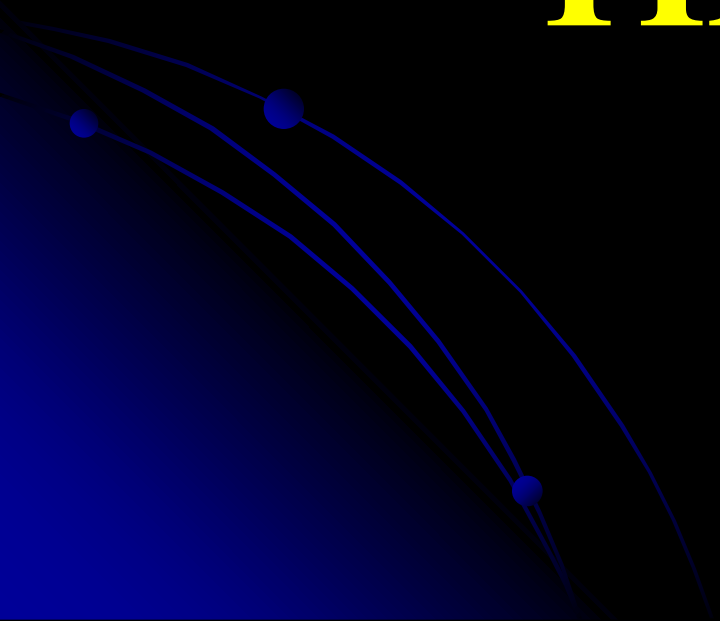


# Chương III

# DAO ĐỘNG MẠNG

# TÍNH TẾ<sup>2</sup>



# I. ĐỘNG LỰC HỌC MẠNG TINH THỂ

Những tính chất quan trọng của chất rắn đều liên quan đến **dao động mạng tinh thể**.

Trong tinh thể **các nguyên tử** này **dao động** quanh vị trí cân bằng của nó (nút mạng).

**Dao động** này được **lan truyền** trong mạng tinh thể **tạo thành sóng** trong mạng tinh thể.

Sóng này phụ thuộc vào 2 yếu tố:

- *Loại lực liên kết trong tinh thể*
- *Cấu trúc của mạng tinh thể.*

➤ Loại lực liên kết thì liên quan tới bản chất của nguyên tử tạo nên tinh thể và sự tương tác giữ chúng.

➤ Cấu trúc của tinh thể thì liên quan tới sự sắp xếp của các nguyên tử trong mạng.

Mỗi loại tinh thể cho một kiểu dao động riêng gọi là phổ phonon của nó.

Phổ phonon quyết định phần lớn các tính chất quan trọng của chất rắn như: nhiệt dung, độ dẫn nhiệt, hệ số dẫn nở nhiệt....

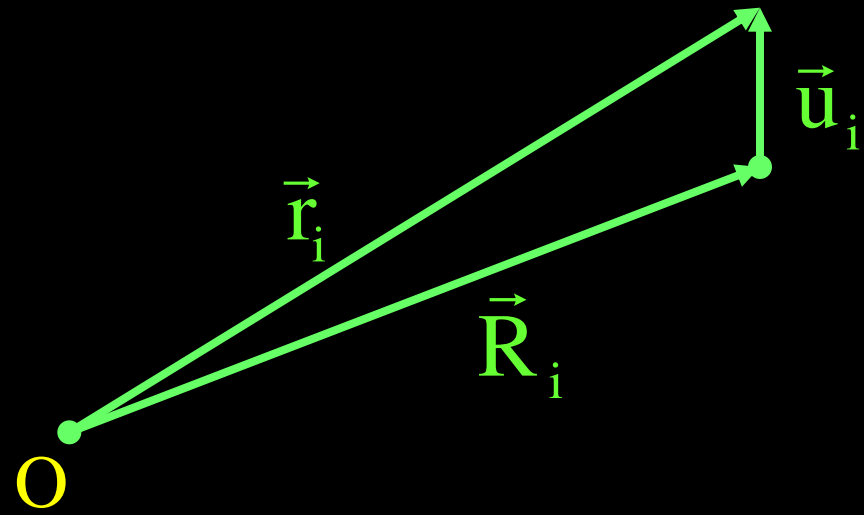
⇒ Bài toán dao động mạng tinh thể là một phần quan trọng của vật lý chất rắn.

