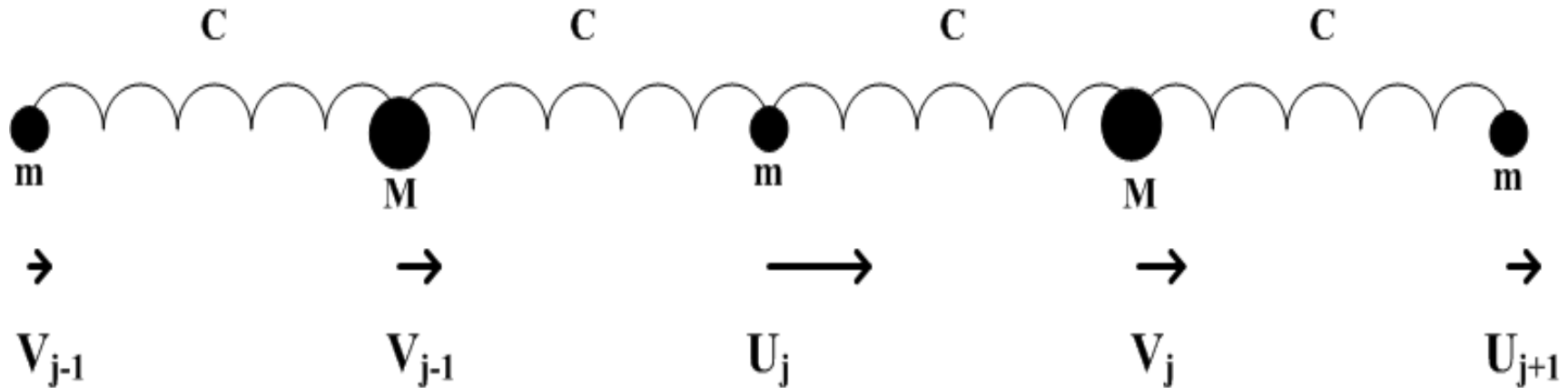
Волновое число со значением, превышающим вектор обратной решётки не имеет физического смысла!

Степени свободы.

Продольные и поперечные фононы.

Акустические фононы. Скорость звука.

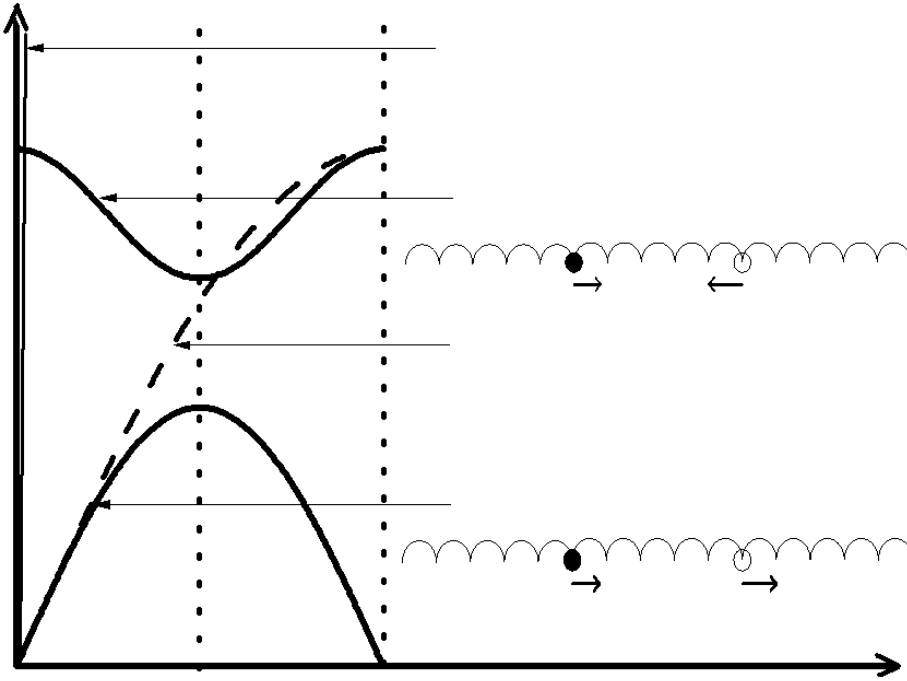
Линейная цепочка – 2 атома



$$\ddot{u}_j = \frac{C}{m} \left((v_j - u_j) + (v_{j-1} - u_j) \right) \quad u_j = u_0 \cdot e^{i(jk2a - \omega t)}$$

$$\ddot{v}_j = \frac{C}{M} \left((u_{j+1} - v_j) + (u_j - v_j) \right) \quad v_j = v_0 \cdot e^{i(jk2a - \omega t)}$$

Оптические фононы.



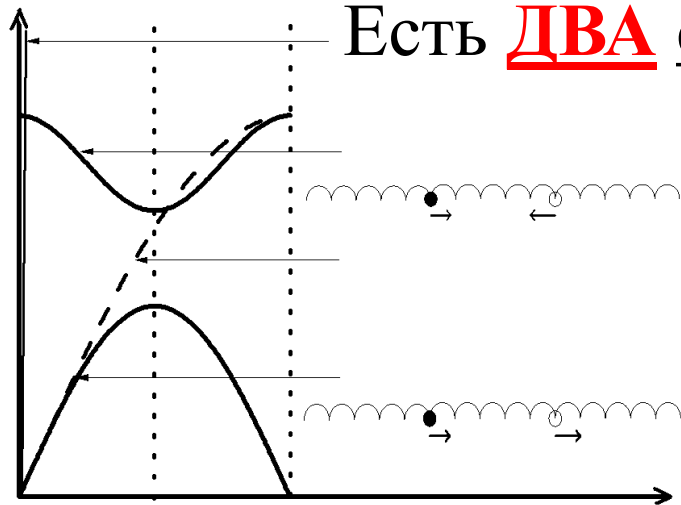
$$\ddot{u}_j = \frac{C}{m} \left((v_j - u_j) + (v_{j-1} - u_j) \right)$$

