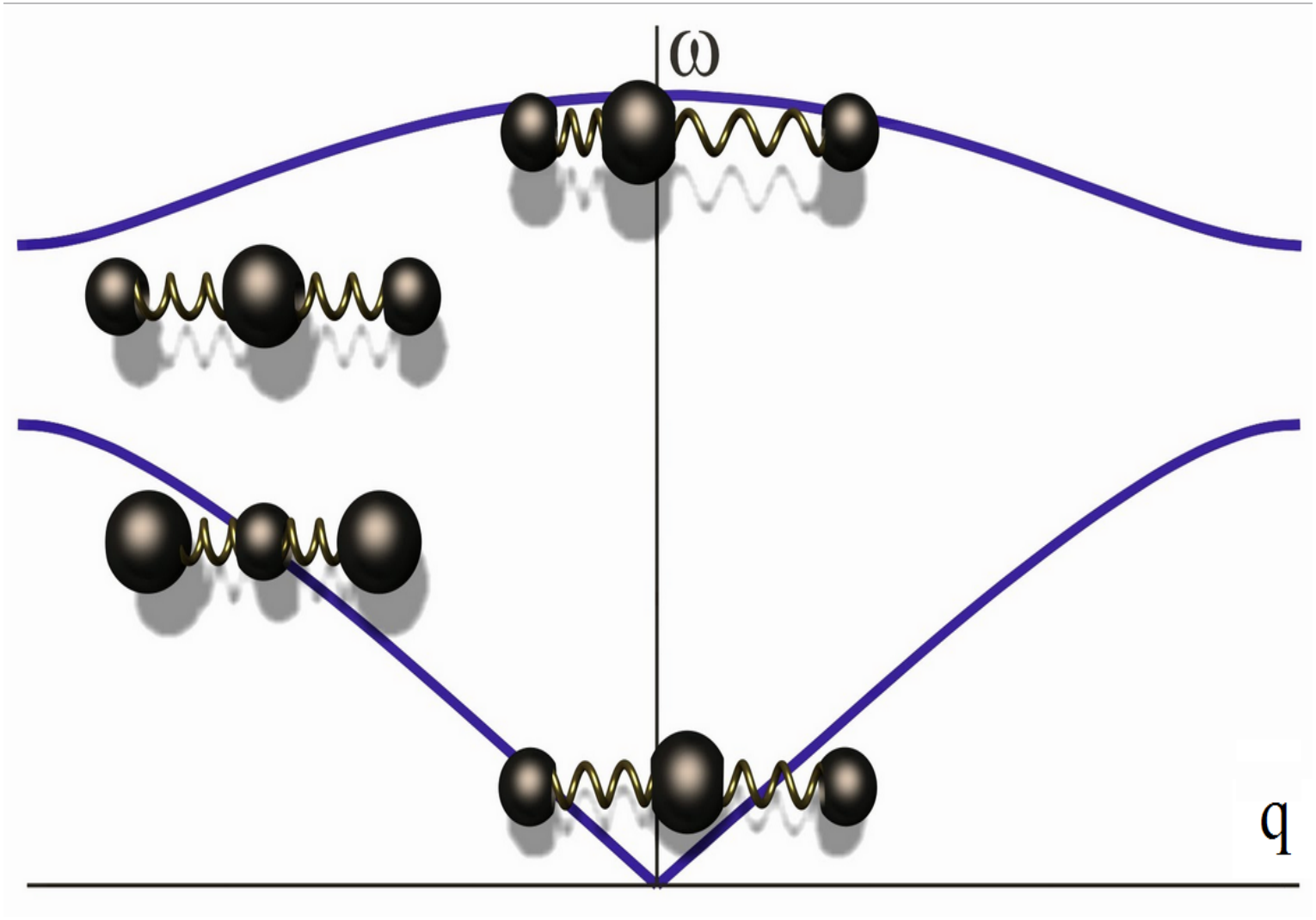
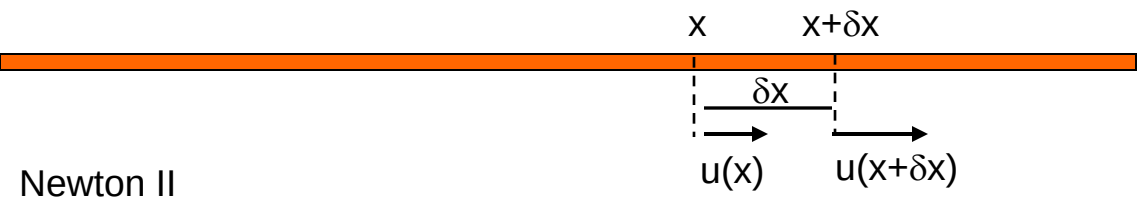
Rácsrezgések



