מבוא למצב מוצק תשפ"ג – תרגול 9
פונונים בשלושה מימדים

ספרות מומלצת:

- Ashcroft, Mermin: ch. 22, 24

1 פונונים בסריג ברווה תלת-מימדי מונואטומי

נרחיב את העיסוק מהשבוע שעבר לפונונים בסריג ברווה תלת-מימדי. נזכיר שאנחנו פותרים משוואות תנועה **קלאסיות** של אטומים בפוטנציאל הרמוני, במטרה להסיק מהן את יחס הנפיצה $\omega_s(\mathbf{k})$ אשר קובע את רמות האנרגיה **הקוונטיות**.

בקירוב ההרמוני, האנרגיה הפוטנציאלית בגביש נתונה על ידי

$$U = \frac{1}{4}\sum_{i,j}\sum_{\alpha,\beta}\left(u_{i\alpha}-u_{j\alpha}\right)D_{\alpha\beta}(\mathbf{R}^0_{ij})\left(u_{i\beta}-u_{j\beta}\right)$$

כאן $D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2\phi}{\partial r_\alpha \partial r_\beta}$ כאשר $\phi(\mathbf{r})$ היא אנרגיית האינטראקציה בין שני אטומים, האינדקסים α, β מתייחסים לרכיבים קרטזיים, האינדקסים i, j מתייחסים לאטומים בסריג, $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ ו

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}^0_i$$

היא הסטייה של האטום ה-i ממיקומו בשיווי משקל. נוח לעבור לכתיבה קומפקטית יותר,

$$U = \frac{1}{2}\sum_{i,j}\sum_{\alpha,\beta}u_{i\alpha}\left[-D_{\alpha\beta}(\mathbf{R}^0_{ij}) + \delta_{ij}\sum_m D_{\alpha\beta}(\mathbf{R}^0_{im})\right]u_{j\beta} \equiv \frac{1}{2}\sum_{i,j}\sum_{\alpha,\beta}u_{i\alpha}K_{\alpha\beta}(\mathbf{R}^0_{ij})\,u_{j\beta}$$

את אופני התנודה ויחס הנפיצה מוצאים מלכסון המטריצה $\tilde{K}(\mathbf{k})$ שמתקבלת מפירוק פורייה של $K(\mathbf{R})$:

$$\tilde{K}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_i K_{\alpha\beta}(\mathbf{R}^0_i)\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}^0_i} = -2\sum_i K_{\alpha\beta}(\mathbf{R}^0_i)\sin^2\left(\frac{1}{2}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}^0_i\right)$$

פתרון מדויק דורש סכימה על כל וקטורי הסריג $\mathbf{R}_i^0$, אבל כרגיל ניקח קירובים שלוקחים בחשבון רק שכנים מסדר נמוך. הראשית $\mathbf{R}_i^0=0$ לא תורמת לסכום.

הערה בתרגיל הבית תראו שעבור פוטנציאל מרכזי, $\phi(\mathbf{r})=\phi(r)$, המטריצה הדינמית היא מהצורה

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{R})=\delta_{\alpha\beta}\frac{\phi'(R)}{R}+\left[\phi''(R)-\frac{\phi'(R)}{R}\right]\left(\hat{\mathbf{R}}\right)_\alpha\left(\hat{\mathbf{R}}\right)_\beta$$

תרגיל: חישוב יחס הנפיצה הפונוני בסריג FCC

סעיף א

כתבו (באופן סכמטי) את משוואת הע"ע שקושרת בין ω ל-$\mathbf{k}$ בסריג FCC שבו האינטראקציה נקבעת ע"י פוטנציאל מרכזי, בקירוב שכנים קרובים ביותר.

פתרון

בסריג FCC לכל אטום 12 שכנים קרובים ביותר, במיקומים

$$\frac{a}{2}\left(\pm1,\pm1,0\right),\frac{a}{2}\left(0,\pm1,\pm1\right),\frac{a}{2}\left(\pm1,0,\pm1\right)$$

מכיוון שניקח בחשבון את $D(\mathbf{R})$ רק כאשר $\mathbf{R}$ מתאר שכן קרוב ביותר, הגודל $R=|\mathbf{R}|$ לא ישתנה בסכימה, ולפיכך קיימים קבועים κ_1,κ_2 כך שניתן לכתוב

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{R})=\delta_{\alpha\beta}\kappa_1+\left[\kappa_2-\kappa_1\right]\left(\hat{\mathbf{R}}\right)_\alpha\left(\hat{\mathbf{R}}\right)_\beta$$

