بررسی مُدهای آکوستیکی و اپتیکی در یک مدل یک‌بعدی با سه ذرّه در یاخته‌ی یکانی

محمّد بهمنی، الناز ماه‌گرفته، سارا قنّاد

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدّین طوسی، تهران،

محمّدابراهیم فولادوند

گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

در این نوشته رابطه پاشندگی فونونی را برای یک بلور یک بعدی که در یاخته یکانی آن سه ذره وجود دارد در تقریب هماهنگ بررسی می کنیم. فرض می شود هر ذره تنها با همسایگان نزدیک خود برهمکنش دارد. بستگی گاف انرژی در مرزهای منطقه بریلوئن و مرکز آن را به تغییرات نسبت ضرایب برهمکنش میان ذرات یاخته وهمچنین نسبت جرم های ذرات بدست می آوریم.

گاما، شماره ی ۲۶، مقاله ی ۱ (بهار ۱۳۹۲) ویرایش ۱ (۱۳۹۲/۱/۱۲)

Abstract

The phononic dispersion relation for a 1D crystal which has 3 different atoms per unit cell is investigated in the harmonic approximation. It is assuemed that each particle is only interacting with its nearest neighbors. The dependence of the energy gap on the ratio of spring coupling constants is investigated for the center and the boundary of the Brillouin zone.

Mohammad Bahmani, Elnaz Mahgerefteh, Sara Ghannad, Mohammad-Ebrahim Fouladvand; *Investigating acoustical and optical modes in a 1D model with 3-type particles in the unit cell*;
Gamma, no. 26, art. 1 (Spring 2013), v. 1 (1 Apr 2013)

URL: http://www.gammajournal.ir

© Gamma 2013

۱ پیشگفتار

بررسی مدهای آوایی (آکوستیکی) و نوری (اپتیکی) فونون ها در جامدات از اهمیت زیادی در فیزیک حالت جامد برخوردار است [1, 2]. یک مد آکوستیکی فونونی به مدی گفته می شود که در رابطه پاشندگی آن هنگامیکه $\boldsymbol{q}$ به سمت صفر می‌رود، بسامد $\omega(\boldsymbol{q})$ نیز به سمت صفر برود. چنان چه وقتی $\boldsymbol{q} \to 0$ می‌رود بسامد ω به سمت صفر نرود، به آن مُد، مُد اپتیکی می‌گوییم. در بیشتر کتاب‌های حالت جامد برای روشن کردن این موضوع مدلی یک بعدی از جسم جامد در نظر می‌گیرند و نشان می‌دهند که اگر دو ذرّه در یاخته ی یکانی وجود داشته باشد، یکی از این دو مُد اپتیکی خواهد بود. برای روشن‌تر شدن مسئله ما در این نوشته حالتی را در نظر می‌گیریم که در یاخته ی یکانی سه ذرّه وجود داشته باشد. نشان می‌دهیم از سه مُد مسئله دو مُد اپیکی و یک مُد آکوستیکی هستند. البته در حالت کلی‌تر که یاخته f ذرّه داشته باشد، می‌شود ثابت کرد که همواره یکی از مُدها آکوستیکی و $f-1$ مُد دیگر اپتیکی هستد [1].

۲ صورت‌بندی مسئله

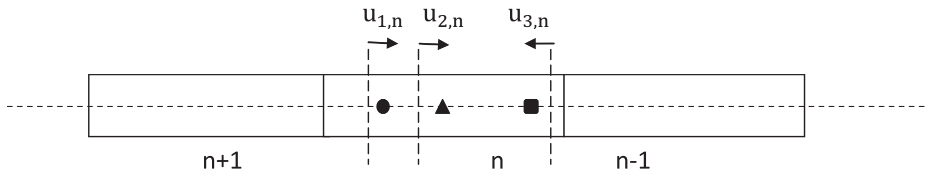
اینک به فرمول‌بندی مسئله می‌پردازیم. یک بلور یک‌بعدی را در نظر می‌گیریم که در یاخته ی یکانی آن سه ذرّه با جرم‌های m_1، m_2، و m_3 باشد. ثابت شبکه را a می‌گیریم. در تقریب هماهنگ، فرض می‌کنیم هر ذرّه تنها با همسایگان نزدیک خود برهمکنش دارد [2]. در این تقریب برهمکنش میان ذرّات را می‌توان به صورت فنرهای مجازی با ثابت‌های k_1، k_2، و k_3 مدل کرد. در زمان t جابجایی ذرّات از موضع تعادلشان را با u_1، u_2، و u_3 نشان می‌دهیم. در شکل (1) هندسه ی مسئله کشیده شده است.

