

PHYS-C0240 Materiaalifysiikka

kevät 2019

Prof. Martti Puska
Emppu Salonen
Kristoffer Simula

Viikko 3: Harmoniset 1D-hilavärähtelyt

Torstai 2.5.2019

Aiheet tällä viikolla

- 1D harmonisen ketjun normaalimoodit ja dispersiorelaatio
- Fononit
- Diatomisen 1D-ketjun värähtely
- Mitattuja hilavärähtelyn dispersiorelaatioita
- Sananen todellisten hilavärähtelyjen anharmonisuudesta

Osaamistavoitteet, viikko 3

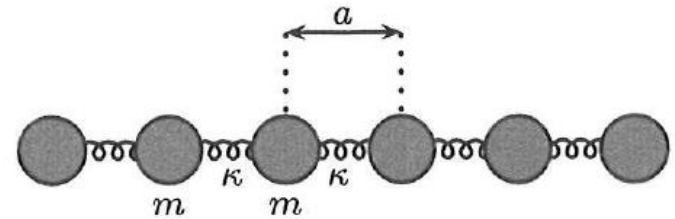
- Osaat tulkita yksinkertaisten monatomisten ja diatomisten atomiketjujen värähtelyjen dispersiorelaatioita: Brillouinin vyöhykkeet, vaihe- ja ryhmänopeudet, värähtelyn akustiset ja optiset haarat.
- Osaat selittää käsitteet *fononi* (määritelmä, ominaisuudet) ja *kideliikemäärä* (miten eroaa todellisesta liikemäärästä ja miksi).

1D-hilavärähtelyt

Monatominen harmoninen ketju

Liikkeyhtälö

$$m\delta\ddot{x}_n = \kappa(\delta x_{n+1} + \delta x_{n-1} - 2\delta x_n)$$

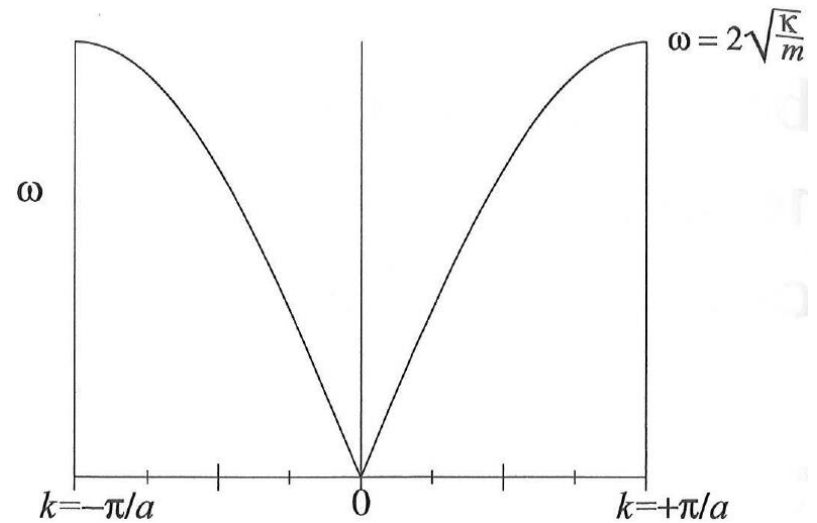


Yrite: normaalimoodit tasoaaltoja

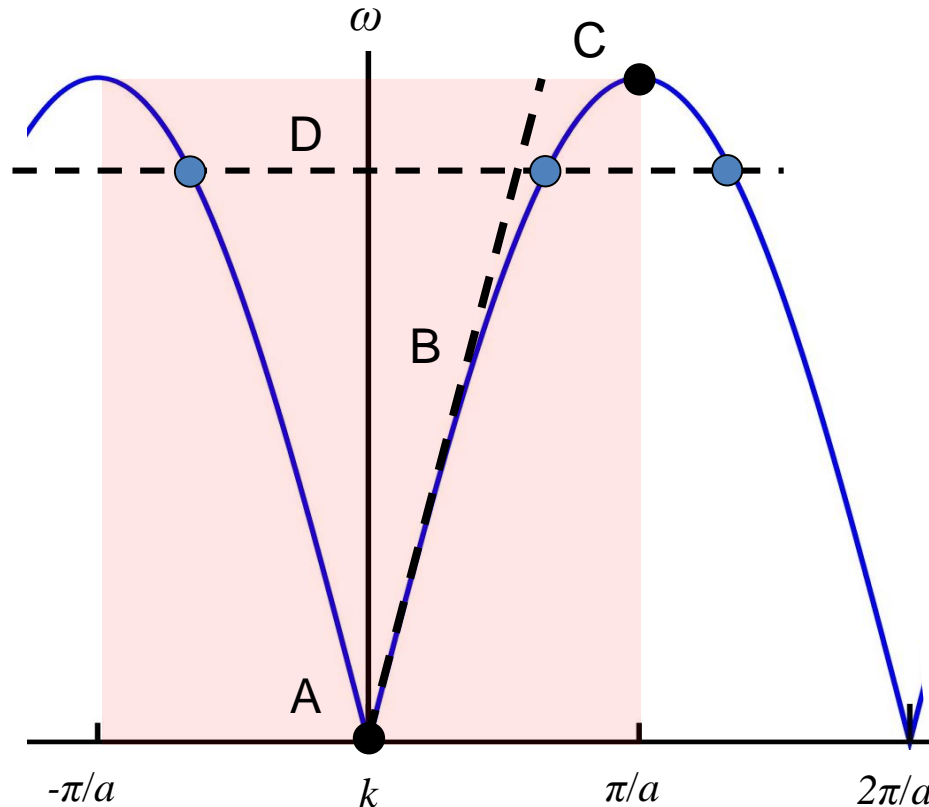
$$\delta x_n = A e^{i(\omega t - k n a)}$$

Dispersiorelaatio

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} |\sin(ka/2)|$$



1D-ketju: dispersiorelaation tulkintaa



A: Minkälaista ionien liikettä piste $k = 0$ vastaa?

Koko kiteen liikettä! Kaikki atomit liikkuvat täsmälleen samassa vaiheessa nollataajuudella.

B: Mitä tämä viiva kuvaa (dispersiokäyrän tangenti pisteessä $k = 0$ tai lineaarinen sovitus, kun $k \rightarrow 0$)

Akustinen approksimaatio dispersiorelaatiolle. Kulmakerroin = äänen nopeus.

