ادامه فصل چهارم

۱– دو اتم در پایه بسیط

۲– کوانتش امواج کشسان

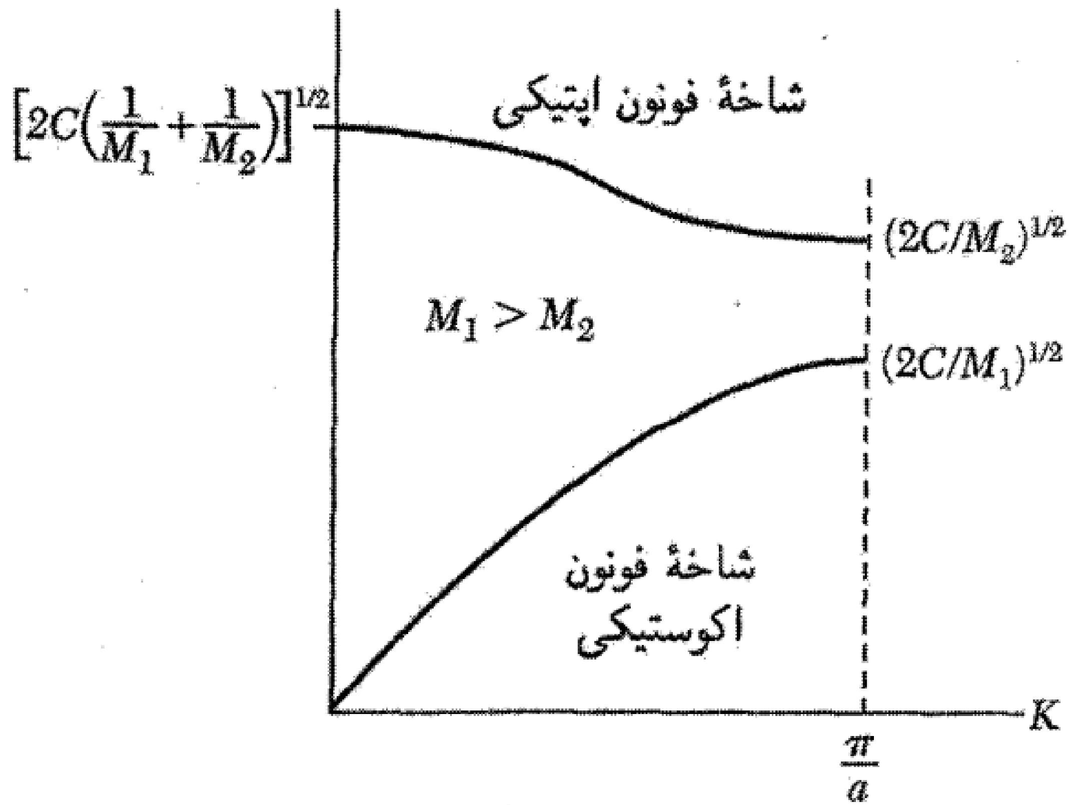
۳– تکانه فونون

۴– پراکندگی ناکشسان توسط فونونها

دو اتم در پایه بسیط

در بلورهایی که بیش از یک اتم در یاختهٔ بسیط دارند، رابطهٔ پاشیدگی فونونی ویژگیهای جدیدی را نشان می‌دهد. مورد دو اتم در یاختهٔ بسیط، مانند NaCl یا ساختار الماس، را در نظر می‌گیریم. در یک جهت انتشار معین، رابطهٔ پاشیدگی ω برحسب K برای هر یک از مدهای قطبشی دو شاخه با نامهای اکوستیکی و اپتیکی دارد (شکل ۷). مدهای اکوستیکی طولی LA و اکوستیکی عرضی TA، و مدهای اپتیکی طولی LO و اپتیکی عرضی TO را خواهیم داشت.

اگر p اتم در یاختهٔ بسیط وجود داشته باشد، رابطهٔ پاشیدگی دارای $3p$ شاخه خواهد بود که ۳ تای آنها اکوستیکی و $3p-3$تای دیگر اپتیکی‌اند.



شکل ۷. شاخه‌های اپتیکی و اکوستیکی رابطهٔ پاشیدگی در شبکهٔ خطی دواتمی. بسامدهای حدی در $K = 0$ و $K = K_{\max} = \pi/a$ نشان داده شده‌اند. ثابت شبکه برابر a است.