## Xét mẫu tinh thể đơn giản nhất là argon

- Các nguyên tử argon trung hòa xếp đều đặn với các lớp vỏ điện tử bão hòa vững chắc.
- Chúng liên kết với nhau bằng liên kết Van der Waals tác dụng chủ yếu giữa các nguyên tử nằm lân cận gần nhất.
- Các quá trình vật lý trong tinh thể này liên quan tới chuyển động nhiệt của các nguyên tử quanh vị trí cân bằng của nó.
- Theo mẫu Einstein: mỗi nguyên tử trong tinh thể dao động điều hòa trong một giếng thế tạo bởi các lực tương tác của nó với các nguyên tử lân cận  $\Rightarrow$  Thế Lennard - Jones.

➤Giới hạn của mẫu là xét trong điều kiện nhiệt độ khá cao.

➤ Vị trí của nguyên tử thứ  $i$  trong mạng tinh thể được xác định bởi vectơ vị trí:



$$\vec{r}_i = \vec{R}_i + \vec{u}_i$$

$\vec{R}_i$  = véc tơ xác định vị trí của nút mạng thứ  $i$ .

$\vec{u}_i$  = độ dịch chuyển của nguyên tử thứ  $i$ .

$M_i$  = khối lượng của nguyên tử thứ  $i$ .

Động năng của mạng là:  $E_d = \sum_i \frac{1}{2} M_i \vec{u}_i'^2 = \sum_l \frac{P_l^2}{2M_l}$

Gọi  $U(\vec{u}_i)$  là thế năng của mạng tinh thể. Hàm này cực tiểu khi gốc nguyên tử nằm tại VTCTB.

$$\Rightarrow \vec{u}_i = 0$$

Khai triển hàm  $U$  thành chuỗi Taylor quanh VTCTB và coi dao động của nguyên tử là dao động bé.

$$U = U_0 + \sum_i \left[ \frac{\partial U}{\partial u_i} \right]_0 \cdot u_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left[ \frac{\partial^2 U}{\partial u_i \partial u_j} \right] u_i u_j + \dots$$

$U_0$  = thế năng của mạng tinh thể khi các nguyên tử ở nút mạng = const = chọn bằng 0.

Và:

$$\sum_i \left[ \frac{\partial U}{\partial u_i} \right]_0 \cdot u_i = 0$$

⇒ Vậy thế năng của tinh thể là thế năng dao động điều hòa dạng:

$$U_{\text{điều hòa}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left[ \frac{\partial^2 U}{\partial u_i \partial u_j} \right] u_i u_j$$

$$\Rightarrow U = U_o + U_{\text{điều hòa}} = U_{\text{điều hòa}}$$

Phương trình dao động có dạng phương trình dao động điều hòa:

$$m_i \vec{u}_i'' = - \frac{\partial U}{\partial \vec{u}_i} = \vec{F}_i$$

Hay:

$$\vec{u}_i'' = - \omega^2 \vec{u}_i$$

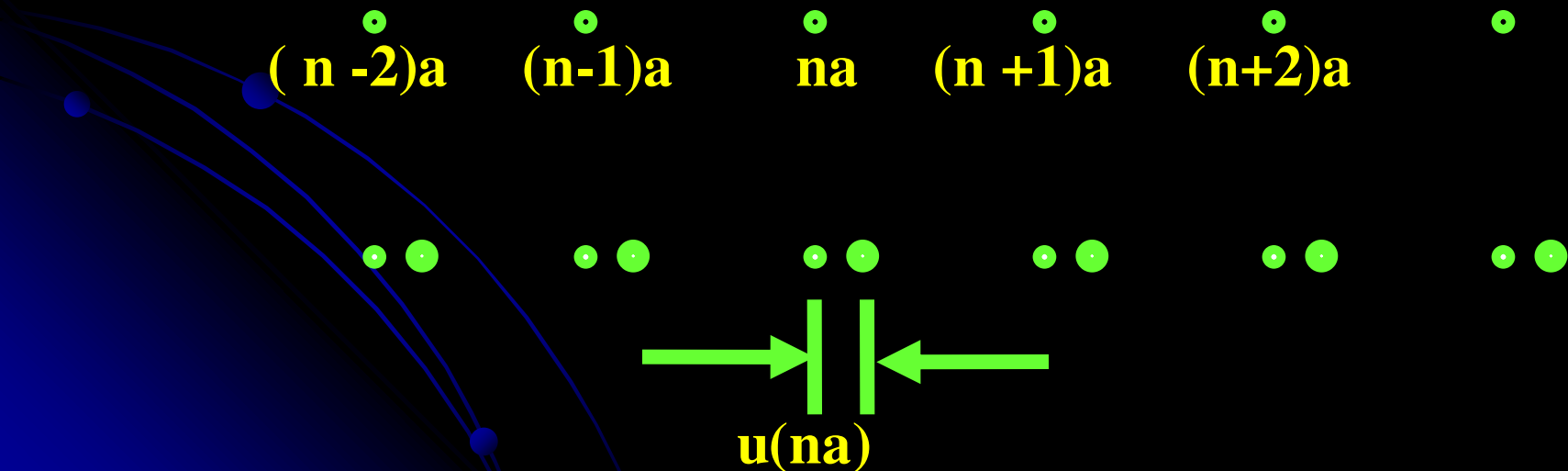
Lực tác dụng gây ra dao động của nguyên tử có dạng lực hồi phục:

$$\vec{F}_i = -\alpha \vec{u}_i \quad \alpha = \text{hằng số lực.}$$

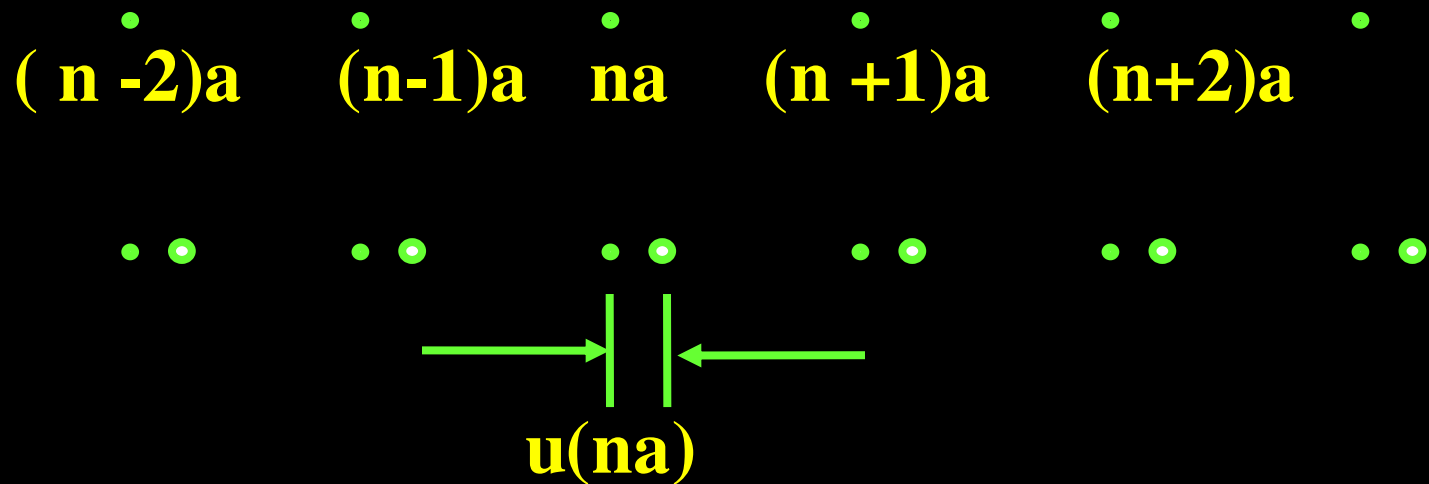
## II. DAO ĐỘNG MẠNG CỦA MẠNG MỘT CHIỀU GỒM MỘT LOẠI NGUYÊN TỬ

Xét trường hợp mạng một chiều gồm:

- Các nguyên tử cùng loại có khối lượng  $M$  nằm trên cùng một đường thẳng
- Chúng chỉ tương tác với các nguyên tử gần nhất.
- Khoảng cách giữa các nguyên tử gần nhất là  $a$ .