فاصله ی تعادلی میان ذرّات 1 و 2 ی هر یاخته را با d، و فاصله ی میان ذرّات 2 و 3 را با e نمایش می‌دهیم. بی آن که کلیّت مسئله از دست برود، می‌توان فرض کرد $d < a/2$ و $e < (a-d)/2$ است (شکل (2) را ببینید).

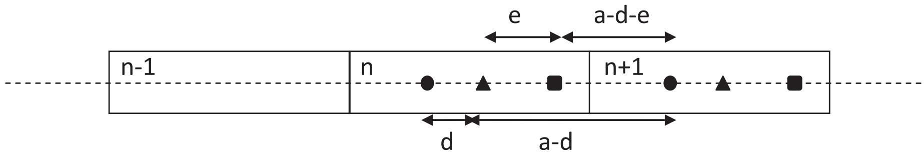
در تقریب هماهنگ انرژی پتانسیل سامانه به صورت زیر خواهد بود.

$$U = \frac{1}{2}\sum_n \left\{k_1\ (u_{2,n}-u_{3,n})^2 + k_2\ (u_{3,n}-u_{1,n+1})^2 + k_3\ (u_{1,n}-u_{2,n})^2\right\}. \qquad (1)$$

k_1 ثابت نیرویی است که ذرّات 2 و 3 یِ یک یاخته را به هم پیوند می‌دهد. k_2 ثابت نیرویی است که ذرّه ی 3 یِ یک یاخته را به ذرّه یِ 1 یاخته ی بعدی پیوند می‌دهد. k_3 ثابت نیرویی است که ذرّات 1 و 2 یِ یک یاخته



شکل 1: سه ذرّه در یاخته ی یکانی که با نشان‌های دایره، سه‌گوش، و چهارگوش نشان داده شده اند. n شماره ی یاخته را نشان می‌دهد. خطوط عمودی نقطه‌چین مکان تعادلی ذرّه‌ها را نشان می‌دهند.



شکل 2: فاصله ی تعادلی میان ذرّات یاخته.

را به هم پیوند می‌دهد (شکل (3) را ببینید).

از رابطه ی (1) معادلات حرکت برای ذرّات یاخته ی n به صورت زیر خواهند بود.

$$m_1\,\ddot{u}_{1,n} = -\frac{\partial U}{\partial u_{1,n}} = -\frac{\partial}{\partial u_{1,n}}\left\{\frac{k_3}{2}\,(u_{1,n}-u_{2,n})^2 + \frac{k_2}{2}\,(u_{3,n-1}-u_{1,n})^2\right\} \tag{2}$$

$$m_2\,\ddot{u}_{2,n} = -\frac{\partial U}{\partial u_{2,n}} = -\frac{\partial}{\partial u_{2,n}}\left\{\frac{k_3}{2}\,(u_{1,n}-u_{2,n})^2 + \frac{k_1}{2}\,(u_{2,n}-u_{3,n})^2\right\} \tag{3}$$

$$m_3\,\ddot{u}_{3,n} = -\frac{\partial U}{\partial u_{3,n}} = -\frac{\partial}{\partial u_{3,n}}\left\{\frac{k_1}{2}\,(u_{2,n}-u_{3,n})^2 + \frac{k_2}{2}\,(u_{3,n}-u_{1,n+1})^2\right\} \tag{4}$$

پس از انجام مشتق‌گیری خواهیم داشت:

$$m_1\,\ddot{u}_{1,n} = -k_3\,(u_{1,n}-u_{2,n}) + k_2\,(u_{3,n-1}-u_{1,n})\,, \tag{5}$$

$$m_2\,\ddot{u}_{2,n} = +k_3\,(u_{1,n}-u_{2,n}) - k_1\,(u_{2,n}-u_{3,n})\,, \tag{6}$$

$$m_3\,\ddot{u}_{3,n} = +k_1\,(u_{2,n}-u_{3,n}) - k_2\,(u_{3,n}-u_{1,n+1})\,. \tag{7}$$

پاسخها را به صورت زیر در نظر می‌گیریم.

