UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO – MATEMATIČKI FAKULTET
DEPARTMAN ZA MATEMATIKU I INFORMATIKU

FONONI

seminarski rad

Profesor:
dr Svetlana Lukić – Petrović

Student:
Džana Rožajac
325/06

Novi Sad, 2010.

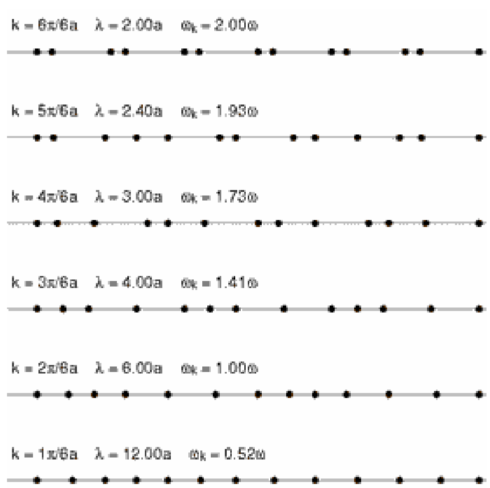
SADRŽAJ

1. FONONI

U fizici, fonon je kvazi čestica, odnosno to je kvant energije nekog elastičnog talasa, analogno sa fotonom, koji je kvant energije elektromagnetnog talasa.

Fononi predstavljaju važan deo kristala, jer imaju značajnu ulogu u mnogim fizičkim osobinama materije, uključujući toplotnu i električnu provodljivost. Zvučni talasi u kristalima su „sastavljeni“ od fonona. Toplotne vibracije u kristalima su toplotno pobuđeni fononi.

Fonon je kvantno – mehanički opis posebne vrste vibracije kretanja, poznat kao harmonijsko oscilovanje u klasičnoj mehanici, u kojoj rešetka ravnomerno osciluje sa istom frekvencijom. Harmonijska oscilovanja su važna, jer se bilo koja proizvoljna vibracija rešetke može smatrati kao superpozicija osnovnih vibracija.



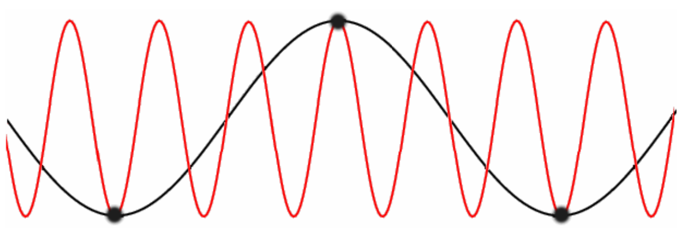
Ime fonon potiče od grčke reči φωνη (zvuk), što se prevodi kao svojstvo dugotalasnog područja koje dovodi do pojave zvuka u kristalima.

Kakav je eksperimentalni dokaz kvantovanja nekog elastičnog talasa. Najvažniji dokazi uključuju sledeće:

1. Udeo rešetke u toplotnom kapacitetu čvrstog trela uvek teži nuli kada temperatura teži nuli; ovo može biti objašnjeno jedino kvantovanjem vibracija rešetke. Ovo je bio najraniji dokaz postojanja fonona.
2. X-zraci i neutroni se neelastično rasejavaju na kristalima, sa promenama energije i impulsa koje odgovaraju stvaranju ili apsorbovanju jednog ili više fonona. Merenjem „uzmaka“ rasejanog x-zraka ili neutrona, određujemo svojstva pojedinih fonona. Takvi eksperimenti pružaju najbolji način određivanja disperzionih relacija za fonone, tj. daju zavisnost frekvencije od talasnog vektora i predstavljaju dokaz postojanja fonona.

1.1. IMPULS FONONA

Fonon talasnog vektora K interaguje sa drugim česticama kao da ima impuls hK ($h \quad \frac{h}{2} \quad 1{,}05 \quad 10^{\;27}\,\mathrm{Js}$, gde je h Plankova konstanta). Jedan fonon u stvarnosti nema impuls, odnosno samo za $K \quad 0$, tj. za uniformno kretanje rešetke, fonon poseduje impuls. Međutim, u najviše praktičnih slučajeva, fonon deluje kao da mu je impuls jednak hK. Ponekad se hK naziva kvazi – impulsom fonona u kristalu. Postoje zakoni konzervacije impulsa u kristalima, u smislu pravila odabiranja za dozvoljene prelaze između kvantnih stanja; ova pravila odabiranja obuhvataju hK. Zbog toga je hK fizički značajna veličina.