معادلات حرکت در بلور با پایه دو اتمی

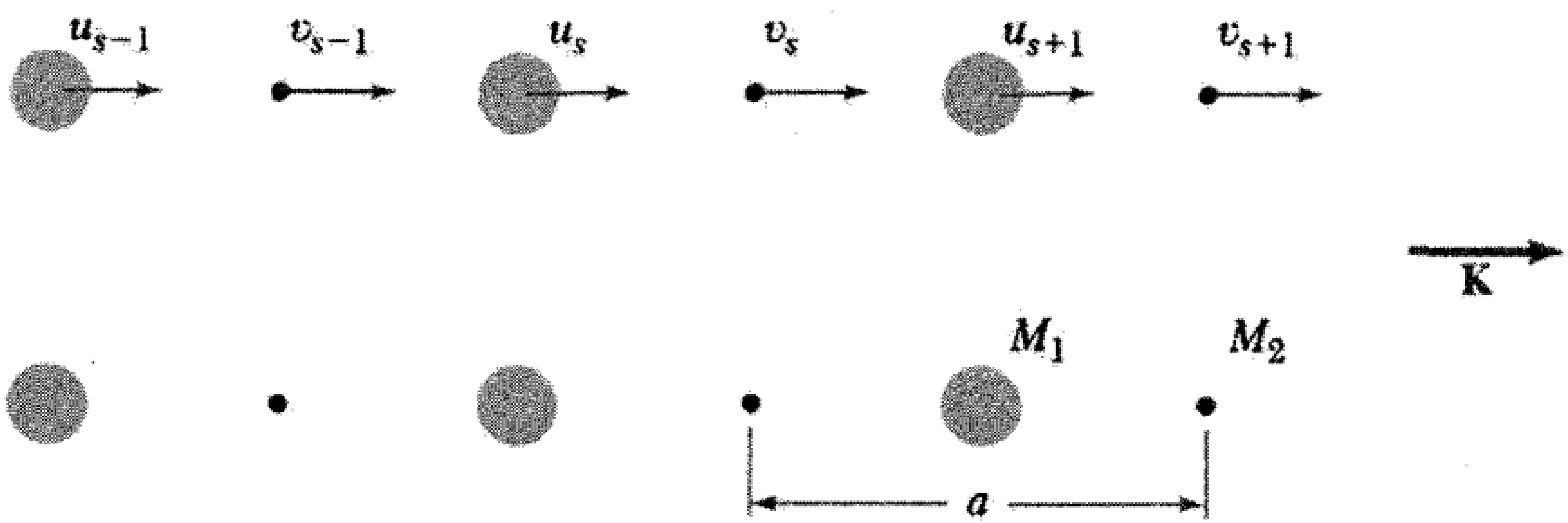
معادلات حرکت را با این فرض می‌نویسیم که هر صفحه فقط با صفحات همسایهٔ اول خود برهم‌کنش دارد و اینکه ثابتهای نیرو بین تمام زوج صفحات همسایهٔ اول یکسان‌اند. با مراجعه به شکل ۹ به‌دست می‌آوریم،

$$
\begin{aligned}
M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} &= C(v_s + v_{s-1} - 2u_s); \\
M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} &= C(u_{s+1} + u_s - 2v_s)
\end{aligned}
\qquad (۱۸)
$$

به‌دنبال پاسخی به شکل موج متحرک می‌گردیم که اکنون دامنه‌اش روی صفحات متوالی، به‌ترتیب، برابر مقادیر متفاوت u و v باشد:

$$u_s = u \exp(isKa)\exp(-i\omega t); \qquad v_2 = v \exp(isKa)\exp(-i\omega t). \qquad (۱۹)$$

در شکل ۹، a را فاصلهٔ نزدیکترین صفحات مشابه، نه نزدیکترین صفحات، تعریف می‌کنیم.



شکل ۹. ساختار بلور دواتمی با جرمهای M_1 و M_2 که با ثابت نیروی C بین صفحات مجاور به هم مربوط می‌شوند. جابه‌جایی اتمهای M_1 را با u_{s-1}، u_s، u_{s+1}، . . . و جابه‌جایی اتمهای M_2 را با v_{s-1}، v_2، v_{s+1}، . . . نشان می‌دهیم. فاصلهٔ تکرار شبکه در جهت بردار موج K برابر a است. اتمها در مکانهای جابه‌جانشدهٔ خود نشان داده شده‌اند.