http://physics-animations.com/Physics/English/phon_txt.htm

Rácsrezgések

Longitudális hullám rúdban



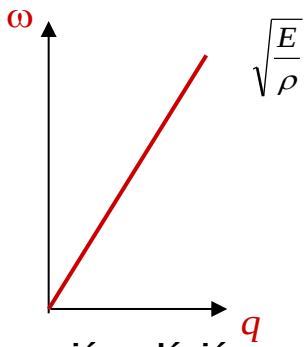
lokális erő az x pontban

$$F(x) = AE\frac{\partial u}{\partial x}$$

Young modulus

Newton II

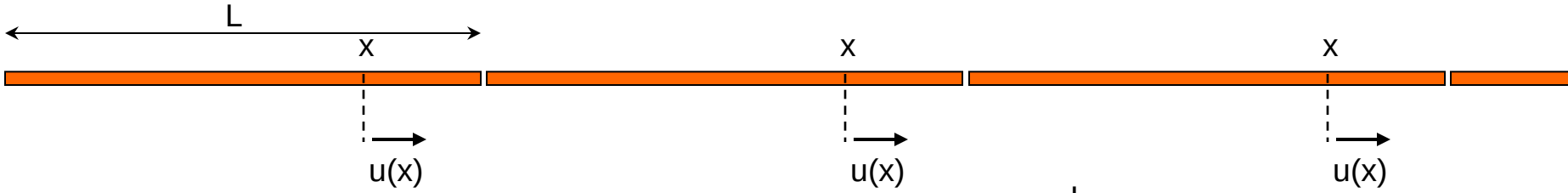
$$\left.\begin{aligned} F(x+\delta x) - F(x) &= \rho\delta V\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \\ \frac{\partial F}{\partial x}\delta x = AE\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\delta x &= E\,\delta V\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \end{aligned}\right\} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{E}{\rho}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \longrightarrow u(x,t) = u_o e^{i(qx-\omega t)}$$



ω(q) diszperziós reláció:
frekvencia-hullámszám függés

A q hullámszám értelmezési tartománya

véges méret → periódikus határfeltétel (Born-Kármán)



$$u(x,t) = u(x+L,t)$$

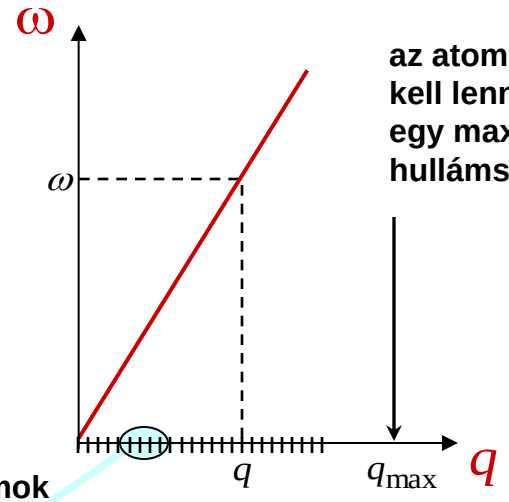
$$u_o e^{i\{qx-\omega t\}} = u_o e^{i\{q(x+L)-\omega t\}} \quad \Rightarrow \quad e^{iqL} = 1 \quad \Rightarrow \quad q = n\frac{2\pi}{L}, \quad \text{ahol } n = 0,1,2,\ \ldots \quad \text{egész számok}$$

Definiciók

Módus

rezgési állapot, melyet
a q hullámhossz és az ω frekvencia jellemez

vagy
a ħq impulzus és a ħω energia (kvantummechanika)



az atomi természet miatt kell lenni egy maximális hullámszámnak

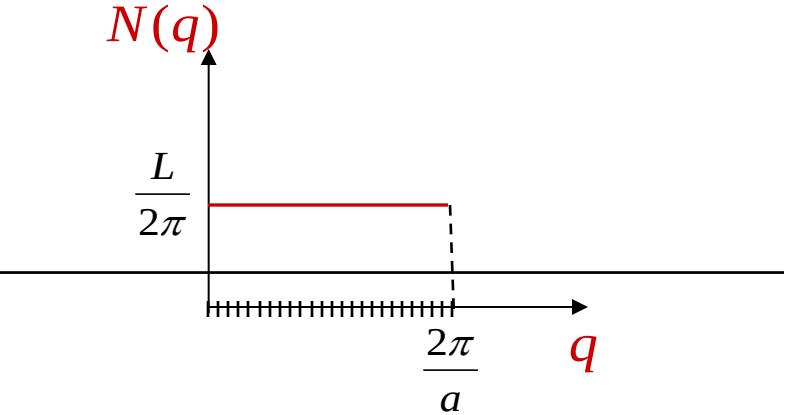
a rúdban kialakuló lehetséges állóhullámok

$$\Delta q = \frac{2\pi}{L}$$

$$q_{max} = N\frac{2\pi}{L} = 2\pi\frac{N}{L} = \frac{2\pi}{a}$$

Állapotsűrűség

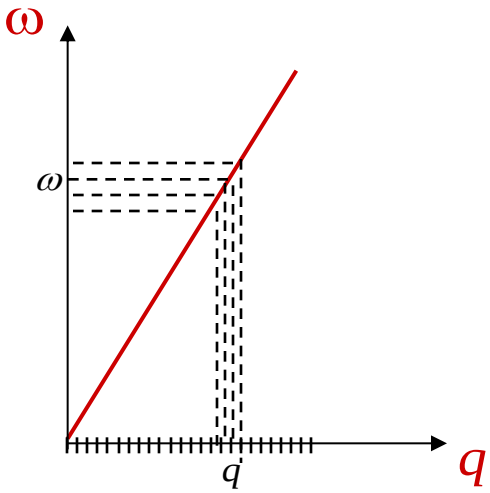
N(q), g(ω) - a lehetséges módusok száma
a q és q+dq, illetve az ω és ω+dω tartományban



