מבוא למצב מוצק תשפ"ג – תרגול 8
פוננים במימד אחד

ספרות מומלצת:

- Ashcroft, Mermin: pp. 422-437 (ch. 22)
- Simon: ch. 8-10

בתחילת הקורס הצגנו את המושג "פוננים", החלקיקים המתקבלים מקוונטיזציה של תנודות הרמוניות של אטומים במוצק. אכלוס הפוננים בכל אופן תנודה נקבע לפי התפלגות בוז-איינשטיין, כך שבסה"כ

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\mathbf{k},s} \hbar\omega_s(\mathbf{k}) \left[f_{BE}(\beta\hbar\omega_s(\mathbf{k})) + \frac{1}{2} \right]$$

התדירויות $\omega_s(\mathbf{k})$ הן התדירויות של אופני התנודה הנורמליים (הבלתי-תלויים) **הקלאסיים**. למעשה זוהי רדוקציה של הבעיה ההרמונית הקוונטית אל בעיה של מציאת אופני תנודה קלאסיים.

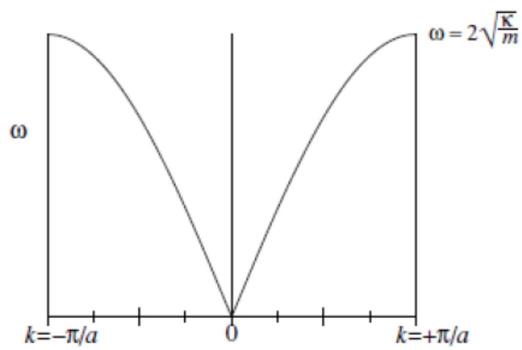
בתחילת הקורס עסקנו בפתרונות של Debye ($\omega_s(\mathbf{k}) = c\,|\mathbf{k}|$) ושל איינשטיין ($\omega_s(\mathbf{k}) = \omega_E$) עבור יחס הנפיצה. כעת אנחנו חוזרים לבעיה הקלאסית הזו, אבל הפעם בגביש – כלומר, מנצלים את **המבנה המחזורי** של המוצק.

1 שרשרת חד-מימדית מונואטומית

בכיתה מצאתם את יחס הנפיצה בשרשרת חד-מימדית מונואטומית עם קבוע סריג a. ראיתם שלכל k קיים פתרון יחיד, לפי

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{D_L}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

יחס הנפיצה מחזורי עם מחזור $\frac{2\pi}{a}$, ולכן אופני התנודה הבלתי-תלויים מוכלים כולם באזור ברילואן הראשון $-\frac{\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$ (עבור שרשרת עם N אטומים יש N אופני תנודה נורמליים). בגבול אורכי גל ארוכים $ka \ll 1$ מתקבלת התלות שהניח Debye, $\omega(k) \approx c\,|k|$.



איור 1 : יחס הנפיצה של שרשרת חד-מימדית מונואטומית על פני BZ1 (כאן $\kappa = D_L$).

תרגיל

נתונה שרשרת חד-מימדית מונואטומית, שבה כל אטום מקיים אינטראקציה הרמונית עם שכניו הקרובים ביותר וגם עם השכנים מסדר שני. מצאו את יחס הנפיצה ואת מהירות הקול במרכז אזור ברילואן, והראו שמהירות החבורה מתאפסת בקצות אזור ברילואן.

פתרון

האנרגיה הפוטנציאלית הכוללת בתרחיש הנתון היא מהצורה

$$U = U_0 + \frac{K_1}{2}\sum_n \left(u_n - u_{n+1}\right)^2 + \frac{K_2}{2}\sum_n \left(u_n - u_{n+2}\right)^2$$

כאשר u_n היא הסטייה של האטום ה-n מהמיקום בשיווי-משקל. משוואת התנועה הקלאסית עבור כל אחד מהאטומים היא

$$m\ddot{u}_n = -\frac{\partial U}{\partial u_n} = -K_1\left(u_n - u_{n+1}\right) - K_1\left(u_n - u_{n-1}\right) - K_2\left(u_n - u_{n+2}\right) - K_2\left(u_n - u_{n-2}\right)$$

