Kvantová fyzika pevných látek

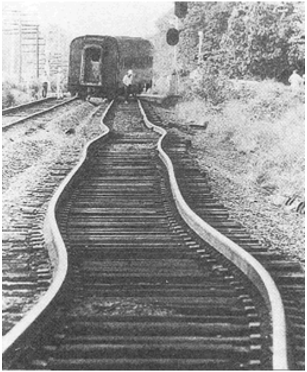
Přednáška 6: Vibrace krystalové mřížky I.

Pavel Márton

30. října 2013

Pozorování

- Zahřívání těles
  - Co způsobuje roztažnost látek se vzrůstající teplotou?
  - Kam vlastně teplo předávané látce jde?
  - Co způsobuje vedení tepla látkou?
  - Jaká je příčiná tání?
- Při ohřevívání pevné látky vzrůstají tepelné vibrace mřížky.
  - Kovy: do tepelné kapacity přispívá jak mřížka, tak elektrony.
  - Izolátory: přispívá pouze mřížka.
- Jak se šíří materiálem zvuk?
  - Postup zvukových vln - učité vibrační módy



Obrázek:
http://www.upscale.utoronto.ca/IYearLab/Intros/ThermalExpans/T

Vibrace krystalů s jednoatomovou bází I.

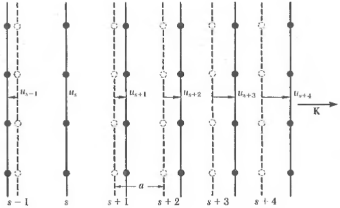
- Je dán směr postupu vlny **K**. Síla působící na plochu s: $F_s = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s)$. C je silová konstanta. Liší se pro *longitudinální* a *transversální* vibrace. Tento vztah je lineární ve výchylce, má charakter *Hookova zákona*.
- Pohybová rovnice (M je hmotnost):

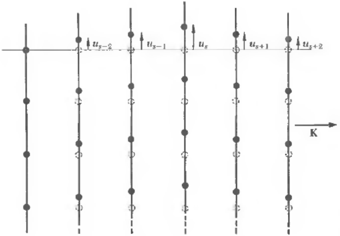
$$M\frac{d^2u_s}{dt^2} = F_s = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s)\ .$$

- Hledáme řešení pro výchylky s časovou závislostí ve tvaru $exp[-i\omega t]$, což vede na diferenční rovnici pro u_s

$$-M\omega^2 u_s = C\left(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s\right)$$

- Řešení očekáváme ve tvaru $u_{s\pm 1} = uexp[isKa]exp[\pm iKa]$, kde a je vzdálenost vibrujících rovin.
- Všimněme si že vlnová délka souvisí s vlnovým vektorem **K** vztahem $K = 2\pi/\lambda$.





Obrázek: Nahoře: podélná vlna, dole: transversální vlna (issp)

Vibrace krystalů s jednoatomovou bází II.

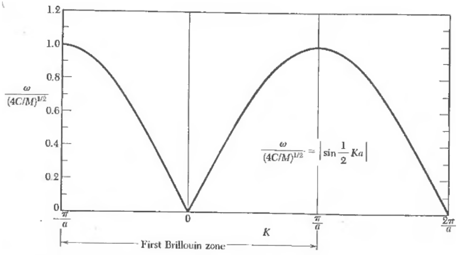
- Řešení:

$$\omega = (4C/M)^{1/2} \left| sin(\frac{1}{2}Ka) \right|$$

- Závislost $\omega(K)$ se nazývají *disperzní relace*.
- Ve *středu Brillouinovy zóny* vibrace vymizí. Všechny krystalové roviny se pohybují souhlasně $\Rightarrow$ posun celého krystalu.
- *Hranice* první Brillouinovy zóny: $K = \pm\frac{\pi}{a}$.
- *Stojaté vlny* vznikají na hranici Brillouinovy zóny.

$$u_s = u \, exp[\pm is\pi] = u(-1)^s$$

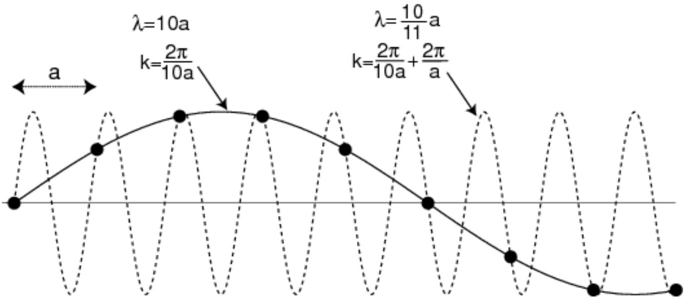
- Mezi hranicí a centrem Brillouinovy zóny se nachází tzv. *postupné vlnění*.