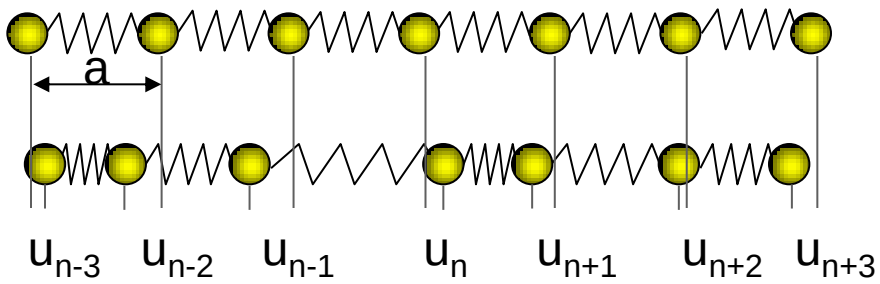
$$N(q) = \frac{L}{2\pi}$$

$$g(\omega)d\omega = N(q)dq$$

$$g(\omega) = \frac{1}{c}\frac{L}{2\pi}$$



Lineáris lánc



Egyforma atomok, első szomszéd kölcsönhatás

a rácstávolság
c rugóállandó

Legyen u_n az elmozdulás az r_n=na helyen.

A mozgásegyenlet:

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = -c(u_n - u_{n-1}) - c(u_n - u_{n+1})$$

A próbafüggvény

$$u = u_o e^{i(qr_n - \omega t)}$$

$$M(i\omega)^2 = -c(2 - e^{-iqa} - e^{+iqa}) = -2c(1-\cos qa) = -4c\sin^2\frac{qa}{2}$$

diszperziós reláció →

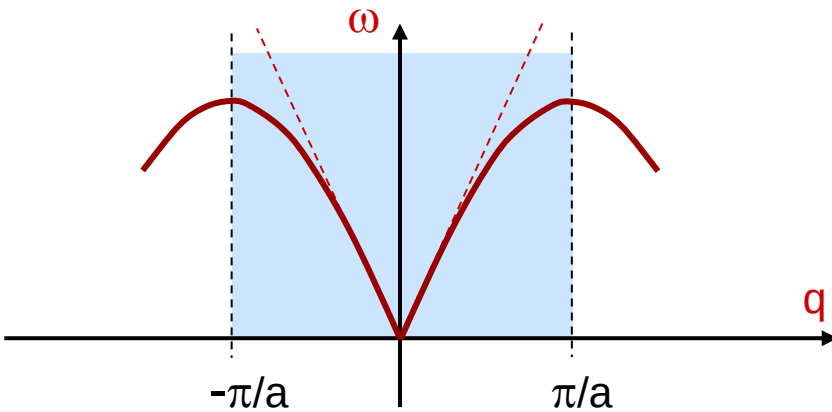
$$\omega(q) = \sqrt{\frac{4c}{M}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|$$

Tulajdonságai

- periódikus 2π/a szerint; célszerű választás q=0 , ω =0

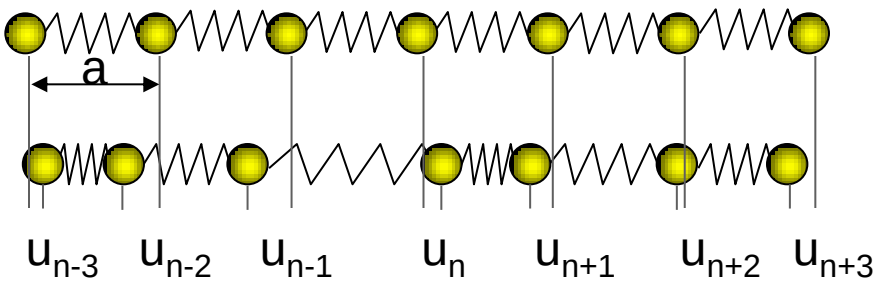
- lineárisan indul, meredekség: $a\sqrt{\frac{c}{M}}$ **(folytonos közeg:** $\sqrt{\frac{E}{\rho}}$ **)**

- a -π/a < q < π/a intervallum hordoz minden információt



Lineáris lánc

Egyforma atomok, első szomszéd kölcsönhatás



a rácstávolság
c rugóállandó

Legyen u_n az elmozdulás az r_n=na helyen.

A mozgásegyenlet:

$$M\frac{d^2u}{dt^2} = -c(u_n - u_{n-1}) - c(u_n - u_{n+1})$$

A próbafüggvény

$$u = u_o e^{i(qr_n - \omega t)}$$

$$M(i\omega)^2 = -c(2 - e^{-iqa} - e^{+iqa}) = -2c(1-\cos qa) = -4c\sin^2\frac{qa}{2}$$

diszperziós reláció →

$$\omega(q) = \sqrt{\frac{4c}{M}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|$$