Xét nguyên tử thứ  $i$  ở vị trí nút  $R = na$ .

Độ dịch chuyển của nút này là  $u(na)$ .

Thế năng trong trường hợp này có dạng:

$$U = \frac{1}{2}\alpha \left\{ u(na) - u[(n+1)a] \right\}^2 + \frac{1}{2}\alpha \left\{ u(na) - u[(n-1)a] \right\}^2$$

$$\Rightarrow U = -\alpha [2u(na) - u[(n+1)a] - u[(n-1)a]] \quad (1)$$

$$\Rightarrow Mu''(na) = -\frac{\partial U}{\partial u(na)}$$

Do tính tuần hoàn mạng và coi tinh thể là một chuỗi dài vô hạn chứa N nguyên tử  $\Rightarrow$  áp dụng điều kiện biên Born- von Karman:

$$u[(N+1)a] = u(a) ; u(0) = u(Na)$$

Đặt :

$$u(na, t) = u_0 e^{i(kna - \omega t)} \quad (2)$$

$$u[(N+1)a, t] = u_0 e^{i[k(N+1)a - \omega t]} ; u(a, t) = u_0 e^{i(ka - \omega t)}$$

Điều kiện biên dẫn tới:

$$e^{ikNa} = 1 \Rightarrow k = \frac{2\pi}{a} \frac{n}{N} ; \text{ Với } n \in \mathbb{N}$$

Từ (1) và (2) ta suy ra được:

$$\begin{aligned} M\omega^2 e^{i(kna - \omega t)} &= -\alpha [ 2 - e^{-ika} - e^{ika} ] e^{i(kna - \omega t)} \\ &= -2\alpha (1 - \cos ka) e^{i(kna - \omega t)} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \ddot{u}_k = -2\frac{\alpha}{M} (1 - \cos ka) u_k = -\omega^2 u_k$$

Trong đó:

$$\omega^2 = 2\frac{\alpha}{M}(1 - \cos ka) = 4\frac{\alpha}{M} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$\Rightarrow \omega(k) = 2\sqrt{\frac{\alpha}{M}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

# NHẬN XÉT

Điều kiện phải thỏa của  $\omega > 0$  và hàm sin là hàm tuần hoàn có chu kỳ  $2\pi$ .

Vậy các dao động mạng đều nhận được khi:

$$-1 \leq \sin \frac{ka}{2} \leq 1$$

$$\Rightarrow -\frac{\pi}{2} \leq \frac{ka}{2} \leq \frac{\pi}{2}$$

$$\Rightarrow -\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a} \Rightarrow \text{Vùng Brillouin}$$

Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của  $\omega$  theo  $k$  gọi là ***đường cong tán sắc***.

➤ Tần số góc  $\omega(\mathbf{k})$  là một hàm tuần hoàn theo  $\mathbf{k}$ .