Obrázek: Graf závislosti ω na K (issp)

Proč je první Brillouinov zóna tak speciální?

- Dvě vlny, jejichž vlnové vehtory $\mathbf{k}$ a $\mathbf{k}'$ se liší o vektory $\mathbf{G}$ reciproké mřížky dávají stejnou vlnu vzorkovanou diskrétní mřížkou krystalu. Proto je energie vlny samozřejmě stejná (toto se bude významně lišit u elektronů. Důvod: elektrony jsou také periodické s periodou mřížky $\mathbf{T}$, ale nejsou mřížkou vzorkovány!)
- Příklad v 1D:
  - Discretizace (mřížková konstanta je a)
  - Velikost první Brillounovy zóny je $\frac{2\pi}{a}$
  - Dvě vlny, u kterých se K liší o $\frac{2\pi}{a}$ jsou zobrazeny na obrázku.
  - Různé vlny dávají stejné vzorky.



Srovnej http://en.wikipedia.org/wiki/File:Phonon_k_3k.gif

Grupová rychlost

- Rychlost postupu vlnového balíku je dána tzv. *grupovou rychlostí*:

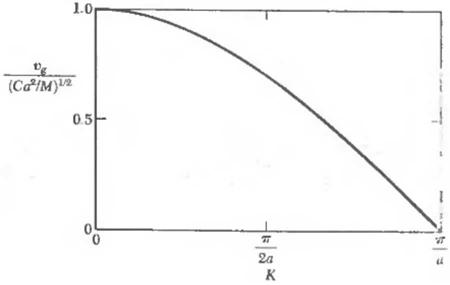
$$v_g = \frac{d\omega}{dK}$$

$$\mathbf{v}_g = grad_{\mathbf{K}}\ \omega(\mathbf{K})$$

- Grupová rychlost je rychlost postupu energie v prostředí.
- V našem případě je grupová rychlost

$$v_g = \left(\frac{Ca^2}{M}\right)^{1/2} cos(\frac{1}{2}Ka)$$

- Grupová rychlost je nulová na hranici první Brillouinovy zóny; stojaté vlnění samozřejmě nepřenáší energii.



Obrázek: Grupová rychlost v_g v závislosti na K (issp)

Dlouhovlnná limita

- Řešení: $\omega = (4C/M)^{1/2} \left|sin(\frac{1}{2}Ka)\right|$
- V oblasti $K \ll \frac{1}{a}$ (nebo jinak $\lambda \gg a$) vede Taylorův rozvoj k $sin(\frac{1}{2}Ka) \approx \frac{1}{2}Ka$, což vede ke vztahu pro úhlovou rychlost

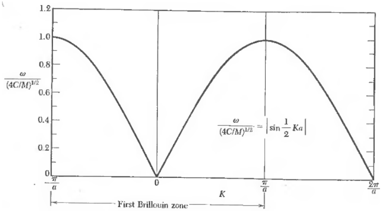
$$\omega = \sqrt{\frac{C}{M}}Ka$$

- Úhlová frekvence ω je úměrná vlnovému vektoru K.
- V této limitě

$$v = \frac{\omega}{K} = \sqrt{\frac{C}{M}}a = \sqrt{\frac{E}{\rho}}\ ,$$

přesně jako ve spojité teorii elasticity. Zde E je *objemový modul* (*Youngův modul*).

- *Dlouhovlnná limita* = *spojitá limita*.
- Rychlost zvuku nezávisí na frekvenci. Naštěstí! Takové médium se nazývá nedisperzní.



Obrázek: Graf ω v závislosti na K (issp)