

Dinamika rešetke

« Fizika čvrstog stanja »

Ivo Batistić

Fizički odsjek, PMF
Sveučilište u Zagrebu

predavanja 2014/2015 (zadnja inačica 13. listopada 2015.)

Pregled predavanja

Harmonička aproksimacija

Jednadžbe gibanja i dinamička matrica

Primjeri

Lokalizirana titranja

Kohnova anomalija

Lokalizirana titranja

Harmoniĉka aproksimacija

- ▶ Jedna od osnovnih pretpostavki u teoriji međumolekularnih i atomskih veza je Born–Oppenheimerova aproksimacija.
- ▶ U toj se aproksimaciji gibanje atoma zanemaruje.
- ▶ Međutim mnoge pojave (mehanička, elastična, termalna i ina svojstva) nije moguće razumjeti bez uzimanja u obzir dinamike rešetke.

Harmonička aproksimacija

- ▶ U Born–Oppenheimerovoj aproksimaciji energija sustava (bez kinetičke energije atoma) je funkcija položaja atoma.
- ▶ Pretpostavit ćemo da smo odredili minimum energije. To je pravilna kristalna struktura.
- ▶ Atomi u kristalnoj rešetci ne miruju, nego se gibaju titrajući oko svojih ravnotežnih pozicija.
- ▶ Ravnotežni položaji atoma u kristalnoj strukturi mogu se opisati pomoću radijus vektora Bravaisove rešetke i baznih vektora:

$$\vec{r}(m, i) = \vec{R}_m + \vec{r}_i \quad (i = 1, \dots, p)$$

gdje je p ukupni broj atoma u jediničnoj ćeliji.

- ▶ Gibanje atoma oko ravnotežnih položaja opisat ćemo vremenski ovisnim pomakom $\vec{u}(m, i, t)$:

$$\vec{r}(m, i, t) = \vec{R}_m + \vec{r}_i + \vec{u}(m, i, t) \quad (\text{vremensko ovisni položaji atoma})$$

Harmonička aproksimacija

U harmoničkoj aproksimaciji energija sustava se razvija po malim pomacima atoma od ravnotežnih položaja. Radi se o razvoju oko minimuma energije:

$$U(\{\vec{r}(m, i)\}) \approx U_0 + \sum_{m, i, \alpha} \overbrace{\left(\frac{\partial U}{\partial u_\alpha(m, i)} \right)}^{=0} u_\alpha(m, i) + \frac{1}{2} \sum_{m, i, \alpha, n, j, \beta} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial u_\alpha(m, i) \partial u_\beta(n, j)} \right)_0 u_\alpha(m, i) u_\beta(n, j)$$

$\alpha, \beta = x, y, z$
 $n, m =$ indeksi jedinične ćelije
 $i, j =$ indeksi atoma u jed. ćeliji

gdje su α i β indeksi, x, y i z , vektorskog polja \vec{u} .

Za drugu derivaciju energije uvedimo slijedeću oznaku:

$$K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m) = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial u_\alpha(m, i) \partial u_\beta(n, j)} \right)_0$$

Harmonička aproksimacija

Sila koja djeluje na i -ti atom u m -toj jediničnoj ćeliji dana je gradijentom potencijalne energije:

$$F_{\alpha}(m, i) = - \left(\frac{\partial U}{\partial u_{\alpha}(m, i)} \right) \\ \approx - \sum_{n, j, \beta} K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m) u_{\beta}(n, j)$$

Energija je invarijantna na homogenu translaciju sustava, pa tako i ukupna sila na atom treba biti jednaka nuli ako su svi pomaci atoma isti:

$$\sum_{n, j} K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m) = 0$$

$\alpha, \beta = x, y, z$

$n, m =$ indeksi jedinične ćelije

$i, j =$ indeksi atoma u jed. ćeliji

$$\sum_{m, i} K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m) = 0$$

U harmoničkoj se aproksimaciji energija može zapisati i kao:

$$U = U_0 - \frac{1}{4} \sum_{m, i, \alpha, n, j, \beta} K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m) [u_{\alpha}(m, i) - u_{\alpha}(n, j)] [u_{\beta}(m, i) - u_{\beta}(n, j)]$$

Harmonička aproksimacija

Elastične konstante $K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m)$ ne ovise o apsolutnim položajima jediničnih ćelija m i n . Oni ovise o njihovoj međusobnoj udaljenosti:

$$K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m) \equiv K_{\alpha\beta}^{ij}(\vec{R}_n - \vec{R}_m)$$

Pretpostavimo da je samo jedan atom (i_0) u samo jednoj jediničnoj ćeliji (m_0) izvučen iz ravnotežnog položaja. Sila koju osjećaju okolni atomi (j -ti atom u n -toj ćeliji):

$$F_{\beta}^j(n, m_0) = - \sum_{\alpha} K_{\beta\alpha}^{ji_0}(n, m_0) u_{\alpha}(m_0, i_0)$$

je lokalizirana u području oko poremećaja.