לדוגמה, עבור $\mathbf{R}_1=\frac{a}{2}\left(1,1,0\right)$ מתקיים $\hat{\mathbf{R}}_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1,1,0\right)$, ואז

$$D(\mathbf{R}_1)=\kappa_1\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}+(\kappa_2-\kappa_1)\cdot\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&1&0\\1&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{\kappa_2+\kappa_1}{2}&\frac{\kappa_2-\kappa_1}{2}&0\\\frac{\kappa_2-\kappa_1}{2}&\frac{\kappa_2+\kappa_1}{2}&0\\0&0&\kappa_1\end{pmatrix}$$

נשים לב גם שמתקיים $D_{\alpha\beta}(\mathbf{R})=D_{\alpha\beta}(-\mathbf{R})$, ולכן עבור $\mathbf{R}_2=\frac{a}{2}\left(-1,-1,0\right)$ תתקבל מטריצה דינמית זהה. לכן נקבל 6 מטריצות דינמיות שונות עבור 12 השכנים.

בשלב הבא עלינו לעבור למונחי המטריצה $K\left(\mathbf{R}_{ij}\right)=-D\left(\mathbf{R}_{ij}\right)+\delta_{ij}\sum_m D\left(\mathbf{R}_{im}\right)$. אבל נשים לב שהתרומה השנייה נלקחת בחשבון רק כאשר $i=j$ (כלומר עבור $\mathbf{R}_{ij}=0$), בעוד שכאן אנחנו סוכמים על שכנים

של האטום בראשית ולא על האטום בראשית. אם כך,

$$K_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i) = -D_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i)$$

על כן נותר להציב בביטוי למטריצה $\tilde{K}$,

$$\tilde{K}(\mathbf{k}) = 2\sum_{i=1}^{12} D(\mathbf{R}_i)\sin^2\left(\frac{1}{2}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i\right)$$

צריך לסכום על 12 איברים, אבל כל איבר סימטרי תחת ההחלפה $\mathbf{R}_i \;\rightarrow\; -\mathbf{R}_i$ ולכן צריך לחשב בסך הכל 6 תרומות שונות. הע"ע של $\tilde{K}$ הם $m\omega^2(\mathbf{k})$, והווקטורים העצמיים יתנו את הקיטובים של אופני התנודה הקלאסיים.

סעיף ב

מצאו את יחס הנפיצה לאורך הישר $(k,0,0)$.

פתרון

ארבעת השכנים $\frac{a}{2}(0,\pm1,\pm1)$ לא יתרמו לסכום שמגדיר את $\tilde{K}$ משום שהם ניצבים ל-$\mathbf{k}=(k,0,0)$. לכן, אחרי שכבר מצאנו את $D(\mathbf{R}_1)=D(\mathbf{R}_2)$, נותר לנו למצוא 3 מטריצות דינמיות עבור שאר הזוגות של השכנים הקרובים. למשל,

$$\mathbf{R}_3 = -\mathbf{R}_4 = \frac{a}{2}(1,-1,0)$$
$$\longrightarrow D = \kappa_1\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} + (\kappa_2-\kappa_1)\cdot\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-1&0\\-1&1&0\\0&0&0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{\kappa_2+\kappa_1}{2} & -\frac{\kappa_2-\kappa_1}{2} & 0\\ -\frac{\kappa_2-\kappa_1}{2} & \frac{\kappa_2+\kappa_1}{2} & 0\\ 0&0&\kappa_1\end{pmatrix}$$

עבור שני הזוגות האחרים

$$\mathbf{R}_5 = -\mathbf{R}_6 = \frac{a}{2}(1,0,1) \longrightarrow D = \begin{pmatrix}\frac{\kappa_2+\kappa_1}{2} & 0 & \frac{\kappa_2-\kappa_1}{2}\\ 0&\kappa_1&0\\ \frac{\kappa_2-\kappa_1}{2} & 0 & \frac{\kappa_2+\kappa_1}{2}\end{pmatrix}$$
$$\mathbf{R}_7 = -\mathbf{R}_8 = \frac{a}{2}(1,0,-1) \longrightarrow D = \begin{pmatrix}\frac{\kappa_2+\kappa_1}{2} & 0 & -\frac{\kappa_2-\kappa_1}{2}\\ 0&\kappa_1&0\\ -\frac{\kappa_2-\kappa_1}{2} & 0 & \frac{\kappa_2+\kappa_1}{2}\end{pmatrix}$$

נבחין גם שעבור כל 8 השכנים הרלוונטיים מתקיים $\frac{1}{2}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i=\frac{a}{4}k$, ולכן

$$\tilde{K}(k,0,0)=2\sin^2\left(\frac{ak}{4}\right)\sum_{i=1}^{8}D(\mathbf{R}_i)$$