با جایگذاری معادلات (۱۹) در رابطهٔ (۱۸) داریم

$$\begin{aligned} -\omega^2 M_1 u &= Cv[1+\exp(-iKa)] - 2Cu; \\ -\omega^2 M_2 v &= Cu[\exp(iKa)+1] - 2Cv \end{aligned} \tag{۲۰}$$

این معادلات خطی همگن فقط وقتی دارای پاسخ غیرصفر خواهند بود که دترمینان ضرایب u و v صفر باشد:

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1\omega^2 & -C[1+\exp(iKa)] \\ -C[1+\exp(iKa) & 2C - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \tag{۲۱}$$

یا

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1+M_2)\omega^2 + 2C^2(1-\cos Ka) = 0 \tag{۲۲}$$

این معادله را می‌توان دقیقاً برای $\omega^{۲}$ حل کرد، ولی ساده‌تر آن است که حالات حدی $Ka \ll ۱$ و $Ka = \pm\pi$ را در مرز منطقه بررسی کنیم. برای مقادیر کوچک Ka داریم $\cos Ka \cong ۱ - \frac{۱}{۲}K^{۲}a^{۲} + \cdots$ و دو ریشه به‌صورت زیر خواهند بود.

$$\omega^{۲} \cong ۲C\left(\frac{۱}{M_{۱}} + \frac{۱}{M_{۲}}\right) \qquad \text{(شاخهٔ اپتیکی)} \tag{۲۳}$$

$$\omega^{۲} \cong \frac{\frac{۱}{۲}C}{M_{۱} + M_{۲}}K^{۲}a^{۲} \qquad \text{(شاخهٔ اکوستیکی)} \tag{۲۴}$$

گسترهٔ منطقهٔ اول بریلوئن چنین است $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$، که در آن a فاصلهٔ تکرار شبکه است. در $K_{\max} = \pm\pi/a$ ریشه‌ها عبارت‌اند از

$$\omega^{۲} = \frac{۲C}{M_{۱}}; \qquad \omega^{۲} = \frac{۲C}{M_{۲}} \tag{۲۵}$$

تشریح نتایج فوق

$$\Rightarrow M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1+M_2)\omega^2 + 2C^2 \underbrace{(1-\cos Ka)}_{2\sin^2\frac{Ka}{2}} = 0$$

رابطه بالا یک معادله درجه ۲ برحسب ω^2 است که پاسخ آن بصورت زیر است

$$\omega^2 = C\underbrace{\left(\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}\right)}_{A} \pm \left[C^2\left(\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}\right)^2 - \underbrace{\frac{4C^2}{M_1M_2}}_{B}\sin^2\frac{Ka}{2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_{\pm}^2 = A \pm \left(A^2 - B\sin^2\frac{Ka}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

حالت حدی اول

$$Ka \ll 1$$

$$\Rightarrow \sin\frac{Ka}{2} \approx \frac{Ka}{2} \longrightarrow \omega_{\pm}^{2} = A \pm \left(A^{2} - B\,\frac{K^{2}a^{2}}{4}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$Ka \ll 1 \longrightarrow \left(A^{2} - B\,\frac{K^{2}a^{2}}{4}\right)^{\frac{1}{2}} = A\left(1 - \frac{BK^{2}a^{2}}{4A^{2}}\right)^{\frac{1}{2}} \simeq A\left(1 - \frac{1}{8}\,\frac{BK^{2}a^{2}}{A^{2}}\right)$$

$$\Rightarrow \omega_{+}^{2} \simeq A + A - \frac{1}{8}\,\frac{BK^{2}a^{2}}{A} \approx 2A = 2C\left(\frac{1}{M_{1}} + \frac{1}{M_{2}}\right)$$

چون $Ka \ll 1$

$$\omega_{-}^{2} \simeq A - A + \frac{1}{8}\,\frac{BK^{2}a^{2}}{A} = \frac{\frac{1}{2}C}{M_{1}+M_{2}}\,K^{2}a^{2}$$

لذا به ازای $Ka \ll 1$:

$$\omega_{+} = \sqrt{2C\left(\frac{1}{M_{1}} + \frac{1}{M_{2}}\right)}\,, \qquad \omega_{-} \to 0$$