Elastične konstante $K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m)$ opadaju s povećanjem udaljenosti između jediničnih ćelija. Tipično radi se o samo nekoliko susjednih jediničnih ćelija. U metalima te udaljenosti preko kojih je $K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m)$ različit od nule mogu biti nešto veće.

Harmonička aproksimacija

Često se energija može prikazati kao energija međudjelovanja parova atoma:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{m,i,n,j} V(\vec{r}(m,i) - \vec{r}(n,j))$$

Tada je:

$$K_{\alpha\beta}^{ij}(n,m) = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial r_{\alpha}(m,i) \partial r_{\beta}(n,j)} \right) \Big|_{\text{rav. pol.}}$$

Tipično, međudjelovanje V je kratkog doseg. Koliko brzo međudjelovanje V opada sa udaljenošću, toliko brzo trne i njegova druga derivacija.

U harmoničkoj aproksimaciji međudjelovanje atoma doista je dovedeno na oblik u kojem postoji samo međudjelovanje parova atoma. To međutim ne znači da su tričestična ili višečestična međudjelovanja su zanemarena.

Jednadžbe gibanja i dinamička matrica

Jednadžbe gibanja

Kinetička energija gibanja atoma:

$$T_{kin} = \sum_{m,i} \frac{1}{2} M_i \dot{\vec{u}}^2(m, i)$$

Jednadžbe gibanja:

$$M_i \ddot{u}_\alpha(m, i) = - \sum_{n,j,\beta} K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m) u_\beta(n, j)$$

α, β = x, y, z
 n, m = indeksi jedinične ćelije
 i, j = indeksi atoma u jed. ćeliji

Riješenje se može tražiti u obliku ravnih valova:

$$u_\alpha(m, i) = \frac{\mathbf{e}_\alpha(i)}{\sqrt{M_i}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R}_m - \omega t)}$$

koje se onda svodi na traženje vlastitih vrijednosti i vektora matrice:

$$\sum_{j,\beta} \left[\frac{1}{\sqrt{M_i M_j}} \left(\sum_n K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m) e^{i(\vec{R}_n - \vec{R}_m) \cdot \vec{k}} \right) - \omega^2 \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \right] \mathbf{e}_\beta(j) = 0$$

Dinamička matrica

Traže se vlastiti vrijednosti i vlastiti vektori:

$$\sum_{j,\beta} \left[D_{\alpha\beta}^{jj}(\vec{k}) - \omega^2 \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \right] \mathbf{e}_{\beta}(j) = 0$$

gdje je:

$$D_{\alpha\beta}^{jj}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{M_i M_j}} \sum_n K_{\alpha\beta}^{ij}(n, m) \mathbf{e}^{z(\vec{R}_n - \vec{R}_m) \cdot \vec{k}}$$

Matrica $D_{\alpha\beta}^{jj}(\vec{k})$ se još naziva **dinamička matrica**. Dimenzija matrice je $3p$, gdje je p broj atoma u jediničnoj ćeliji.

Sve vlastite vrijednosti matrice ne smiju biti negativne. Negativnost vlastitih vrijednosti je indikacija da se energija nije razvila oko minimuma nego oko sedlene točke. Pojava negativnih vlastitih vrijednosti s promjenom temperature ili tlaka indikacija su pojave faznog prijelaza.

Periodični rubni uvjeti

Neka su $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ primitivni vektori rešetke, a N_1, N_2, N_3 broj ponavljanja primitivnih ćelija u kristalu u smjeru primitivnog vektora.

Periodični rubni uvjeti:

$$\vec{u}(\vec{R}_m + N_l \vec{a}_l, i) = \vec{u}(\vec{R}_m, i) \quad (l = 1, 2, 3)$$

uvode kvantizaciju valnih brojeva:

$$\vec{k} = \frac{n_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{n_3}{N_3} \vec{b}_3 \quad (n_1, n_2, n_3 = \text{cijeli brojevi})$$

gdje su $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ vektori recipročne rešetke.