Elastično rasejanje (Bragova difrakcija) jednog fotona x-zraka na kristalu, određeno je zakonom konzervacije talasnih vektora

$$k' \quad k \quad G$$

gde je G vektor recipročne rešetke, k je talasni vektor upadnog fotona, a k' je talasni vektor rasejanog fotona.

Ako je rasejanje fotona neelastično uz stvaranje fonona talasnog vektora K tada zakon konzervacije talasnih vektora postaje

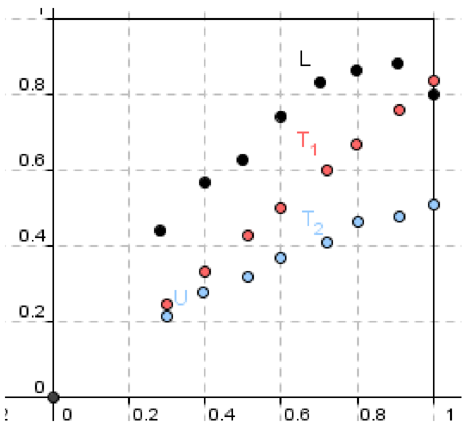
$$k' \quad K \quad k \quad G$$

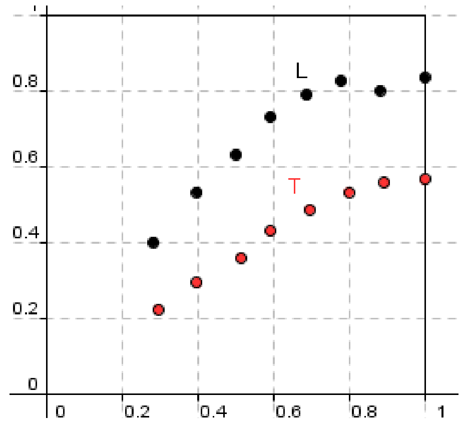
Ako se u ovom procesu apsorbuje fonon sa talasnim vektorom K, imaćemo, sledeću relaciju

$$k' \quad k \quad K \quad G$$

1.2. NEELASTIČNO RASEJAVANJE X-ZRAKA NA FONONIMA

Jedan od metoda proučavanja fononskog spektra čvrstih tela se zasniva na neelastičnom rasejavanju x-zraka. Rezultati koje je Voker dobio za aluminijum su grafički predstavljeni na slikama 1 i 2.





Sl. 1 [110] pravac

Disperzione krive određene pomoću neelastičnog rasejavanja x-zraka, za fonone koji se prostiru duž [110] ose u Al. Longitudinalni talas L je prikazan crnim kružićima; transferzalni T_1, kod koga je kretanje čestica paralelno [001] osi, je prikazan crvenim, a T_2 paralelan [110] osi je prikazan plavim kružićima.

Sl. 2 [100] pravac

Disperzione krive za elastične talase koji se prostiru duž [100] ose u Al, registrovane pri neelastičnom rasejavanju x-zraka Longitudinalni i transferzalni talasi su prikazani respektivno, crnim i crvenim kružićima.

Kod ovakvih eksperimenata, potrebno je da nađemo frekvenciju fonona u funkciji od talasnog vektora fonona K. Talasni vektor se određuje primenom opšteg uslova za konzervaciju talasnih vektora. Nažalost, teško je neposredno odrediti mali pomeraj frekvencije kod rasejanog snopa x-zraka. Kod eksperimenata sa rasejavanjem neutrona, pomeraj energije se obično može neposredno meriti, što predstavnja izvesnu prednost.

1.3. NEELASTIČNO RASEJAVANJE NEUTRONA NA FONONIMA

Neutron, pri prolazu kroz kristalnu rešetku, najjače interaguje sa jezgrima atoma. Kinematika rasejavanja neutronskog snopa na kristalnoj rešetki je opisana opštom relacijom za konzervaciju talasnih vektora

$$k' \quad K \quad k \quad G$$

ili

$$k \quad k' \quad G \quad K$$

Ovde je K talasni vektor fonona koji je stvoren (+) ili apsorbovan (-) u ovom procesu, a G je bilo koji vektor recipročne rešetke.