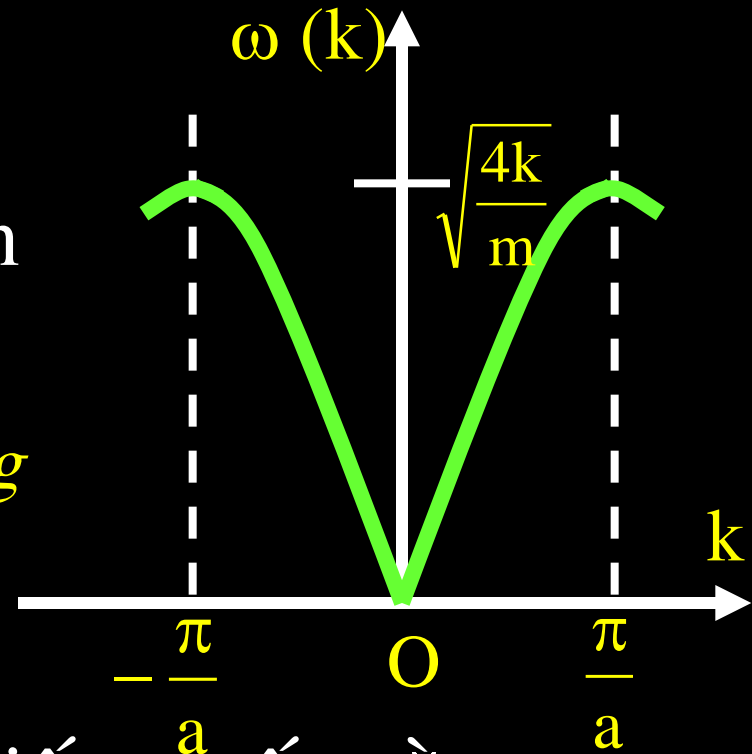
Bất kì 1 giá trị nào của vectơ sóng  $\vec{\mathbf{k}}$  nằm ngoài vùng Brillouin đều có thể tìm thấy một giá trị của  $\omega$  trùng trong vùng Brillouin.

⇒ *Vì vậy chỉ cần khảo sát trong vùng Brillouin.*

➤ Khi  $ka \ll 1$  thì:

$\omega \approx \sqrt{\frac{\alpha}{m}} ka \Rightarrow \omega(k)$  tỉ lệ tuyến tính với  $k$

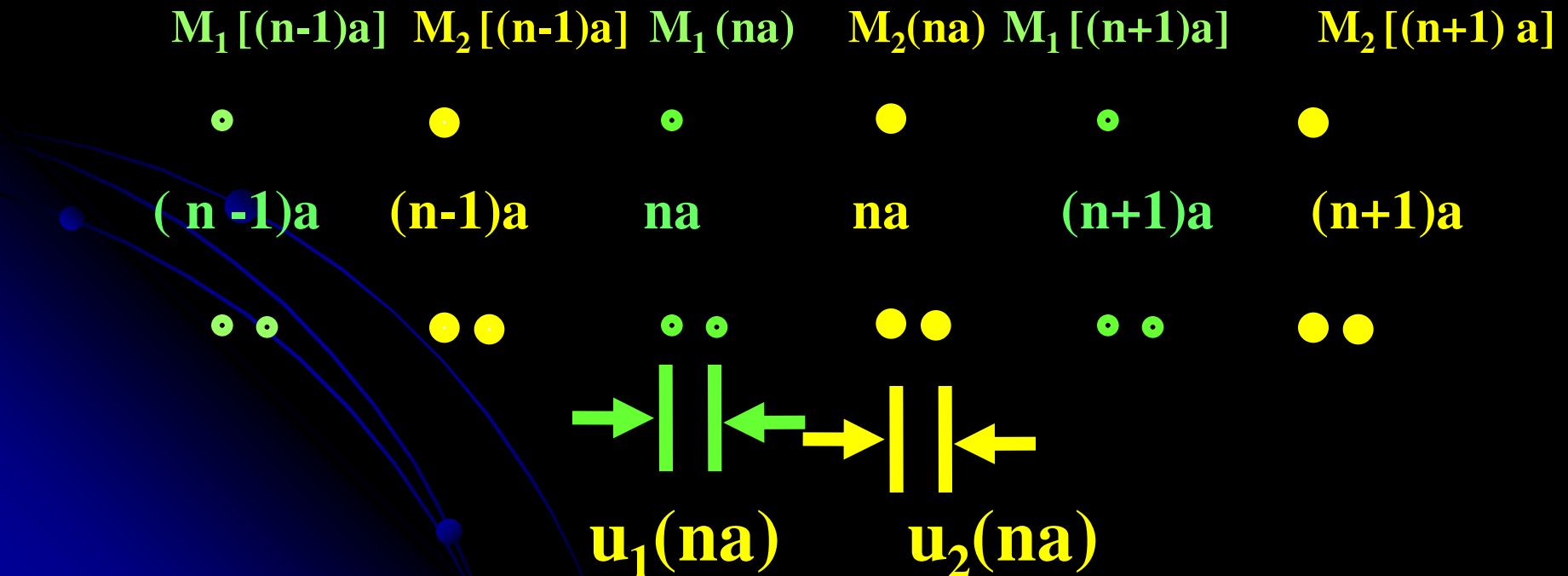
⇒  $\omega(k) \sim k \Rightarrow$  sóng đàn hồi trong môi trường liên tục ⇒ *Nhánh âm*