$$\ddot{v}_j = \frac{C}{M} \left((u_{j+1} - v_j) + (u_j - v_j) \right)$$

$$\begin{vmatrix} 2C - m\omega^2 & -C(1 + e^{-ik2a}) \\ -C(1 + e^{ik2a}) & 2C - M\omega^2 \end{vmatrix}$$

$$\omega^2 = \frac{2C}{mM} \cdot \left(\frac{m+M}{2} \pm \sqrt{\frac{(M-m)^2}{4} + Mm \cdot \cos^2 ka} \right)$$

А что с собственными векторами?



Есть **ДВА** собственных значения!

$$\omega^2 = \frac{2C}{mM} \cdot \left(\frac{m+M}{2} \pm \sqrt{\frac{(M-m)^2}{4} + Mm \cdot \cos^2 ka} \right)$$

Значит 2 набора
собственных
векторов

$$\frac{v_0}{u_0} = \frac{2C - m\omega^2}{C(1 + e^{-ik2a})}$$

В нулевой точке (k стремится к нулю) для собственного значения стремящегося к нулю (акустическая ветвь) - $u_0 = v_0$, это значит, что лёгкий и тяжёлый атомы колеблются в фазе, и «пружинка» их соединяющая не деформируется.

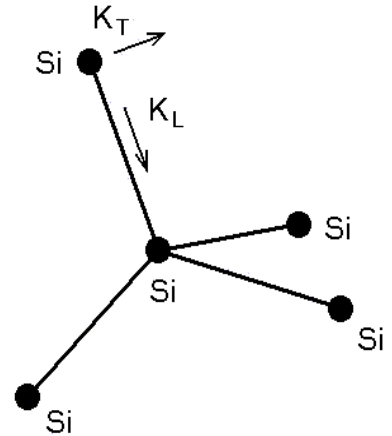
Для оптической ветви, при $k \rightarrow 0$: $\omega^2 = \frac{2C \cdot (m+M)}{mM}$. Тогда

отношение $\frac{v_0}{u_0} = -\frac{m}{M}$.

Методы расчёта фононного спектра.

1. Модели силовых постоянных. (Борна-фон-Кармана, Киттинга).

(Кулоновское взаимодействие можно учесть в модели жёстких ионов)



2. Оболочечная модель.

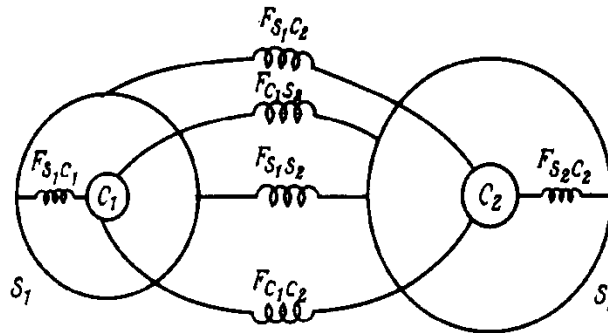
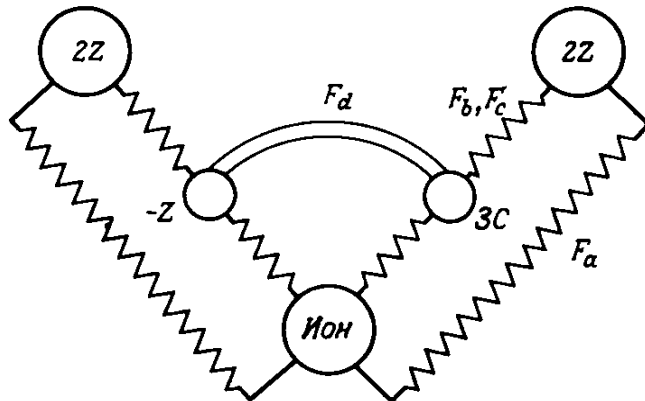
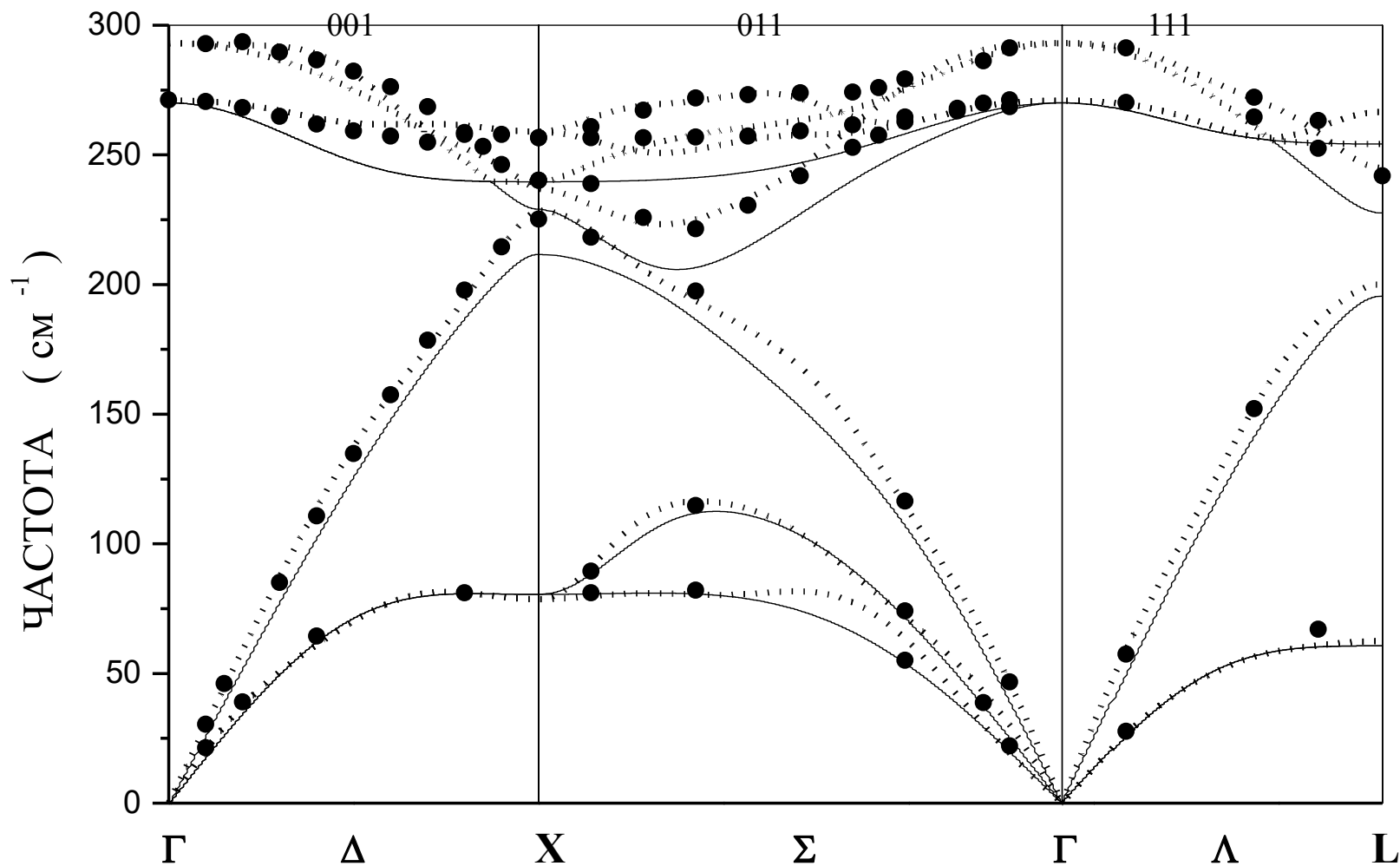


