

## *Bài 3*

**Đạo động mạng tính thể**

# 1. Dao động của chuỗi nguyên tử

Trong tinh thể các nguyên tử dao động quanh các nút mạng trong không gian 3 chiều.

Bài toán của một hệ hạt có tương tác với nhau và dao động với biên độ nhỏ quanh vị trí cân bằng là một trong những bài toán điển hình của Cơ học cổ điển.

Để thấy một số tính chất quan trọng của các dao động đó ta bắt đầu từ một chuỗi thẳng của các nguyên tử.

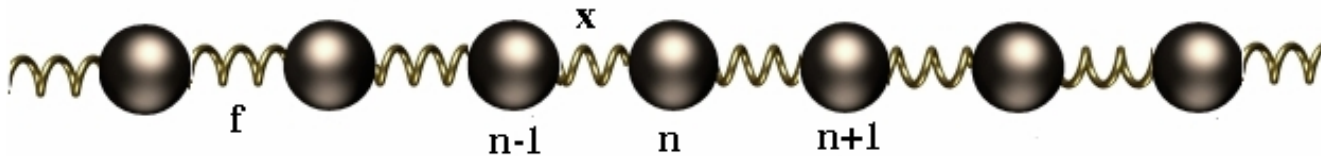
**a. Chuỗi thẳng dài vô hạn của các nguyên tử  
có cùng khối lượng m**

$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = -f[(x_n - x_{n-1}) - (x_{n+1} - x_n)]$$

$x_n$  là độ lệch khỏi vị trí cân bằng của nguyên tử thứ n  
f là hằng số lực đàn hồi tương tác giữa 2 nguyên tử.

Nghiệm có dạng  $x_n = A \exp i (\omega t + qna)$

q - số sóng



Thay nghiệm vào phương trình chuyển động được

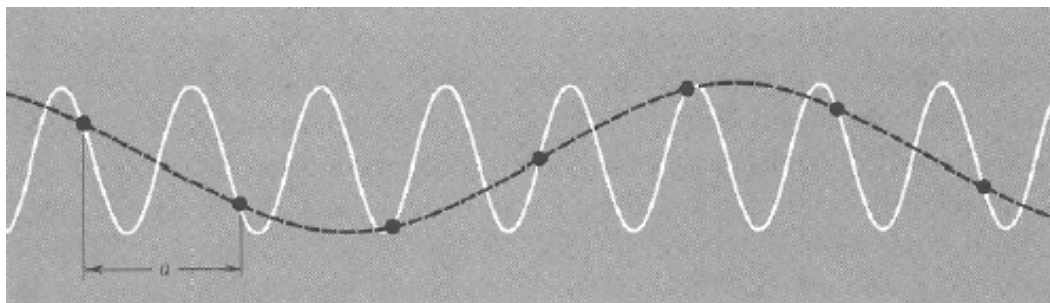
$$\omega = \pm 2\sqrt{\frac{f}{m}} \sin\left(\frac{1}{2}qa\right)$$

cho thấy sự phụ thuộc của tần số dao động  $\omega$  vào số sóng  $q$  :

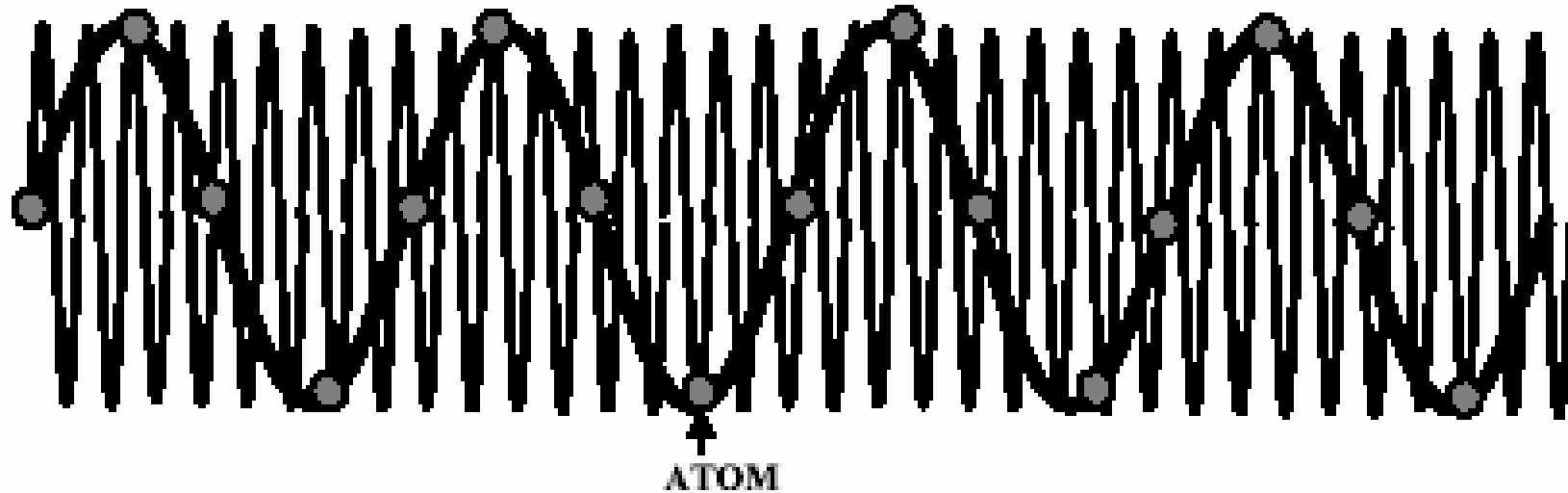
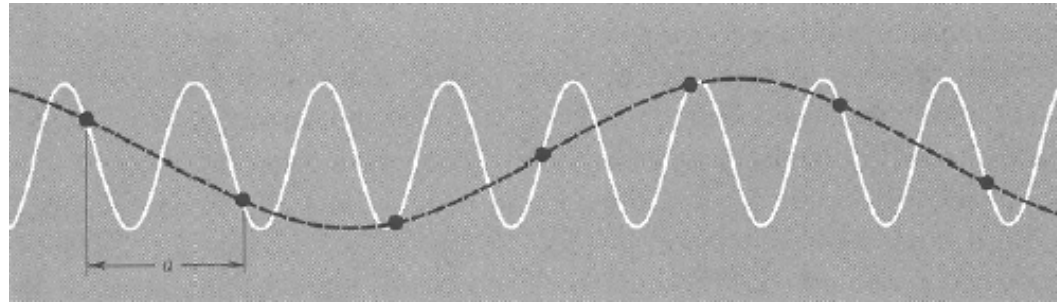
$\omega$  là hàm tuần hoàn của  $q$  với chu kỳ  $\frac{2\pi}{a}$

→ chỉ cần xét  $q$  trong khoảng  $-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}$

Vùng Brillouin thứ nhất một chiều



→ Chỉ cần các bước sóng lớn hơn  $2a$  .



Ở hình trên ,  $q = \pi/a$  tương ứng với  $\lambda=2a$ .  $q > \pi/a$  không có ý nghĩa vật lý vì không có nguyên tử dao động giữa một chu kỳ. Như vậy vectơ sóng được phép cho dao động mạng nằm trong vùng Brillouin thứ nhất ( $|q| < \pi/a$  ).

Do đó tất cả có  $N$  giá trị được phép của vectơ sóng ( và bước sóng ) nằm trong khoảng  $-\pi/a < q < \pi/a$ . Mỗi giá trị đó tương ứng với một mode dao động của mạng. Mode đó được gọi là **mode chuẩn**

**Vận tốc pha** của sóng trong chuỗi :  
 ( vận tốc truyền của các mặt đẳng pha )  $v_p = \frac{\omega}{q} = a \sqrt{\left(\frac{f}{m}\right)} \left| \frac{\sin \frac{qa}{2}}{\frac{qa}{2}} \right|$

■ Với  $q$  nhỏ ( bước sóng dài ) vận tốc pha  $v_p = a(f/m)^{1/2}$  không đổi và bằng vận tốc truyền âm trong tinh thể (  $\sim 3.10^5$  cm/s ).

■ Khi  $q$  tăng, vận tốc giảm : hiện tượng tán sắc. Sự tán sắc là do sự ảnh hưởng lẫn nhau giữa các phần nén và dãn của sóng. Với các bước sóng ngắn các phần đó rất gần nhau.

■ Khi  $\lambda$  giảm đến  $2a$  các phần nén và dãn bù trừ lẫn nhau làm sóng biến mất --> vận tốc bằng 0.