حالت حدی دوم

$$\text{if} \quad K = K_{max} = \pm \frac{\pi}{a} \rightarrow \sin^2 \frac{Ka}{2} = \sin^2\left(\pm \frac{\pi}{2}\right) = 1$$

$$\Rightarrow \omega_{\pm}^2 = A \pm \left(A^2 - B\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= C\left(\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}\right) \pm \left[C^2\left(\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}\right)^2 - \frac{4C^2}{M_1M_2}\right]$$

$$= \frac{(M_1+M_2) \pm \left[(M_1+M_2)^2 - 4M_1M_2\right]}{M_1M_2/C}$$

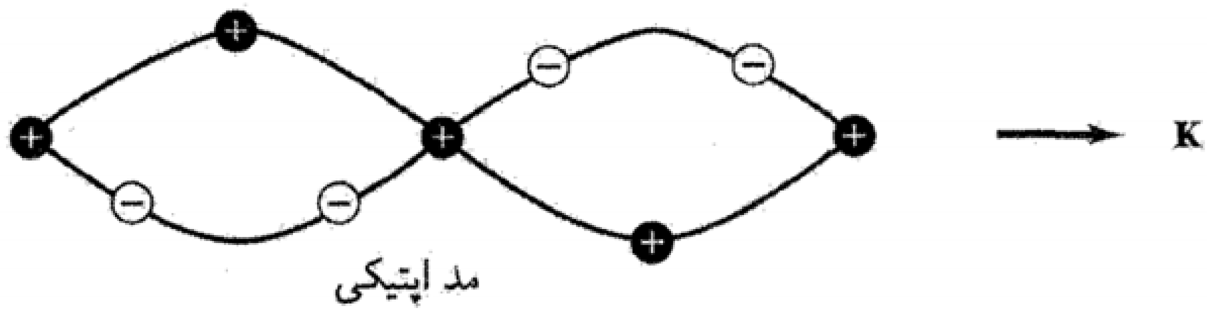
$$= \frac{M_1+M_2 \pm (M_1-M_2)}{M_1M_2/C}$$

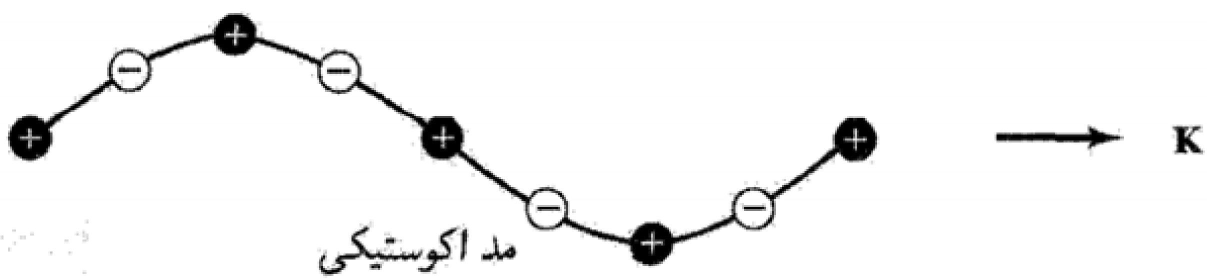
$$\Rightarrow \omega_+^2 = \frac{(M_1+M_2)+(M_1-M_2)}{M_1M_2/C} = \frac{2C}{M_2} \rightarrow \omega_+ = \sqrt{\frac{2C}{M_2}}$$

$$\omega_-^2 = \frac{(M_1+M_2)-(M_1-M_2)}{M_1M_2/C} = \frac{2C}{M_1} \rightarrow \omega_- = \sqrt{\frac{2C}{M_1}}$$

بستگی ω به K برای $M_۱ > M_۲$ در شکل ۷ نشان داده شده است.

جابه‌جاییهای ذره در شاخه‌های اکوستیکی عرضی (TA) و اپتیکی عرضی (TO) در شکل ۱۰ نشان داده شده‌اند.





شکل ۱۰. امواج اپتیکی و اکوستیکی عرضی در شبکهٔ خطی دواتمی. که با جابه‌جایی ذرات در این دو مد برای طول موجهای یکسان نمایش داده شده‌اند.