Иллюстрация короткодействующих силовых постоянных в оболочечной модели. FC_1S_2 обозначает силовую постоянную между остовом 1 и оболочкой 2 и т.д.

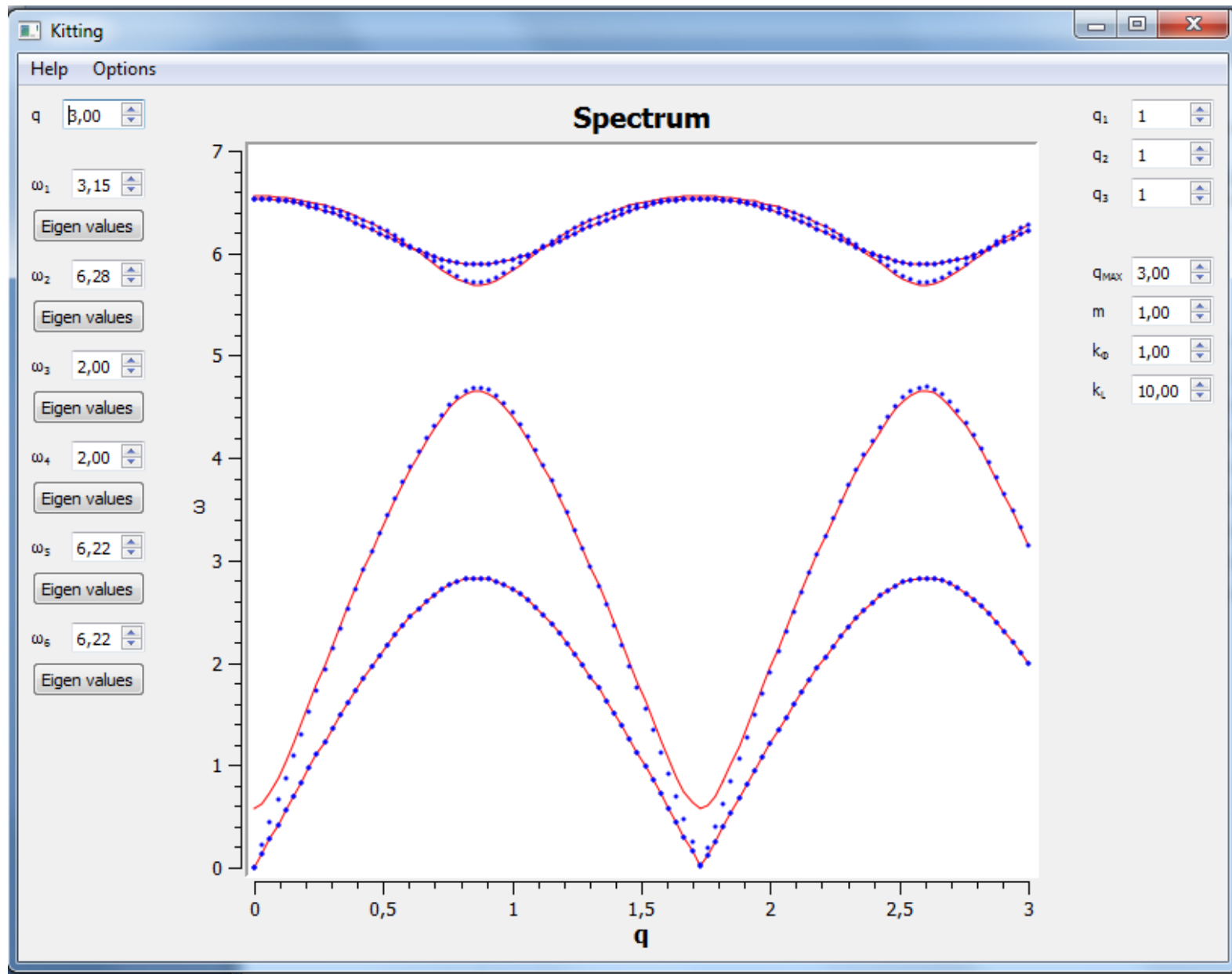
3. Модели с зарядами на связях.