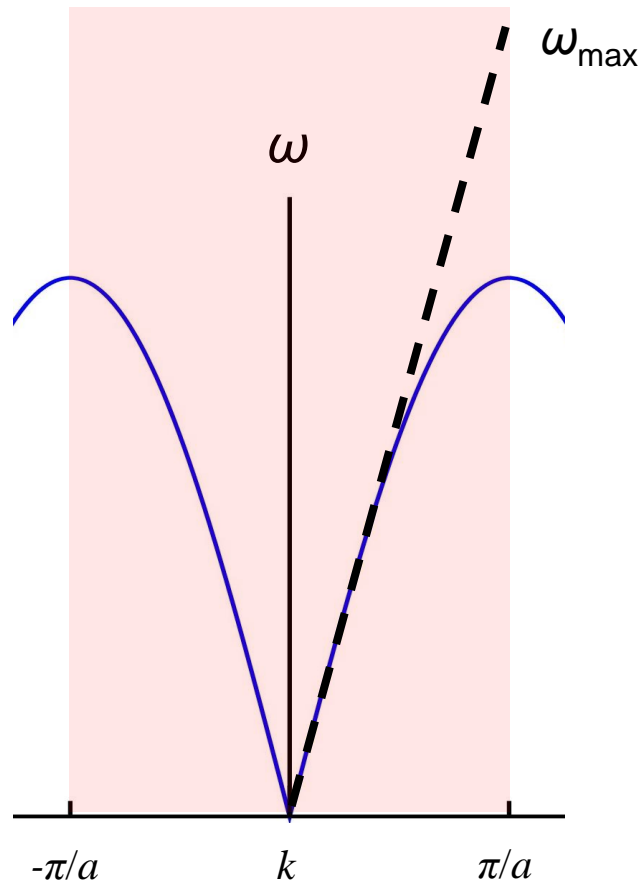
C: Mikä on tämän pisteen fysikaalinen merkitys? Minkälaista ionien liikettä se vastaa?

1. Brillouinin vyöhykkeen raja, vierekkäiset atomit vastakkaisessa vaiheessa.

D: Mitkä näistä viivalla olevista pisteistä kuvaavat samaa ionien värähtelyä?

Kaikki tuottavat saman taajuuden värähtelyn, mutta laitimmaisten pisteiden tapauksessa ryhmänopeus on negatiivinen, keskimmaisen pisteen tapauksessa positiivinen.

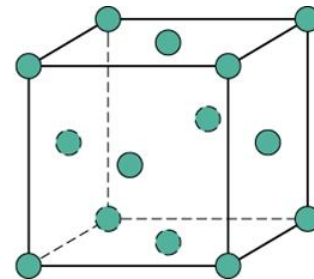
1D-ketju: suuruusluokka-arvio



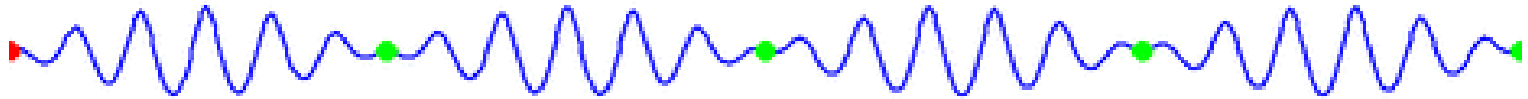
Suuruusluokka-arvio ionien värähtelyn ylärajataajuudelle ($k = \pm\pi/a$).

Esim. lyijylle [100]-suunnassa

$$v_o = 1158 \text{ m/s} \quad 2a = 4.95 \text{ \AA} \quad \Rightarrow \quad \omega_{\max} \approx 1,5 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$$



Vaihe- ja ryhmänopeus



● Vaihenopeus $v_p = f\lambda = \frac{\omega}{k}$

Yksittäisen aallon vaiheen etenemisnopeus

● Ryhmänopeus $v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k}$

Moduloivan aallon (aaltopakettin) etenemisnopeus

Voidaan ilmoittaa derivaattana, kuten tässä, jos tarkasteltujen aaltojen taajuuDET ovat likimain samat.

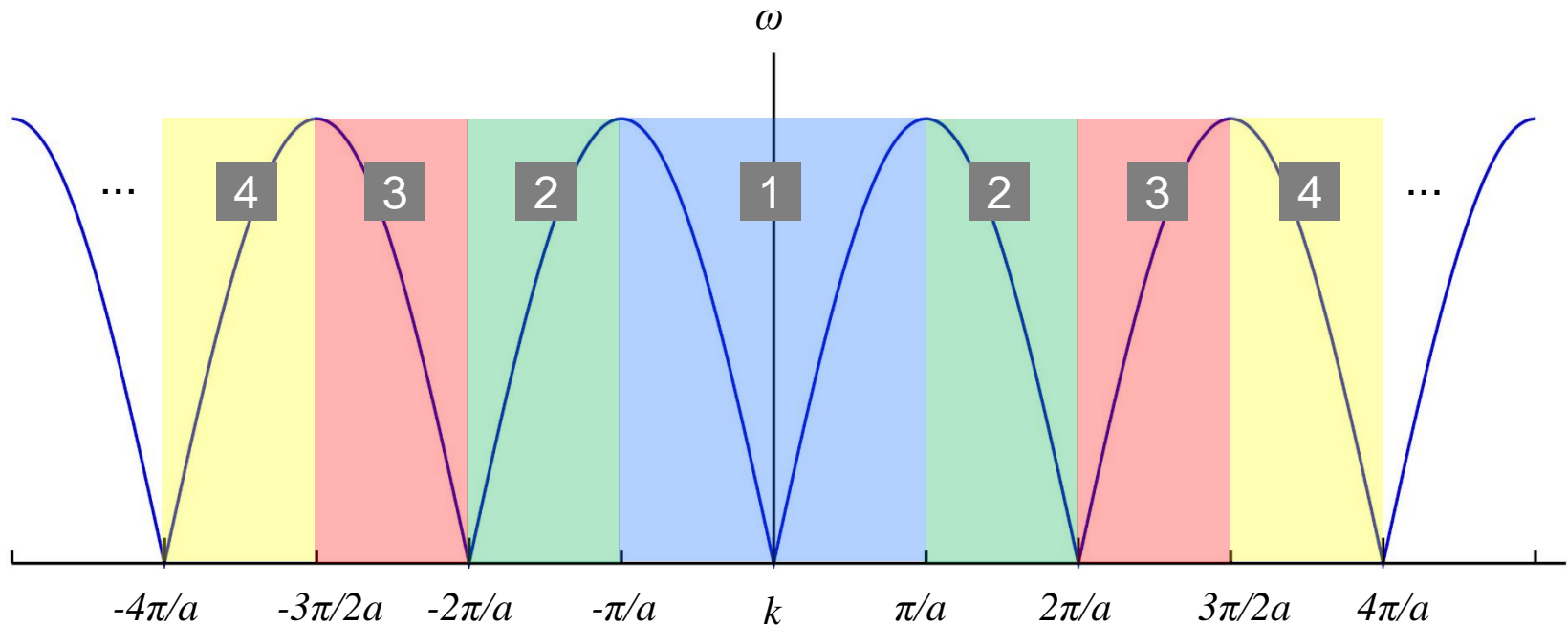
Esimerkkejä

[YouTube: animaatio, jossa \$v_g > v_p\$](#)

[YouTube: animaatio, jossa \$v_g < 0\$](#)