Kinetička energija upadnog neutrona je $\frac{p^2}{2M_n}$, gde je M_n masa neutrona. Njegov impuls p je dat sa hk, gde je k talasni vektor neutrona. Tako je $\frac{h^2k^2}{2M_n}$ kinetička energija upadnog neutrona. Ako je k' talasni vektor rasejanog neutrona, onda će njegova kinetička energija biti $\frac{h^2k'^2}{2M_n}$. Prema zakonu o održanju energije je

$$\frac{h^2k^2}{2M_n} \qquad \frac{h^2k'^2}{2M_n} \qquad h \quad _k$$

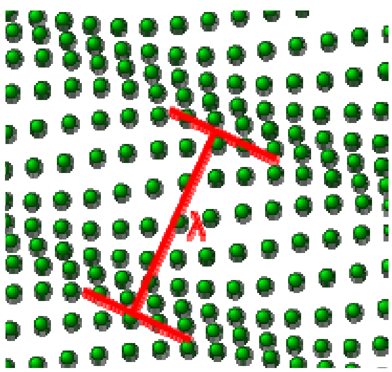
gde je $h \quad _K$ energija fonona stvorenog (+) ili apsorbovanog (-) u ovom procesu.

Pod povoljnim uslovima je neutronsko rasejavanje idealan metod za određivanje fononskih spektara. Ovaj metod nije primenljiv kada je apsorpcija neutrona jezgrima u kristalu velika. Pod izvesnim okolnostima je moguće dobiti važne podatke o vremenu života fonona, na osnovu ugaone širine snopa rasejanih neutrona.

2. OSCILOVANJE REŠETKE

Kristalna rešetka sastoji se od N čestica (atoma), iako u realnom stanju ove čestice mogu biti molekuli. Broj čestica iznosi 10^{23} (Avogadrov broj).

Zbog povezanosti među atomima, pomeranje jednog ili više atoma iz njihovih ravnotežnih položaja dovodi do vibracije talasa koji se prenose kroz rešetku. Jedan takav talas je prikazan na slici.



Amplituda talasa je data izmeštanjem atoma iz ravnotežnog položaja. Sa je označena talasna dužina.

Postoji najmanja talasna dužina, koja održava ravnotežu između atoma na rastojanju a.

Svako oscilovanje rešetke nema dobro definisanu talasnu dužinu i frekvenciju. Međutim, harmonijsko oscilovanje to poseduje.

2.1. VIBRACIJE MONOATOMSKIH REŠETKI

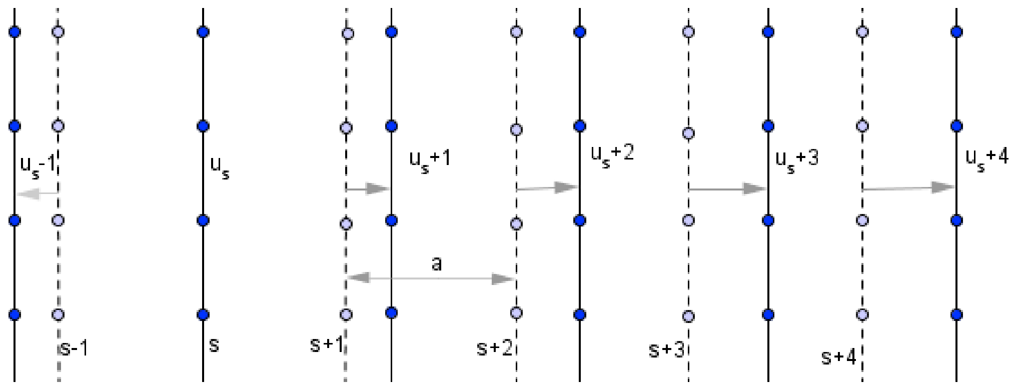
Sada ćemo proširiti razmatranje elastičnih vibracija u kristalima na kratkotalasno područje, gde je talasna dužina talasa u rešetki uporediva sa konstantom rešetke kristala. Periodičnost kristalne strukture je od velike važnosti za elastične talase, baš kao i za x-zrake.

Radi uprošćavanja problema, razmatraćemo prostiranje elastičnih talasa u takvim pravcima, da su polarizacije talasa čisto transferzalne ili čisto longitudinalne. (Razmatramo jedino kristale kod kojih primitivni motiv sadrži samo jedan atom.) U kubnoj kristalnoj rešetki takvi sa [100], [111] i [110] pravci. Kada se talas prostire duž jednog od ovih pravaca, čitave ravni atoma u kristalu se kreću u fazi. Ovo kretanje je paralelno pravcu prostiranja ako je talas longitudinalan, a normalan na pravac prostiranja ako je talas transverzalan.