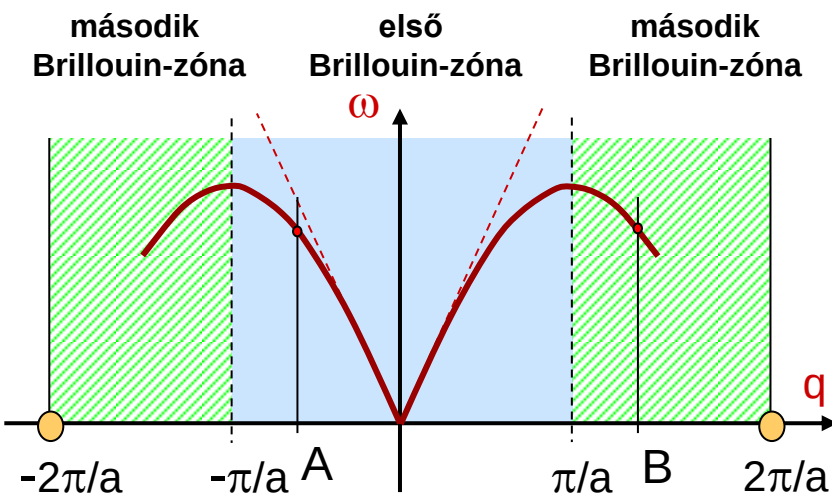
Tulajdonságai

- periódikus 2π/a szerint; célszerű választás q=0 , ω =0

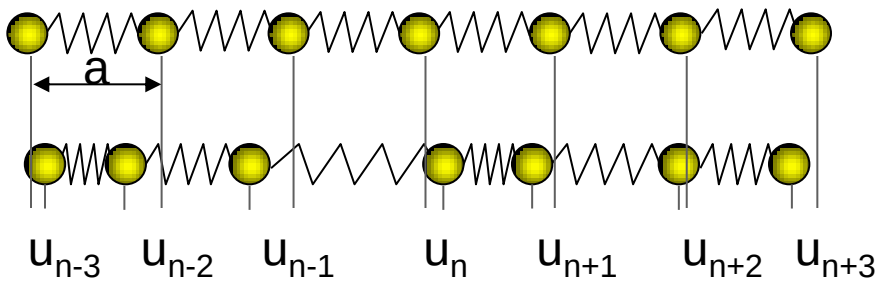
- lineárisan indul, meredekség: $a\sqrt{\frac{c}{M}}$ **(folytonos közeg:** $\sqrt{\frac{E}{\rho}}$ **)**

- a -π/a < q < π/a intervallum hordoz minden információt

- az A és B pontok ekvivalensek (a második Brillouin-zónához tartozó vektor ugyanazt a rezgést írja le)



Lineáris lánc



Egyforma atomok, első szomszéd kölcsönhatás

a rácstávolság
c rugóállandó

Legyen u_n az elmozdulás az r_n=na helyen.

A mozgásegyenlet:

$$M\frac{d^2u}{dt^2} = -c(u_n - u_{n-1}) - c(u_n - u_{n+1})$$

A próbafüggvény

$$u = u_o e^{i(qr_n - \omega t)}$$

$$M(i\omega)^2 = -c(2 - e^{-iqa} - e^{+iqa}) = -2c(1-\cos qa) = -4c\sin^2\frac{qa}{2}$$

diszperziós reláció →

$$\omega(q) = \sqrt{\frac{4c}{M}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|$$

Tulajdonságai

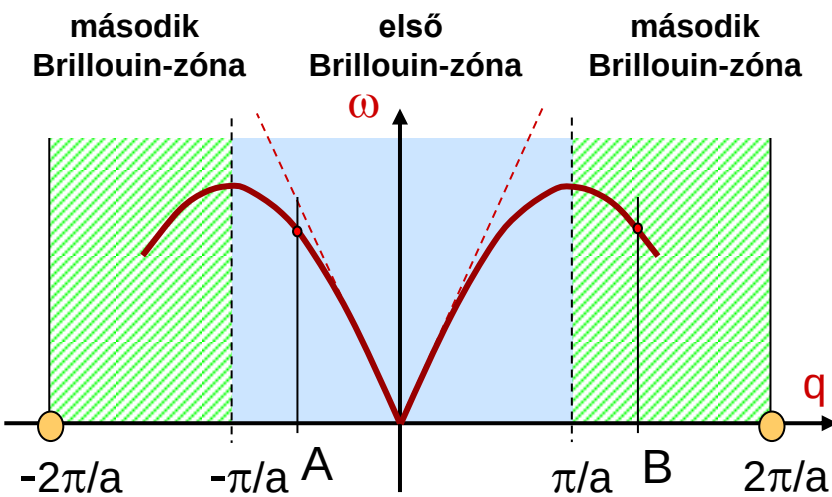
- periódikus 2π/a szerint; célszerű választás q=0 , ω =0

- lineárisan indul, meredekség: $a\sqrt{\frac{c}{M}}$ **(folytonos közeg:** $\sqrt{\frac{E}{\rho}}$ **)**

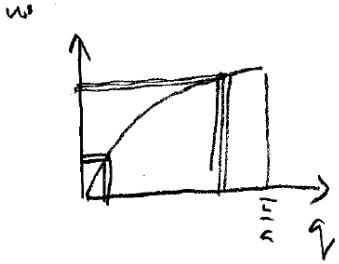
- a -π/a < q < π/a intervallum hordoz minden információt

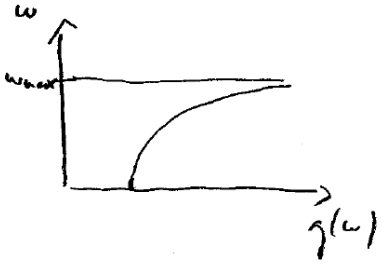
- az A és B pontok ekvivalensek (a második Brillouin-zónához tartozó vektor ugyanazt a rezgést írja le)

- nem lehet tetszőlegesen nagy energiájú gerjesztés, $\omega_{\max} = \sqrt{\frac{4c}{M}}$