נבחין בפרט כי הגדלת מספר השכנים איתם מתבצעת אינטראקציה לא הובילה להגדלת מספר המשוואות, אלא רק להגדלת מספר האיברים במשוואה. ננחש פתרון גלי מהצורה

$$u_n(t) = A_0 e^{ikna - i\omega t}$$

וכשנציב במשוואת התנועה נקבל

$$\begin{aligned} m\omega^2 &= K_1\left(1-e^{ika}\right)+K_1\left(1-e^{-ika}\right)+K_2\left(1-e^{i2ka}\right)+K_2\left(1-e^{-i2ka}\right) \\ &= 2K_1\left(1-\cos(ka)\right)+2K_2\left(1-\cos(2ka)\right) \\ &= 4K_1\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)+4K_2\sin^2(ka) \end{aligned}$$

לפיכך יחס הנפיצה הוא

$$\boxed{\omega(k)=2\sqrt{\frac{K_1}{m}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)+\frac{K_2}{m}\sin^2(ka)}}$$

בגבול $ka \ll 1$ (מרכז אזור ברילואן) נקבל שיחס הנפיצה מקיים בקירוב

$$\omega(k)\approx 2\sqrt{\frac{K_1}{m}\left(\frac{ka}{2}\right)^2+\frac{K_2}{m}(ka)^2}=a\sqrt{\frac{K_1+4K_2}{m}}\cdot|k|$$

ולכן מהירות הקול תהיה

$$c_s=a\sqrt{\frac{K_1+4K_2}{m}}$$

מהירות החבורה מתקבלת מגזירת יחס הנפיצה לפי k,

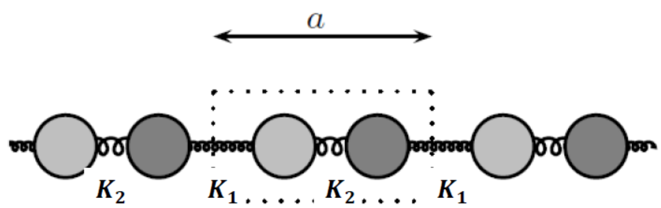
$$v_g=\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}=\frac{a\left[\frac{1}{2}K_1\sin(ka)+K_2\sin(2ka)\right]}{\sqrt{m\left(K_1\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)+K_2\sin^2(ka)\right)}}$$

בקצוות אזור ברילואן $k=\pm\frac{\pi}{a}$, ומכיוון שמתקיים $\sin(\pm\pi)=\sin(\pm2\pi)=0$, נקבל שגם $v_g=0$.

2 שרשרת חד-מימדית עם בסיס

תרגיל

נתונה שרשרת חד-מימדית עם קבוע סריג a שבה שני אטומים בכל תא יחידה פרימיטיבי. שני האטומים זהים, אך בשיווי-משקל המרחק ביניהם קטן מ-$\frac{a}{2}$, כך שניתן למדל זאת כשרשרת הרמונית שבה קבוע הקפיץ משתנה לסירוגין בין K_1 ל-K_2, כאשר $K_2 > K_1$.



איור 2 : שרשרת חד-מימדית דו-אטומית עם קבועי קפיץ מתחלפים.

סעיף א

מצאו את יחס הנפיצה של תדירות התנודות.

פתרון

נסמן בתא היחידה ה-n את הסטייה משיווי-משקל של האטום השמאלי בתור u_n, ואת זו של האטום הימני בתור v_n. נכתוב ביטוי לאנרגיה הפוטנציאלית הכוללת במערכת :

$$U = U_0 + \frac{K_1}{2}\sum_n \left(v_n - u_{n+1}\right)^2 + \frac{K_2}{2}\sum_n \left(u_n - v_n\right)^2$$

האיבר הראשון מתייחס לאינטראקציה בין תאי יחידה, והשני לאינטראקציה בתוך כל תא יחידה. נמצא את משוואות התנועה עבור כל אחד מהאטומים בתא יחידה :

$$m\ddot{u}_n = -\frac{\partial U}{\partial u_n} = K_1\left(v_{n-1} - u_n\right) + K_2\left(v_n - u_n\right)$$
$$m\ddot{v}_n = -\frac{\partial U}{\partial v_n} = K_1\left(u_{n+1} - v_n\right) + K_2\left(u_n - v_n\right)$$