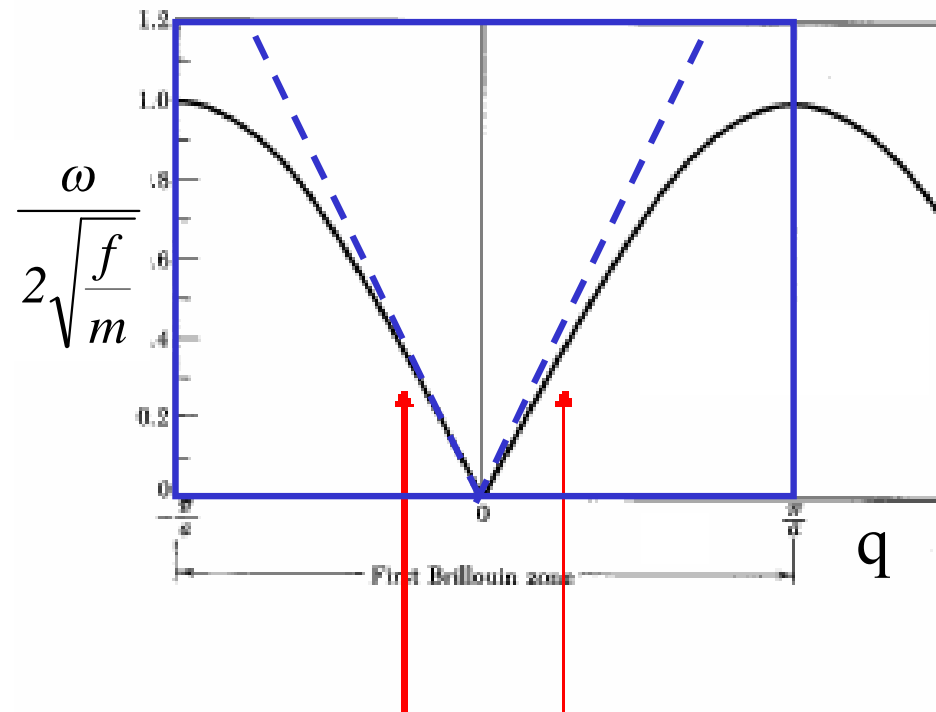
Vận tốc truyền năng lượng - **vận tốc nhóm**:  $v_{nhóm} = \frac{d\omega}{dq} = a \sqrt{\frac{f}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right|$

Ở các biên  $q = \pi/2$  ,  $v_{nhóm} = 0$  : không truyền năng lượng



$$\omega = \pm 2\sqrt{\frac{f}{m}} \sin\left(\frac{1}{2}qa\right)$$

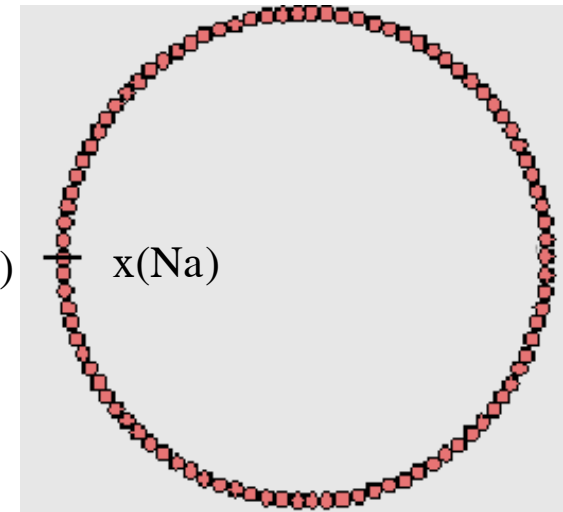
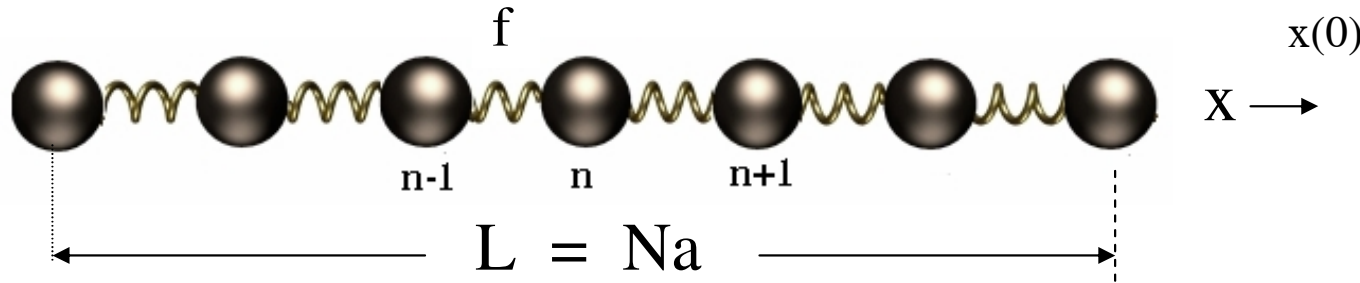
Với  $q$  nhỏ



Có sự phụ thuộc tuyến tính trong miền này



**b. Chuỗi thẳng dài L hữu hạn gồm N nguyên tử có cùng khối lượng m**



Điều kiện biên tuần hoàn :  $x_n = x_{n+N}$

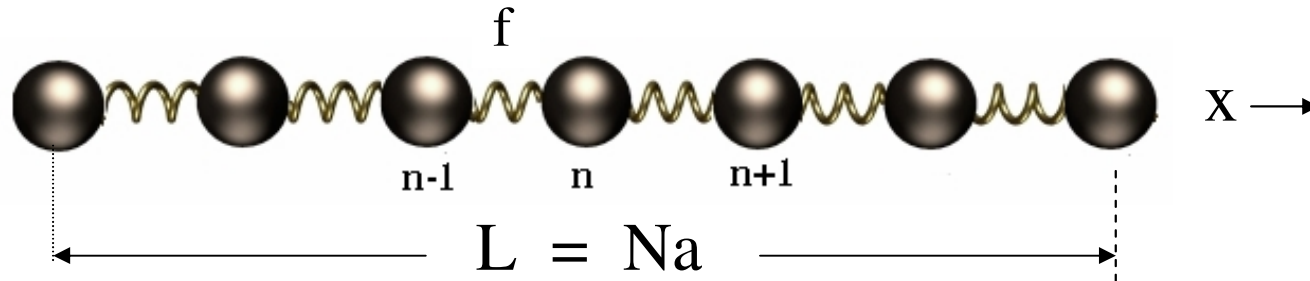
Điều kiện biên tuần hoàn  
Born von Karman

Từ  $x_n = A \exp i ( \omega t + qna )$

$$\exp inqa = \exp i(n+N)qa \longrightarrow \exp iNqa = 1 = \exp i2\pi j$$

$$Nqa = 2\pi j \longrightarrow q = \frac{2\pi}{na} j$$

$j$  là các số nguyên dương hoặc âm.

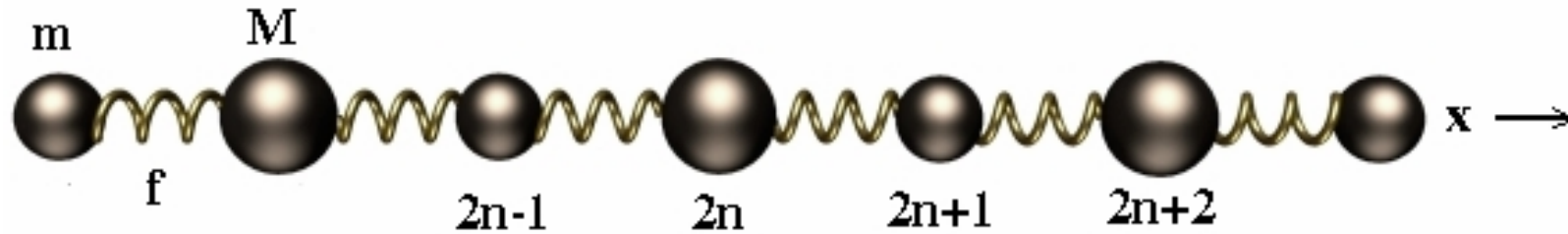


Điều kiện biên tuần hoàn :  $x_n = x_{n+N}$

Các giá trị gián đoạn của  $q$  xác định  $N$  dao động riêng của chuỗi. Nghiệm tổng quát thu được từ sự tổ hợp tuyến tính của tất cả các nghiệm riêng

$$x_n = \sum_s A_s \exp i(\omega_s t + \frac{2\pi n}{N} j)$$

### c. Chuỗi thẳng gồm 2 loại nguyên tử có khối lượng $m$ và $M$



$$m \frac{d^2 x_{2n+1}}{dt^2} = -f[(x_{2n+1} - x_{2n}) - (x_{2n+2} - x_{2n+1})]$$

$$M \frac{d^2 x_{2n}}{dt^2} = -f[(x_{2n} - x_{2n-1}) - (x_{2n+1} - x_{2n})]$$

Nghiệm của chúng có dạng

$$x_{2n+1} = A_m \exp i [\omega t + (2n+1)qa]$$

$$x_{2n} = A_M \exp i [\omega t + (2n)qa]$$

Thay các nghiệm này vào phương trình chuyển động tương ứng được 2 phương trình để xác định các biên độ  $A_m$  và  $A_M$ .

Từ điều kiện để cho nghiệm của hệ 2 phương trình không tầm thường, định thức của các hệ số  $A_m$  và  $A_M$  phải bằng 0.