Lineáris lánc



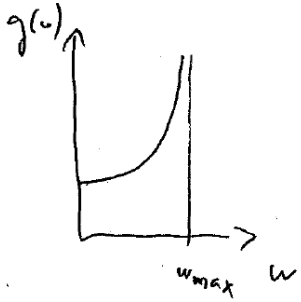


Az állapotsűrűség:

$$g(\omega)d\omega = N(q)dq$$

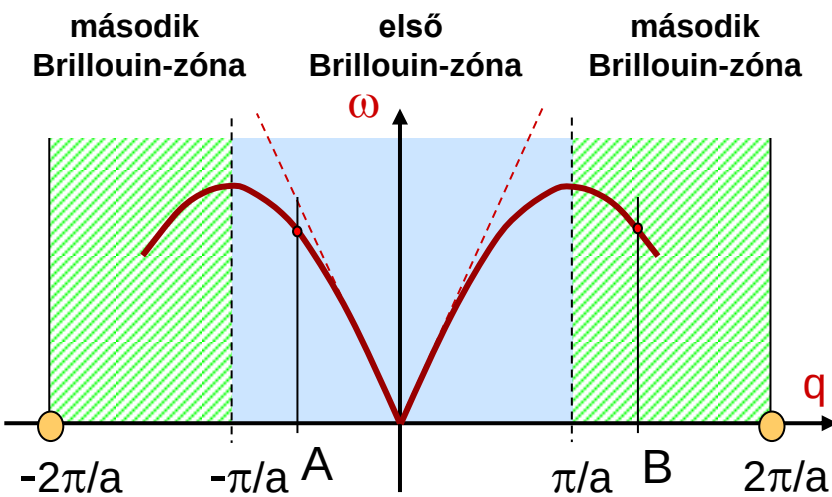
$$g(\omega) = N(q)\left(\frac{d\omega}{dq}\right)^{-1}$$

$$g(\omega) = \frac{L}{2\pi}\frac{1}{\omega_{\max}\frac{a}{2}\cos\frac{qa}{2}} = \frac{N}{\pi}\frac{1}{\omega_{\max}\sqrt{1-\sin^2\frac{qa}{2}}} = \frac{N}{\pi}\frac{1}{\sqrt{\omega^2{}_{\max} - \omega^2}}$$



Tulajdonságai

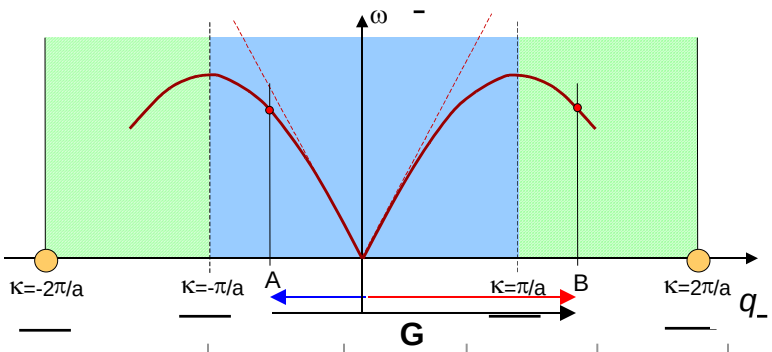
- **periódikus 2π/a szerint; célszerű választás q=0 , ω =0**
- **lineárisan indul, meredekség:** $a\sqrt{\frac{c}{M}}$ **(folytonos közeg:** $\sqrt{\frac{E}{\rho}}$ **)**
- **a -π/a < q < π/a intervallum hordoz minden információt**
- **az A és B pontok ekvivalensek (a második Brillouin-zónához tartozó vektor ugyanazt a rezgést írja le)**
- **nem lehet tetszőlegesen nagy energiájú gerjesztés,** $\omega_{\max} = \sqrt{\frac{4c}{M}}$
- **az állapotsűrűség divergál a zónahatáron**