ננחש פתרונות מהצורה של גלי סריג,

$$u_n = Ae^{i(kna - \omega t)}$$
$$v_n = Be^{i(kna - \omega t)}$$

מציבים ומקבלים

$$m\omega^2 A = A\left(K_1 + K_2\right) - B\left(K_1 e^{-ika} + K_2\right)$$
$$m\omega^2 B = B\left(K_1 + K_2\right) - A\left(K_1 e^{ika} + K_2\right)$$

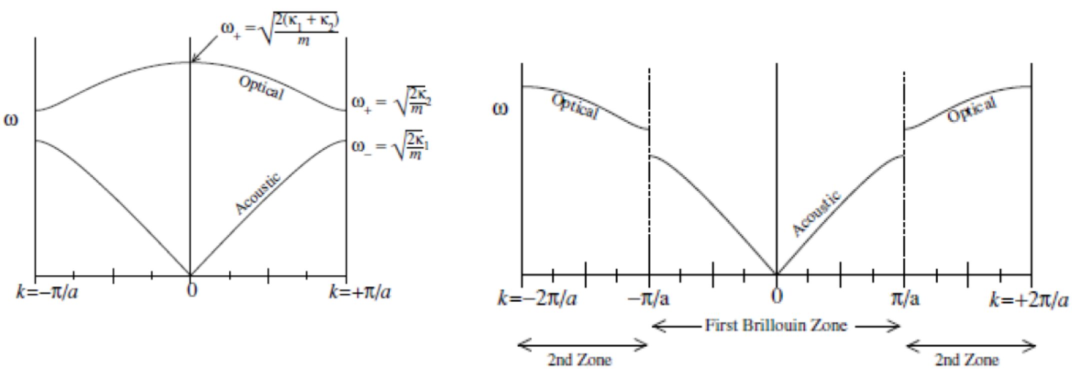
את שתי המשוואות המצומדות הללו על הנעלמים A, B נוח לכתוב בצורה מטריצית, כבעיית ערכים עצמיים

$$\begin{pmatrix} K_1 + K_2 - m\omega^2 & -\left(K_1 e^{-ika} + K_2\right) \\ -\left(K_1 e^{ika} + K_2\right) & K_1 + K_2 - m\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

פתרון לא טריוויאלי – כלומר, פתרון שבו <u>לא</u> מתקיים $A = B = 0$ – יתקבל רק בתנאי שהדטרמיננטה של המטריצה מתאפסת. מחישוב הדטרמיננטה והשוואה ל-0 מקבלים שני פתרונות אפשריים עבור $\omega(k)$ לכל k:

$$\boxed{\omega^2(k) = \frac{K_1 + K_2}{m} \pm \frac{1}{m}\sqrt{K_1^2 + K_2^2 + 2K_1K_2\cos(ka)}}$$

כצפוי, הפתרון מחזורי ב-k עם מחזור $\frac{2\pi}{a}$, ומכיוון שיש שני אטומים בתא היחידה קיבלנו שני ענפים ביחס הנפיצה.



איור 3 : יחס נפיצה בשרשרת דו-אטומית, בהצגת extended Brillouin zone (מימין) ובהצגת reduced Brillouin zone (משמאל).

הענף התחתון מקיים $\lim_{k\to 0}\omega_-(k) = 0$, ובגבול $ka \ll 1$ מקיים (בדקו זאת!)

$$\omega_-(k) \approx a\sqrt{\frac{K_1K_2}{2m\left(K_1 + K_2\right)}} \cdot |k|$$

ולכן זהו **הענף האקוסטי**. הענף העליון מקיים $\lim_{k\to 0}\omega_+(k) = \sqrt{\frac{2(K_1+K_2)}{m}}$, והוא **הענף האופטי**.

סעיף ב

מצאו את אופן התנודה הקלאסי המתאים לכל תדירות במרכז ובקצוות של אזור ברילואן.