$$u_{1,n} = \epsilon_1\, e^{i(q\,n\,a-\omega\,t)}, \tag{8}$$

$$u_{2,n} = \epsilon_2\, e^{i(q\,n\,a-\omega\,t)}, \tag{9}$$

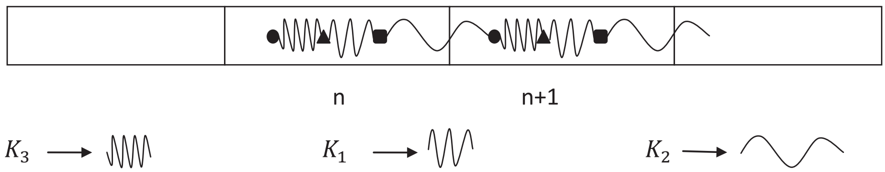
$$u_{3,n} = \epsilon_3\, e^{i(q\,n\,a-\omega\,t)}. \tag{10}$$

u_i ها موج تخت با بسامد ω و عدد موج q هستند. ϵ_i ها دامنه‌ها ی جابجایی هستند. در این نوشته شرط‌های مرزی بورن-فون کارمن را به کار برده ایم [1]. اگر این توابع را در سه معادله ی بالا جایگذاری کنیم، پس از ساده‌سازی و حذف عامل‌های مشترک، به دست می‌آوریم:

$$-m_1\,\omega^2\,\epsilon_1 = -k_3\,(\epsilon_1-\epsilon_2) + k_2\,\left(\epsilon_3\,e^{-i\,q\,a}-\epsilon_1\right), \tag{11}$$

$$-m_2\,\omega^2\,\epsilon_2 = +k_3\,(\epsilon_1-\epsilon_2) - k_1\,(\epsilon_2-\epsilon_3)\,, \tag{12}$$

$$-m_3\,\omega^2\,\epsilon_3 = k_1\,(\epsilon_2-\epsilon_3) - k_2\,\left(\epsilon_3-\epsilon_1\,e^{i\,q\,a}\right). \tag{13}$$



شکل 3: ثابت‌های نیروهای میان ذرّات یاخته.

این دستگاه را می‌توان به شکل ساده‌تر زیر نوشت،

$$\epsilon_1 \left(m_1 \omega^2 - k_3 - k_2\right) + \epsilon_2 k_3 + \epsilon_3 k_2 e^{-i q a} = 0, \tag{14}$$

$$\epsilon_1 k_3 + \epsilon_2 \left(m_2 \omega^2 - k_3 - k_1\right) + \epsilon_3 k_1 = 0, \tag{15}$$

$$\epsilon_1 k_2 e^{i q a} + \epsilon_2 k_1 + \epsilon_3 \left(m_3 \omega^2 - k_2 - k_1\right) = 0, \tag{16}$$

و سپس آن را به صورت دستگاه معادلات 3×3 همگن زیر در آورد.

$$\begin{bmatrix} m_1 \omega^2 - k_3 - k_2 & k_3 & k_2 e^{-i q a} \\ k_3 & m_2 \omega^2 - k_3 - k_1 & k_1 \\ k_2 e^{i q a} & k_1 & m_3 \omega^2 - k_2 - k_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{17}$$

شرط وجود پاسخ نابدیهی این است که دترمینان ماتریس ضرایب صفر شود.

$$P(\omega^2) := \begin{vmatrix} m_1 \omega^2 - k_3 - k_2 & k_3 & k_2 e^{-i q a} \\ k_3 & m_2 \omega^2 - k_3 - k_1 & k_1 \\ k_2 e^{i q a} & k_1 & m_3 \omega^2 - k_2 - k_1 \end{vmatrix} = 0. \tag{18}$$

با انجام کمی محاسبه به معادله ی زیر می‌رسیم.

$$P(\omega^2) = C_6 \omega^6 + C_4 \omega^4 + C_2 \omega^2 + C_0 = 0, \tag{19}$$

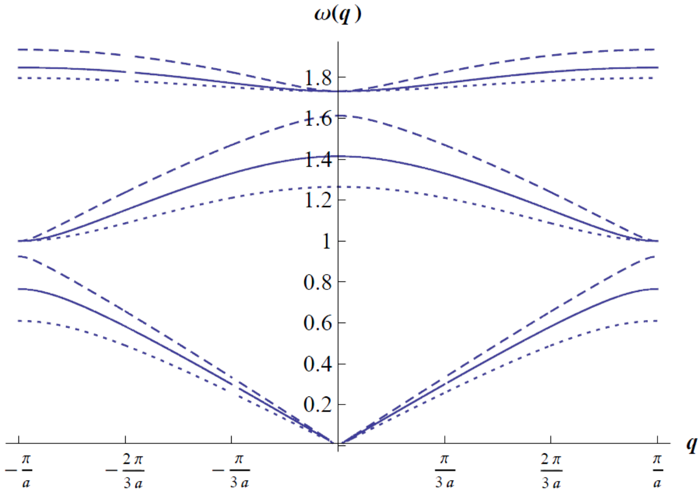
که در این جا

$$C_6 = m_1 m_2 m_3, \tag{20}$$

$$C_4 = k_1 m_1 \left(m_2 + m_3\right) + k_2 m_2 \left(m_3 + m_1\right) + k_3 m_3 \left(m_1 + m_2\right), \tag{21}$$