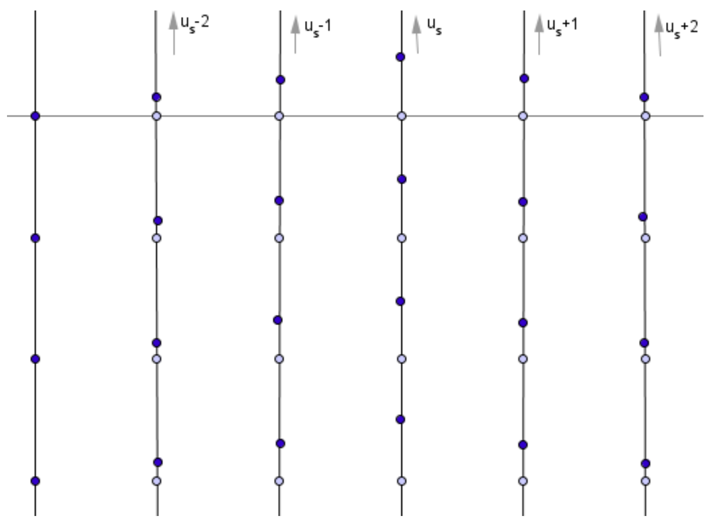
O silama koje povezuju različite ravni atoma možemo saznati iz relacije između frekvencije i talasnog vertora K, za ove posebne načine prostiranja.

Ako se ravni atoma pomeraju kao celine, paralelno ili normalno na talasni vektor K, pri „prolaženju“ talasa, tada možemo opisivati jednom koordinatom u_s pomeraj ravni s iz jednog ravnotežnog položaja. Problem je tada jednodimenzionalan.

Pretpostavljamo, za sada, da su sve ravni atoma identične. Razmotrićemo jedan pravac polarizacije, bilo longitudinalni bilo transverzalni. Slika 3 prikazuje pomeraj čestica kod longitudinalnog talasa, a slika 4 kod transverzalnog.



Sl. 3 Isprekidane linije – ravni atoma u ravnotežnom položaju. Neprekidne linije – pomerene ravni atoma



Sl. 4 Ravni atoma koje su pomerene pri prolaženju jednog transferzalnog talasa

Sila koja deluje na ravan označenu sa s i koja je izazvana pomeranjem ravni označene sa $s+p$, proporcionalna je razlici pomeraja ovih ravni, tako da je ukupna sila koja deluje na ravan s data sa

$$F_s = \sum_p C_p(u_{s+p} - u_s). \tag{1}$$

Ovaj izraz je linearan po promenljivama i ima oblik Hukovog zakona. Konstanta C_p je restuticioni koeficijent koji se javlja između dve ravni pri udaljavanju ravni p. C_p-ovi će biti različiti za longitudinalne i transverzalne talase. Pogodno je posmatrati F i C_p kao da su definisani za jedan atom u ravni, tako da je F_s sila koja deluje na jedan atom u ravani s. Jednačina kretanja ravni s je:

$$M\frac{d^2u_s}{dt^2} \qquad {}_{p}\, C_p(u_{s\ \ p} \quad u_s)\,, \tag{2}$$

gde je M masa jednog atoma. Pri sumiranju, p uzima vrednosti svih pozitivnih i negativnih celih brojeva.
Potražićemo rešenje za (2) u obliku progresivnog talasa:

$$u_{s\ \ p} \quad u(0)e^{i(s\ \ p)Ka\ \ i\ \ t}, \tag{3}$$

gde je a interplanarni razmak[1] , a K je talasni vektor. Tada se (2) svodi na

$$^{2}Mu(0)e^{i(sKa-\ \ t)} \qquad {}_{p}\, C_p(e^{i(s\ \ p)Ka} \quad e^{isKa})u(0)e^{\ \ i\ \ t} \tag{4}$$