פתרון

למציאת אופני התנודה עבור $k=0$, נציב את $\omega_{\pm}(k=0)$ במשוואה המטריצית. עבור הענף האקוסטי,

$$\begin{pmatrix} K_1+K_2 & -(K_1+K_2) \\ -(K_1+K_2) & K_1+K_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_- \\ B_- \end{pmatrix} = 0 \longrightarrow \begin{pmatrix} A_- \\ B_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

בעוד שעבור הענף האופטי

$$\begin{pmatrix} -(K_1+K_2) & -(K_1+K_2) \\ -(K_1+K_2) & -(K_1+K_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_+ \\ B_+ \end{pmatrix} = 0 \longrightarrow \begin{pmatrix} A_+ \\ B_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

בפתרון של אופן התנודה האקוסטי, שני האטומים בתא היחידה נעים יחד באותה הפאזה; גם תאי יחידה סמוכים הם בתיאום פאזה, ולכן הפתרון הזה מתאים לגל קול שמתקדם בשרשרת כמו במודל Debye. בפתרון של אופן התנודה האופטי האטומים בתא היחידה הם בהפרש פאזה של π, כך שהתנודה הדומיננטית היא התנודה הפנימית בתוך תא היחידה; זה אנלוגי במובן מסוים למודל איינשטיין, שבו כל אטום מהווה אוסליטור בלתי-תלוי ביתר האטומים.

אם נציב $k=\pm\frac{\pi}{a}$ נקבל

$$\begin{pmatrix} \pm(K_1-K_2) & K_1-K_2 \\ K_1-K_2 & \pm(K_1-K_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_\pm \\ B_\pm \end{pmatrix} = 0 \longrightarrow \begin{pmatrix} A_\pm \\ B_\pm \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mp 1 \end{pmatrix}$$

כלומר, בתוך כל תא יחידה קיבלנו מצב זהה למצב ב-$k=0$. אלא שכעת $e^{ika}=-1$, ולכן תאי יחידה סמוכים יהיו בפאזה הפוכה זה לזה, ובכל אופן תנודה נמתח רק סוג אחד של קפיץ.

באופן כללי, אם חושבים על תא היחידה כעל מולקולה, אופני התנודה של הענף האקוסטי הם אופני תנודה שבהם האטומים במולקולה נעים (בערך) יחד, והדינמיקה נשלטת על ידי האינטראקציה בין תאי היחידה. הענף האופטי מתאים לאופן תנודה פנימי של המולקולה, כאשר האינטראקציות בין תאי יחידה מרחיבות אותו לפס עם תלות ב-k.

סעיף ג

הראו שבגבול $K_2 \to K_1$ מתקבל יחס הנפיצה של שרשרת מונואטומית.

פתרון

כאשר מציבים $K_1=K_2\equiv K$, שני הענפים נותנים $\omega(k=\pm\frac{\pi}{a})=\sqrt{\frac{2K}{m}}$, והפער ביניהם נסגר. בהצגת extended Brillouin zone נוכל לראות שהתקבל גרף רציף של יחס הנפיצה על פני אזור ברילואן הראשון של סריג עם קבוע $\frac{a}{2}$, שתחום התנעים שלו הוא $-\frac{2\pi}{a}\leq k\leq\frac{2\pi}{a}$. ניקח בתחום $|k|\leq\frac{\pi}{a}$ את הפתרון של הענף

האקוסטי, ונקבל

$$\begin{aligned}\omega^2(k) &= \frac{2K}{m} - \frac{K}{m}\sqrt{2+2\cos(ka)} = \frac{2K}{m} - \frac{2K}{m}\sqrt{\cos^2(ka)} \\ &= \frac{2K}{m}\left[1-\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right] = \frac{4K}{m}\sin^2\left(\frac{ka}{4}\right)\end{aligned}$$

בתחום $\frac{\pi}{a} \leq |k| \leq \frac{2\pi}{a}$ ניקח את הפתרון של הענף האופטי, ונבחין כי בתחום הזה $\cos(ka) < 0$. נקבל

$$\begin{aligned}\omega^2(k) &= \frac{2K}{m} + \frac{K}{m}\sqrt{2+2\cos(ka)} = \frac{2K}{m}\left[1+\left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right|\right] \\ &= \frac{2K}{m}\left[1-\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right] = \frac{4K}{m}\sin^2\left(\frac{ka}{4}\right)\end{aligned}$$

אכן, קיבלנו את יחס הנפיצה הצפוי עבור שרשרת מונואטומית עם קבוע סריג $\frac{a}{2}$ וקבוע קפיץ K.