$$C_2 = \left(k_1 k_2 + k_2 k_3 + k_3 k_1\right)\left(m_1 + m_2 + m_3\right), \tag{22}$$

$$C_0 = -2 k_1 k_2 k_3 \left(1 - \cos q a\right). \tag{23}$$



شکل 4: رابطه ی پاشندگی فونونی برای $\alpha = 1$,$\beta = 0.3$ (dotted), 0.5 (solid), 0.8 (dashed)

۳ حل معادلات

اگر برای سادگی تمام جرم‌ها و ثابت‌فنرها را یکسان بگیریم، با تغییر متغیر $X := m\,\omega^2$ خواهیم داشت

$$X^3 - 6\,k\,X^2 + 9\,k^2\,X - 2\,k^3\,(1 - \cos qa) = 0. \tag{24}$$

این معادله برای $q = 0$، یعنی در مرکز منطقه ی بریلوئن، دو ریشه دارد

$$X = 0, \quad X = 3\,k, \tag{25}$$

پس داریم

$$\omega_1 = 0, \quad \omega_2 = \omega_3 = \sqrt{\frac{3\,k}{m}}. \tag{26}$$

معادله ی (24) برای $q = \pm\pi$، یعنی در مرز منطقه ی بریلوئن می‌شود

$$X^3 - 6\,k\,X^2 + 9\,k^2\,X - 4\,k^3 = 0. \tag{27}$$

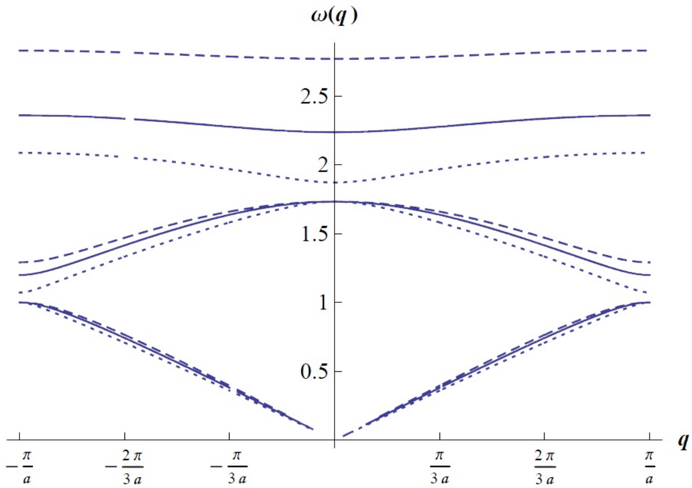
اینک به حل تحلیلی این معادله می‌پردازیم. روش حل معادله ی درجه ی سوم $x^3 + a_1\,x^2 + a_2\,x + a_3 = 0$ به صورت زیر است [3].

$$x_1 = S + T - \frac{a_1}{3}, \qquad x_2 = -\frac{1}{2}(S+T) - \frac{a_1}{3} + \frac{i\,\sqrt{3}}{2}\,(S - T), \qquad x_3 = \overline{x_2}, \tag{28}$$

که در این جا

$$S = \sqrt[3]{R + \sqrt{Q^3 + R^2}} \qquad T = \sqrt[3]{R - \sqrt{Q^3 + R^2}} \tag{29}$$

$$Q = \frac{3\,a_2 - (a_1)^2}{9} \qquad R = \frac{9\,a_1\,a_2 - 27\,a_3 - 2\,(a_1)^3}{54}. \tag{30}$$



شکل 5: رابطه ی پاشندگی فونوی برای $\beta = 1$,$\alpha = 0.3$ (dashed), 0.5 (solid), 0.8 (dotted)

با توجه به این روابط، برای (27) داریم

$$a_1 = -6\,k \qquad a_2 = 9\,k^2 \qquad a_3 = -4\,k^3 \tag{31}$$

$$Q = -k^2 \qquad R = k^3 \qquad S = K \qquad T = K \tag{32}$$

و در آخر ریشه‌های معادله ی (27) به صورت زیر خواهند بود.