Kts: http://en.wikipedia.org/wiki/Group_velocity

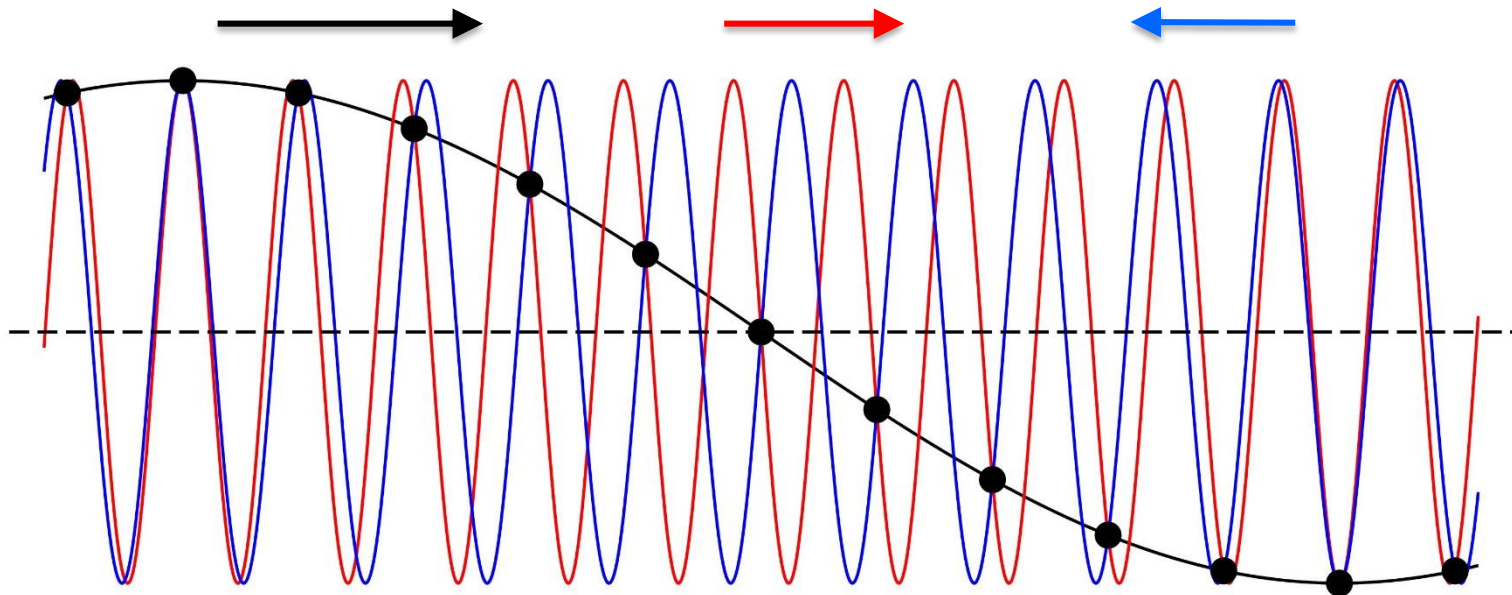
Brillouinin vyöhykkeet



Värähtelyn täydellinen kuvaus löytyy kunkin Brillouinin vyöhykkeen sisältä. Mukavuussyistä (useimmiten) käytämme vain 1. Brillouinin vyöhykettä.

Samalla aallonpituudet ovat "fysikaalisempia".

1. Brillouinin vyöhyke

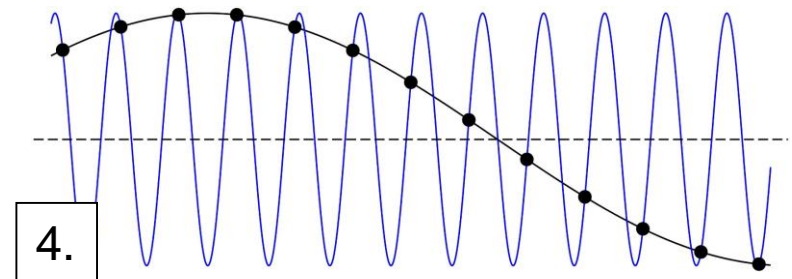
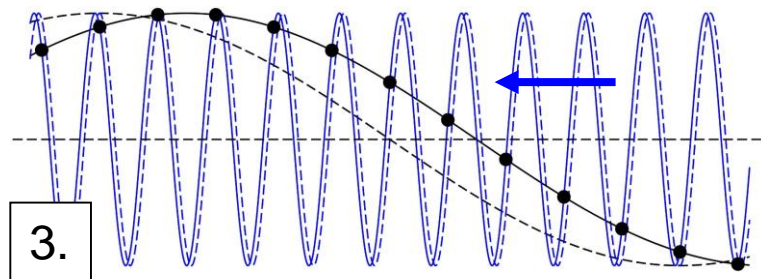
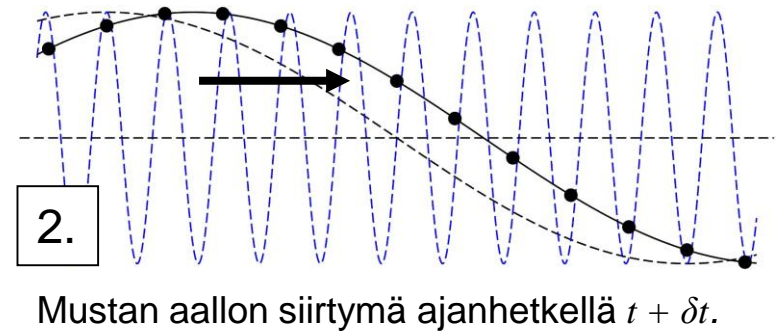
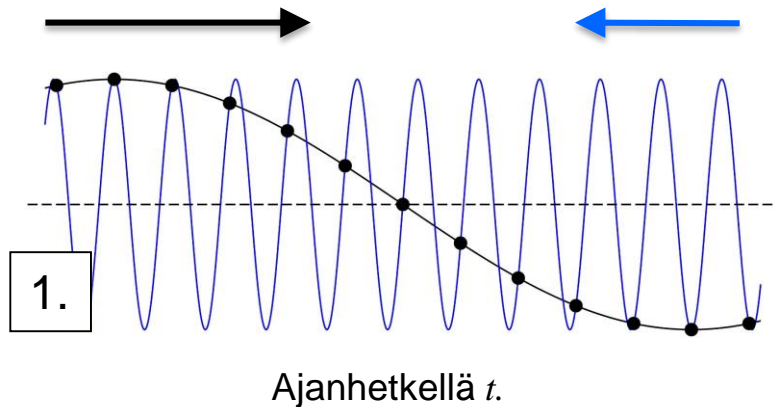


Vierekkäisten ionien
välinen vaihe-ero e^{-ika}

Sininen käyrä: $k - 2\pi/a$

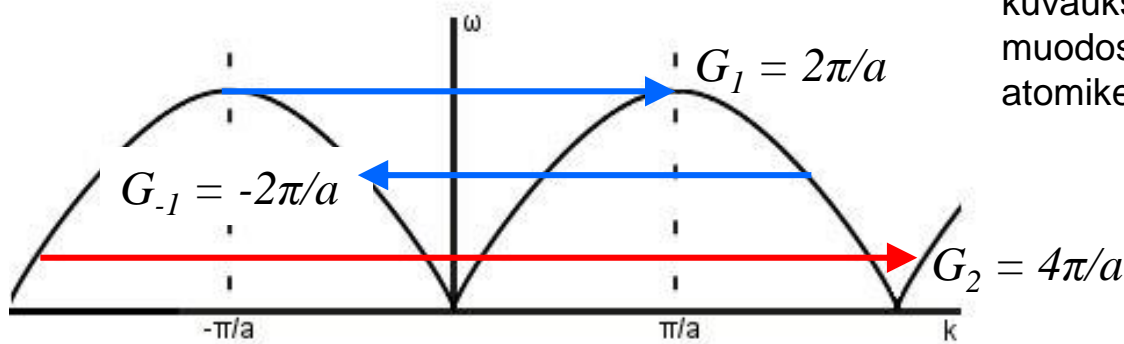
Punainen käyrä: $k + 2\pi/a$

1. Brillouinin vyöhyke



Otetaan sitten huomioon myös sinisen aallon siirtymä ajanhetkellä $t + \delta t$ (huomioi aaltojen eri vaihenopeudet dispersiorelaation mukaisesti, $v_p = \omega/k$).