Dinamička matrica

Matrica $D_{\alpha\beta}^{jj}(\vec{k})$ ima periodičnost recipročne rešetke:

$$D_{\alpha\beta}^{jj}(\vec{k} + \vec{G}) = D_{\alpha\beta}^{jj}(\vec{k})$$

Vlastite vrijednosti i vlastiti vektori imaju periodičnost recipročne rešetke!

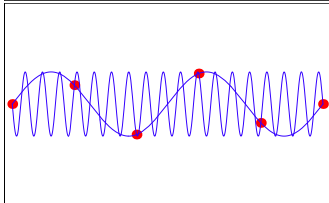
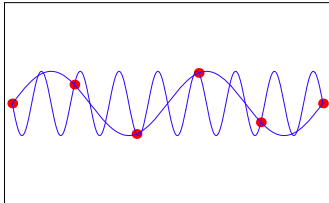
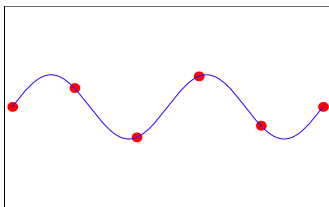
Valni brojevi \vec{k} mogu se ograničiti na samo prvu Brillouinovu zonu. (1. BZ)

Ukupni broj diskretnih valnih brojeva (trojki brojeva n_1, n_2, n_3) unutar 1. BZ jednak je broju primitivnih ćelija u kristalu.

U makroskopski velikom sustavu sumacija po valnim brojevima unutar 1. BZ može se zamijeniti integracijom:

$$\sum_{\vec{k}_i \in 1. \text{BZ}} \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{1. \text{BZ}} d\vec{k}$$

Zašto valni brojevi izvan 1. BZ nemaju smisla



Valni brojevi za sva ova tri vala razlikuju se za $\frac{2\pi}{a} \times$ (cijeli broj), a pri tome su pomaci atoma isti.

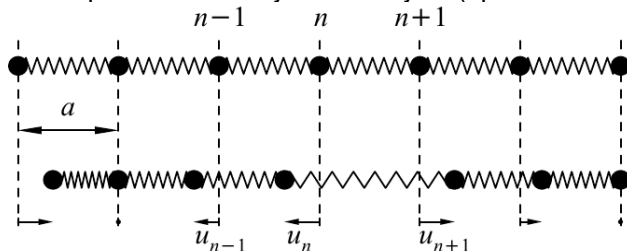
Valni brojevi izvan 1. BZ opisuju oscilacije koje se događaju na prostornim skalama manjim od udaljenosti atoma. Oni ne opisuju valove atoma koji već nisu obuhvaćeni valnim brojevima unutar 1. BZ.

Primjeri

Primjer: 1d lanac

Promotrimo primjer 1d lanca u kojem:

- ▶ postoji samo jedan atom po jediničnoj ćeliji.
- ▶ Postoji međudjelovanje samo između prvih susjeda,
- ▶ i atomi se pomiču samo u jednom smjeru (npr. uzduž lanca)



Energija u harmoničkoj aproksimaciji je:

$$U = U_0 + \sum_n \frac{K}{2} (u_n - u_{n+1})^2$$

Primjer: 1d lanac

Jednadžbe gibanja su:

$$M\ddot{u}_n = -K(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

Riješenje se traži u obliku ravnih valova:

$$u_n(t) = A e^{i(kx_n - \omega t)}$$

gdje je x_n ravnotežni položaj n -tog atoma: $x_n = na$.

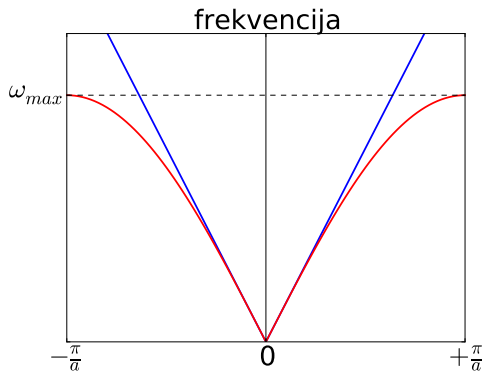
Uvrštavanjem u jednadžbe gibanja:

$$(-M\omega^2) A e^{i(kx_n - \omega t)} = -K(2 - e^{ika} - e^{-ika}) A e^{i(kx_n - \omega t)}$$