Từ đó

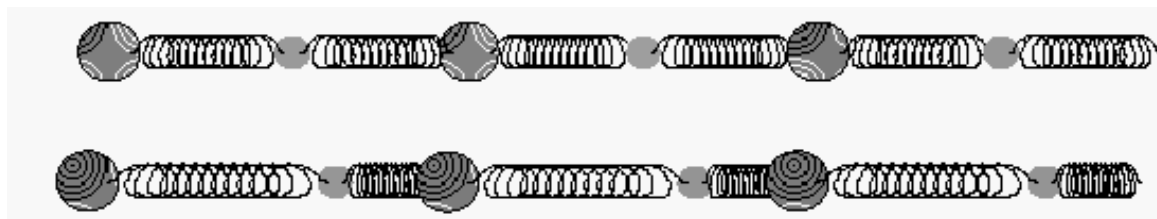
$$\omega^2 = f \left\{ \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \left[ \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \frac{qa}{2}}{mM} \right]^{1/2} \right\}$$

Như vậy với cùng một số sóng  $q$  có 2 tần số khác nhau  $\omega_-$  và  $\omega_+$  tùy theo việc lấy dấu trừ hay dấu + trong biểu thức của  $\omega$ .

--> nếu biểu diễn  $\omega$  theo  $q$  được 2 nhánh tần số :

\* nhánh âm :  $\omega_-(q)$

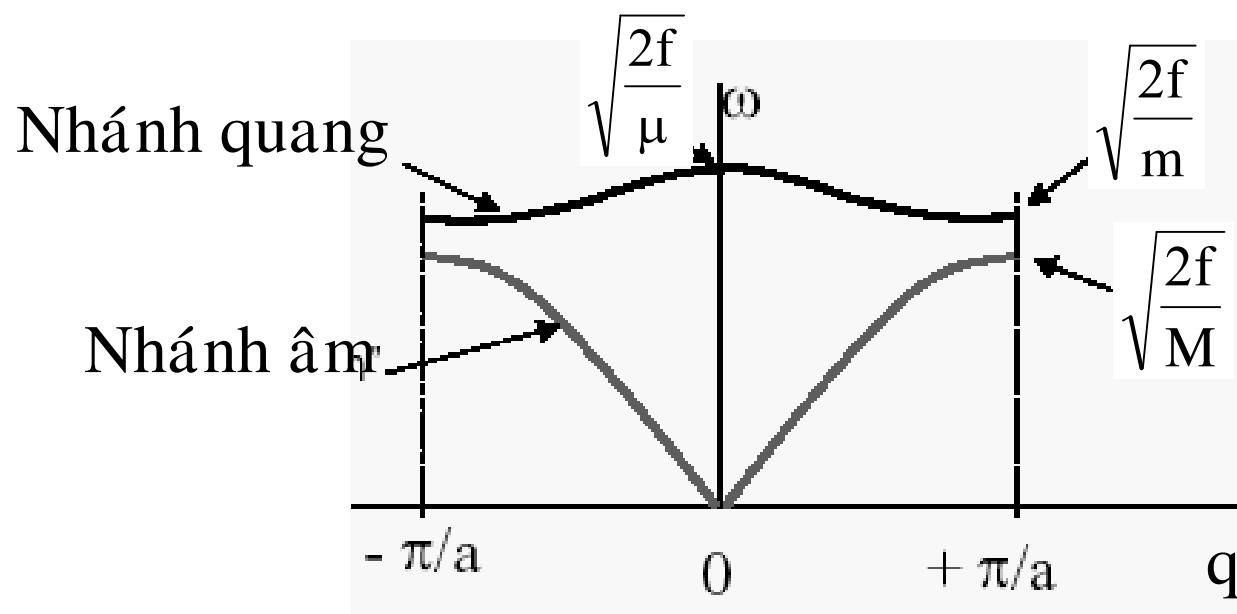
\* nhánh quang :  $\omega_+(q)$



Chuỗi nguyên tử

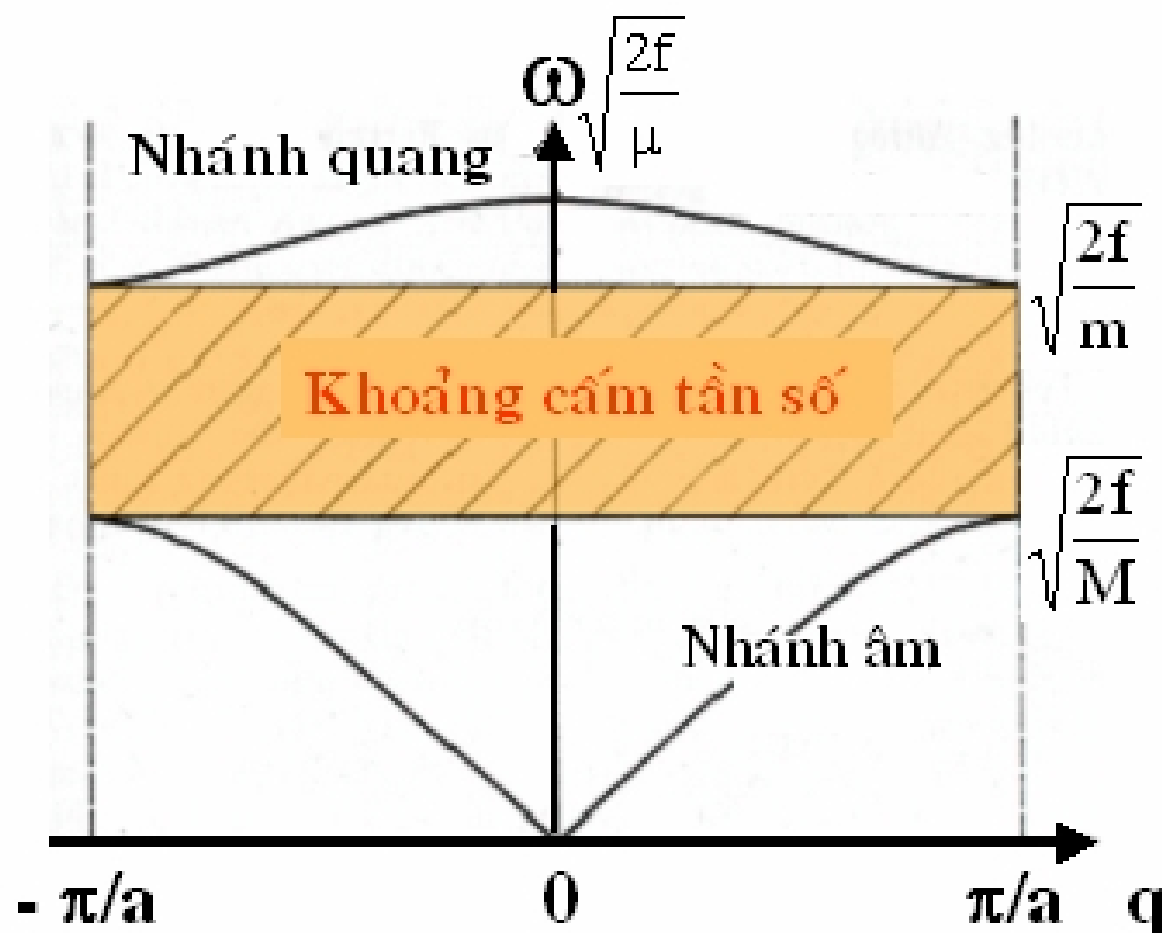
Dao động quang

$$\omega^2 = f \left\{ \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \left[ \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \frac{qa}{2}}{mM} \right]^{1/2} \right\}$$



$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}$$

$$\omega^2 = f \left\{ \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \left[ \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \frac{qa}{2}}{mM} \right]^{1/2} \right\}$$



$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}$$

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \pm \left[\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2 \frac{qa}{2}}{mM}\right]^{1/2}$$

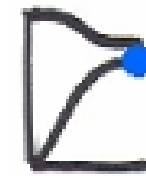
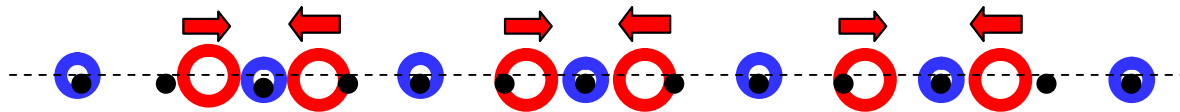
$$\omega^2 = \frac{f}{mM} [(m + M) \pm \sqrt{(m + M)^2 - 2mM(1 - \cos qa)}]$$

Xét các trường hợp giới hạn sau :

1.  $q = \pi / a$  : có 2 nghiệm

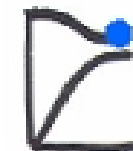
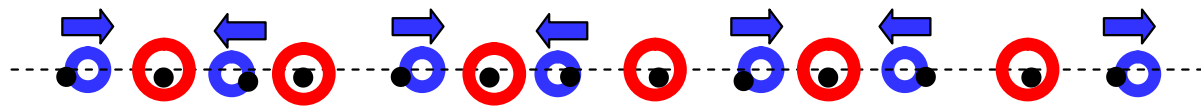
$$\omega_-^2 = \frac{2f}{M}$$

$$\omega_+^2 = \frac{2f}{m}$$



$$q = \pi/a$$

Tần số thấp : nguyên tử nhẹ đứng yên, nguyên tử nặng dao động



$$q = \pi/a$$

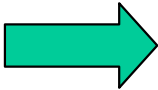
Tần số thấp : nguyên tử nhẹ dao động , nguyên tử nặng đứng yên