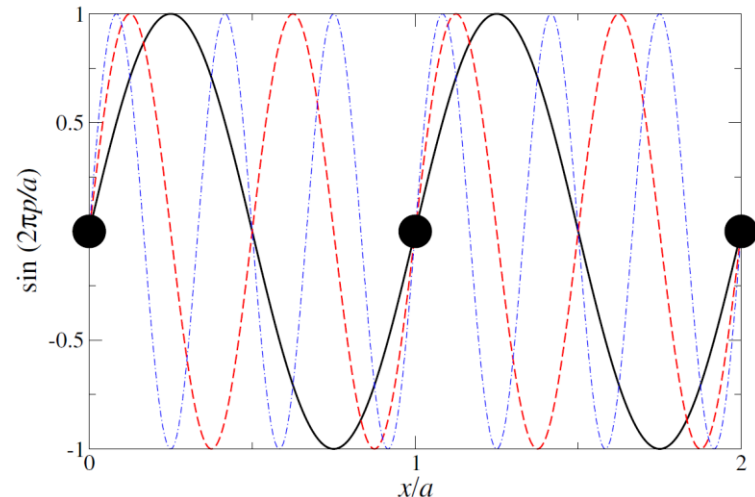
Käänteishila



Siirtymä $G_m = 2\pi m/a$ tuottaa saman kuvauksen värähtelystä. Pisteet G_m muodostavat k -avaruudessa atomiketjumme **käänteishilan**.

Mikäli nyt 1D-ketjussa etenee aalto, joka vastaa jotain käänteishilan pistettä, aallon vaihe jokaisen atomin kohdalla on sama.

Atomien väli on käänteishilan pistettä vastaavan aallonpituuden moninkerta!



Käänteishilan käsitteeseen palataan tarkemmin kurssin viikolla 5 (Simon, luku 13).

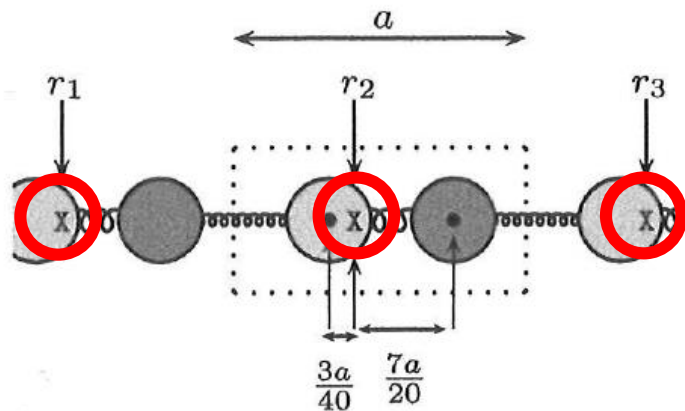
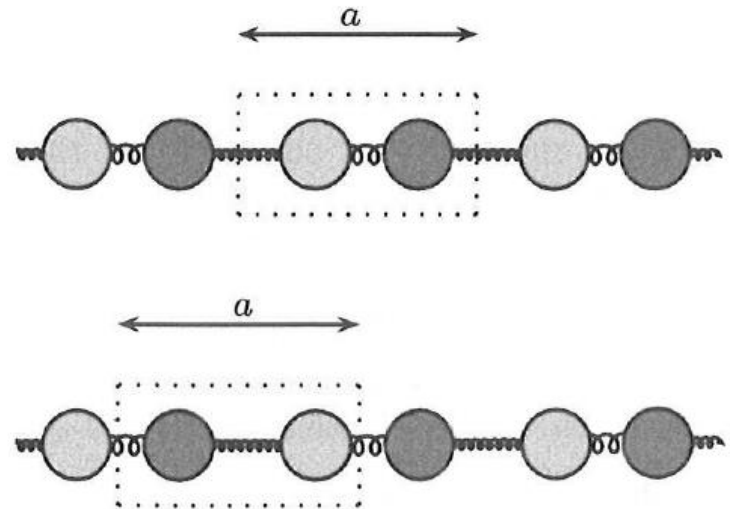
Fononit ja kide liikemäärä



Diatominen ketju

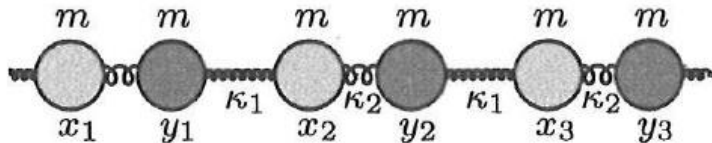
Diatominen ketju

Rakennetta voidaan kuvata *yksikkökopilla*, toistuvalla rakenteella, joka täyttää koko ketjun (yksikkökopin valinta ei yksikäsitteinen!)



Valitsemalla referenssipiste, *hilapiste*, yksikkökopissa ja spesifioimalla eri atomien paikat hilapisteen suhteen (*kanta*), saadaan ketjun rakenteen täydellinen kuvaus.

Tarkasteltu diatominen ketju



Liikkeyhtälöt atomeille

$$m\ddot{\delta x}_n = \kappa_2 (\delta y_n - \delta x_n) + \kappa_1 (\delta y_{n-1} - \delta x_n)$$

$$m\ddot{\delta y}_n = \kappa_1 (\delta x_{n+1} - \delta y_n) + \kappa_2 (\delta x_n - \delta y_n)$$