One su zadovoljene ako je frekvencija titranja:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4K}{M}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

Primjer: 1d lanac - frekvencija



$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4K}{M}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

Maksimalna frekvencija:

$$\omega_{max} = \sqrt{\frac{4K}{M}}$$

U području malih valnih brojeva frekvencija linearno ovisi o valnom broju:

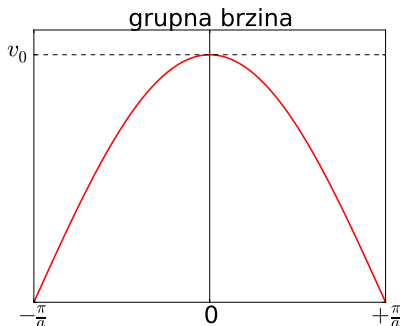
$$\omega(k) = v_0|k|$$

gdje je $v_0 = \sqrt{\frac{Ka^2}{M}}$ brzina zvuka.

Primjer: 1d lanac - grupna brzina

Grupa valova giba se zajedničkom (grupnom) brzinom:

$$v(k) = v_0 \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$

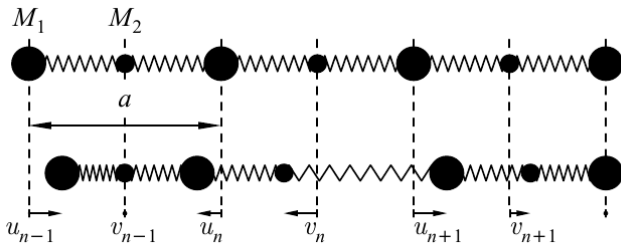


Valni paket se nakon nekog vremena raspada. Iza fronte valnog paketa ostaje trag brzooscilirajućih valova koji imaju malu faznu brzinu.

Primjer: 1d lanac s 2 atoma

Promotrimo primjer 1d lanca u kojem:

- ▶ postoje dva atoma različitih masa po jediničnoj ćeliji.
- ▶ Postoji međudjelovanje samo između prvih susjeda
- ▶ i atomi se pomiču samo u jednom smjeru.



Hamiltonijan

$$H = \sum_n \frac{M_1 \dot{u}_n^2}{2} + \frac{M_2 \dot{v}_n^2}{2} + \frac{K}{2} (u_n - v_n)^2 + \frac{K}{2} (v_n - u_{n+1})^2$$

Primjer: 1d lanac s 2 atoma

Jednadžbe gibanja su:

$$M_1 \ddot{u}_n = -K(2u_n - v_n - v_{n-1})$$

$$M_2 \ddot{v}_n = -K(2v_n - u_{n+1} - u_n)$$

Riješenje se traži u obliku ravnih valova:

$$\begin{pmatrix} u_n(t) \\ v_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{A}{\sqrt{M_1}} \\ \frac{B}{\sqrt{M_2}} \end{pmatrix} e^{i(kx_n - \omega t)}$$

gdje je x_n položaj n -te jedinične ćelije: $x_n = na$.

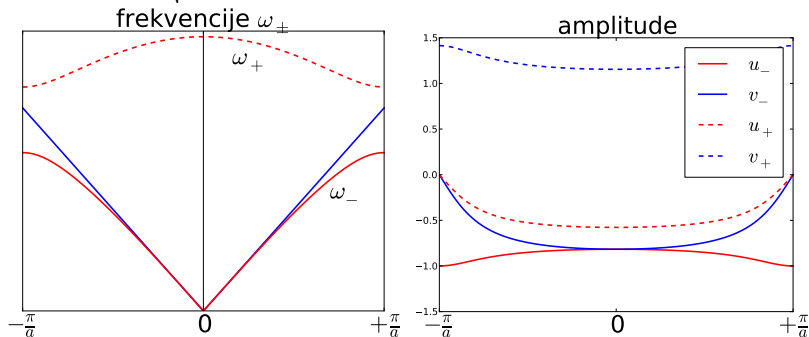
Uvrštavanjem u jednadžbe gibanja dobiva se problem vlastitih vrijednosti i vektora:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \frac{2K}{M_1} & -\frac{K}{\sqrt{M_1 M_2}}(1 + e^{-ika}) \\ -\frac{K}{\sqrt{M_1 M_2}}(1 + e^{ika}) & \frac{2K}{M_2} \end{bmatrix}}_{D^j(k) \text{ dinamička matrica}} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \omega^2 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Primjer: 1d lanac s 2 atoma