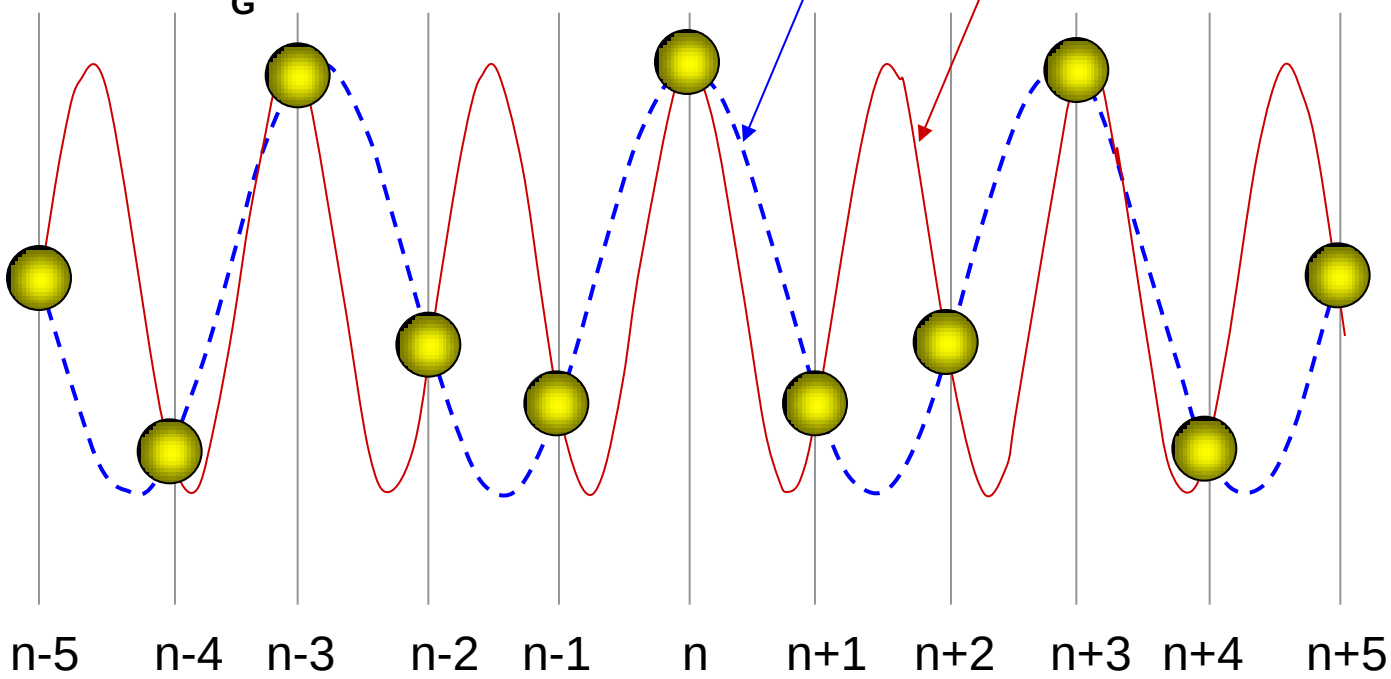


A hullámszám egyértelműsége

q ekvivalens q = q + G -vel (G tetszőleges reciprok rácsvektor)

ahol az elmozdulást leíró függvények eltérnek, nincs atomi pozíció

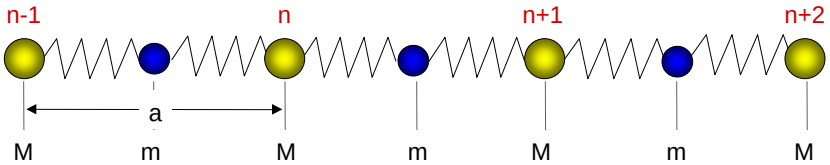




$$u_n = ue^{i(qna-\omega t)}$$

Kétatomos lánc

Tömegek: m és M
Rugóállandó: c



A mozgásegyenletek:

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = -c(u_n - v_{n-1}) - c(u_n - v_n)$$

$$m\frac{d^2v_n}{dt^2} = -c(v_n - u_n) - c(v_n - u_{n+1})$$

$$v_{n-1} \quad u_n \quad v_n \quad u_{n+1}$$

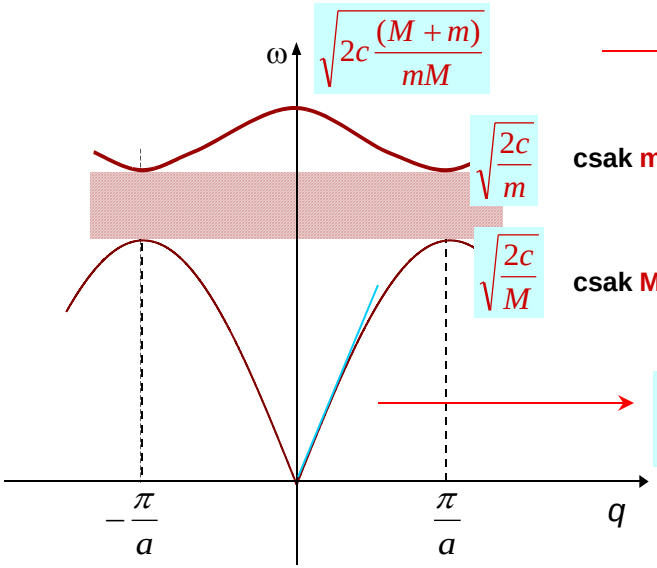
$$u_n = ue^{i(qna-\omega t)} \qquad v_n = ve^{i(q\{n+\frac{1}{2}\}a-\omega t)}$$

$$-\omega^2 uM = 2c(v\cos\frac{qa}{2} - u)$$

$$-\omega^2 vm = 2c(u\cos\frac{qa}{2} - v)$$

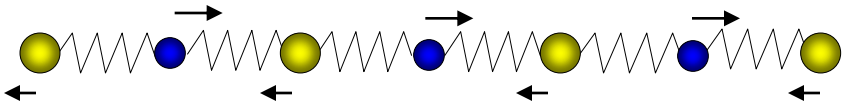
Két megoldás:

$$\omega^2 = c\frac{(M+m)}{mM} \pm c\sqrt{\left(\frac{(M+m)}{mM}\right)^2 - \frac{4\sin^2(qa/2)}{mM}}$$



optikai ág (q=0: m és M tömegközépponti rezgése)

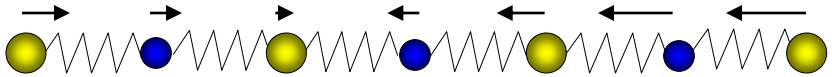
csak m rezeg



csak M rezeg

$$\sqrt{\frac{c}{2(M+m)}}qa$$

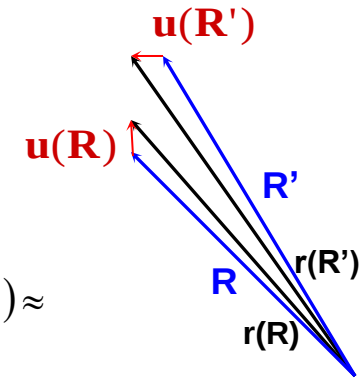
akusztikus ág (q=0: a teljes lánc eltolása)



3 dimenziós, egyatomos kristály

Harmonikus közelítés

$$E = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \Phi\left[\mathbf{r}(\mathbf{R}) - \mathbf{r}(\mathbf{R}')\right]$$