Možemo sa obe strane skratiti $u(0)e^{isKa}e^{\ \ i\ \ t}$, tako da je

$$^{2}M \qquad {}_{p}\, C_p(e^{ipKa} \quad 1)\,. \tag{5}$$

Pošto primitivni motiv sadrži samo jedan atom, na osnovu translacione simetrije sledi da je $C_p \quad C_{\ \ p}$, pa možemo (5) preurediti:

$$^{2}M \qquad {}_{p}\, C_p(e^{ipKa} \quad e^{\ \ ipKa} \quad 2)\,. \tag{6}$$

Koristeći identitet $2\cos pKa \quad e^{ipKa} \quad e^{\ \ ipKa}$, imamo da je disperziona relacija

$$^{2} \quad \frac{2}{M}\, {}_{p\ \ 0}\, C_p(1 \quad \cos pKa)\,. \tag{7}$$

Ako postoji interakcija jedino između najbližih susednih ravni, tada se (7) svodi na

$$^{2} \quad (2\frac{C_1}{M})(1 \quad \cos Ka)\,. \tag{8}$$

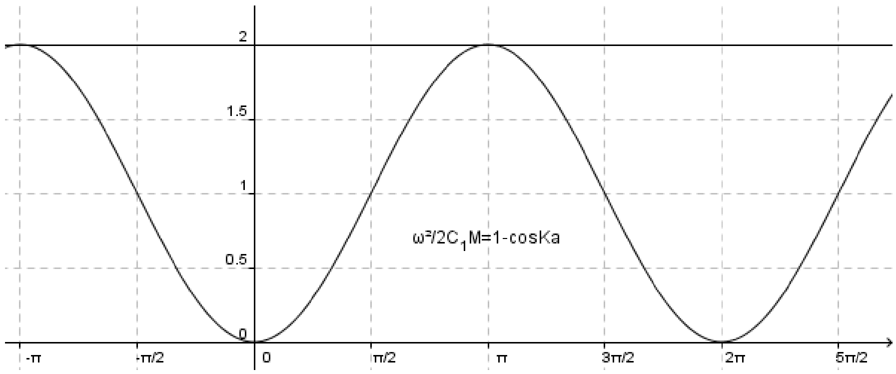
Koristeći trigonometrijski identitet, ovo može biti napisano kao

$$^{2} \quad (4\frac{C_1}{M})\sin^2\frac{1}{2}Ka\,, \qquad \sqrt{\frac{4C_1}{M}}\left|\sin\frac{1}{2}Ka\right|. \tag{9}$$

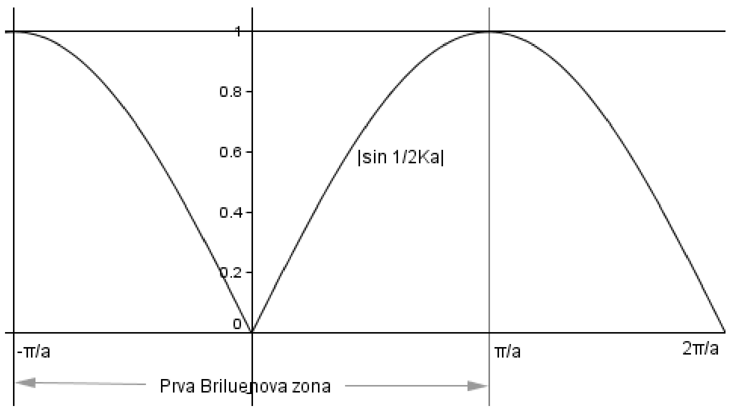
Ispred kvadratnog korena smo izabrali znak tako da je frekvencija uvek pozitivna za stabilnu rešetku. Grafički prikazi zavisnosti: ^{2} od Ka dat je na slici 5, a od Ka na slici 6. Obe krive su periodične po K, sa periodom $\frac{2}{a}$.

---

[1] Vrednost za interplanarni razmak a , za datu rešetku, će zavisiti od pravca K



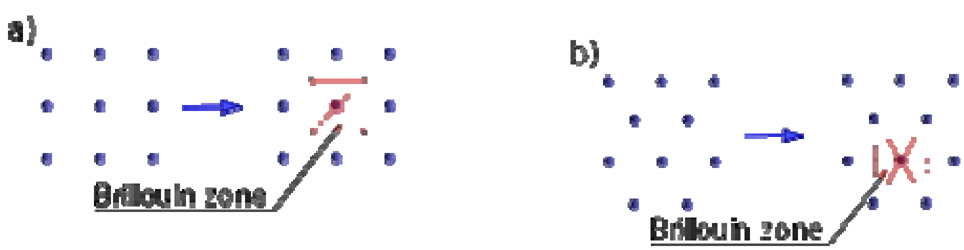
Sl. 5



Sl. 6

Koji je interval vrednosti za K fizički značajan? Ovo je jedno važno pitanje. Interval od 2 za Ka pokriva sve nezavisne vrednosti za e^{iKa}. Potrebne su nam i pozitivne i negativne vrednosti za K, jer se talasi mogu prostirati i nadesno i nalevo. Tako se interval nezavisnih vrednosti za K kreće od