Postoje dvije vlastite frekvencije:

$$\omega_{\pm}(k) = \sqrt{\frac{K}{M_1} + \frac{K}{M_2} \pm \sqrt{\left(\frac{K}{M_1} + \frac{K}{M_2}\right)^2 - \frac{4K^2}{M_1 M_2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}}$$



Fononski spektar (lijevo) i amplitude titranja (desno) za 1d rešetku s dva atoma. Račun je napravljen za slučaj kada je $M_1 = 2 M_2$.

Primjer: 1d lanac s 2 atoma

Za male valne brojeve frekvencije su:

$$\omega_{-}(|\mathbf{ka}| \ll \pi) \approx \sqrt{\frac{2K}{M_1 + M_2}} \left| \sin\left(\frac{\mathbf{ka}}{2}\right) \right| \approx \sqrt{\frac{K a^2}{2(M_1 + M_2)}} |k|$$

$$\omega_{+}(|\mathbf{ka}| \ll \pi) \approx \sqrt{\frac{2K}{M_1} + \frac{2K}{M_2}}$$

a za valne brojeve na rubu 1. BZ:

$$\omega_{\pm}(|\mathbf{ka} - \pi| \ll \pi) \approx \sqrt{\frac{K}{M_1} + \frac{K}{M_2} \pm \left| \frac{K}{M_1} - \frac{K}{M_2} \right|} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2K}{M_{min}}} \\ \sqrt{\frac{2K}{M_{max}}} \end{cases}$$

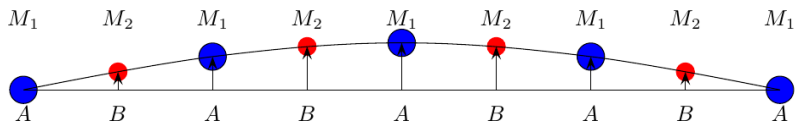
gdje su:

$$M_{min} = \min(M_1, M_2)$$

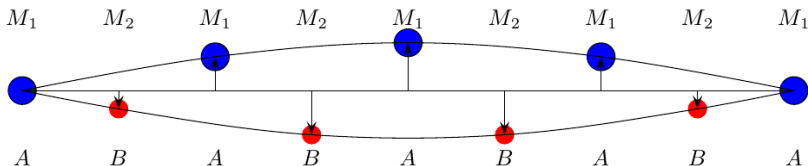
$$M_{max} = \max(M_1, M_2)$$

Primjer: 1d lanac s 2 atoma

Akustičko titranje



Optičko titranje



Primjer: 1d lanac s 2 atoma

U jednodimenzionalnom lancu s dvije vrste atoma različitih masa postoje dvije grane titranja:

▶ Akustičko titranje

- U području malih valnih brojeva frekvencija je linearno proporcionalna valnom broju: $\omega_- \approx v_0|k|$.
- Amplitude titranja atoma su **u fazi**.
- Akustičko titranje pomiče centar mase primitivne ćelije.
- U području malih valnih brojeva oba atoma titraju s istom amplitudom i istom fazom.

▶ Optičko titranje

- Frekvencija ima slabu ovisnost o valnom broju: $\omega_+ \approx \text{konst.}$
- Amplitude titranja atoma su u **antifazi**.
- Kod optičkog titranja centar mase je približno nepomičan.
- Ako se ioni različitog naboja stvara se dipolni moment.

Primjer: 1d lanac

Promotrimo primjer 1d lanca u kojem:

- ▶ postoji samo jedan atom po jediničnoj ćeliji.
- ▶ Postoji **međudjelovanje između daljnjih susjeda**.
- ▶ i atomi se pomiču samo u jednom smjeru.