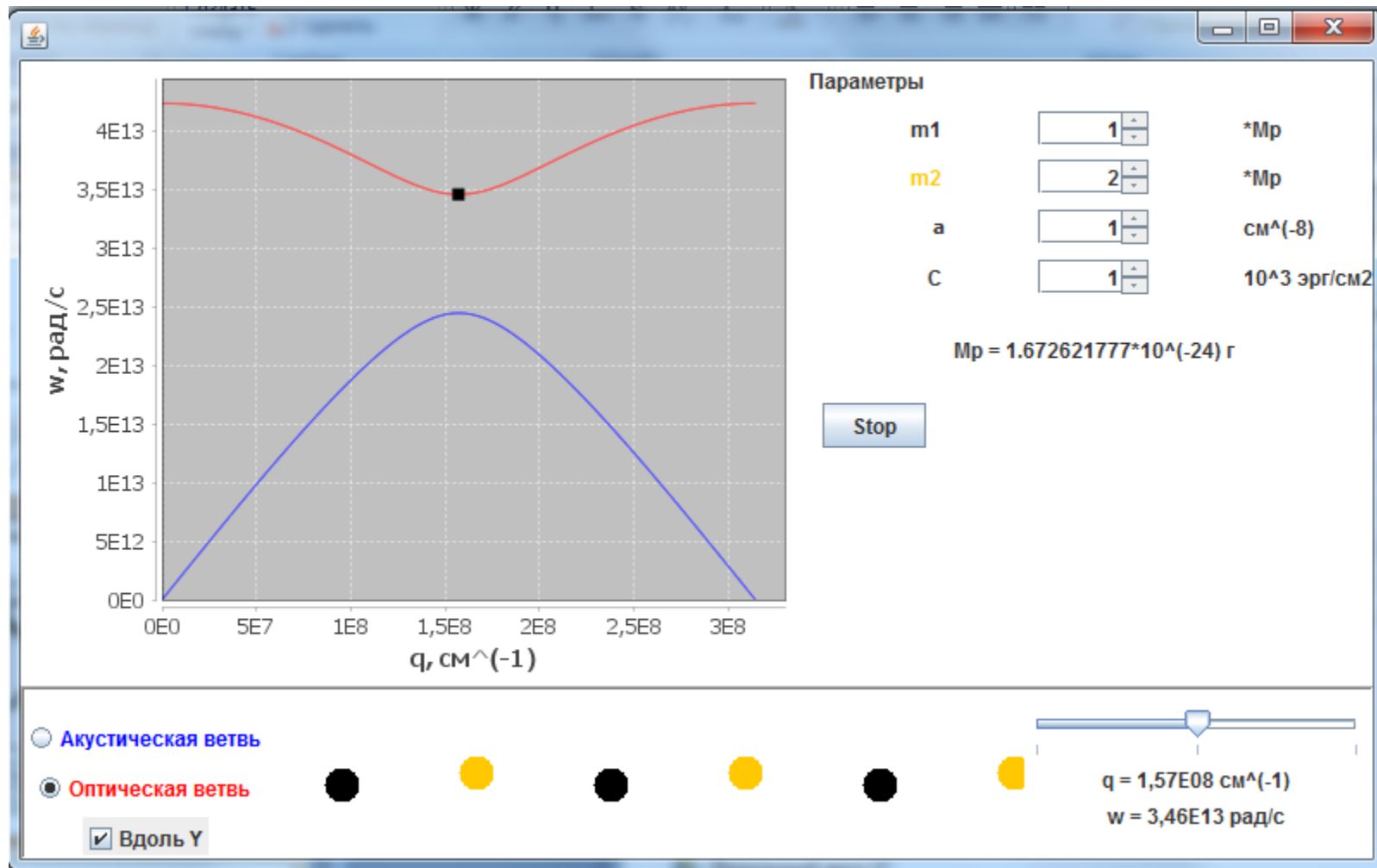
Схематичное изображение модели заряда на связи (3C). $2Z$ —остаточный заряд иона, $-Z$ —заряд на связи. Присутствуют короткодействующие силы между ионами (F_a) и кулоновские силы между ионами и 3C (F_b). Для стабилизации 3C на их узлах необходимы короткодействующие силы: ион 3C (F_c). F_d описывает короткодействующее взаимодействие связь-связь.



Зависимость частоты фононов в GaAs от волнового вектора вдоль высокосимметричных направлений зоны Бриллюэна. Сплошная линия – расчет с использованием модели заряда на связи, прерывистая линия – расчет с использованием расширенной модели Борна-фон-Кармана. Экспериментальные данные (рассеяние медленных нейтронов) приведены точками.



Пример программы с расчётом дисперсии фононов —
найдите ошибку!



Пример программы для визуализации фононов

Ангармонизм. Локальные колебания.

Фононы подчиняются статистике Бозе—Эйнштейна, то есть, вероятность того, что, фононное состояние заполнено (число заполнения n) равно:

$$\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

Тепловое расширение твёрдых тел. (Есть аномальные диапазоны теплового «сжатия»).