در حالت حدی $Ka \ll ۱$ و به کمک (۲۰)، برای شاخهٔ اپتیکی خواهیم داشت:

$$\frac{u}{v} = -\frac{M_۲}{M_۱} \qquad (۲۶)$$

استنتاج رابطه فوق و معنی آن:

در حالت $Ka \ll 1$ در معادلات حرکت

(۲۰) [با فرض $Ka \to 0$ خواهیم داشت]:

$$-\omega^2 M_1 u = cv(2) - 2cu \qquad (\text{الف})$$

$$-\omega^2 M_2 v = cu(2) - 2cv \qquad (\text{ب})$$

$$(\text{ب}) \to 2cu = -\omega^2 M_2 v + 2cv$$

$$(\text{الف}) \to -\omega^2 M_1 u = 2cv + \omega^2 M_2 v - 2cv$$

$$\to -\omega^2 M_1 u = \omega^2 M_2 v \to \frac{u}{v} = -\frac{M_2}{M_1}$$

اتمها مخالف یکدیگر ارتعاش می‌کنند، ولی مرکز جرمشان ثابت است. اگر دو اتم حامل بارهای مخالف باشند، مانند شکل ۱۰، چنین حرکتی را می‌توان به کمک میدان الکتریکی موج نوری برانگیخت و به این دلیل این شاخه را شاخهٔ اپتیکی می‌نامند.

از رابطه ۲۰ با اعمال حالت حدی $Ka \ll ۱$ یک پاسخ دیگر برای نسبت دامنه‌ها در Kی

کوچک به‌صورت $u = v$ است که به‌ازای حد $K = ۰$ در رابطهٔ (۲۴) به‌دست می‌آید. اتمها (و مرکز جرمشان)، مانند ارتعاشات اکوستیکی با طول موج بلند، با یکدیگر حرکت می‌کنند و این دلیل اطلاق نام شاخهٔ اکوستیکی است.

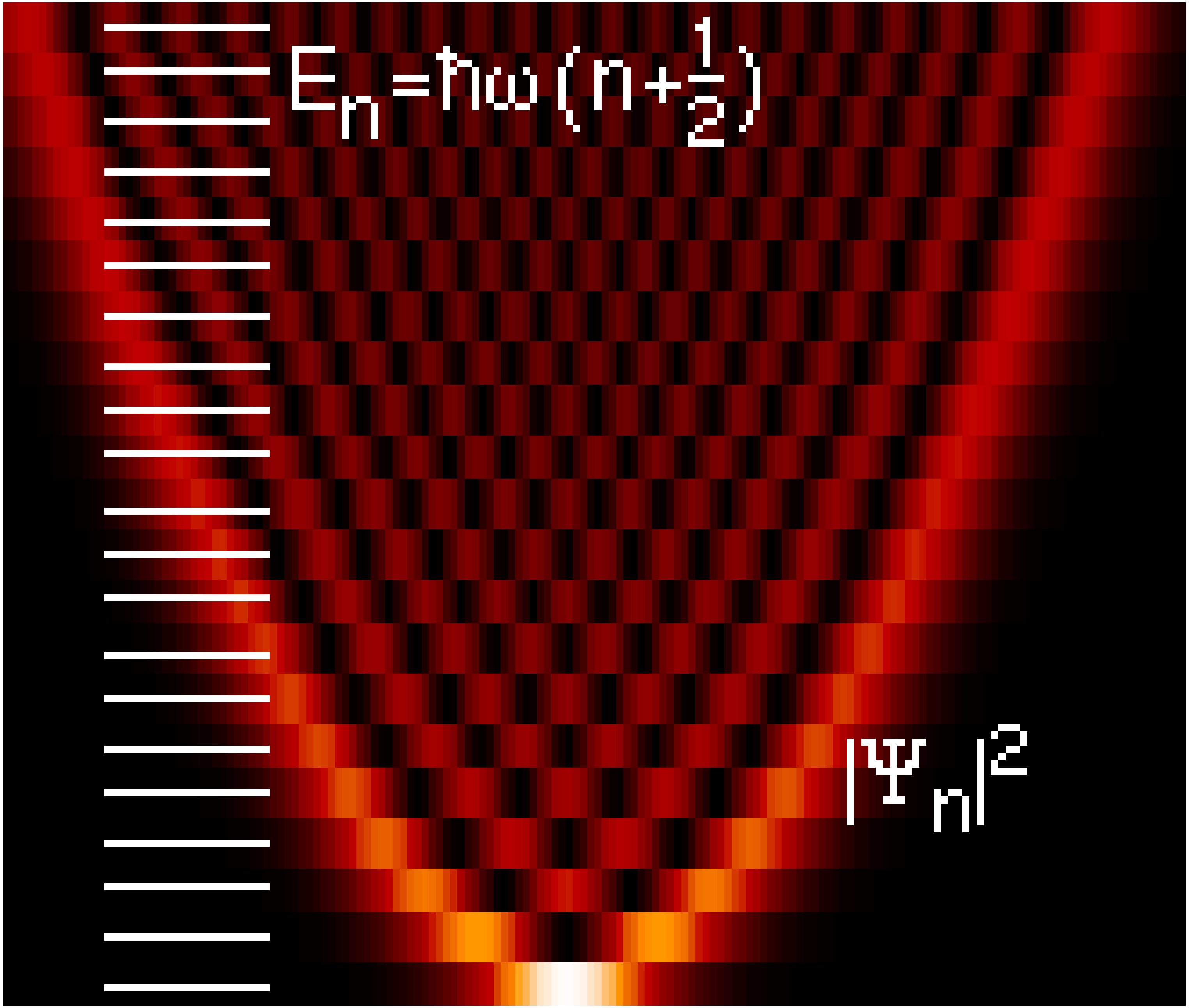
برای بعضی از بسامدها، در اینجا برای بسامدهای بین $(۲C/M_۱)^{۱/۲}$ و $(۲C/M_۲)^{۱/۲}$، پاسخهای موج‌گونه وجود ندارد. این امر خصلت مشخصهٔ امواج کشسان در شبکه‌های چنداتمی است. در مرز منطقهٔ اول بریلوئن، $K_{\max} = \pm\pi/a$، یک گاف بسامد وجود دارد.