Energija međudjelovanja:

$$U = U_0 + \sum_n \sum_{p \geq 1} \frac{K_p}{2} (u_n - u_{n+p})^2$$

Jednadžbe gibanja su:

$$M\ddot{u}_n = - \sum_{p \geq 1} K_p (2u_n - u_{n+p} - u_{n-p})$$

a frekvencija titranja je:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4}{M} \sum_{p \geq 1} K_p \sin^2 \left(\frac{pka}{2} \right)}$$

Fononski spektar u 3d

Primjer: 3d kubični kristal s jednim atomom

U najjednostavnijoj aproksimaciji međudjelovanje atoma ovisi samo o **njihovoj međusobnoj udaljenosti**. Energiji doprinose samo pomaci atoma koji su kolinearni radijus vektoru koji povezuje atome:

$$\begin{aligned}\delta|\vec{R}_{12}| &= |\vec{R}_1 - \vec{R}_2 + \vec{u}_1 - \vec{u}_2| - |\vec{R}_1 - \vec{R}_2| \\ &= \sqrt{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|^2 + |\vec{u}_1 - \vec{u}_2|^2 + 2(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \cdot (\vec{u}_1 - \vec{u}_2)} - |\vec{R}_1 - \vec{R}_2| \\ &\approx \underbrace{\frac{(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|}}_{\vec{n}_{12}} \cdot (\vec{u}_1 - \vec{u}_2) = \vec{n}_{12} \cdot (\vec{u}_1 - \vec{u}_2)\end{aligned}$$

Elastična energija:

$$U_{12} = \frac{k}{2} \left[\delta|\vec{R}_{12}| \right]^2 \approx \frac{k}{2} \left[\vec{n}_{12} \cdot (\vec{u}_1 - \vec{u}_2) \right]^2$$

Primjer: 3d kubični kristal s jednim atomom

Za jednostavnu kubičnu rešetku s međudjelovanjem samo između prvih susjednih atoma, elastična energija je:

$$U = U_0 + \frac{K}{2} \sum_{i,j,k} [(u_{i,j,k} - u_{i+1,j,k})^2 + (v_{i,j,k} - v_{i,j+1,k})^2 + (w_{i,j,k} - w_{i,j,k+1})^2]$$

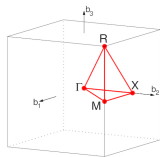
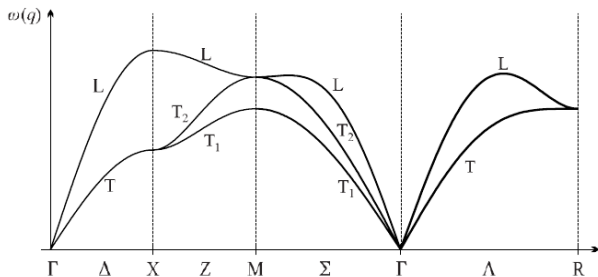
gdje su u , v i w x , y i z komponente vektora pomaka:

$$\vec{u} = (u, v, w)$$

- ▶ Ovako pojednostavljeni model ne daje ispravno transversalno titranje.
- ▶ Potrebno je uzeti u obzir međudjelovanje između daljnjih susjeda.
- ▶ Jedan od načina na koji se može gledati međudjelovanje između drugih susjeda da njihovo pomicanje mijenja kut između veza koje ga čine.

Primjer: 3d kubični kristal s jednim atomom

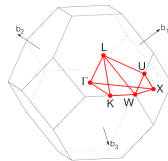
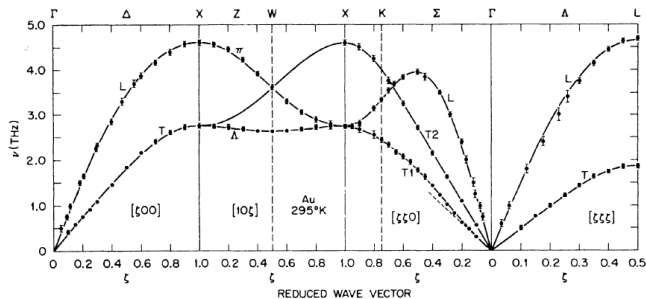
Fononski spektar jednostavnog kubičnog kristala u kojem postoji međudjelovanje samo između prvih i drugih susjednih atoma. Frekvencije su izračunate uzduž puteva koji povezuju točke visoke simetrije (Γ, X, M), kako je prikazano na maloj sličici prve Brillouinove zone (1BZ).



- ▶ Postoje samo 3 akustičke grane.
- ▶ U dugovalnoj granici, jedna akustička grana predstavlja longitudinalno titranje, a ostale dvije su transverzalna titranja.
- ▶ Brzine transverzalnih valova dane su međudjelovanjem drugih susjeda i manje su od brzine longitudinalnih valova.