Теплоёмкость фононов.

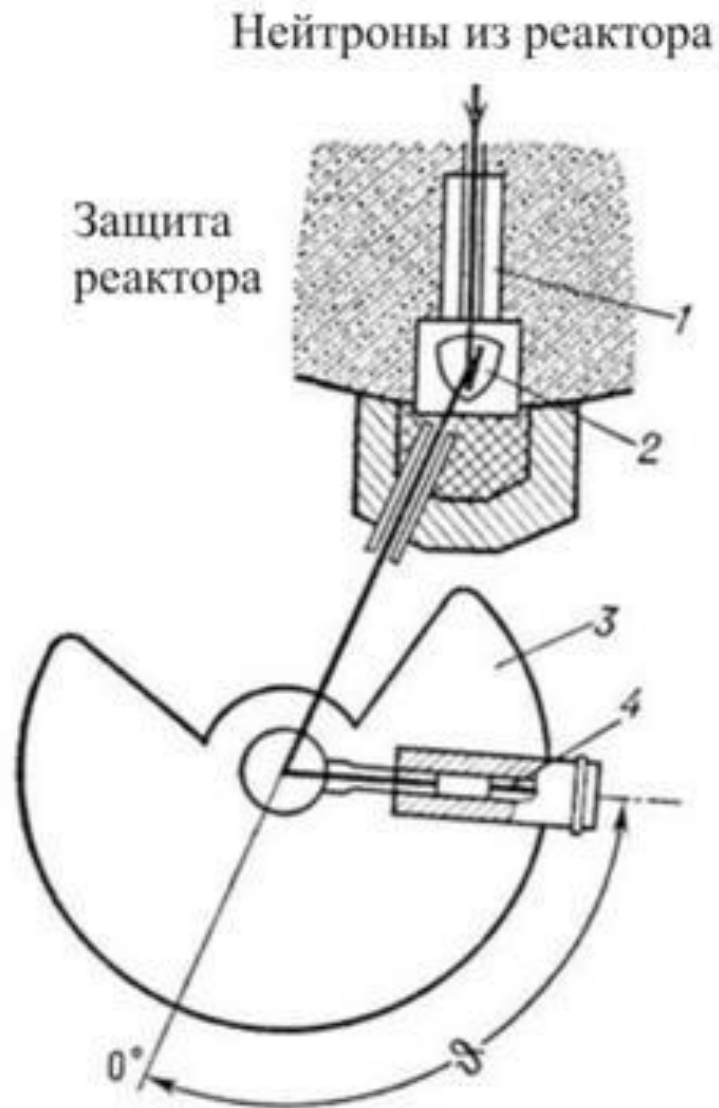
Локальные колебания в случае нарушения трансляционной симметрии — дефекты, примеси, аморфные вещества.

Локализованные и поверхностные фононы в наноструктурах.

Методы исследования фононного спектра.

- 1) Рассеяние медленных нейтронов
- 2) Поглощение фотонов с рождением фонона – ИК-спектроскопия
- 3) Комбинационное (неупругое рассеяние света)