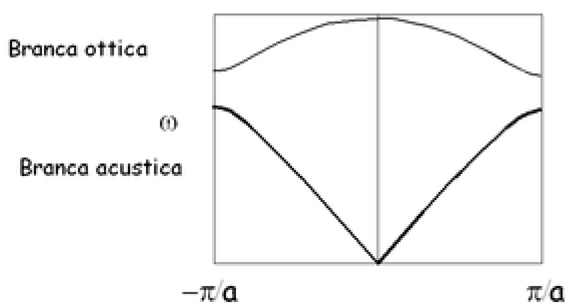
Ka , odnosno $\frac{}{a}$ K $\frac{}{a}$. Ovaj interval je poznat kao **prva Briluenova zona** jednodimenzionalne rešetke. Izvan ove zone K uzima vrednosti K $\frac{2n}{a}$. Na slici 7 dati su izgledi Briluenove zone, a) u kvadratnoj rešetki, b) u heksagonalnoj rešetki.



Sl. 7

2.2. REŠETKA SA DVA ATOMA PO PRIMITIVNOJ ĆELIJI

Kod kristala koji imaju dva ili više atoma po primitivnoj ćeliji, vibracioni spektar pokazuje nove odlike, tj postoje dva tipa fonona: **akustičk**i i **optički**. Razmotrićemo slučaj dva atoma po primitivnoj ćelliji, kao što je kod NaCl-strukture ili dijamantske srukture. Za svaku od polarizacija, kod prostiranja u datom pravcu, disperziona relacija u zavisnosti od K određuje dve grane, poznate kao akustičke i optičke grane, sa „istoimenim“ fononima. Imamo longitudinalne (LA) i transverzalne (TA) akustičke fonone, i longitudinalne (LO) i transverzalne (TO) optičke fonone.



Sva oscilovanja se dešavaju sa stalnom razlikom faza u pravcu vektora k. Atomi vibriraju u protivfazi, dok je njihov centar masa nepomičan. Ako su ove dve „vrste“ atoma suprotno naelektrisane, kretanje možemo pobuditi električnim poljem svetlosnog talasa[1], ova pojava odgovorna je za mnoge optičke karakteristike, pa je zbog toga ova grana nazvana optičkom. Optički fononi imaju minimalne frekvencije, čak i kada je talasna dužina velika.

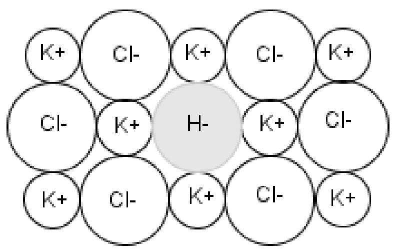
Ako je foton apsorbovan kristalom uz stvaranje jednog fonona, tada će zbog konzervacije talasnih vektora biti $k_{foton}=K_{fonon}$. Talasni vektori fotona frekvencija (~10^{13} Hz) su reda 10^3 cm^{-1}, dok, međutim, talasni vektori fonona idu do 10^8 cm^{-1}. Na taj način pobuđeni fononi imaju male talasne vektore.

Ako ima p atoma u primitivnoj ćeliji, postojaće $3p$ grana za fononsku disperzionu relaciju: 3 akustičke grane i $3p \quad 3$ optičke grane.

[1] Uticaji magnetnog polja svetlosnog talasa su slabiji, pošto je magnetna sila koja deluje na naelektrisane jone proporcionalna sa v / c, gde je v brzina kretanja jona u rešetki

3. LOKALNI FONONI

Fononski spektar u kristalu se donekle menja zbog postojanja defekata rešetke i primesnih atoma. Razmotrimo zamenjivanje teškog jona lakim jonom, takvo kao što je zamena Cl-jona H-jonom u KCl-kristalu (sl. 8).