האיברים שמחוץ לאלכסון מתקזזים בסכימה, כך שבסך הכל מתקבלת המטריצה האלכסונית

$$\tilde{K}(k,0,0)=4\sin^2\left(\frac{ak}{4}\right)\begin{pmatrix}2\kappa_1+2\kappa_2 & 0 & 0\\ 0 & 3\kappa_1+\kappa_2 & 0\\ 0 & 0 & 3\kappa_1+\kappa_2\end{pmatrix}$$

הע"ע של המטריצה הם פשוט איברי האלכסון, ומכאן שקיבלנו אופן תנודה אורכי אחד ושני אופני תנודה רוחביים (מנוונים),

$$m{\omega_L}^2=8\left(\kappa_1+\kappa_2\right)\sin^2\left(\frac{ak}{4}\right)$$
$$m{\omega_T}^2=4\left(3\kappa_1+\kappa_2\right)\sin^2\left(\frac{ak}{4}\right)$$

כצפוי, שלושת הפתרונות הם של ענפים אקוסטיים (מתאפסים במרכז BZ1), ומחזוריים עם מחזור $\frac{4\pi}{a}$ (הסריג ההופכי הוא BCC עם צלע $\frac{4\pi}{a}$).

2 מדידת יחס הנפיצה הפונוני

את יחס הנפיצה הפונוני $\omega_s(\mathbf{k})$ ניתן למדוד באמצעות פיזור אנאלסטי של ניוטרונים מהגביש. כאשר מקרינים ניוטרונים על הגביש, ניוטרון בעל תנע $\mathbf{p}$ ואנרגיה $E=\frac{p^2}{2m}$ יכול להתפזר לתנע $\mathbf{p}'$ ואנרגיה $E'=\frac{p'^2}{2m}$. גודל התנע $|\mathbf{p}|$ יכול להשתנות בפיזור עקב פליטה או בליעה של פונונים. בהנחה של **פיזור חד-פונוני**, יש רק פונון אחד (באופן תנודה כלשהו $\mathbf{k},s$) שנבלע או נפלט ע"י הניוטרון במהלך הפיזור. הפיזור צריך לשמר אנרגיה ותנע סריגי:

$$E'=E\pm\hbar\omega_s(\mathbf{k})$$
$$\mathbf{p}'=\mathbf{p}\pm\hbar\mathbf{k}+\hbar\mathbf{G}$$

כש-$\mathbf{G}$ וקטור סריג הופכי כלשהו, וכאשר הסימן $+$ מתאים לתרחיש של בליעה והסימן $-$ מתאים לתרחיש של פליטה. המחזוריות של יחס הנפיצה נותנת לנו את התנאי לפיזור חד-פונוני,

$$\frac{p'^2}{2m}=\frac{p^2}{2m}\pm\hbar\omega_s\left(\pm\frac{\mathbf{p}'-\mathbf{p}}{\hbar}\right)$$

תרגיל

מקרינים ניוטרונים עם אורך גל λ בכיוון $\hat{\mathbf{x}}$ על גביש בעל מבנה של סריג SC. הגלאי מזהה ניוטרונים שהתפזרו בכיוון $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{y}}\right)$ ושאורך הגל שלהם הוא $\sqrt{2}\lambda$. בהנחה של פיזור חד-פונוני, האם נבלע או נפלט פונון? מהם $\mathbf{k}$ ו-ω של הפונון?

פתרון

התנע לפני ואחרי הפיזור הוא

$$\begin{aligned}\mathbf{p} &= \hbar\mathbf{q} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}\hat{\mathbf{x}} \\ \mathbf{p}' &= \hbar\mathbf{q}' = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2}\lambda}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{y}}\right) = \frac{\pi\hbar}{\lambda}\left(\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{y}}\right)\end{aligned}$$

השינוי באנרגיה הוא לפיכך

$$E' - E = \frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{\lambda}\right)^2\left[1^2+1^2-2^2\right] = -\frac{1}{m}\left(\frac{\pi\hbar}{\lambda}\right)^2$$

מכיוון שהניוטרון איבד אנרגיה נסיק שבתהליך הפיזור **נפלט** פונון.

נחשב את הנקודה המתאימה $\omega_s(\mathbf{k})$ ביחס הנפיצה:

$$\begin{aligned}\mathbf{k} &= \mathbf{q} - \mathbf{q}' + \mathbf{G} = \frac{\pi}{\lambda}\left(\hat{\mathbf{x}}-\hat{\mathbf{y}}\right) + \mathbf{G} \\ \omega_s(\mathbf{k}) &= \frac{|E'-E|}{\hbar} = \frac{\hbar}{m}\left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^2\end{aligned}$$

את התוספת $\mathbf{G}$ ניתן כמובן להשמיט לצורך חישוב יחס הנפיצה הפונוני, שכן הוא ממילא מחזורי בווקטורי הסריג ההופכי.