➤ Khi  $k = \frac{\pi}{a}$  thì: hàm  $\omega(k)$  có tiếp tuyến nằm ngang  
⇒  $\omega(k)$  không còn tuyến tính với  $k \Rightarrow$  *Sự tán sắc*

### III. DAO ĐỘNG MẠNG CỦA MẠNG MỘT CHIỀU GỒM HAI LOẠI NGUYÊN TỬ

Xét trường hợp mạng một chiều, trong đó chứa 2 loại nguyên tử **khối lượng**  $M_1$  và  $M_2$  có hằng số lực  $\alpha$  bằng nhau. Coi các nguyên tử chỉ tương tác với các nguyên tử gần nhất. Khoảng cách giữa các nguyên tử gần nhất là  $a$ .



## ➤ Đối với nguyên tử thứ nhất:

Thế năng trong trường hợp này có dạng:

$$U = \frac{1}{2} \alpha [u_1(na) - u_2(na)]^2 + \frac{1}{2} \alpha \{ [u_1(na) - u_2[(n-1)a]] \}^2$$

Trong đó:

$$u_1(na) = u_{01} e^{i(kna - \omega t)}$$
$$u_2(na) = u_{02} e^{i(kna - \omega t)}$$

Phương trình dao động có dạng:

$$M_1 \ddot{u}_1 = - \frac{\partial U}{\partial u_1}$$
$$\Rightarrow M_1 \ddot{u}_1 = M_1 \omega^2 u_1 = -2\alpha \cdot u_1 + 2\alpha \cos ka \cdot u_2$$
$$\Rightarrow (2\alpha - M_1 \omega^2) u_1 - 2\alpha \cos ka u_2 = 0 \quad (1)$$

➤ *Đối với nguyên tử thứ hai:*

Thế năng trong trường hợp này có dạng:

$$U = \frac{1}{2} \alpha [u_2(na) - u_1(na)]^2 + \frac{1}{2} \alpha \{ [u_2(na) - u_1[(n+1)a]] \}^2$$

$$M_2 \ddot{u}_2 = - \frac{\partial U}{\partial u_2}$$

$$\Rightarrow M_2 \ddot{u}_2 = M_2 \omega^2 u_2 = -2\alpha \cdot u_2 + 2\alpha \cos ka \cdot u_1$$

$$-2\alpha \cos ka \cdot u_1 + (2\alpha - M_2 \omega^2) u_2 = 0 \quad (2)$$

Để tìm  $\omega$  ta giải hệ phương trình (1) và (2):

$$\begin{cases} (2\alpha - M_1 \omega^2) u_1 - 2\alpha \cos ka \cdot u_2 = 0 \\ -2\alpha \cos ka \cdot u_1 + (2\alpha - M_2 \omega^2) u_2 = 0 \end{cases}$$



$\Rightarrow$  giải phương trình định thức:

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - M_1\omega^2 & -2\alpha \cos ka \\ -2\alpha \cos ka & 2\alpha - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

Phương trình có nghiệm:

$$\omega^2 = \alpha \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{M_1 M_2}}$$

- Khi  $k = 0$ :  $\sin ka = 0$ :  $\omega^{+2} = 2\alpha \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)$ ;  $\omega^- = 0$
- Khi  $k = \frac{\pi}{2a}$ :  $\sin ka = 1$ :  $\omega^{+2} = \frac{2\alpha}{M_1}$ ;  $\omega^{-2} = \frac{2\alpha}{M_2}$

# NHẬN XÉT

Đồ thị của  $\omega^+$  và  $\omega^-$  cho thấy:

+ Đối với nghiệm  $\omega^-$ :