کوانتش امواج کشسان

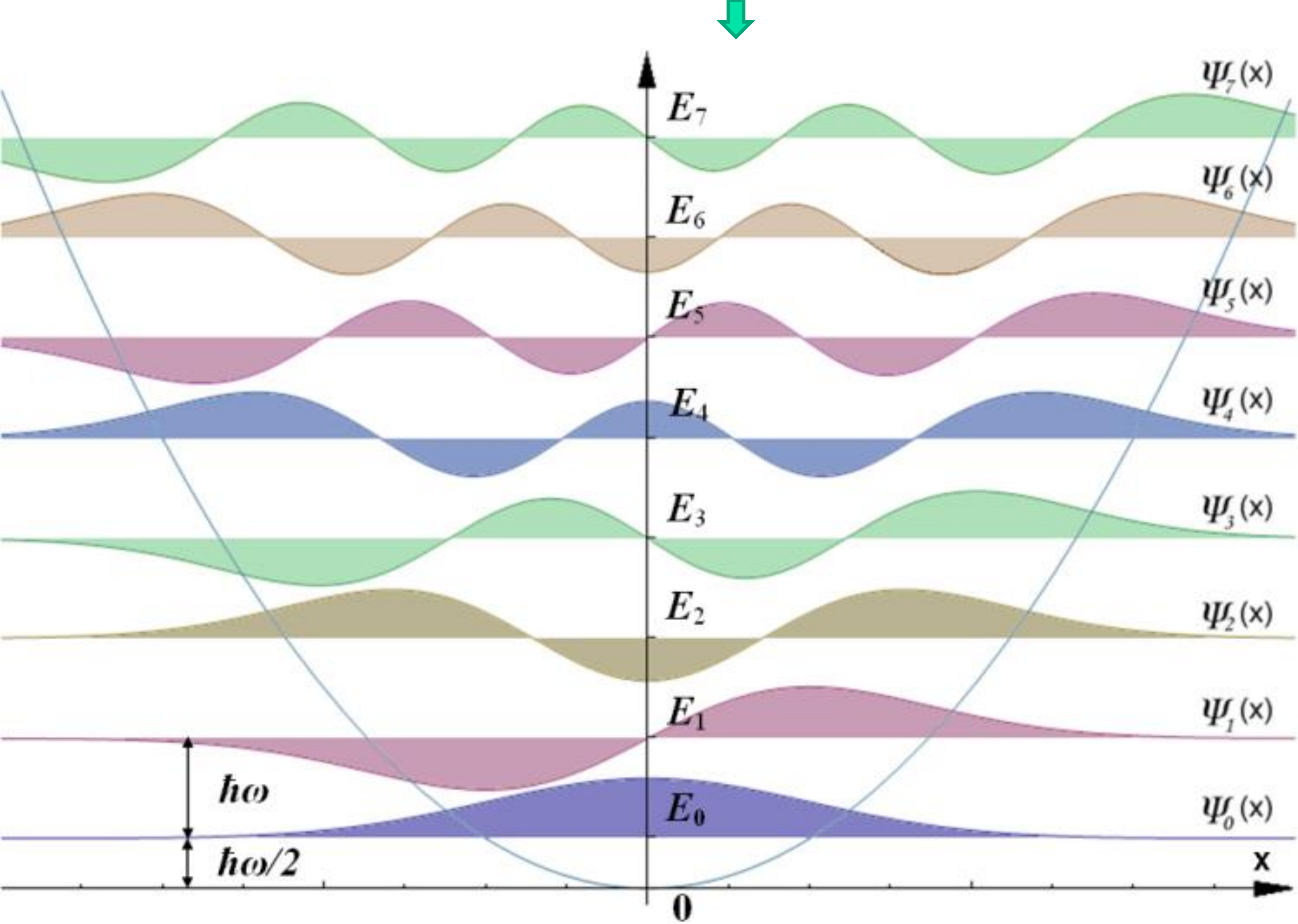
انرژی ارتعاش شبکه،کوانتومی است. کوانتوم انرژی، در تشابه با فوتوندر موج الکترومغناطیسی، **فونون** نامیده می‌شود. انرژی مد کشسان با بسامد زاویه‌ای ω، هنگامی که این مد تا عدد کوانتومی n برانگیخته شود، یعنی وقتی با n فونون اشغال شود، برابر است با