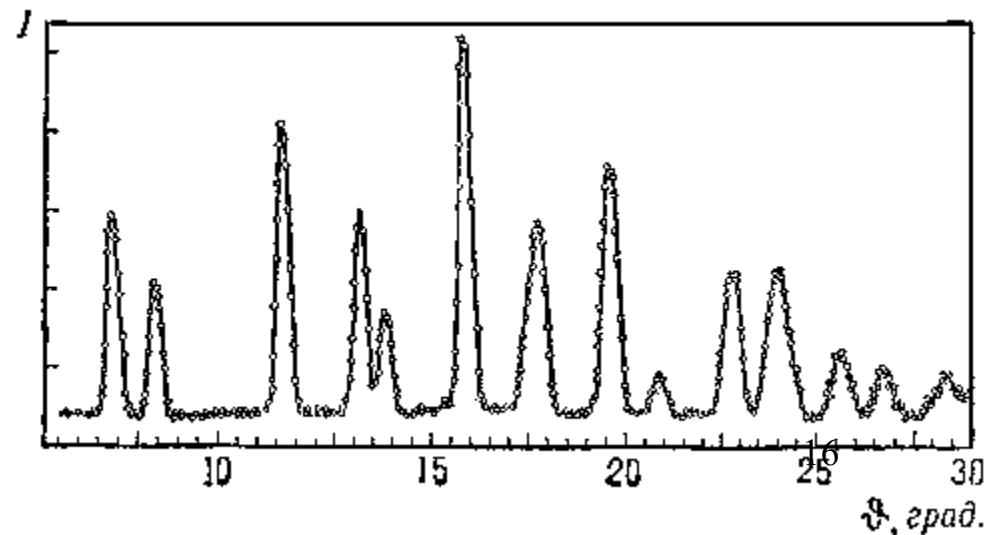
Рассеяние медленных нейтронов



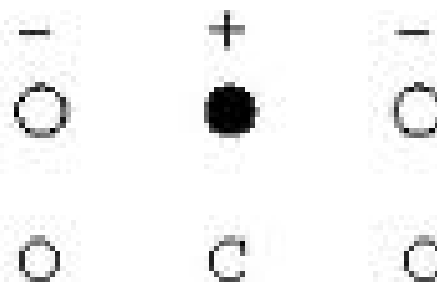
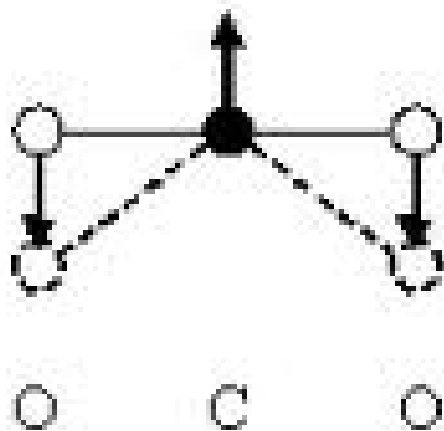
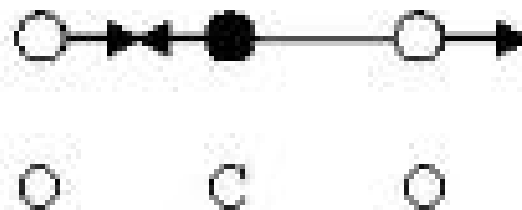
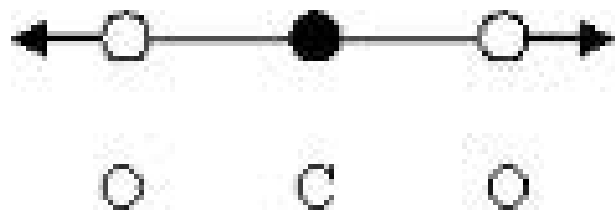
Импульс МН сравним с импульсом фоонов.

Анализируют потери энергии нейтронов – неупругое рассеяние.

Недостаток – сложность, **требуется большой кристалл.**



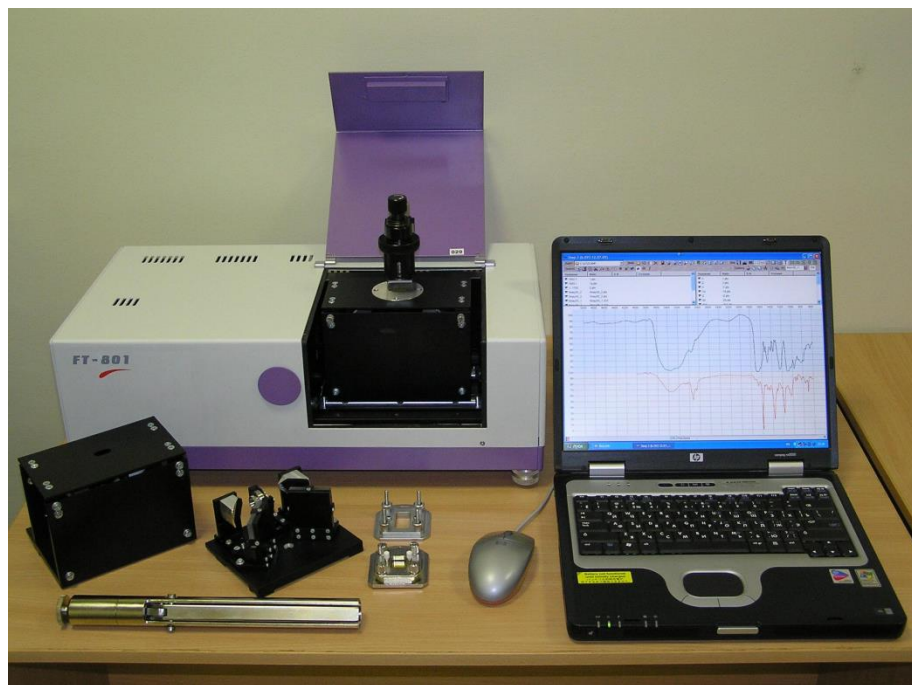
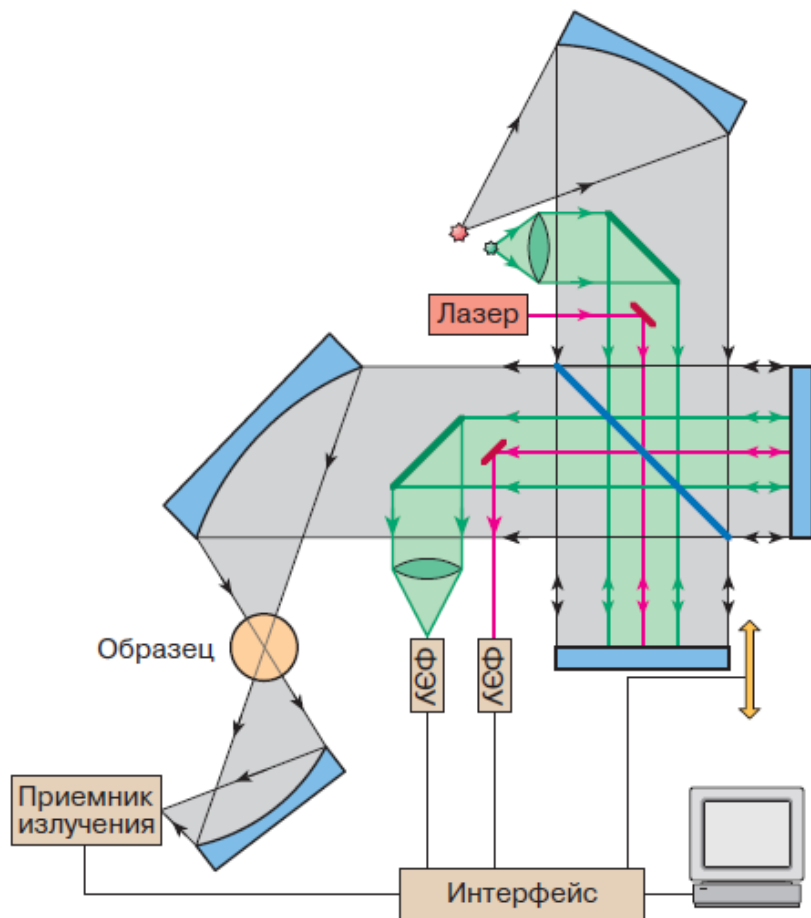
ИК-поглощение