➤  $k \approx 0$ :  $\omega^-(k) \sim k \Rightarrow$  dao động âm học (vì nó tương tự như dao động sóng dài trong môi trường liên tục đàn hồi)

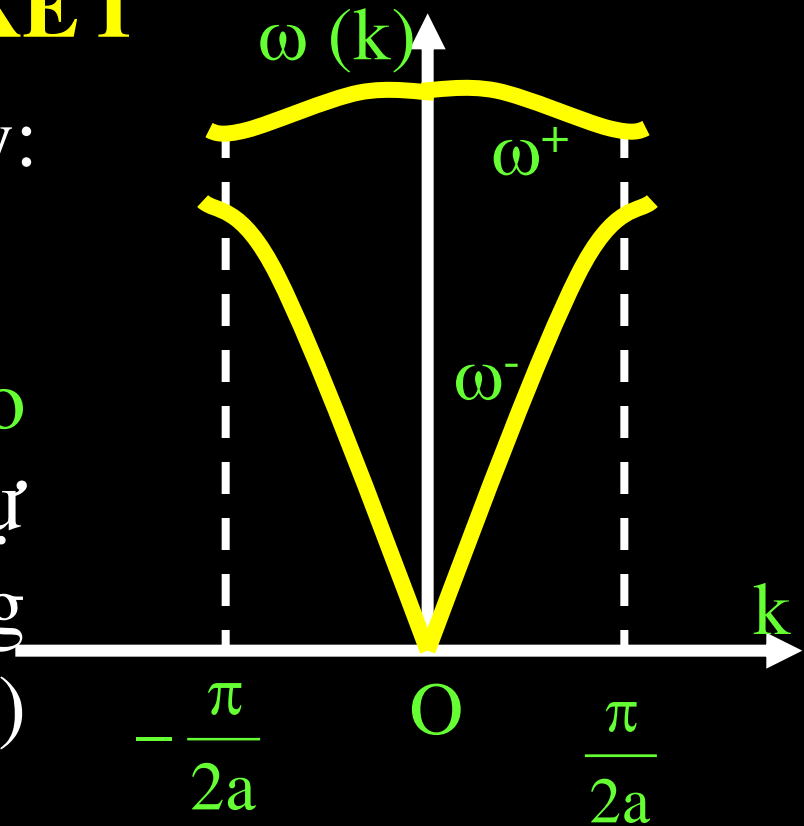
$\Rightarrow$  **Nhánh âm**

+ Đối với nghiệm  $\omega^+$ :

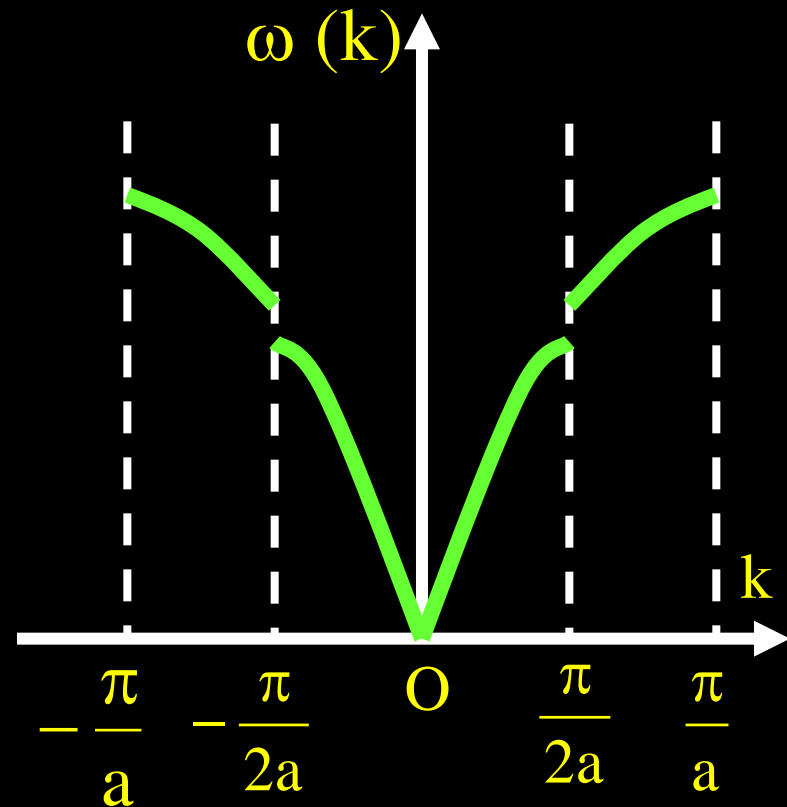
Khi  $k \approx 0$ : nhánh  $\omega^+$  nằm xa nhánh  $\omega^-$