$$x_1 = 4\,k \qquad x_2 = k \qquad x_3 = k. \tag{33}$$

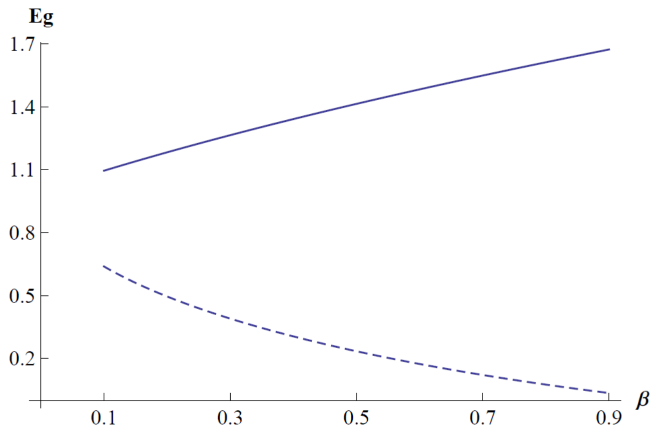
برای q یِ دلخواه پاسخ های تحلیلی دیگر ساده نیستند، و بهتر است با کامپیوتر آنها را بررسی کنیم. اینک که قرار است کامپیوتر برای ما معادله ی درجه ی سوم را حل کند، حتی می‌توانیم دیگر k_i ها و m_i ها را با هم برابر نگیریم. نخست مسئله را برای نسبت‌های گوناگون k و جرم‌های یکسان، با استفاده از نرم‌افزار Mathematica حل کرده ایم. این نسبت k ها را با دو ضریب α و β نشان می‌دهیم.

$$\alpha = \frac{k_1}{k_3} \qquad \beta = \frac{k_2}{k_1}. \tag{34}$$

شکل (4) رابطه ی پاشندگی را برای $\alpha = 1$ و چند مقدار β نشان می‌دهد.

همان گونه که در شکل‌های (4) و (5) می‌بینید، از سه مُد مسئله، دو مُد اپتیکی و یک مُد آکوستیکی است. شکل (5) رابطه ی پاشندگی را برای $\beta = 1$ و چند مقدار α نشان می‌دهد. در شکل (6) گاف انرژی (یعنی اختلاف مقدار انرژی نوار دوم و اول) در مرکز و مرز ناحیه ی بریلوئن بر حسب β کشیده شده است ($\alpha = 1$).

همان گونه که می‌بینید، گاف انرژی میان شاخه ی آکوستیکی و شاخه ی اپتیکی پایینی در مرکز ناحیه ی بریلوئن با افزایش β زیاد می‌شود. در مرز منطقه ی بریلوئن ($q = \pm\pi$) گاف انرژی میان شاخه ی آکوستیکی و شاخه اپتیکی بالایی با افزایش β کم می‌شود. در شکل (7) گاف انرژی را (برای $\beta = 1$) در مرکز و مرز ناحیه ی بریلوئن بر حسب α کشیده ایم.



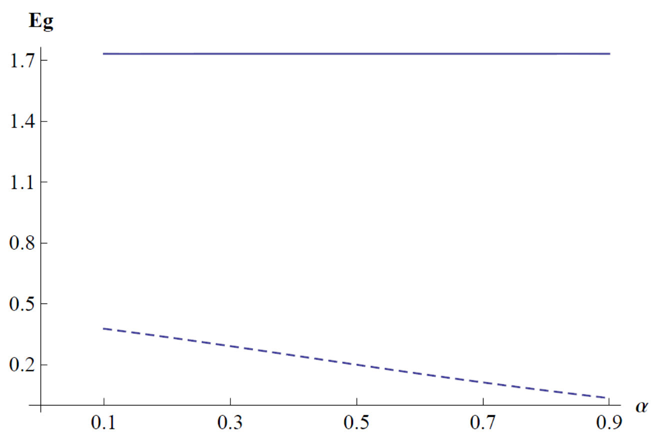
شکل 6: گاف انرژی در مرکز و مرز ناحیه ی بریلوئن بر حسب β. $q = \pm\pi$ (line), $q = 0$ (dashed)

مراجع

[1] Kittel C.; *Introduction to Solid State Physics*; John Wiley and Sons, 1996.

[2] Neil W. Ashcroft, N. W., Mermin, N. D.; *Solid State Physics*; Harcourt College Publishers ,1976.

[3] M. R. Spiegel, *Schaums Mathematical Handbook of Formulas and Tables*, McGraw Hill, 1968.



شکل 7: گاف انرژی در مرکز و مرز ناحیه ی بریلوئن بر حسب α. $q = \pm\pi$ (solid), $q = 0$ (dashed).