**2. Với  $q$  nhỏ,**  $\rightarrow$  hiệu pha nhỏ : các ô lân cận dao động gần như nhau

$$\omega^2 = \frac{f}{mM} [(m + M) \pm \sqrt{(m + M)^2 - 2mM(1 - \cos qa)}]$$

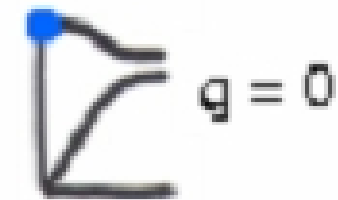
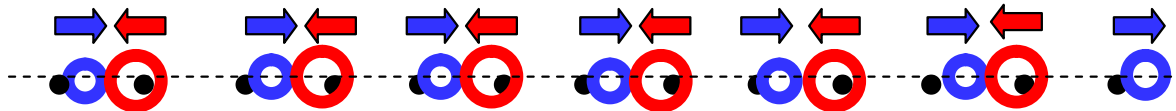
Khi  $qa \ll 1 \rightarrow \cos qa \sim 1 - q^2 a^2 / 2$

$$\omega^2 = \frac{f(m + M)}{mM} \left[ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{2mM}{(m + M)^2} \frac{(qa)^2}{2}} \right]$$

  $\omega^2 = \frac{f(m + M)}{mM} \left\{ 1 \pm \left[ 1 - \frac{mM}{(m + M)^2} \frac{(qa)^2}{2} \right] \right\}$

Cũng có 2 nghiệm :

**Nghiệm 1 :** dấu + , bỏ qua số hạng  $q^2 a^2$



Các nguyên tử trong cùng ô ngược pha nhưng các ô lân cận thì đồng pha

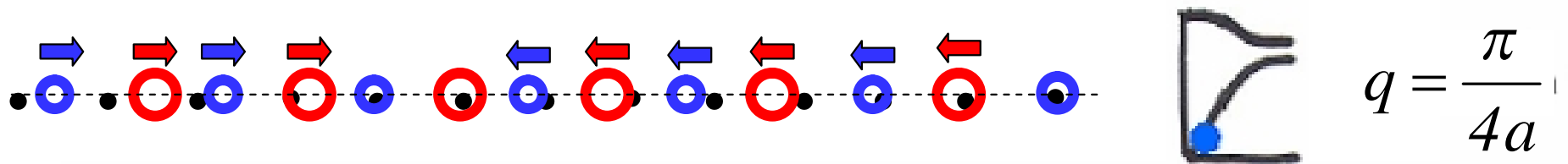


**Nghiệm 2** : dấu - ,  $qa$  nhỏ  $\rightarrow$  bỏ qua số hạng  $q^2a^2$

$$\omega^2 = \frac{f(m+M)}{mM} \left\{ 1 - \left[ 1 - \frac{mM}{(m+M)^2} \frac{(qa)^2}{2} \right] \right\}$$

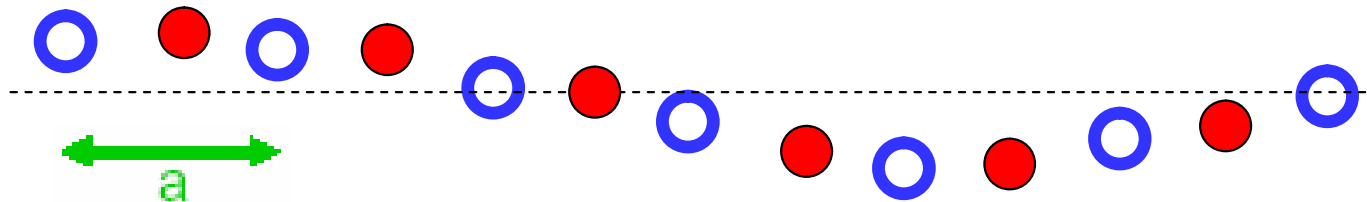
$$\omega^2 = \frac{q^2a^2}{2} \frac{f}{m+M} \quad \rightarrow \quad \omega = qa \sqrt{\frac{f}{2(m+M)}}$$

Nghiệm tần số thấp có độ dốc không đổi với  $qa$  nhỏ

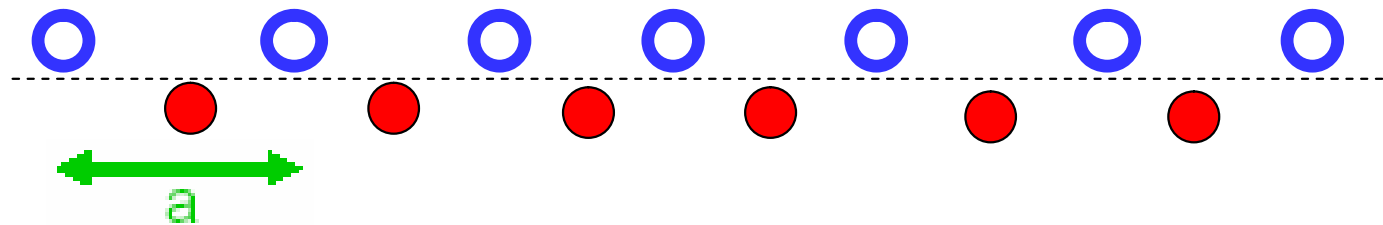


Các nguyên tử trong ô đơn vị chuyển động đồng pha, các ô lân cận cũng đồng pha

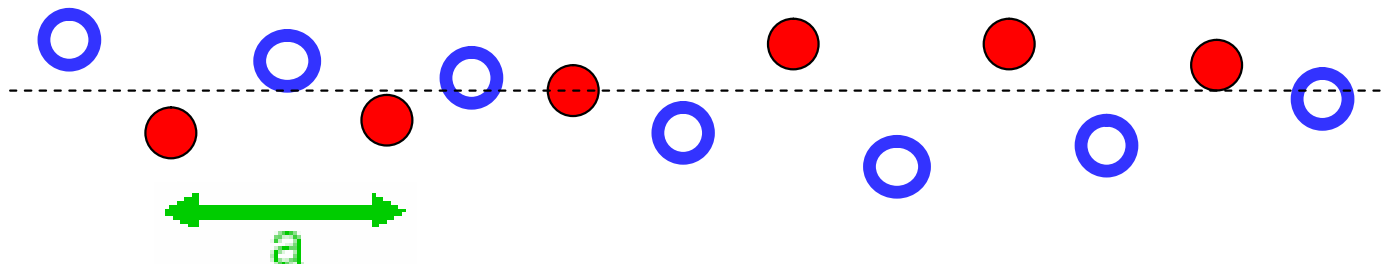
Nhánh âm ngang với  $q$  nhỏ



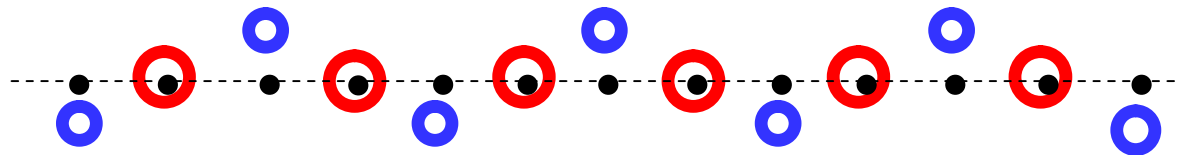
Nhánh quang ngang với  $q = 0$



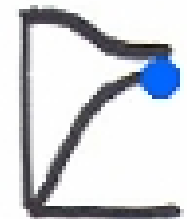
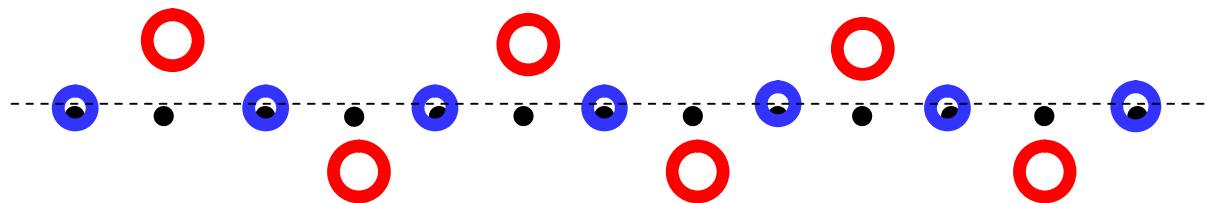
Nhánh quang ngang với  $q$  nhỏ



Nhánh quang ngang với  $q = \pi/a$  ( ○ nhẹ ○ nặng )



Nhánh âm ngang với  $q = \pi/a$



Nếu 2 loại nguyên tử có điện tích trái dấu, các sóng đó là sóng phân cực

Các hạt dao động đồng pha với biên độ bằng nhau có tần số thuộc nhánh âm với  $q$  nhỏ. Trong trường hợp này ô mạng dịch chuyển như một toàn bộ. Do đó xuất hiện các chỗ nén và giãn trong tinh thể tương tự như sự nén và giãn của tinh thể khi có sóng âm truyền qua. Vì vậy dao động trong đó cả 2 nguyên tử trong ô đơn vị chuyển động đồng pha được gọi là **dao động “ âm ”**.