Φ párpotenciál

$$E = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \Phi\left(\mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{R}' - \mathbf{u}(\mathbf{R}')\right) = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \Phi\left(\mathbf{R} - \mathbf{R}' + \mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{u}(\mathbf{R}')\right) \approx$$

$$\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \Phi\left[\mathbf{R} - \mathbf{R}'\right] + 0 + \frac{1}{4}\sum_{\substack{\mathbf{R},\mathbf{R}' \\ \mu,\nu}} \left\{u_\mu(\mathbf{R}) - u_\mu(\mathbf{R}')\right\} \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{R} - \mathbf{R}')}{\partial u_\mu \partial u_\nu} \left\{u_\nu(\mathbf{R}) - u_\nu(\mathbf{R}')\right\}$$

alapállapoti energia (állandó)

a kristály egyensúlyának feltétele, hogy a lineáris tagok összege = 0

dinamikus mátrix

Az energia harmonikus közelítésben:

$$\boxed{E_{harm} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \mathbf{u}(\mathbf{R})\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')\mathbf{u}(\mathbf{R}')}$$

$$D_{\mu\nu}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = -\frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{R} - \mathbf{R}')}{\partial u_\mu \partial u_\nu} + \delta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \sum_{\mathbf{R}''} \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{R} - \mathbf{R}'')}{\partial u_\mu \partial u_\nu}$$

A dinamikus mátrix tulajdonságai:

$$\boxed{\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = \underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}' - \mathbf{R})}$$

Inverziós szimmetria: $\boxed{\mathbf{u}(\mathbf{R})}$ **és** $\boxed{-\mathbf{u}(-\mathbf{R})}$ **energiája azonos**

$$\boxed{\sum_{\mathbf{R}} \underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}) = 0}$$

Az energia független a kristály térbeli pozíciójától

$$0 = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \mathbf{d}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')\mathbf{d} = \frac{N}{2}\sum_{\mathbf{R}} \mathbf{d}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R})\mathbf{d} = \frac{N}{2}\sum_{\mathbf{R}} d_\mu d_\nu D_{\mu\nu}(\mathbf{R})$$

3 dimenziós, egyatomos kristály

$$E_{harm} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \mathbf{u}(\mathbf{R})\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\mathbf{u}(\mathbf{R}')$$

Mozgásegyenlet

$$M\frac{d^2 u_\mu(\mathbf{R})}{dt^2} = -\frac{\partial E_{harm}}{\partial u_\mu(\mathbf{R})} = -\sum_{\mathbf{R}',\nu} D_{\mu,\nu}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')u_\nu(\mathbf{R}')$$

$$\boxed{M\frac{d^2\mathbf{u}(\mathbf{R})}{dt^2} = -\sum_{\mathbf{R}'}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\mathbf{u}(\mathbf{R}')}$$

Síkhullám próbafüggvény

$$\mathbf{u}(\mathbf{R},t) = \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}\, e^{i(\mathbf{qR}-\omega t)}$$

$$\sum_{\mathbf{R}'}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\mathbf{u}(\mathbf{R}') = \sum_{\mathbf{R}''}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}'')\mathbf{u}(\mathbf{R}-\mathbf{R}'') = e^{i(\mathbf{qR}-\omega t)}\underbrace{\sum_{\mathbf{R}''}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}'')e^{-i\mathbf{qR}''}}_{\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})}\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

$$M\omega^2\underline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{qR}} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R}}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R})\left[e^{-i\mathbf{qR}} + e^{i\mathbf{qR}} - 2\right] = 2\sum_{\mathbf{R}}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R})\sin^2\left(\frac{1}{2}\mathbf{qR}\right)$$

felhasználtuk hogy: $\boxed{\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}) = \underline{\underline{\mathbf{D}}}(-\mathbf{R})}$ $\boxed{\sum_{\mathbf{R}}\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{R}) = 0}$

Mivel $\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})$ **szimmetrikus és valós**

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q}) = \lambda_s(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q})$$

$\boxed{\mathbf{q}}$ **terjedési irány,** $\boxed{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s}$ **polarizáció**

$$\boxed{\omega_s(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\lambda_s(\mathbf{q})}{M}}}$$

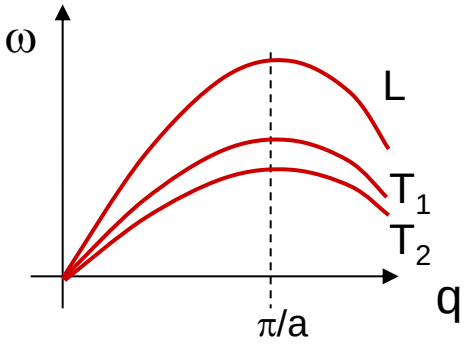
$$\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_s(\mathbf{q})\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_{s'}(\mathbf{q}) = \delta_{s,s'}$$

Izotróp anyagban minden $\boxed{\mathbf{q}}$ **-hoz lehet**

olyan polarizációt választani, hogy

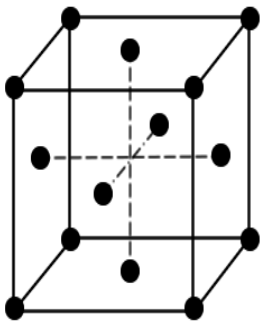
$\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_1$ **párhuzamos legyen q-val (longitudinális hullám)**

$\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_2, \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_3$ **merőleges legyen q-ra (transzverzális hullám)**