- ▶ Broj različitih titranja je broj atoma u primitivnoj ćeliji pomnožen s tri.
- ▶ Uvijek postoje 3 akustička titranja.
- ▶ Optička titranja se javljaju u kristalnoj rešetci s više atoma.
- ▶ Broj optičkih grana je $3 \times (p - 1)$ gdje je p broj atoma u primitivnoj ćeliji.
- ▶ Dobro definirana longitudinalna i transverzalna titranja postoje ili za posebne valne brojeve ili u dugovalnoj granici ($|\vec{k}| \rightarrow 0$).

Primjer: fononski spektar zlata

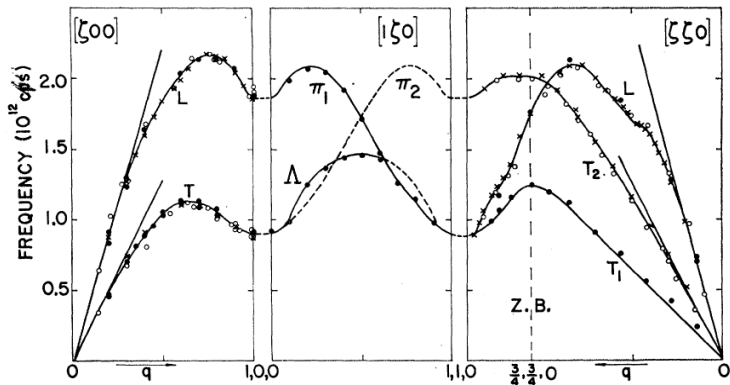


FCC path: Γ -X-W-K-L-U-W-L-K-U-X
[Soyman & Curcio, DOI: 10.1016/j.commat.2010.05.010]

Fononski spektar kristala zlata na sobnoj temperaturi izračunat uzduž linija koje povezuju točke visoke simetrije (Γ , X, W, K, L) u 1BZ. Točkice predstavljaju izmjerene podatke, a puna linija je teorijska prilagodba izmjerenim rezultatima. Posuđeno iz rada Lynn *et al.*, Phys. Rev. **B 8** (1973) 3493.

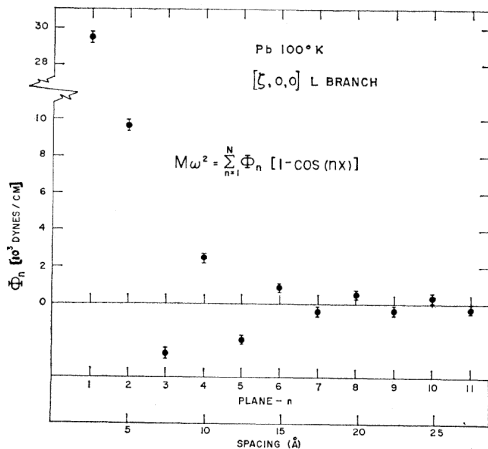
Kohnova anomalija

Primjer: fononski spektar olova



Fononski spektar olova na 100 K. Na rubu zone postoji mekšanje fononskih frekvencija što se objašnjava međudjelovanjem elektrona i fononskih titranja (Kohnova anomalija: W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **2** (1959) 393). Slika posuđena iz rada B.N. Brockhouse et al., Phys.Rev. **128** (1962) 1099.

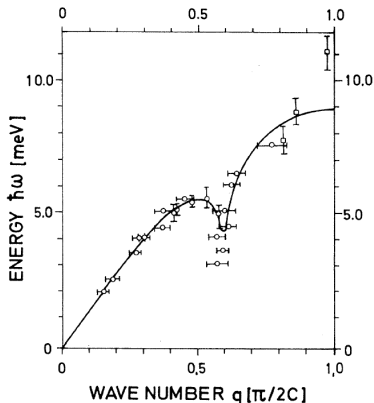
Primjer: fononski spektar olova



Da bi se objasnio fononski spektar metala treba uzeti u obzir i sile između daljnjih susjeda. Na slici je kako elastična konstanta između ravnina treba ovisiti o njihovoj udaljenosti kako bi se reproducirao fononski spektar u smjeru [$\zeta, 0, 0$] (vidi. prethodnu sliku.) Iz rada B.N. Brockhouse et al., Phys.Rev. **128** (1962) 1099.

Kohnova anomalija

Kohnova anomalija je posebno izražena u kvazijednodimenzionalnim (niskodimenzionalnim) materijalima. Na niskim temperaturama Kohnova anomalija dovodi do stvaranja periodične statičke $2k_F$ -deformacije, a metal postaje izolator.