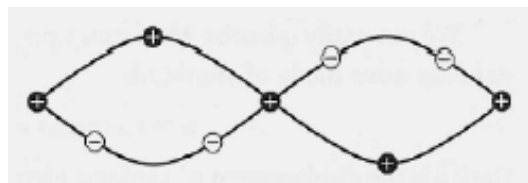
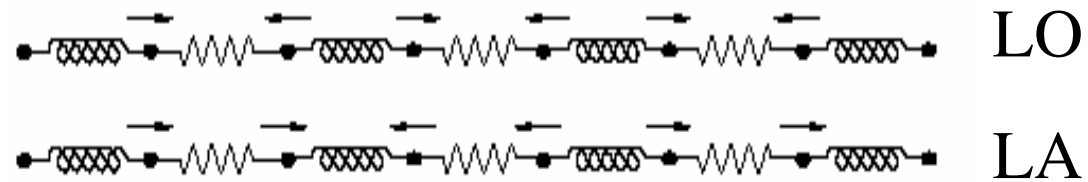
Nhánh quang ứng với trường hợp 2 nguyên tử trong ô dao động ngược pha nhau. Biên độ dao động tỷ lệ ngược với khối lượng của hạt. Trọng tâm của ô đơn vị không đổi. Nếu 2 loại nguyên tử mang điện tích trái dấu thì trong ô xuất hiện mômen lưỡng cực điện nhờ đó có thể tương tác mạnh với sóng điện từ --> loại **dao động “ quang ”**



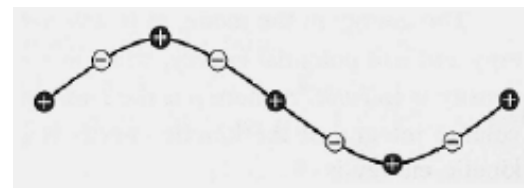
A



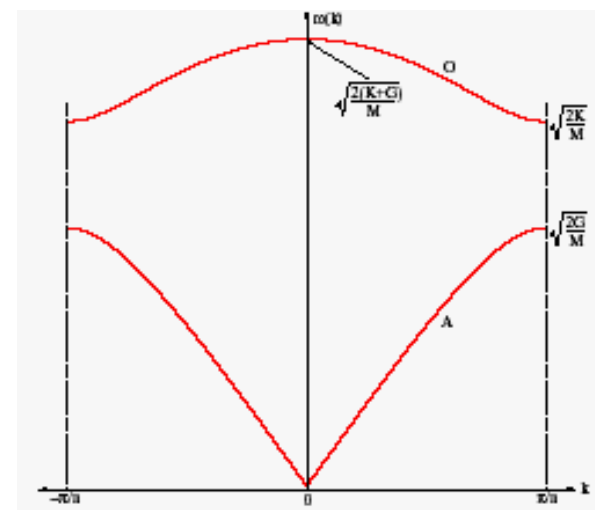
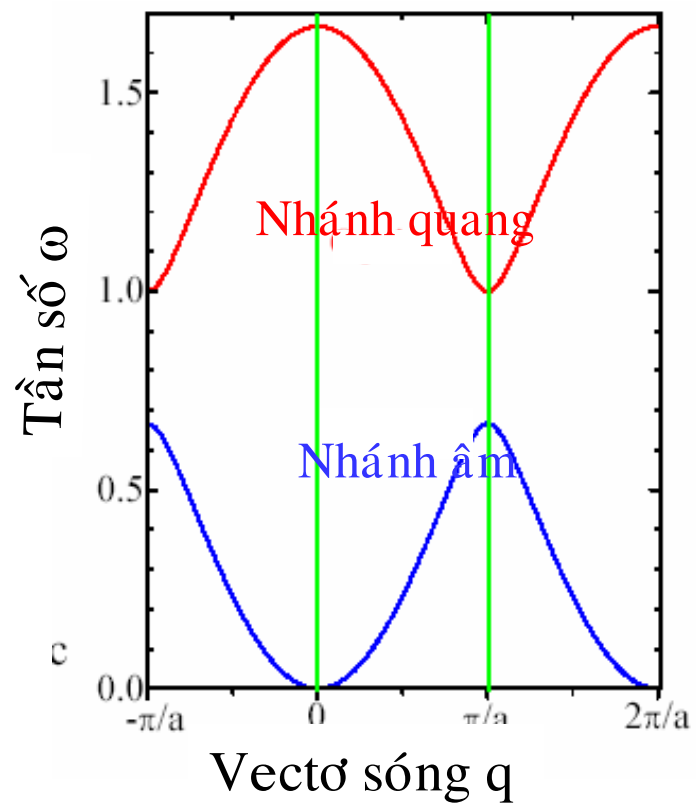
O

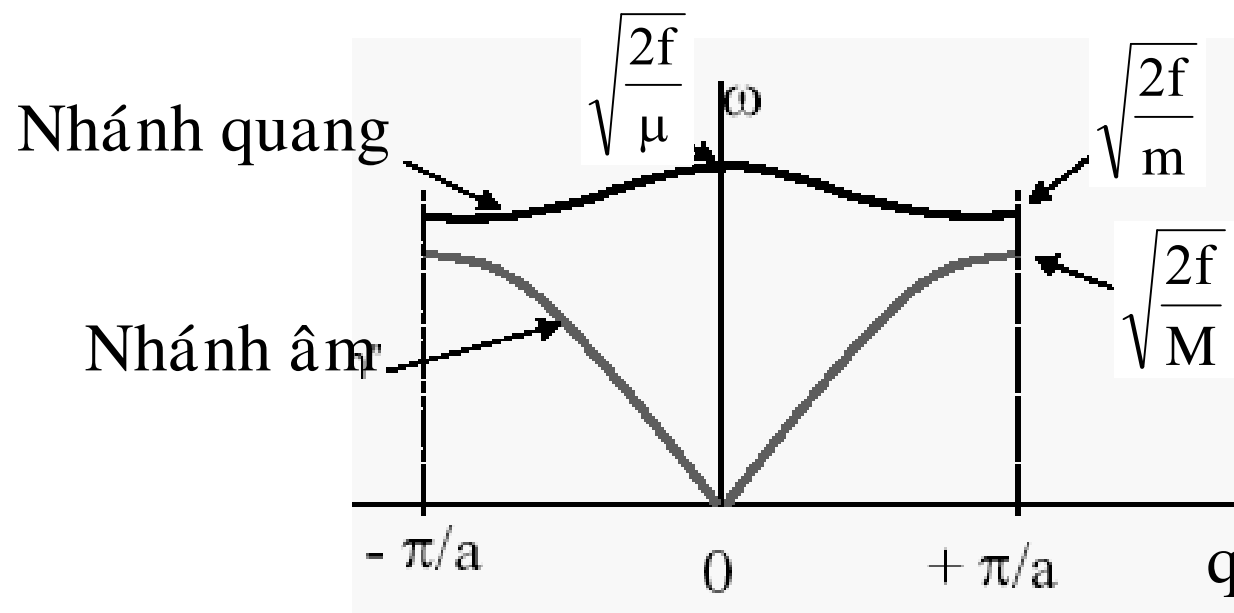
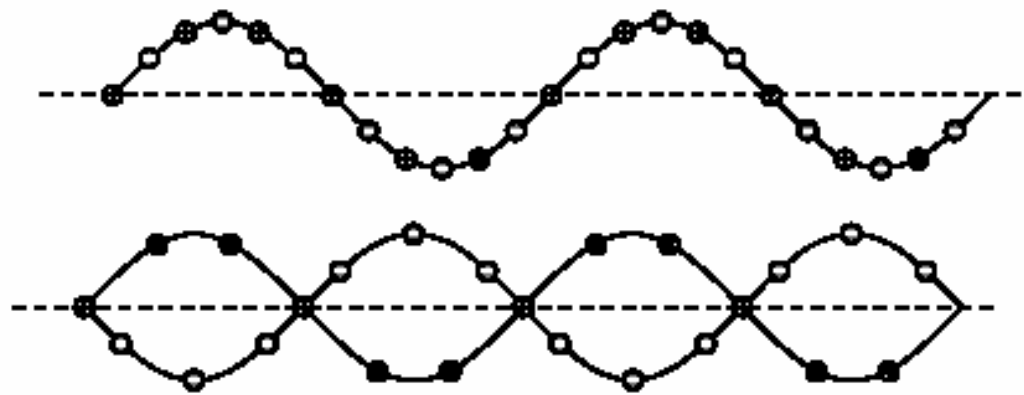
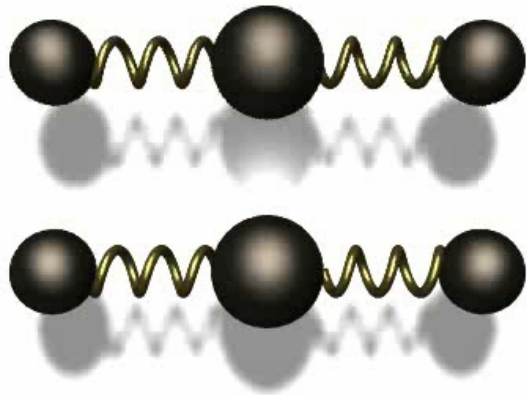