Khi  $k$  tăng: nhánh  $\omega^+$  tiến gần nhánh  $\omega^-$

$\Rightarrow$  dao động quang học  $\Rightarrow$  **Nhánh quang**



- Nếu thay đổi khối lượng nguyên tử sẽ làm xuất hiện các biên mới của vùng tại điểm  $\pm \frac{\pi}{2a}$
- Khi qua các biên này tần số thay đổi một cách gián đoạn tạo thành một khe .
- Tương tự nếu xét mạng dao động một chiều gồm 3 nguyên tử:  
 $M_1 \neq M_2 \neq M_3$  thì ta sẽ có 3 nhánh dao động:



*1 nhánh âm học và 2 nhánh quang học.*

# TỔNG QUÁT

➤ Trường hợp **mạng một chiều** có  $n$  nguyên tử khác loại sẽ có  $n$  nhánh dao động mạng, trong đó:

*1 nhánh âm học và  $(n-1)$  nhánh quang học*

➤ Trường hợp **mạng 3 chiều** có 1 loại nguyên tử, dao động mạng sẽ có 3 nhánh âm, trong đó:

*1 nhánh âm dọc và 2 nhánh âm ngang*

➤ Trường hợp **mạng ba chiều** có  $n$  nguyên tử khác loại sẽ có  $3n$  nhánh dao động mạng, trong đó:

*3 nhánh âm học và  $3(n-1)$  nhánh quang học*

# IV. CÁC PHÔNÔN

Tính chất của Trường điện từ

+ Tính chất sóng: sóng điện từ đặc trưng bởi bước sóng  $\lambda$

+ Tính chất hạt: các lượng tử = photon

Mỗi photon sẽ mang một năng lượng và một động lượng xác định:

$$\varepsilon = \frac{hc}{\lambda} = \hbar\omega, \quad \vec{P} = \hbar\vec{k}$$

Trong đó:

$\omega$  = tần số góc

$\vec{k}$  = véc tơ sóng của sóng điện từ.

Tương tự, ta có thể coi mạng tinh thể dao động ngoài tính chất sóng nó còn có tính chất hạt, những hạt đó gọi là phonon.

Mỗi phonon sẽ mang một năng lượng và một xung lượng:

$$\varepsilon(\vec{q}) = \frac{hc}{\lambda} = \hbar\omega(\vec{q}), \vec{P} = \hbar\vec{q}$$

Trong đó  $\omega$  = tần số góc

$\vec{q}$  = véc tơ sóng của sóng dao động mạng.

Trong phép gần đúng dao động điều hòa, các phonon coi như chuyển động tự do tạo thành khí phonon lý tưởng.

Trong mạng tinh thể có thể có nhiều phonon ở cùng một trạng thái lượng tử ( cùng  $\vec{q}$  ).

Khí phonon tuân theo **phân bố Bose – Einstein**, tức là số phonon trung bình có năng lượng trung bình (  $\hbar\omega$  ) ở điều kiện cân bằng nhiệt ở nhiệt độ T là:

Năng lượng của dao động mạng  
là tổng năng lượng của các  
phonon:

$$E = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega(\vec{q})n(\vec{q})$$

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega(\vec{q})}{k_B T}} - 1}$$

Với  $n(\vec{q})$  = số phonon có véctơ sóng  
và năng lượng  $\hbar\omega(\vec{q})$ .

Khác với các electron và nguyên tử là các phonon không tồn tại ngoài tinh thể mà **liên hệ chặt chẽ** với cấu trúc tinh thể.