Правила отбора – энергия (ИК-излучение – 2-100 мкм),
импульс, колебания должны создавать дипольный
МОМЕНТ

ИК-спектрометры

Дисперсионные и Фурье

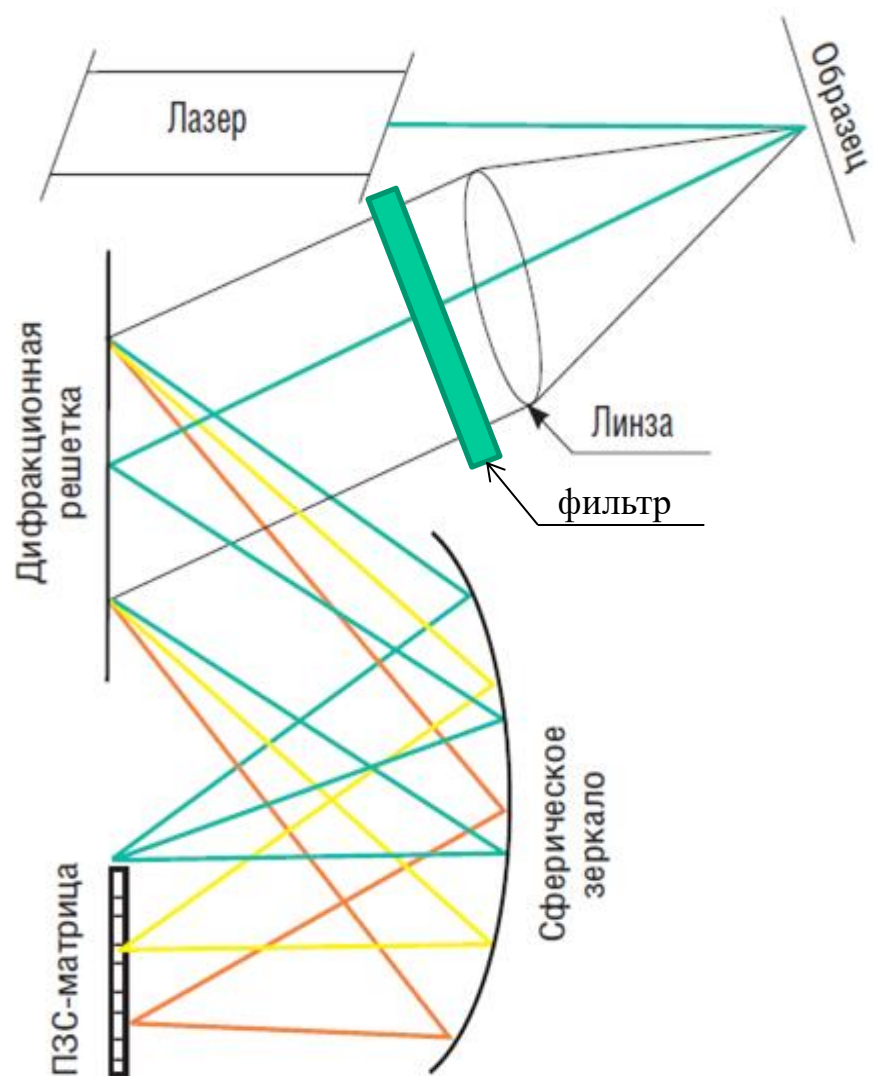
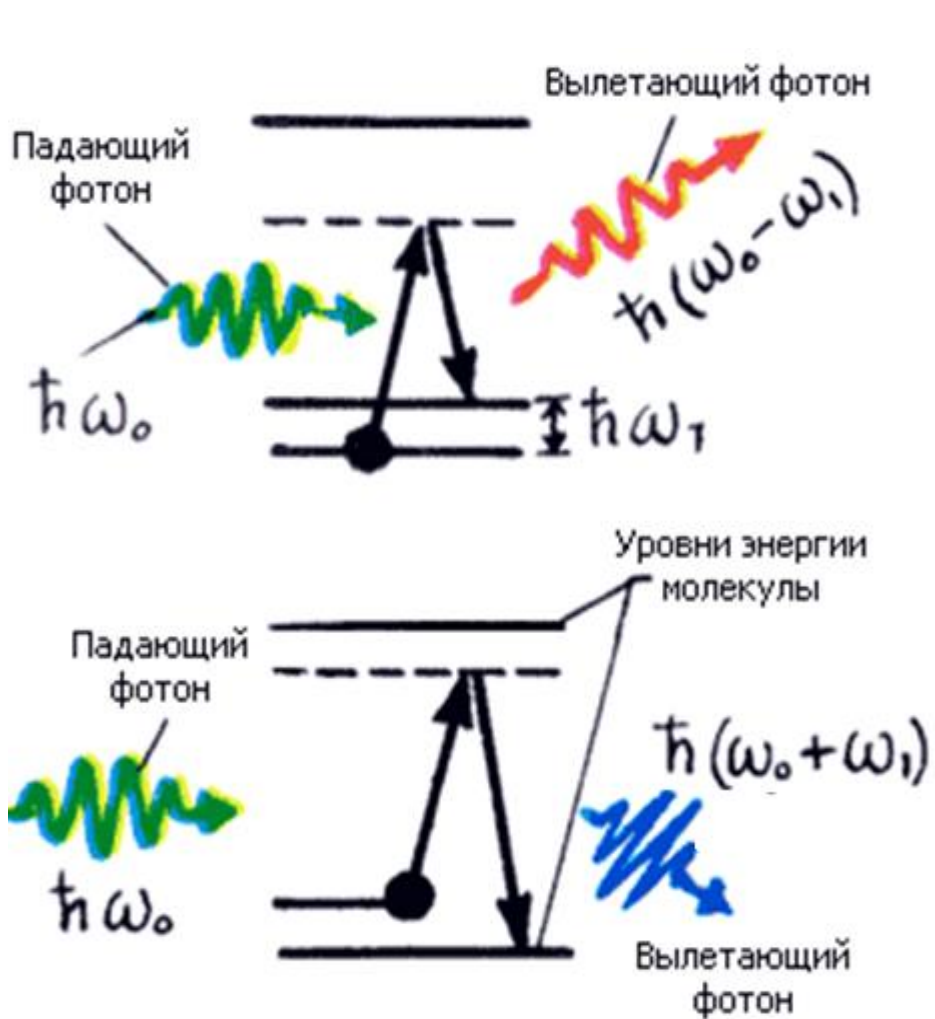