TO



TA

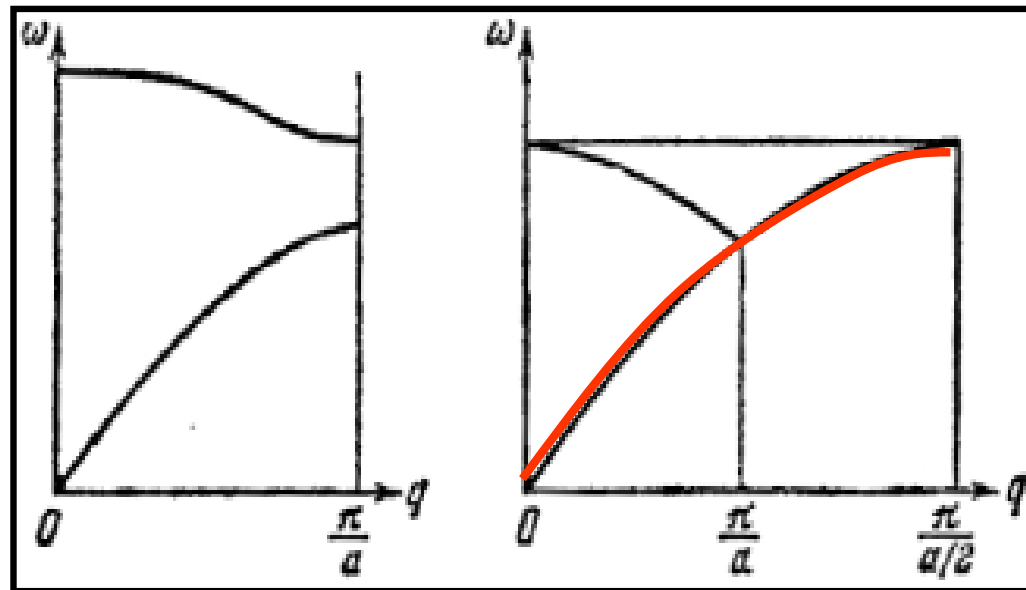




$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}$$

Khi  $m = M$  : suy biến .

Chuỗi chỉ có 1 loại nguyên tử với chu kỳ  $a/2$





## 2. Dao động của mạng tinh thể

Để tính toán dùng thế  $V$  của tinh thể là hàm của tọa độ của tất cả các nguyên tử có trong tinh thể.

Khi mạng dao động, các nguyên tử lệch khỏi vị trí cân bằng.

Khai triển  $V$  thành chuỗi quanh vị trí cân bằng

$$V = V_o + \frac{1}{2} \sum_{n,n'} \left( \frac{\partial^2 V}{\partial s_n \partial s_{n'}} \right)_o s_n s_{n'} + \text{các số hạng bậc cao hơn}$$

$V_o$  là thế năng khi tất cả các nguyên tử ở vị trí cân bằng

$s_n$  là vectơ dịch chuyển của nguyên tử thứ  $n$  khỏi vị trí cân bằng

Khi độ dịch chuyển của các nguyên tử là nhỏ có thể bỏ qua các số hạng bậc cao

Phương trình chuyển động của nguyên tử thứ  $m$  ( khối lượng  $M$  )

$$M \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = - \frac{\partial V}{\partial \rho_m} = - \sum_n \left( \frac{\partial^2 V}{\partial \rho_n \partial \rho_m} \right)_o \rho_n$$

Giả thử chuyển động là tuần hoàn

$$\rho_m = \rho_o \exp i(\omega t + q a_m)$$

$$a_m = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

Thay nghiệm vào phương trình chuyển động

$$M \omega^2 s_m^{(o)} - \sum_n \left( \frac{\partial^2 V}{\partial \rho_n \partial \rho_m} \right)_o s_n^{(o)} \exp i q (a_n - a_m) = 0$$

Trong các tinh thể với 1 nguyên tử trong ô nguyên tố ta thu được 3 phương trình tương ứng với 3 thành phần của phương trình chuyển động.

Nếu biết

$$\left(\frac{\partial^2 V}{\partial \rho_n \partial \rho_m}\right)_0$$

thì về nguyên tắc có thể xác định các giá trị của tần số riêng cũng như biên độ của các dao động thành phần bằng cách giải 3 phương trình nói trên.

Điều kiện để cho 3 phương trình có nghiệm không tầm thường là hệ thức của các hệ số phải bằng 0 :

$$\left| \sum_n \left(\frac{\partial^2 V}{\partial \rho_n \partial \rho_m}\right)_0^{ij} \exp i q (\rho_n - \rho_m) - M \omega^2 \delta_{ij} \right| = 0$$

Định thức này có 9 yếu tố. Từ đây suy được phương trình bậc 3 đối với  $\omega^2$ . Giải ra được 3 nghiệm  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ .

$\omega_1(q), \omega_2(q)$  và  $\omega_3(q)$  xác định 3 nhánh âm.

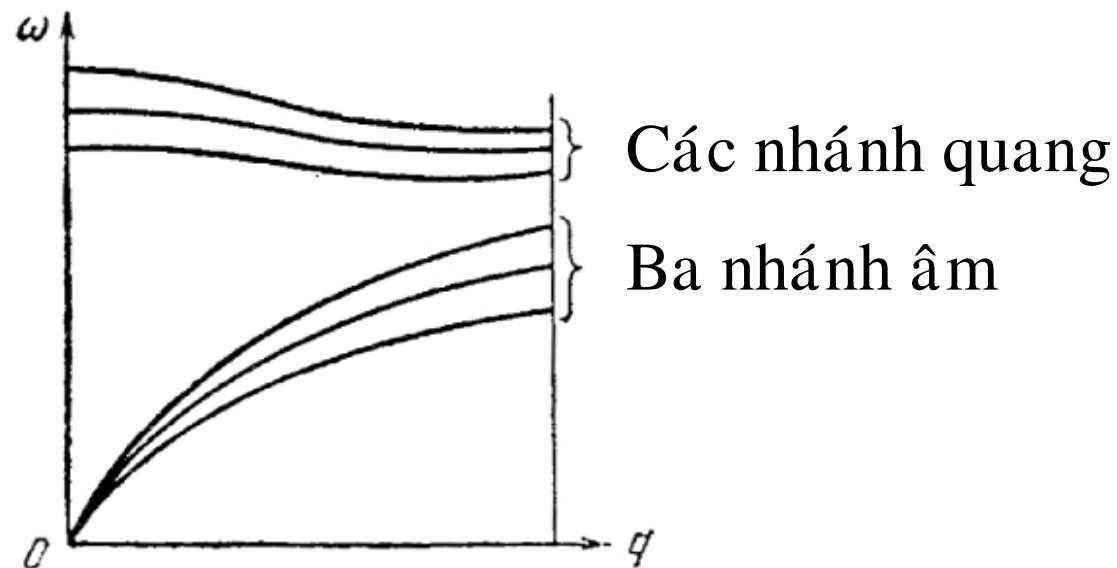
Cách làm trên có thể tổng quát cho trường hợp tinh thể có nhiều loại nguyên tử hoặc trong ô chứa nhiều nguyên tử.

Kết quả cho thấy :

Nếu trong ô có  $p$  nguyên tử thì nói chung có  $3p$  nhánh dao động

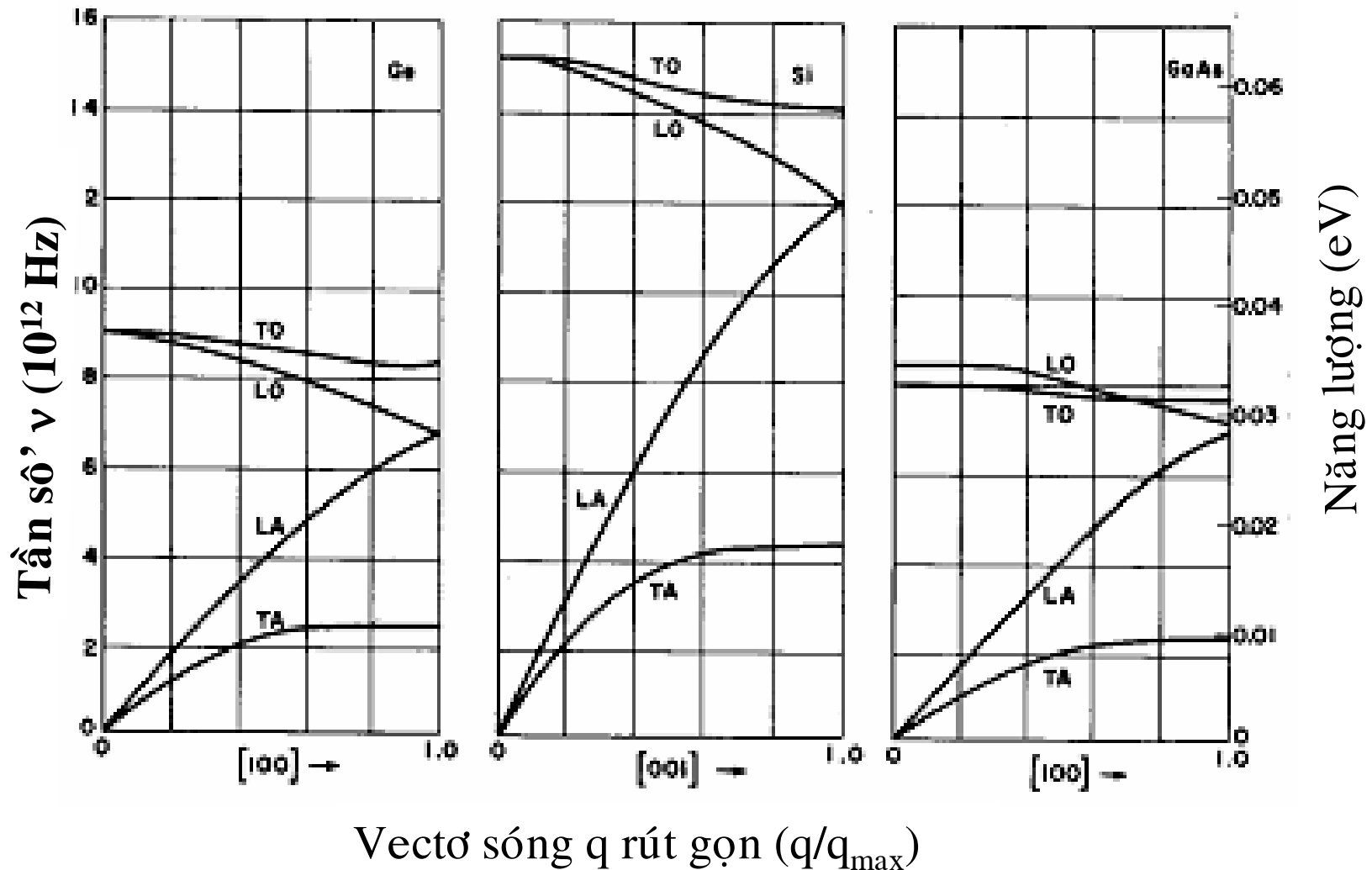
$$\omega_1(q) , \omega_2(q) , \omega_3(q) \dots\dots\dots\omega_p(q)$$