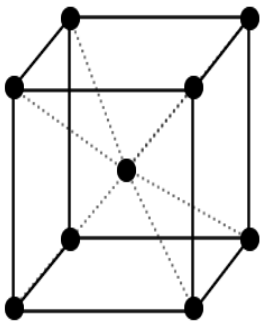


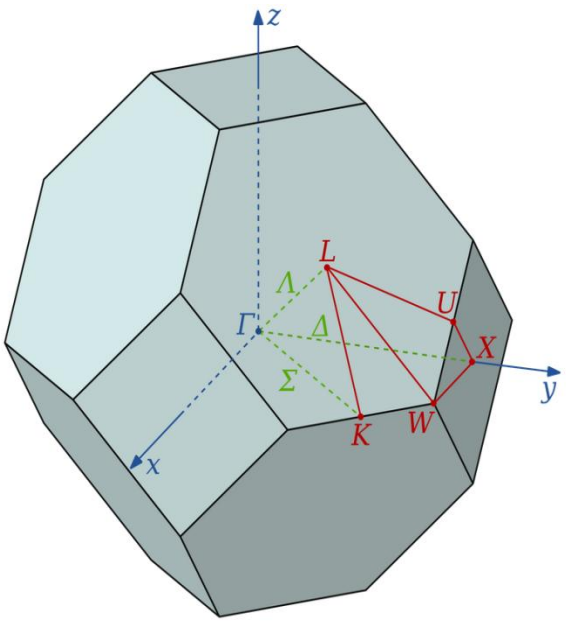
Ábrázolás reciprok térben

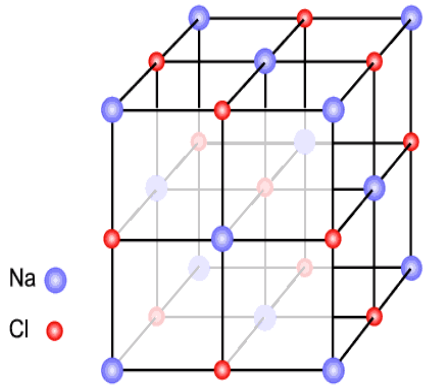
Valós rács



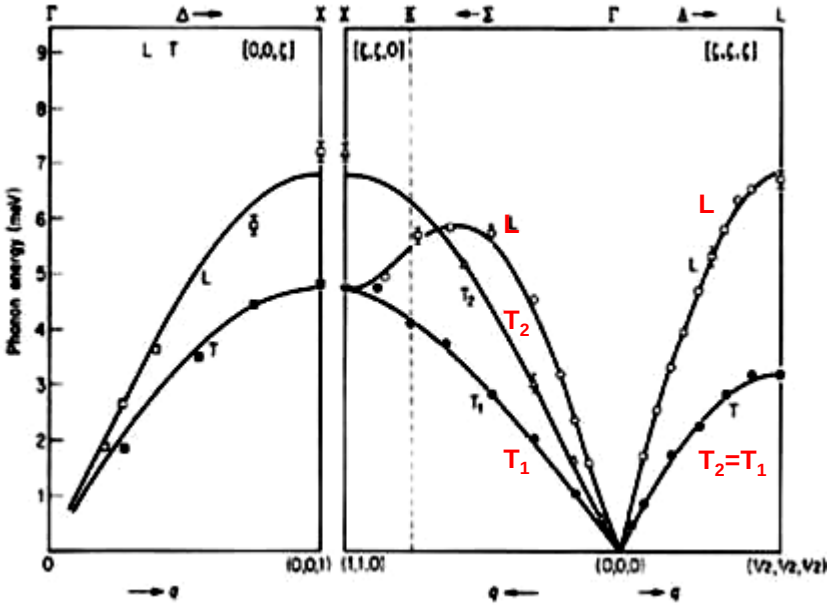
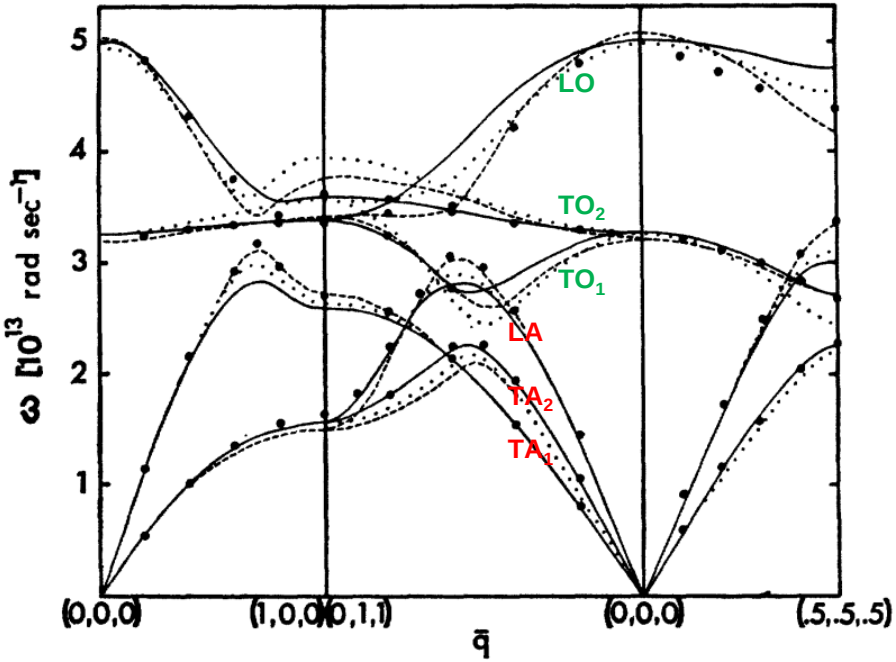
Reciprok rács







Rácsrezgések diszperziós relációja: Ne, T = 4.2 K



Rácsrezgések diszperziós relációja: NaCl, T = 77 K