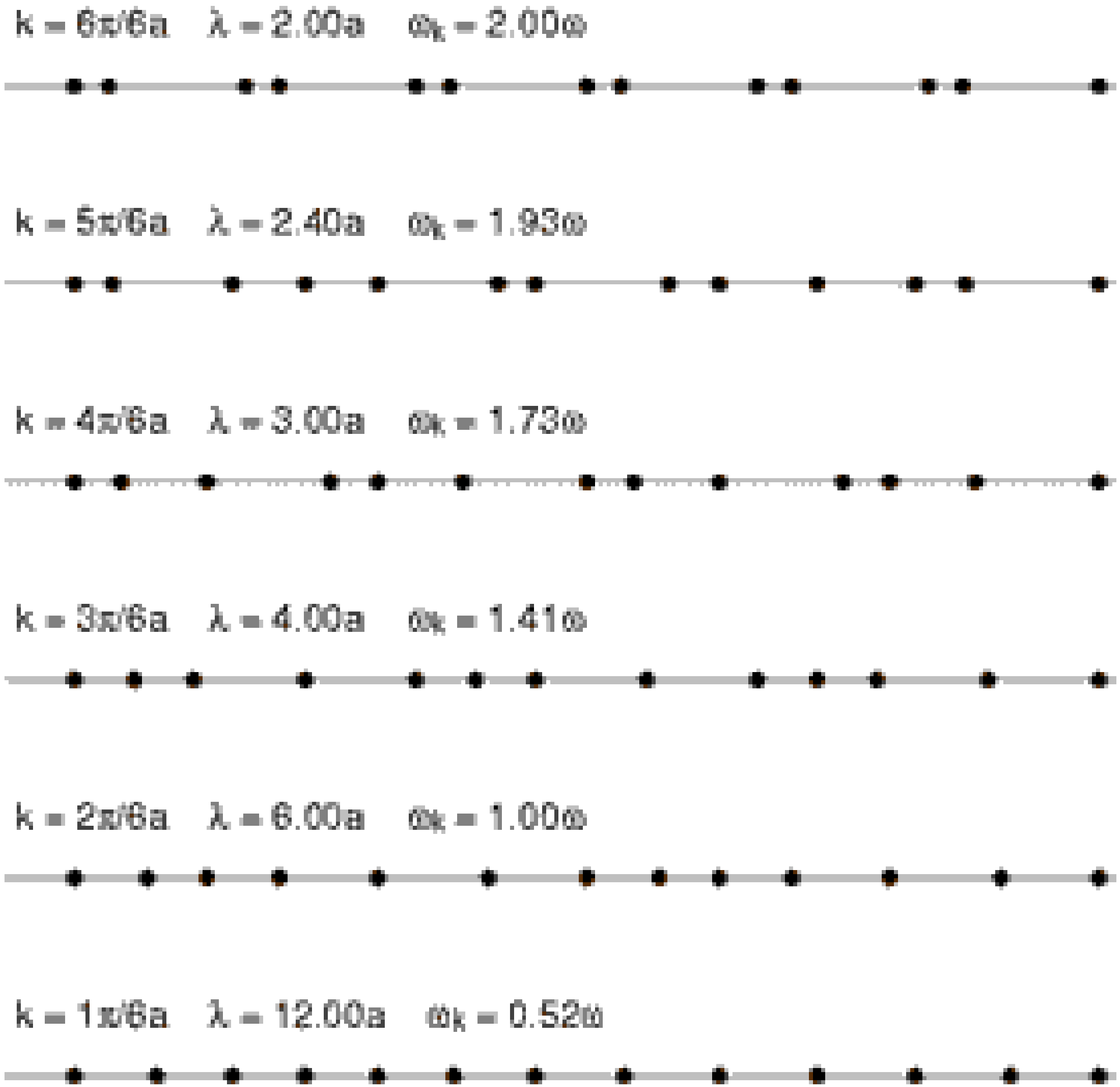
$$\epsilon = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (27)$$