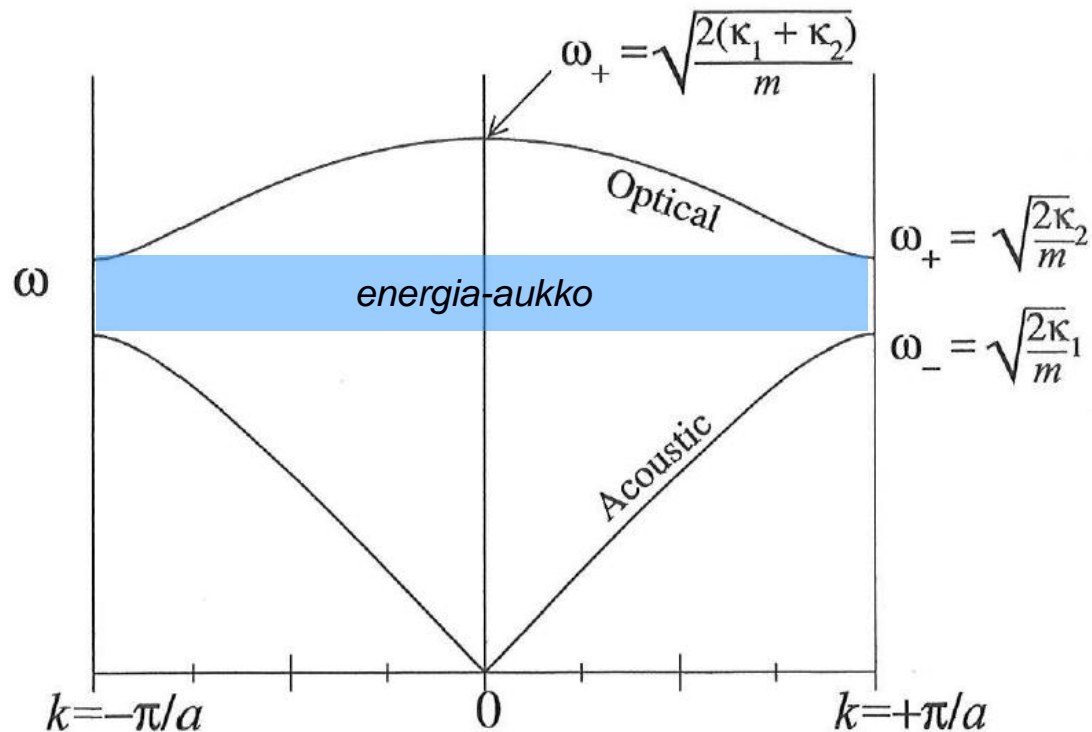
Yritteellä $\delta x_n = A_x e^{i(\omega t - kna)}$

$$\delta y_n = A_y e^{i(\omega t - kna)}$$

Saadaan dispersiorelaatio

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{m} \left[(\kappa_1 + \kappa_2) \pm \sqrt{(\kappa_1 + \kappa_2)^2 - 4\kappa_1\kappa_2 \sin^2(ka/2)} \right]$$

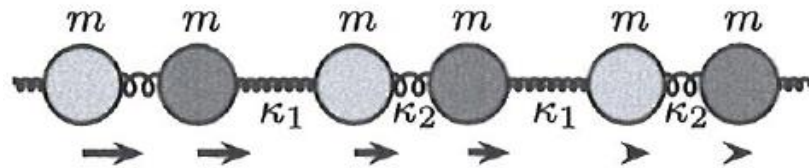
Diatomisen ketjun dispersiorelaatio



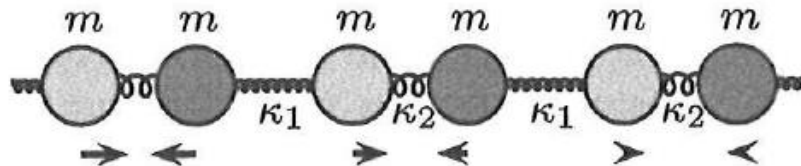
Kahden atomin kannassa dispersiorelaatiossa on kaksi haaraa (akustinen ja optinen), joiden välissä on kiellettyjen taajuuksien aukko (~ energia-aukko).

Atomien värähtely, kun $k \rightarrow 0$

Akustinen haara



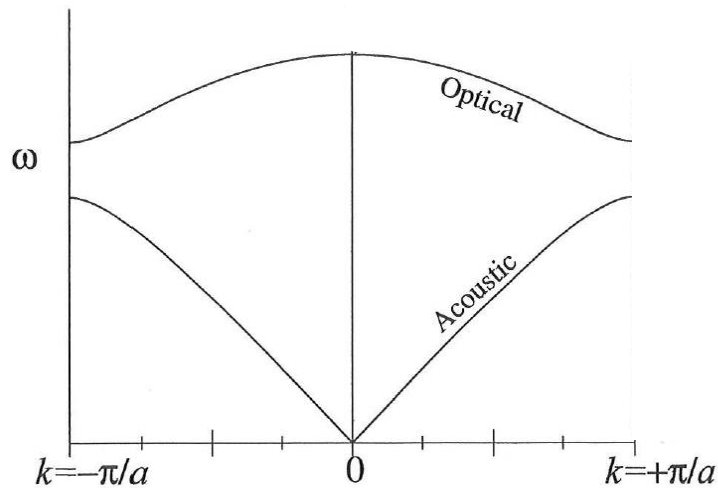
Optinen haara



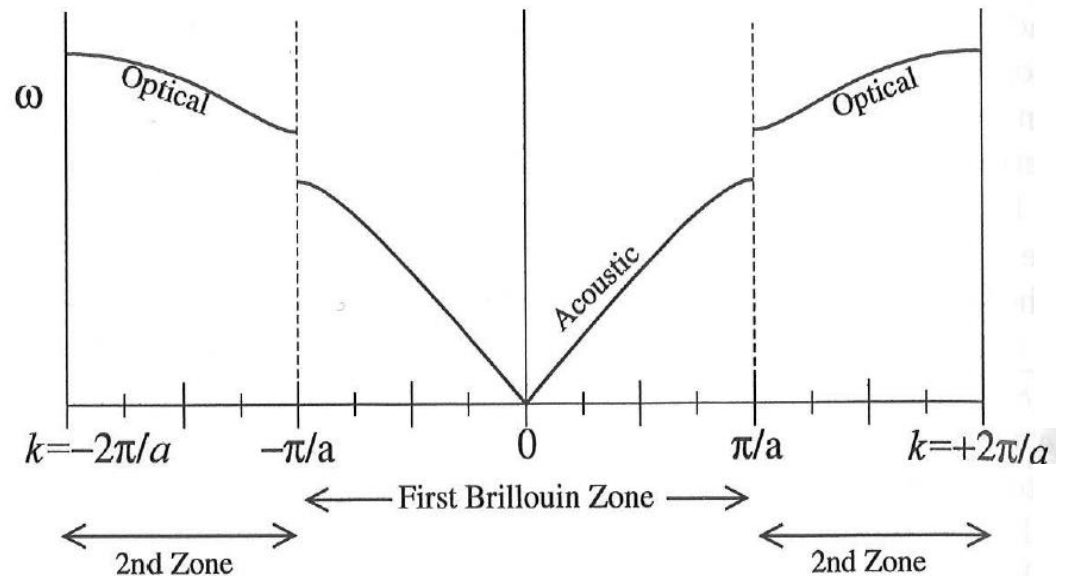
Aaltoluvulla $k = 0$ on akustisessa haarassa yksikkökopin sisällä atomeilla sama vaihe. Sen sijaan optisessa haarassa atomit värähtelevät vastakkaisessa vaiheessa yksikkökopin sisällä.

Kummassakin tapauksessa vierekkäisten yksikkökoppien välillä on hienoinen vaihe-ero.