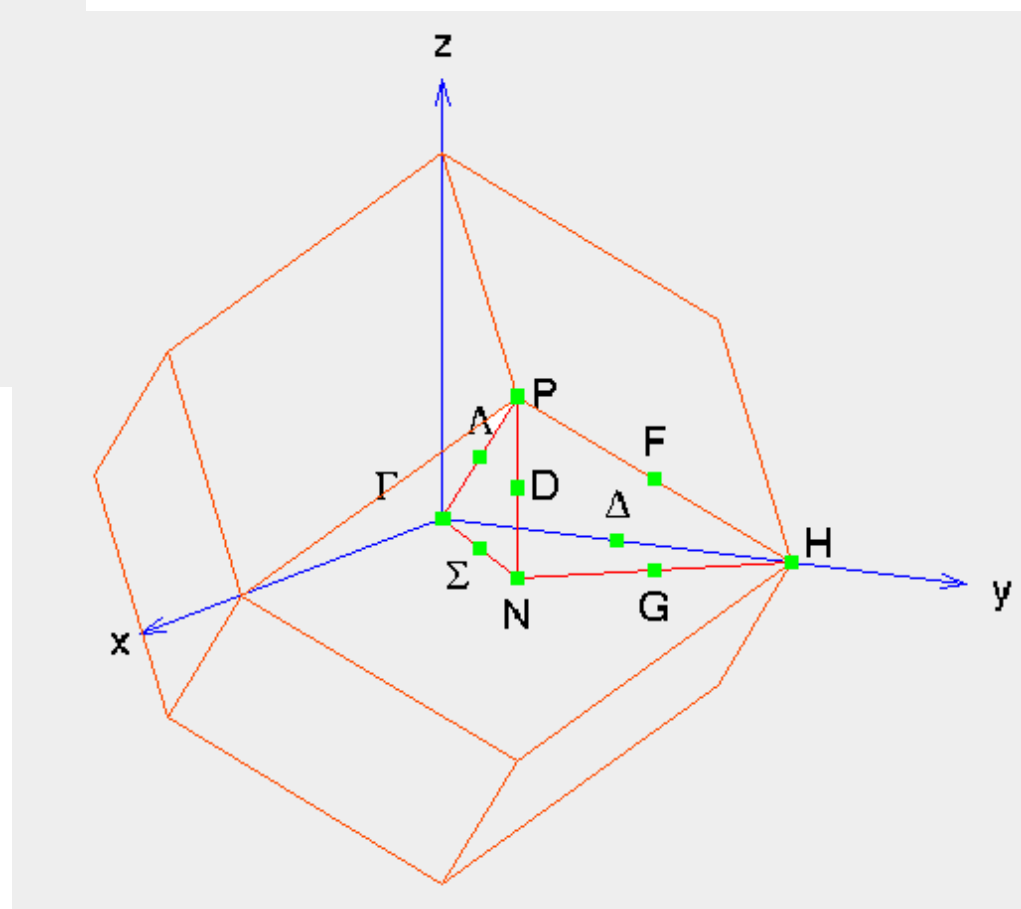
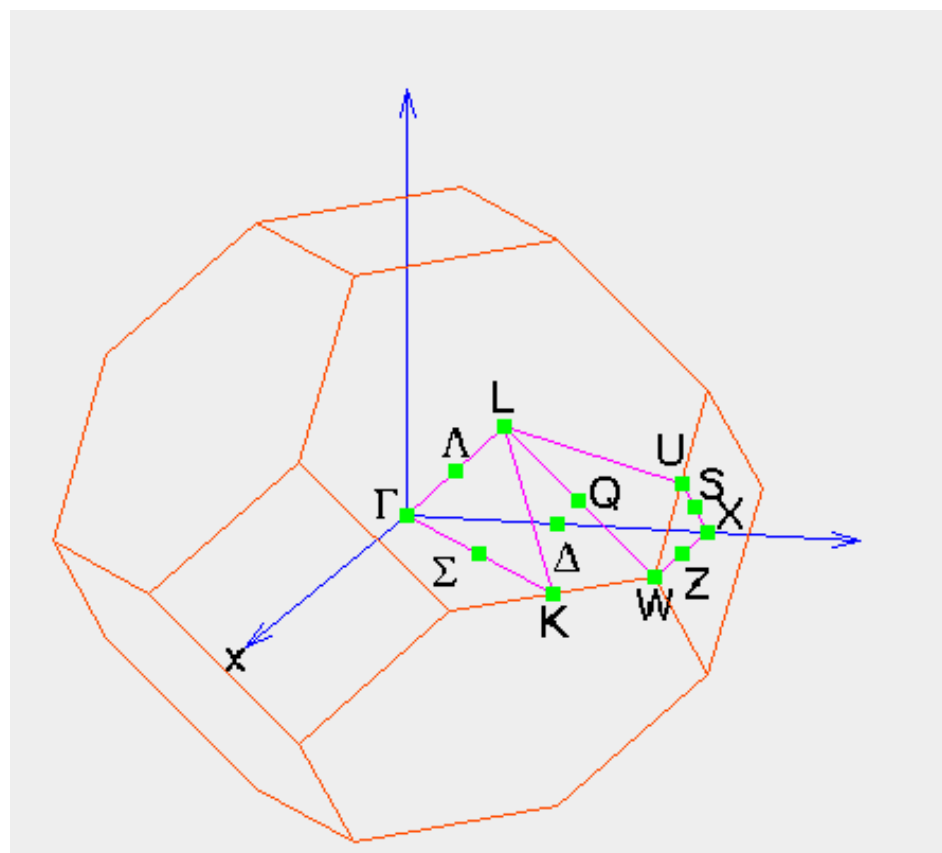
trong đó có 3 nhánh âm và  $3p - 3$  nhánh quang.

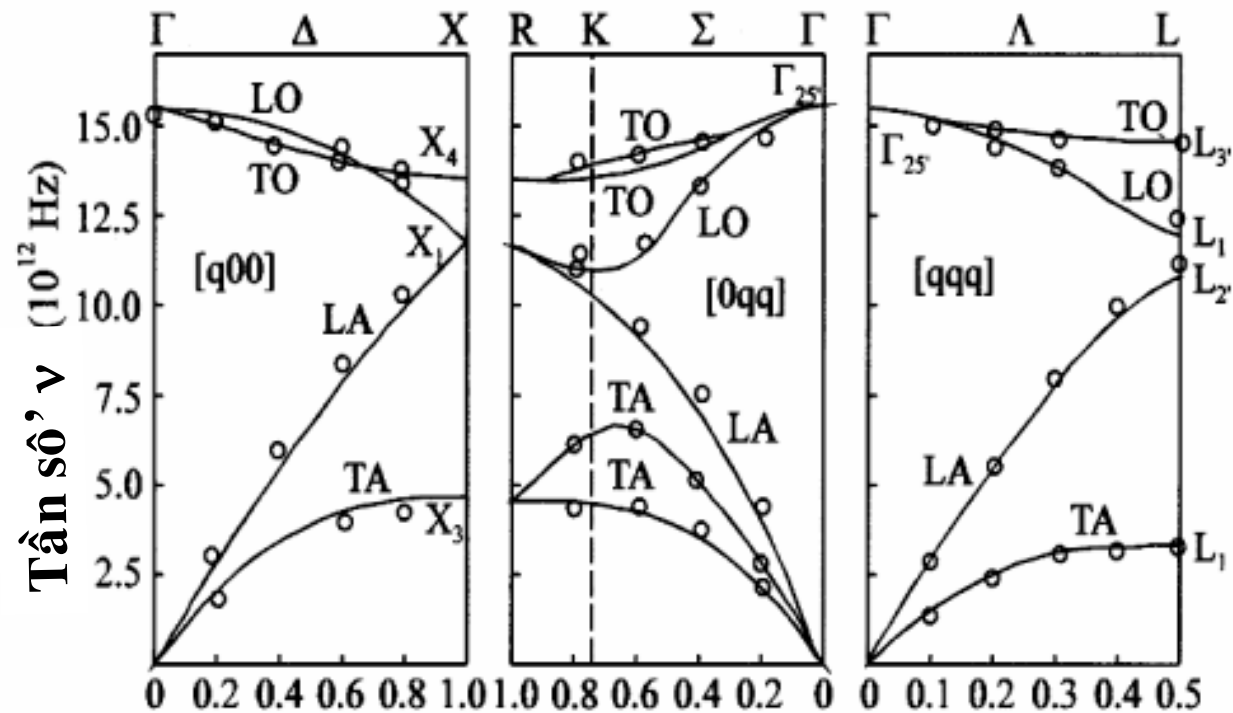


Các nhánh này tùy theo sự đối xứng của mạng tinh thể có thể trùng nhau theo một số chiều nào đó ( suy biến )