Фурье-ИК спектрометр
ФТ-801 (разработан в
ИФП СО РАН)

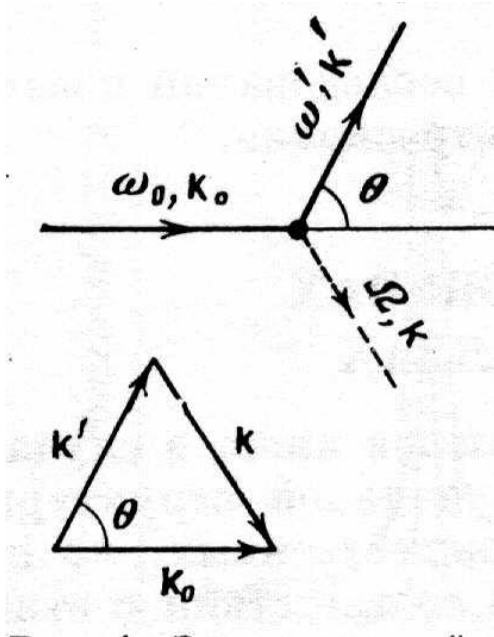
ООО НПФ "СИМЕКС", Новосибирск

<http://simex-ftir.ru/contact.html>

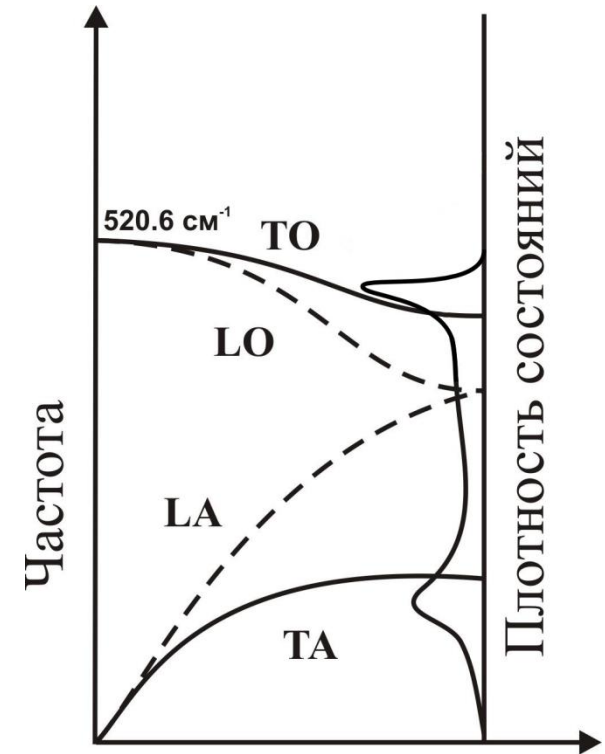
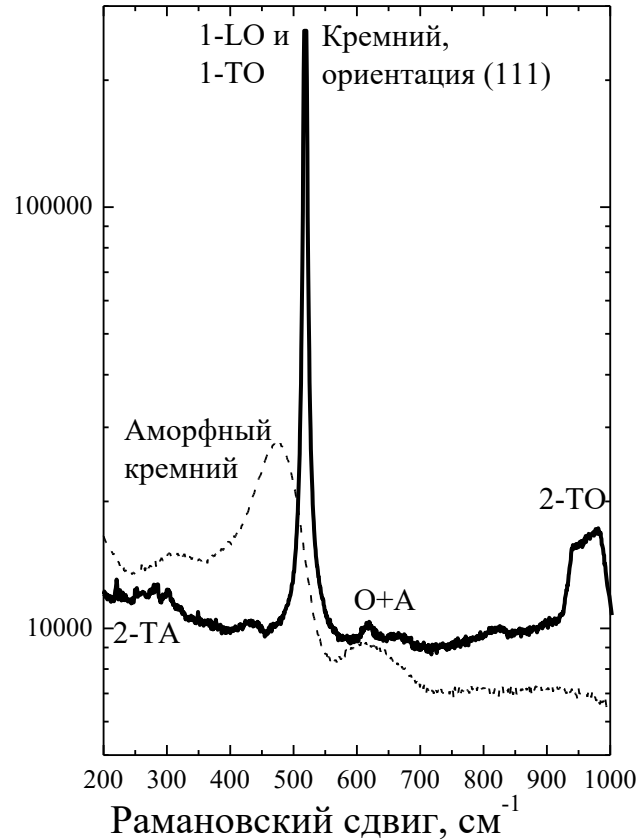
Комбинационное (неупругое) рассеяние света



КРС – законы сохранения, правила отбора



$$\omega' = \omega_0 \pm \Omega$$



Двух-фононное рассеяние

Вопросы на экзамене:

4. Фононы. Гармоническое приближение, эффекты ангармонизма. Модель одномерной цепочки, закон дисперсии, поперечные и продольные колебания. Двухатомная линейная цепочка. Акустические и оптические фононы.