Taitettu ja laajennettu esitys

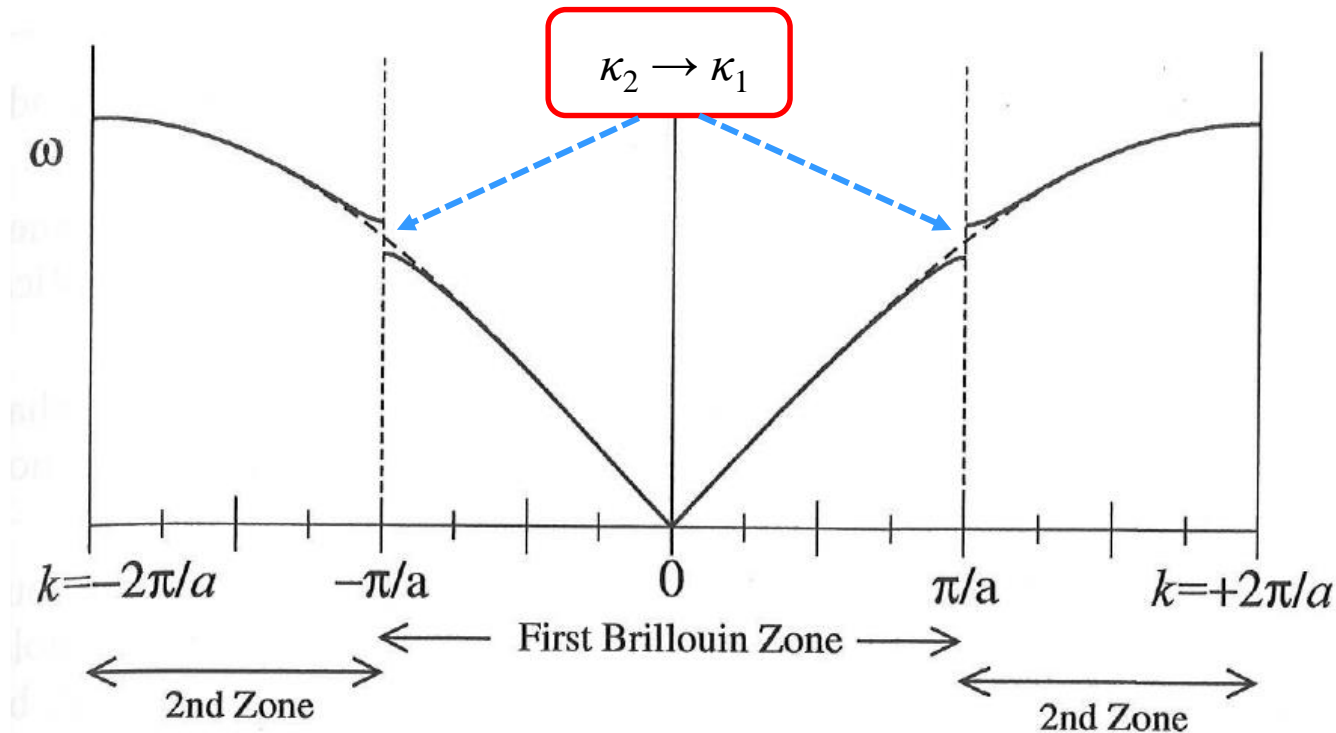


Vain 1. Brillouinin vyöhyke



Esitykset ovat ekvivalentteja, ja niistä voi valita mieleisensä tarpeen mukaan. Myös periodinen esitys (taitettu esitys, mutta jatkettu kaikkien Brillouinin vyöhykkeiden yli) on mahdollinen.

Diatominen \rightarrow monatominen ketju



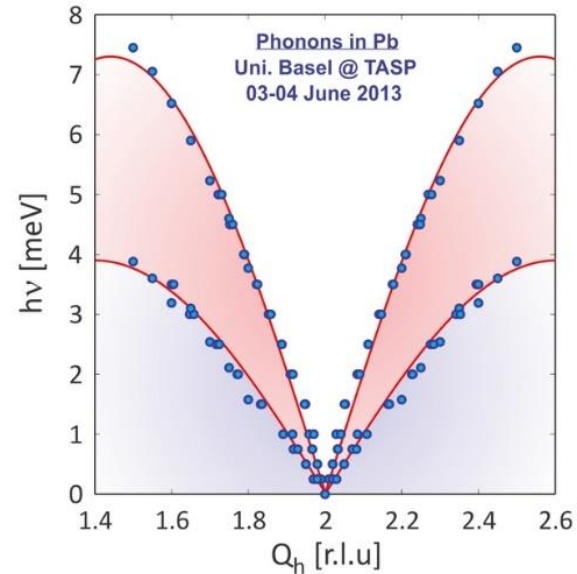
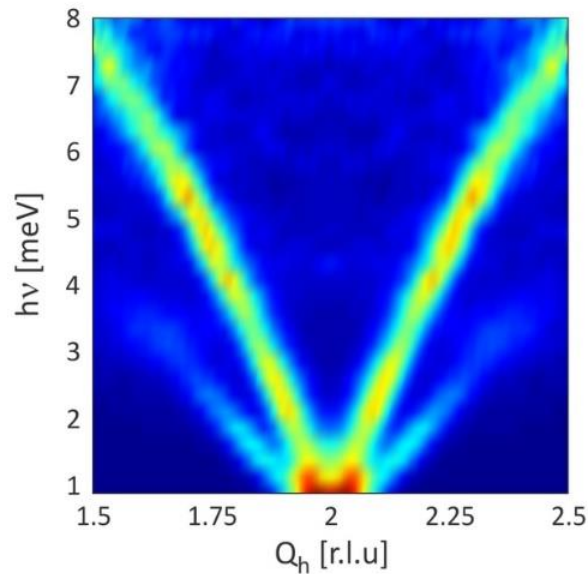
Kun kytkentävakiot lähenevät toisiaan, kaksiatominen kanta periodisuudella a muuttuu yksiatomiseksi kannaksi periodisuudella $a/2 \rightarrow 1$. Brillouinin vyöhykkeen raja siirtyy arvoihin $k = \pm 2\pi/a$.