Vài minh họa





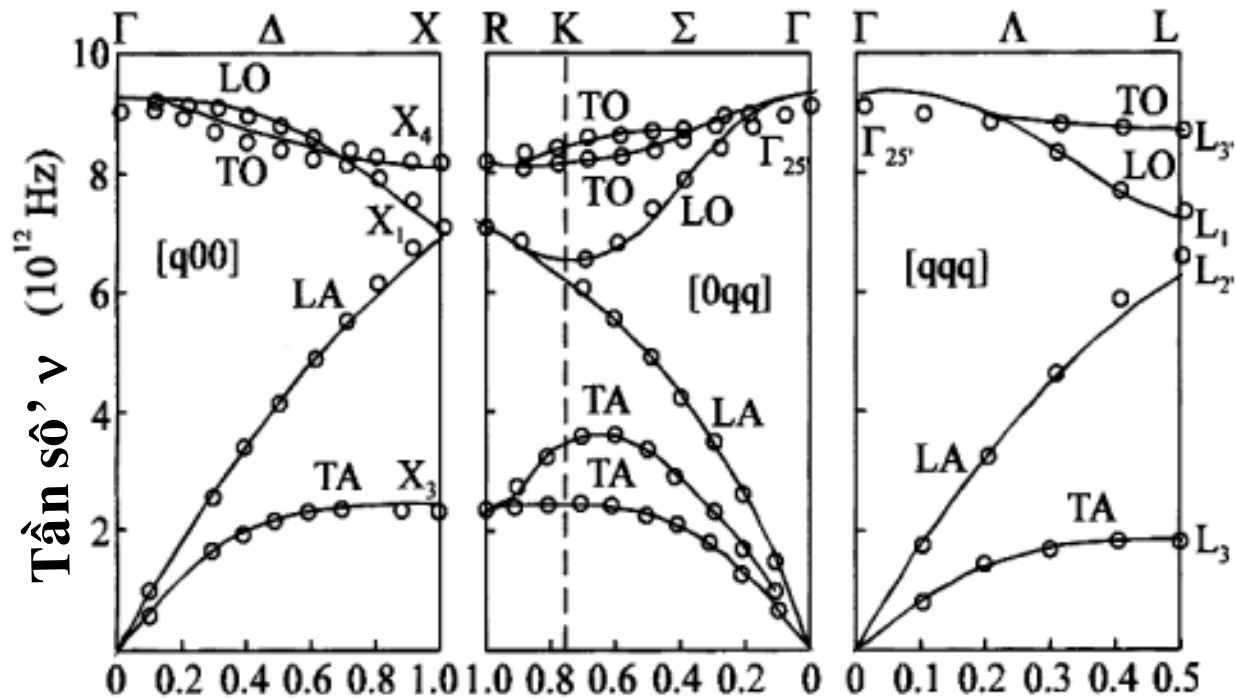


Vectơ sóng q rút gọn (không thứ nguyên)

**Si : Tần số phonon**  
( đơn vị  $10^{12}$  Hz )

T=300K

$\nu_{\text{LTO}}(\Gamma_{25'})$	$15.5 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TA}}(\text{X}_3)$	$4.5 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{LAO}}(\text{X}_1)$	$12.3 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TO}}(\text{X}_4)$	$13.9 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TA}}(\text{L}_3)$	$3.45 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{LA}}(\text{L}_{2'})$	$11.3 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{LO}}(\text{L}_1)$	$12.6 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TO}}(\text{L}_{3'})$	$14.7 \cdot 10^{12}$ Hz



Vectơ sóng q rút gọn (không thứ nguyên)

**Ge : Tần số phonon**  
( đơn vị  $10^{12}$  Hz )

T=300K

$\nu_{\text{LTO}}(\Gamma_{25'})$	$9.02 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TA}}(\text{X}_3)$	$2.385 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{LAO}}(\text{X}_1)$	$7.14 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TO}}(\text{X}_4)$	$8.17 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TA}}(\text{L}_3)$	$1.87 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{LA}}(\text{L}_{2'})$	$6.63 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{LO}}(\text{L}_1)$	$7.27 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TO}}(\text{L}_{3'})$	$8.55 \cdot 10^{12}$ Hz



➤ Tinh thể có N nguyên tử có thể xem là một hệ động học .  
Chuyển động của nó có thể mô tả bởi N tọa độ chuẩn độc lập với nhau. Mỗi tọa độ chuẩn mô tả cho một cấu hình xác định của tất cả nguyên tử của tinh thể dao động điều hòa.

$$\ddot{Q}_q + \omega_q^2 Q_q = 0$$

Dao động tập thể đó của tất cả các nguyên tử của tinh thể được gọi là dao động chuẩn của mạng.

➤ Trong tọa độ chuẩn, năng lượng toàn phần của dao động mạng có dạng rất đơn giản :

$$E = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{3N} (\dot{Q}_i^2 + \omega_i^2 Q_i^2)$$

trong đó  $\omega_i$  là tần số dao động của mode chuẩn thứ i

Với tọa độ chuẩn, dao động của mạng tương đương với 3N dao động điều hòa độc lập ( tất nhiên, mỗi dao động tử tương ứng với một mode chuẩn khác nhau ).

***Một dao động bất kỳ có thể biểu diễn bằng tổ hợp tuyến tính của các dao động chuẩn.***

Lý thuyết lượng tử cho chuyển động của N hạt có tương tác với nhau trong chuỗi

Giải phương trình Schrodinger cho hệ N hạt tương tác với nhau rất khó.

Nếu dùng tọa độ suy rộng có thể đưa hệ N hạt tương tác với nhau về N dao động tử độc lập. Khi đó phương trình Schrodinger tách thành N phương trình trong đó mỗi phương trình mô tả cho chuyển động của một hạt.

Khi các hạt không tương tác với nhau, năng lượng của hệ

$$E = \sum_{n=1}^N E_n$$

và hàm sóng

$$\psi = \prod_{s=1}^N \psi_s(Q_s)$$

$Q_s$  là tọa độ suy rộng,  $E_s$  và  $\Psi_s$  thỏa mãn phương trình

$$\frac{\eta^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_s}{\partial Q_s^2} + (E_s - \frac{1}{2} m \omega_s^2 Q_s^2) \Psi_s = 0$$

Phương trình này có dạng phương trình của dao động tử điều hòa đã được giải trong Cơ học lượng tử. Trị riêng của nó là

$$E_s = (n_s + \frac{1}{2}) \eta \omega_s$$

$n_s$  - số nguyên dương hoặc bằng 0.

Khác với cổ điển, theo lý thuyết lượng tử năng lượng chỉ có thể lấy các giá trị gián đoạn.

Năng lượng  $\eta \omega_s$  có thể xem là một lượng tử năng lượng của dao động với tần số  $\omega_s$ .--> **phonon**.

Nghiệm  $\Psi_s(Q_s)$  ứng với năng lượng  $E_s$  biểu thị cho trạng thái có  $n_s$  phonon trong dao động chuẩn thứ  $s$ .

Theo Cơ học lượng tử, quy tắc lọc lựa cho số lượng tử của dao động tử có dạng  $\Delta n_s = \pm 1$

Khi  $\Delta n_s = -1$  mạng chuyển vào trạng thái có năng lượng thấp hơn : năng lượng  $\eta\omega_s$  được truyền cho các hạt tải điện hoặc vật xung quanh --> quá trình chuyển trạng thái là **quá trình bức xạ phonon**.

Quá trình chuyển trạng thái với  $\Delta n_s = +1$  là **quá trình hấp thụ phonon** bởi mạng.

- Phonon được mô tả bởi các bó sóng chuyển động trong mạng. Tính chất của các bó sóng đó rất giống tính chất của các hạt cổ điển vì có thể gán cho nó năng lượng, xung lượng và vận tốc.

Năng lượng của phonon  $E_p = \eta \omega_s$

Chuẩn xung lượng của phonon  $P_p = \eta q_s$

- Tương tác giữa 2 phonon hoặc giữa phonon và electron được xem như sự tán xạ giữa hai hạt.
- Phonon tuân theo phân bố Bose - Einstein