

## מבוא למצב מוצק תשפ"ג: תרגיל בית 9

1. פונונים בסריג FCC: בתרגול מצאנו את יחס הנפיצה של הפונונים בסריג FCC לאורך הישר  $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ , וזאת בהנחה של אינטראקציה דרך פוטנציאל מרכזי  $\phi(\mathbf{r}) = \phi(r)$  ובקירוב שכנים קרובים ביותר.

(א) הראו שעבור פוטנציאל אינטראקציה מרכזי הביטוי המתקבל למטריצה הדינמית הוא

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

כאשר  $\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{R}\mathbf{R}$  וקטור הכיוון המתאים לווקטור הסריג  $\mathbf{R}$ . בפרט, ראינו שאם כל השכנים הנלקחים בחשבון לצורך חישוב יחס הנפיצה נמצאים במרחק זהה, ניתן לכתוב  $D_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \delta_{\alpha\beta}\kappa_1 + [\kappa_2 - \kappa_1] (\hat{\mathbf{R}})_{\alpha} (\hat{\mathbf{R}})_{\beta}$ .

(ב) מצאו את יחס הנפיצה בסריג FCC לאורך הישרים

$$\mathbf{k} = \left( \frac{2\pi}{a}, k, 0 \right)$$

$$\mathbf{k} = (k, k, 0)$$

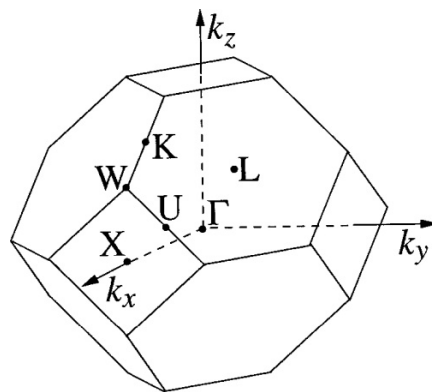
$$\mathbf{k} = (k, k, k)$$

(ג) רשות: עבור  $\kappa_2 = 100\kappa_1$ , שרטטו (בגרף אחד) את יחס הנפיצה לאורך המסלול הבא במרחב  $k$ :

$$\Gamma \rightarrow X \rightarrow X \rightarrow \Gamma \rightarrow L$$

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

בשורה העליונה מופיעים הסימונים של הנקודות באזור ברילואן הראשון (ראו איור), ובשורה התחתונה הקואורדינטות המתאימות להן. שימו לב כי הנקודה  $X$  מופיעה פעמיים לאורך המסלול עם קואורדינטות שונות (מדוע זה נכון?).



2. נתון סריג ריבועי דו-מימדי מונואטומי (בו האטומים מבצעים תנודות בתוך מישור  $xy$  בלבד).

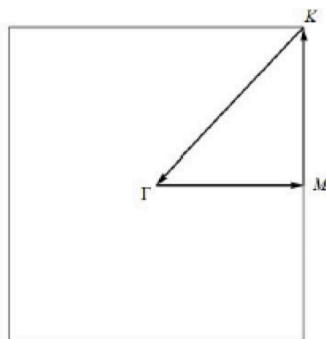
(א) מצאו את הענפים ביחס הנפיצה בקירוב שכנים קרובים ביותר, בהנחת פוטנציאל אינטראקציה

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

מרכזי. קבועי הקפיץ האפקטיביים נתונים ע"י

(ב) שרטטו את יחס הנפיצה לאורך המסלול  $\Gamma \rightarrow M \rightarrow K \rightarrow \Gamma$  באזור ברילואן הראשון (ראו איור).

$$\kappa_L = 4\kappa_T$$



(ג) מצאו את המטריצה ממנה ניתן לחשב את הענפים ביחס הנפיצה בקירוב שכנים מסדר שני. קבועי

הקפיץ האפקטיביים עבור שכנים קרובים ביותר הם כמתואר בסעיף (א), ועבור שכן מסדר שני  $\mathbf{R}$

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \delta_{\alpha\beta}\eta_1 + [\eta_2 - \eta_1] \left(\hat{\mathbf{R}}\right)_\alpha \left(\hat{\mathbf{R}}\right)_\beta$$

נסמן

3. אלומת ניוטרונים בעלי מסה  $M_n$  מוקרנת על גביש בעל מבנה של סריג SC עם קבוע סריג  $a$ , ועוברת פיזור

חד-פונוני. הניחו כי יחס הנפיצה של הפונונים איזוטרופי ולינארי, כלומר

$$\omega_s(\mathbf{k}) = \omega_s(k) = \begin{cases} v_L k \\ v_T k \end{cases}$$

הסימון  $L$  מתייחס לקיטוב אורכי, הסימון  $T$  מתייחס לשני הקיטובים הרוחביים (שיש ביניהם ניוון), ו-

$v_L, v_T$  הן מהירויות הקול המתאימות. קבעו את ערכן של מהירויות הקול באמצעות התנעים המדודים של הניוטרונים לפני ואחרי הפיזור, כמפורט להלן:

(א) ניוטרון בעל תנע  $\mathbf{p}_{in} = \frac{\pi\hbar}{a} \left( \frac{3}{2}, 0, 0 \right)$  מפוזר על ידי פונון בקיטוב אורכי לתנע  $\mathbf{p}_{out} = \frac{\pi\hbar}{a} (1, 1, 0)$ . קבעו את  $v_L$ .

(ב) ניוטרון בעל תנע  $\mathbf{p}_{in} = \frac{\pi\hbar}{a} \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, 0, 0 \right)$  מפוזר על ידי פונון בקיטוב רוחבי לתנע  $\mathbf{p}_{out} = \frac{\pi\hbar}{a} \left( -2, \frac{1}{2}, 0 \right)$ . קבעו את  $v_T$ .

4. בהרצאה ובתרגול התמקדנו במקרה של פיזור חד-פונוני: עבור פיזור של ניוטרונים עם  $\mathbf{p}$  התחלתי נתון, מדידה של אנרגיית הניוטרונים המפוזרים בכיוון ספציפי וקבוע (הכיוון של  $\mathbf{p}'$ ) תראה שיאים חדים בהסתברות למדוד ערכים מסוימים של אנרגיה (התלויים בגודל של  $\mathbf{p}'$ ) בעקבות פיזורים חד-פונוניים. במלים אחרות, למשוואה  $\frac{p'^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \pm \hbar\omega_s \left( \pm \frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{\hbar} \right)$ , אשר נובעת מחוקי השימור, קיים מספר סופי של פתרונות (בדידים) עבור  $p'$  (ולכן עבור  $E'$ ) מרגע שקבענו את הכיוון של  $\mathbf{p}'$ . כעת, במקרה של פיזור דו-פונוני, רשמו את משוואות השימור המתאימות עבור בליעת 2 פונונים, והראו כי מדידת האנרגיות המתקבלות עבור כיוון מסוים של פיזור תתן רצף של אנרגיות מותרות. הסיקו כי ניתן למדוד את יחס הנפיצה של הפונונים רק באמצעות הפיזורים החד-פונוניים.