Aalto University
School of Science

Mitattuja hilavärähtelyjen dispersiorelaatioita

Dispersiorelaatioiden mittaaminen



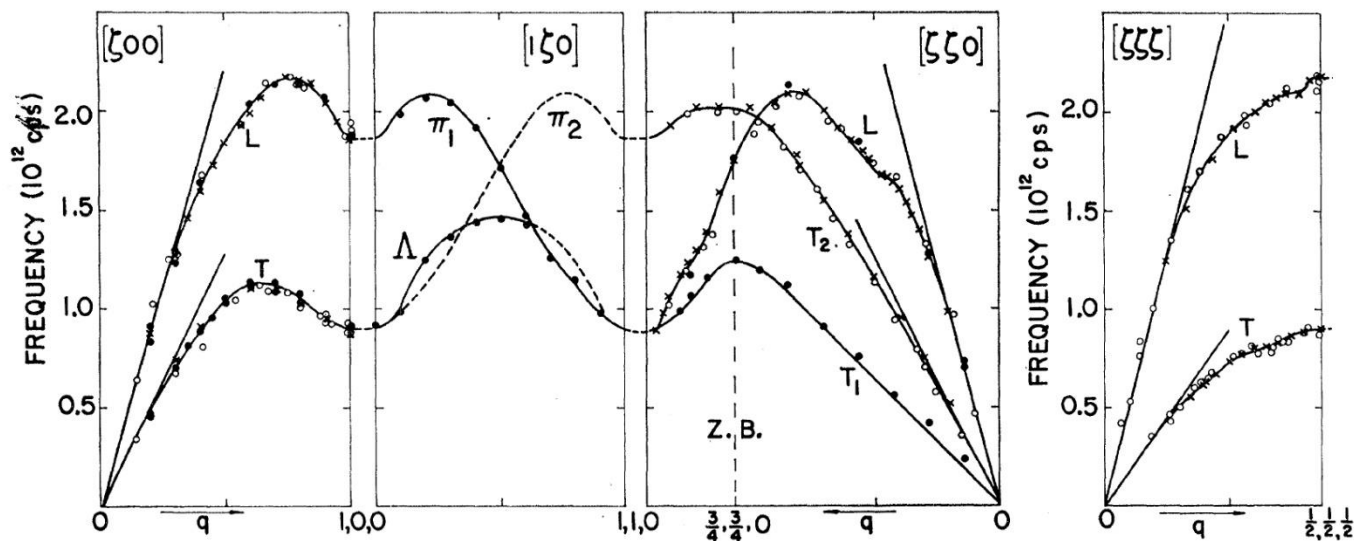
Valon sironta

Erityisesti röntgensäteet ja näkyvä valo, vuorovaikutus ensisijaisesti elektronien kanssa.

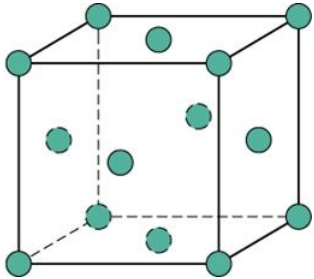
Neutronisironta

Vuorovaikutus ensisijaisesti ytimien kanssa, erittäin hyvä energian erotuskyky.

Mitattuja dispersiorelaatioita (Pb)



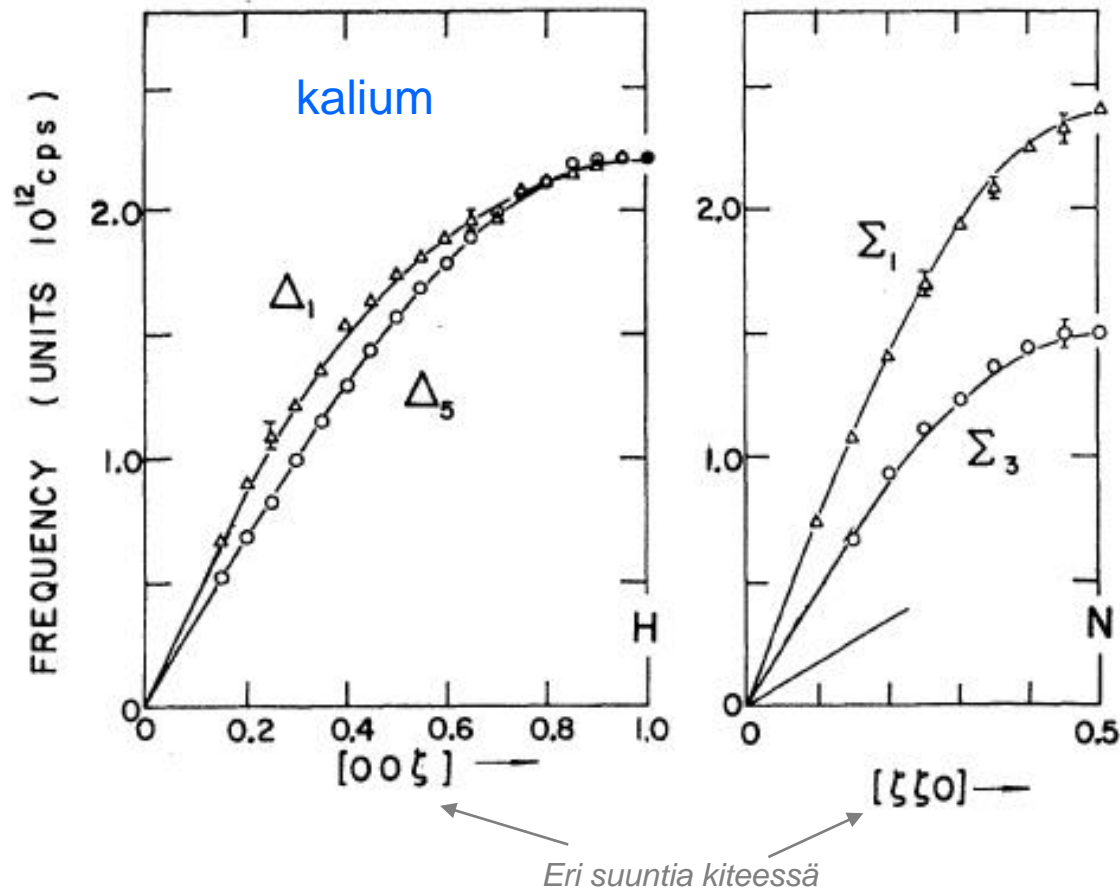
$$q = ka/2\pi$$



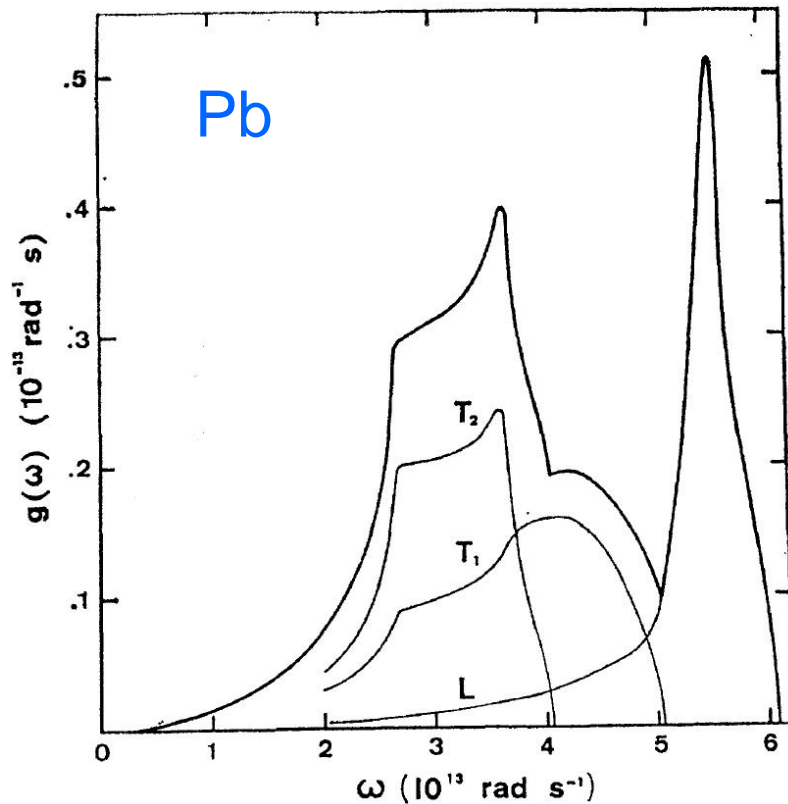
Tässä eri kidesuunnille kokeellisesti määritettyinä. Ainoastaan akustisia haaroja, mutta huomaa kuinka pitkittäisten (L) ja poikittaisten (T) polarisaatioiden dispersiorelaatiot eroavat toisistaan.