Razvoj Kohnove anomalije u $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$.
Iz rada B. Renker et al., Phys.Rev.Lett. **30** (1973) 1144.

Lokalizirana titranja

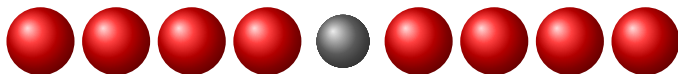
Lokalizirana titranja rešetke

Kristalna rešetke može imati različite vrste defekata.

- ▶ Supstitucijski - regularni atom zamijenjen atomom druge vrste
- ▶ Intersticijski - Atom u međupoložaju
- ▶ Vakancije (praznine) - nedostatak atoma u regularnoj rešetci

Pretpostavke:

- ▶ Monoatomni 1d lanac s pomacima u jednom smjeru
- ▶ Čvorište $n = 0$ sadrži supstitucijski defekt, regularni atom mase M je zamijenjen s lakšim atomom mase M' .
- ▶ Međudjelovanje samo između prvih susjeda.
- ▶ Ista elastična konstanta za međudjelovanje defektnog atoma s regularnim susjednim atomima.



Lokalizirana titranja rešetke

Jednadžbe gibanja:

$$M\ddot{u}_{-2} = -K(2u_{-2} - u_{-1} - u_{-3})$$

$$M\ddot{u}_{-1} = -K(2u_{-1} - u_0 - u_{-2})$$

$$M'\ddot{u}_0 = -K(2u_0 - u_1 - u_{-1})$$

$$M\ddot{u}_1 = -K(2u_1 - u_2 - u_0)$$

...

Kao rješenja i dalje postoje delokalizirani valovi koji se raspršuju na defektu i dobivaju fazni pomak:

$$u_n^{(s)} = A \cos(k|na| - \eta) e^{-i\omega t}$$

$$u_n^{(a)} = B \sin(kna) e^{-i\omega t}$$

Fazni pomak $\eta(k)$ treba izabrati tako da jednadžbe gibanja budu zadovoljene. Frekvencija delokaliziranih valova:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4K}{M}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

Lokalizirana titranja rešetke

Osim delokaliziranih titranja postoje i lokalizirani pobuđenja.
Lokalizirano rješenje tražimo u obliku:

$$u_n = C e^{i\pi n} e^{-\alpha|n|} e^{-i\omega t}$$

Jednadžbe gibanja bit će zadovoljene ako je:

$$\omega^2 = \frac{2K}{M'} (1 + e^{-\alpha}) \quad (\text{za } n = 0)$$

$$\omega^2 = \frac{2K}{M} (1 + \cosh \alpha) \quad (\text{za } n \neq 0)$$

Rješenje jednadžbi postoji ako je:

$$e^{\alpha} = \frac{2M}{M'} - 1 > 1$$

Frekvencija lokaliziranog titranja:

$$\omega = \sqrt{\frac{2K}{M'} \frac{1}{1 - \frac{M'}{2M}}}$$

Lokalizirana titranja rešetke

- ▶ Lokalizirano titranje postoji ako je $M' < M$.
- ▶ Titranje nije lokalizirano samo na defektu nego i na okolnim regularnim atomima.
- ▶ Titranje eksponencijalno trne s udaljenošću od defekta. Brzina atenuacije:

$$I = \frac{a}{\ln\left(\frac{2M}{M'} - 1\right)}$$

- ▶ Frekvencija titranja u području iznad kontinuuma akustičkih valova.

Primjer: supstitucije Cl iona sa vodikom u KCl kristalu.

Rezonantna titranja rešetke

Što ako lokalizirani defekt ima masu veću od regularnog atoma
(Primjer: supstitucija K iona sa Ag u KJ kristalu)

- ▶ Ne postoji lokalizirano titranje izdvojeno iz kontinuuma akustičkih valova.
- ▶ Unutar kontinuuma frekvencija akustičkih valova postoji rezonantno stanje koje odgovara titranju teškog defekta.
- ▶ Ako se pošalje valni paket uzduž kristala, valni paket se propagira grupnom brzinom jednoliko sve do područja teškog defekta. U području teškog defekta se zadržava izvjesno vrijeme, te se raspršuje prema naprijed i prema nazad s određenim faznim pomakom.
- ▶ Najveće zadržavanje valnog paketa oko defekta se dobiva ako srednja frekvencija titranja odgovara rezonantnoj frekvenciji teškog defekta.