جملهٔ $\frac{1}{2}\hbar\omega$ انرژی نقطهٔ صفر این مد است. این انرژی هم در مورد فونونها و هم در مورد فوتونها رخ می‌دهد، و این امر نتیجه‌ای است از معادل بودن آنها با یک نوسانگر هماهنگ کوانتومی با بسامد ω؛ برای این نوسانگر نیز ویژه‌مقدارهای انرژی برابرند با $(n + 1/2)\hbar\omega$.



$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$
$|\Psi_n|^2$


E_7
E_6
E_5
E_4
E_3
E_2
E_1
E_0
$\psi_7(x)$
$\psi_6(x)$
$\psi_5(x)$
$\psi_4(x)$
$\psi_3(x)$
$\psi_2(x)$
$\psi_1(x)$
$\psi_0(x)$
$\hbar\omega$
$\hbar\omega/2$
x
0



Animation showing the first 6 normal modes of a one-dimensional lattice: a linear chain of particles. The shortest wavelength is at top, with progressively longer wavelengths below. In the lowest lines the motion of the waves to the right can be seen.

فونون

- در فیزیک کوانتومی برای بیان نوسان اتم‌ها در شبکه بلور از مفهوم شبه‌ذره بهره می‌جویند که فونون نام دارد.

- در فیزیک ماده چگال، فونون نقش بسیار مهمی دارد و بسیاری از خاصیتهای مواد جامد از جمله رسانایی گرمایی و رسانایی الکتریکی توسط فونون‌ها صورت می پذیرد.

- فونون به عنوان شبه‌ذره یک بوزون است، یعنی از آمار بوز- اینشتین پیروی می کند.

تکانه فونون

یک فونون با بردار موج K با ذراتی مانند فوتونها، نوترونها، و الکترونها به‌گونه‌ای برهم‌کنش می‌کند که گویی دارای تکانهٔ $\hbar K$ است. اما، فونون حامل تکانهٔ فیزیکی نیست.

پراکندگی ناکشسان فوتون و جذب یا ایجاد فونون

در بلورها، برای گذارهای مجاز بین حالتهای کوانتومی، قواعد گزینش بردار موج وجود دارد. در فصل ۲ دیدیم که در پراکندگی کشسان فوتون پرتو x به‌وسیلهٔ بلور، قاعدهٔ گزینش زیر بر بردارهای موج حاکم است

$$\mathrm{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G} \qquad (۳۰)$$

که در آن $\mathbf{G}$ یک بردار در شبکهٔ وارون، $\mathbf{k}$ بردار موج فوتون فرودی و k' بردار موج فوتون پراکنده شده است. در فرایند بازتاب، بلور کاملاً با تکانهٔ $-\hbar\mathbf{G}$ پس‌زده می‌شود، ولی به این تکانهٔ مد یکنواخت به‌ندرت صریحاً توجه می‌شود.

معادلهٔ (۳۰) مثالی از این قاعده است که در شبکهٔ دوره‌ای بردار موج کل موجهایی که برهم‌کنش می‌کنند، با امکان افزودن بردار شبکهٔ وارون $\mathbf{G}$، پایسته است. تکانهٔ واقعی کل دستگاه همیشه دقیقاً پایسته است. اگر پراکندگی فوتون ناکشسان باشد و فونونی با بردار موج $\mathbf{K}$ ایجاد شود، قاعدهٔ گزینش بردار موج به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\mathrm{k}' + \mathbf{K} = \mathrm{k} + \mathbf{G} \qquad (۳۱)$$

اگر در این فرایند فونون $\mathbf{K}$ جذب شود، رابطهٔ زیر را خواهیم داشت

$$\mathrm{k}' - \mathbf{K} = \mathrm{k} + \mathbf{G} \qquad (۳۲)$$

روابط (۳۱) و (۳۲) تعمیم طبیعی رابطهٔ (۳۰)اند.