Tämän kurssin puitteissa 3D-dispersiorelaatioiden tulkinta ei ole keskeisessä asemassa. Tässä ja seuraavassa diassa kuitenkin näynteitä siitä, miltä aidot fononien dispersiorelaatiot näyttäisivät.

Mitattuja dispersiorelaatioita (K)



Tilatiheys $g(\omega)$

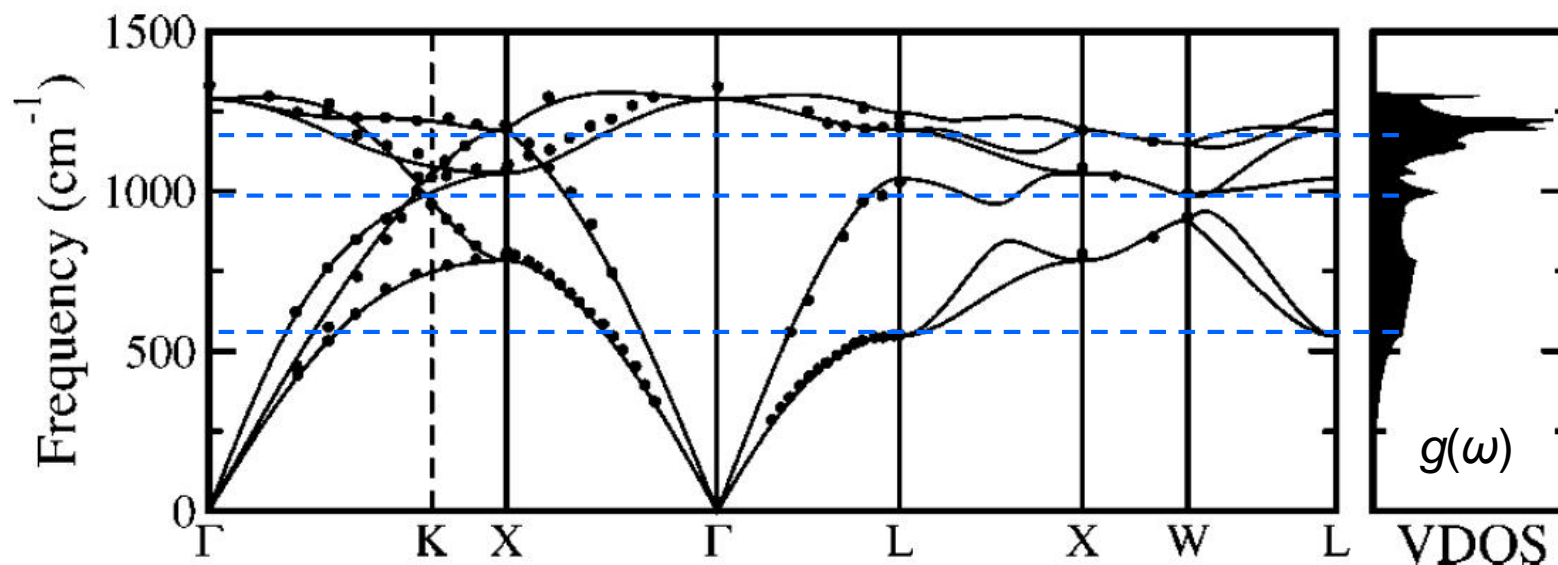


Ylin käyrä on kokonaistilatiheys, alemmat ovat tämän eri polarisaatioita vastaavat komponentit: pitkittäinen (L) ja poikittaiset (T₁ ja T₂).

Huomioi käyrien paraabelimainen muoto pienillä taajuuksilla. (Vertaa Debyen mallin akustiseen approksimaatioon!)

Stedman et al., Phys. Rev. 162 (1967) 549

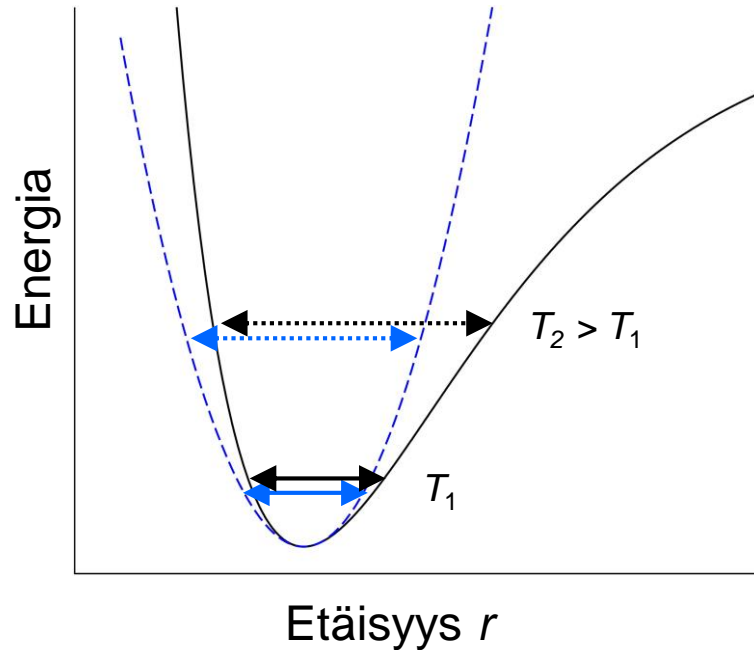
Esimerkki: timantin fononinen tilatiheys



Huomaa tilatiheyden huiputtuminen kohdissa, joissa dispersiorelaatioissa on runsaasti pienen kulmakertoimen kontribuutioita eri haaroista. Huomaa myös timantin tapauksessa 3 optista haaraa 3 akustisen haaran lisäksi (3 eri polarisaatiota). Yksinkertaisen atomiketjun tarkastelun mukaisesti tämä viittaa siihen, että timantin alkeiskopissa olisi kaksi atomia (kuten onkin).

Mounet & Marzari, Phys. Rev. B 71 (2005) 205214.

Anharmonisuus



Esimerkkejä

- Lämpölaajeneminen
- Ominaislämpökapasiteetti korkeilla lämpötiloilla
- Fononi-fononi –vuorovaikutukset
- Lämmönjohtuminen (fononien välisistä vuorovaikutuksista johtuva *terminen resistiivisyys*)
- Dispersiorelaation riippuvuus lämpötilasta

Harmoninen approksimaatio on hyvä ensimmäinen approksimaatio hilavärähtelyjen ja niistä seuraavien materiaalin ominaisuuksien tarkasteluun.

Tässä kuitenkin muutamia esimerkkejä todellisten vuorovaikutusten anharmonisen luonteen seurauksista.