Sl. 8

Ovakva primesa se naziva U-centrom. Fizičko sagledavanje ove zamene ukazuje na to da postoji jedno visokofrekventno kretanje, kod koga se laki H-jon kreće napred – natrag u „kavezu“ od teških K-jona kojima je okružen. Ovakvo kretanje određuje jedan električni dipolni moment. Kristalna rešetka će se u blizini H-jona neznatno deformisati u toku ovog kretanja, dok amplituda deformisanja treba brzo da opada sa rastojanjem od H-jona. Takvu vibraciju nazivamo **lokalizovanim fononom**. Najranija teorijska proučavanja lokalizovanih fonona je obavio Lifšic.

Eksperimente u vezi sa optičkim apsorbovanjem, koje nastaje usled lokalizovanih fonona pridruženih H-jonima u alkalnim halogenidima je izveo Šefer. Lokalni fononi su bili takođe zapaženi pri neutronskom rasejavanju.

Najjednostavniji slučaj lokalnog fonona je kod jednodimenzione rešetke kod koje svi atomi imaju masu M, osim jednog čija je masa M´<M. pokazaćemo da je jedna od normalnih vibracija rešetke lokalizovana u okolini lakšeg atoma, i da je odgovarajuća frekvencija iznad gornje granične vrednosti ω_{max} za neperturbovanu rešetku. Pretpostavljamo postoje interakcija samo između najbližih suseda, kao i da su one između M´ i M iste sa onima između M i M.

Neka lakši atom bude u koordinatnom početku, $s = 0$. Jednačine kretanja za rešetku su:

$$M' \frac{d^2u_0}{dt^2} = C(u_1 + u_{-1} - 2u_0) \tag{1}$$

$$M \frac{d^2u_1}{dt^2} = C(u_2 + u_0 - 2u_1) \tag{2}$$

Potražićemo rešenje koje eksponencijalno opada sa udaljavanjem od atoma sa $s = 0$, a koje se za granični slučaj M´→M približava obliku normalne vibracije neperturbovane rešetke najviše frekvencije. Rešenje kod granice Briluenove zone, za neperturbovanu rešetku je dato sa

$$u_s = u(0)e^{is\pi}e^{-i\omega t} = u(0)e^{-i\omega t}\cos s\pi = u(0)(-1)^s e^{-i\omega t} \qquad (3)$$

Ovo je stojeći talas. Kod ovakvog talasa se uzastopni atomi kreću u protivfazi, jer je $\cos s\pi = \pm 1$ u zavisnosti od toga da li je s neki paran ili neparan ceo broj.

Kod perturbovane rešetke, pokušajmo sa rešenjem oblika

$$u_s = u_0(-1)^s e^{-i\omega t}e^{-|s|\alpha}, \qquad (4)$$

gde α treba da se odredi. Zamenom u (2) nalazimo

$$\omega^2 = \left(\frac{C}{M}\right)(2 + e^{-\alpha} + e^{\alpha}), \qquad (5)$$

dok zamenom u (1) nalazimo

$$\omega^2 = \left(\frac{C}{M'}\right)(2 + 2e^{-\alpha}). \qquad (6)$$

Jednačine (5) i (6) su saglasne ako je $e^{\alpha} = \frac{(2M - M')}{M'}$, odakle je

$$\omega^2 = \omega_{max}^2 \frac{M^2}{2MM' - M'^2}, \qquad (7)$$

gde je $\omega_{max} = \left(\frac{4C}{M}\right)^{\frac{1}{2}}$ prekidna frekvencija kod nepertubovane rešetke, za koju je $M = M'$. Ako je $M' << M$ tada se (7) redukuje na $\omega^2 \approx \omega_{max}^2 \frac{M^2}{2M'}$

LITERATURA:

1. Uvod u fiziku čvrstog stanja; Charles Kittel, savremena administracija, izdavačko štamparsko preduzeće, 1970 Beograd
2. Eksperimentalna fizika kondenzovane materije; Dragoslav M. Petrović, Svetlana R. Lukić; Univerzitet u Novom Sadu, Prirodno – matematički fakultet, 2000 Novi Sad
3. Anatomska i nuklearna fizika; Dragiša M. Ivanović, Vlastimir M. Vučić; jedanaesto prerađeno (SI) izdanje, naučna knjiga, 1981 Beograd
4. www.google.com – fononi