

Chương III

DAO ĐỘNG MẠNG TỈNH THỂ

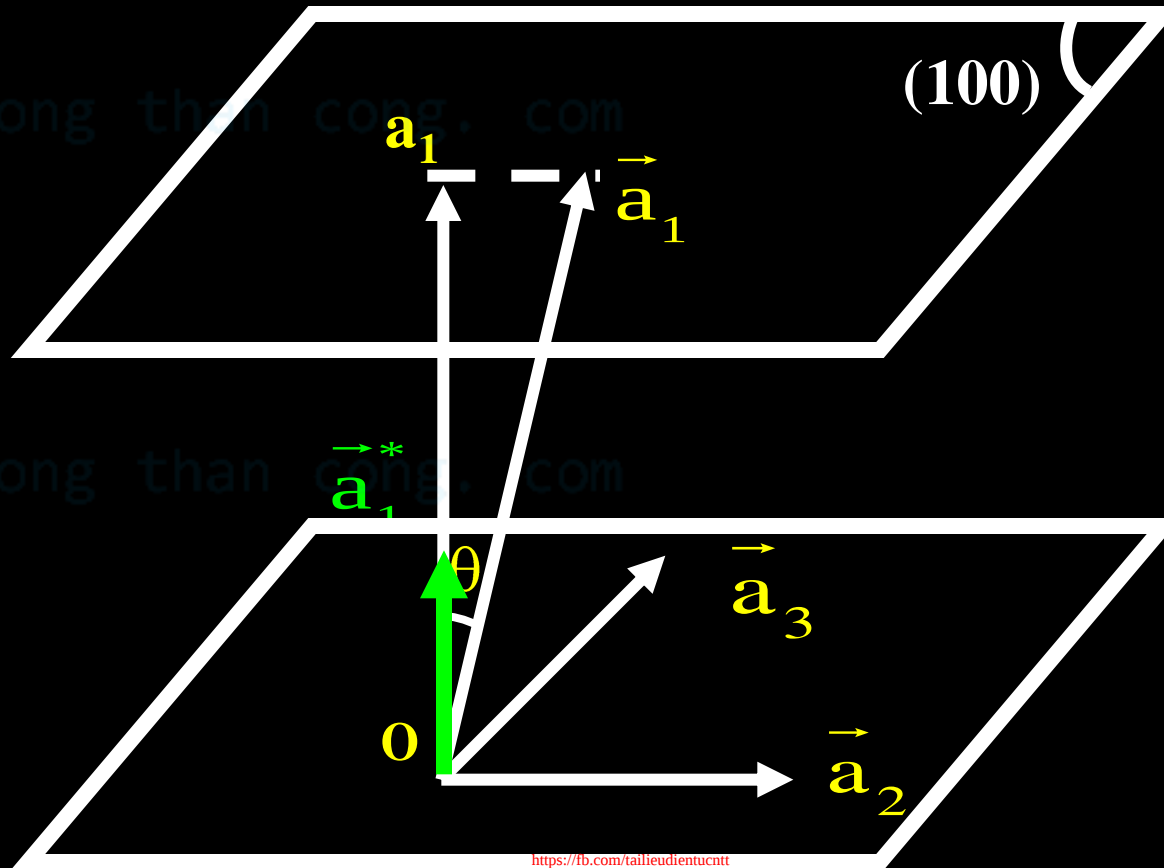
1.8. MẠNG ĐẢO (MẠNG NGƯỢC)

a. ĐỊNH NGHĨA

Cho một mặt thuận có ba vectơ cơ sở $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$.
Ta biểu diễn họ mặt mạng song song mặt $(\vec{a}_2, \vec{a}_3)$ tức họ mặt (100) bằng một vectơ $\vec{a}_1^*$ vuông góc mặt phẳng $(\vec{a}_2, \vec{a}_3)$ và $a_1^* = 2\pi/d_{100}$.

Gọi Oa_1 là hình chiếu của $\vec{a}_1$ trên pháp tuyến của mặt (100) tức $Oa_1' = d_{100}$, ta có:

$$a_1^* \cdot Oa_1 = 2\pi$$



Tất cả các điều kiện trên cho phép ta có :

$$\vec{a}_1^* \cdot \vec{a}_1 = 2\pi; \quad \vec{a}_1^* \cdot \vec{a}_2 = 0; \quad \vec{a}_1^* \cdot \vec{a}_3 = 0$$

Tương tự ta thành lập các vectơ $\vec{a}_2^*; \vec{a}_3^*$ sao cho:

$$\vec{a}_2^* \cdot \vec{a}_1 = 0 \quad \vec{a}_3^* \cdot \vec{a}_1 = 0$$

$$\vec{a}_2^* \cdot \vec{a}_2 = 2\pi \quad \vec{a}_3^* \cdot \vec{a}_2 = 0$$

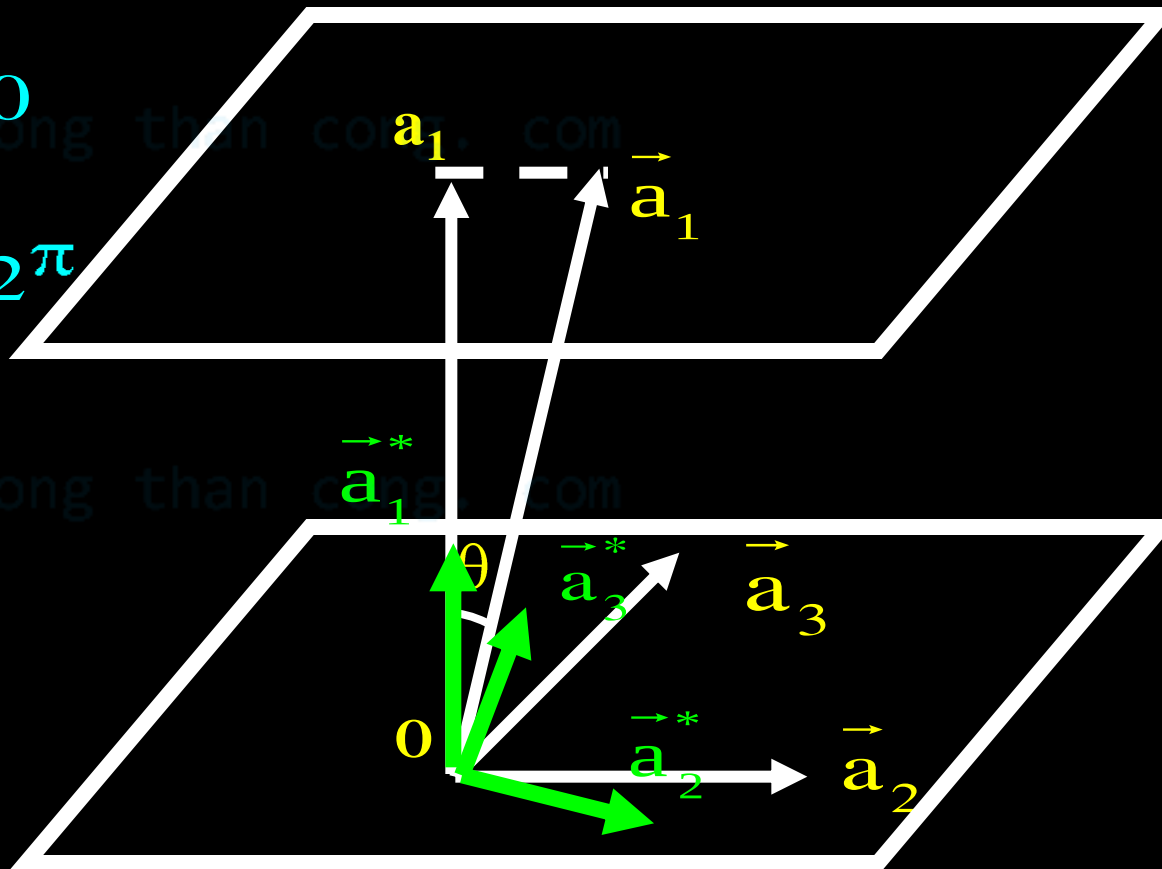
$$\vec{a}_2^* \cdot \vec{a}_3 = 0 \quad \vec{a}_3^* \cdot \vec{a}_3 = 2\pi$$

$$\vec{a}_i^* \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

1 nếu $i = j$

$\delta_{ij} =$

0 nếu $i \neq j$



Mạng được xây dựng trên ba vectơ $\vec{a_1^*}, \vec{a_2^*}, \vec{a_3^*}$ được gọi là mạng ngược của mạng thuận đã cho.

Các nút của mạng ngược có thể xác định bởi vectơ:

$$\vec{G_{hkl}} = h.\vec{a_1^*} + k.\vec{a_2^*} + l.\vec{a_3^*} \quad ; h, k, l \in \mathbb{Z}$$

1.9 MỘT SỐ TÍNH CHẤT CỦA MẠNG ĐẢO (MẠNG NGƯỢC)

1. Gọi V là thể tích của ô mạng thuận; V^* thể tích của ô mạng ngược, ta có:

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$$

$$V^* = \vec{a}_1^* \cdot (\vec{a}_2^* \wedge \vec{a}_3^*)$$

Suy ra:

$$V \cdot V^* = (2\pi)^3$$

• 2. Nếu $\vec{a}_1 \perp \vec{a}_2 \perp \vec{a}_3$ thì $\vec{a}_1^* \perp \vec{a}_2^* \perp \vec{a}_3^*$

Và $\vec{a}_1^* \parallel \vec{a}_1$; $\vec{a}_2^* \parallel \vec{a}_2$; $\vec{a}_3^* \parallel \vec{a}_3$

3. Ích lợi của mạng ngược : nếu nối gốc tọa độ với một nút (h k l) của mạng ngược được biểu diễn bằng vectơ tức là :

$$\vec{G}_{hkl} = h.\vec{a}^* + k.\vec{b}^* + l.\vec{c}^*$$

$\Rightarrow \vec{G}_{hkl}$ phải vuông góc mặt mạng (h k l) của mạng thuận và có độ dài :

$$|\vec{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$\Rightarrow$ có thể biểu diễn một họ mạng thuận bằng một nút của mạng ngược.

$\Rightarrow$ mỗi nút của mạng ngược có thể biểu diễn cho một họ mạng thuận (tức mạng tinh thể) về hướng và thông số mặt mạng.

Vùng Brillouin

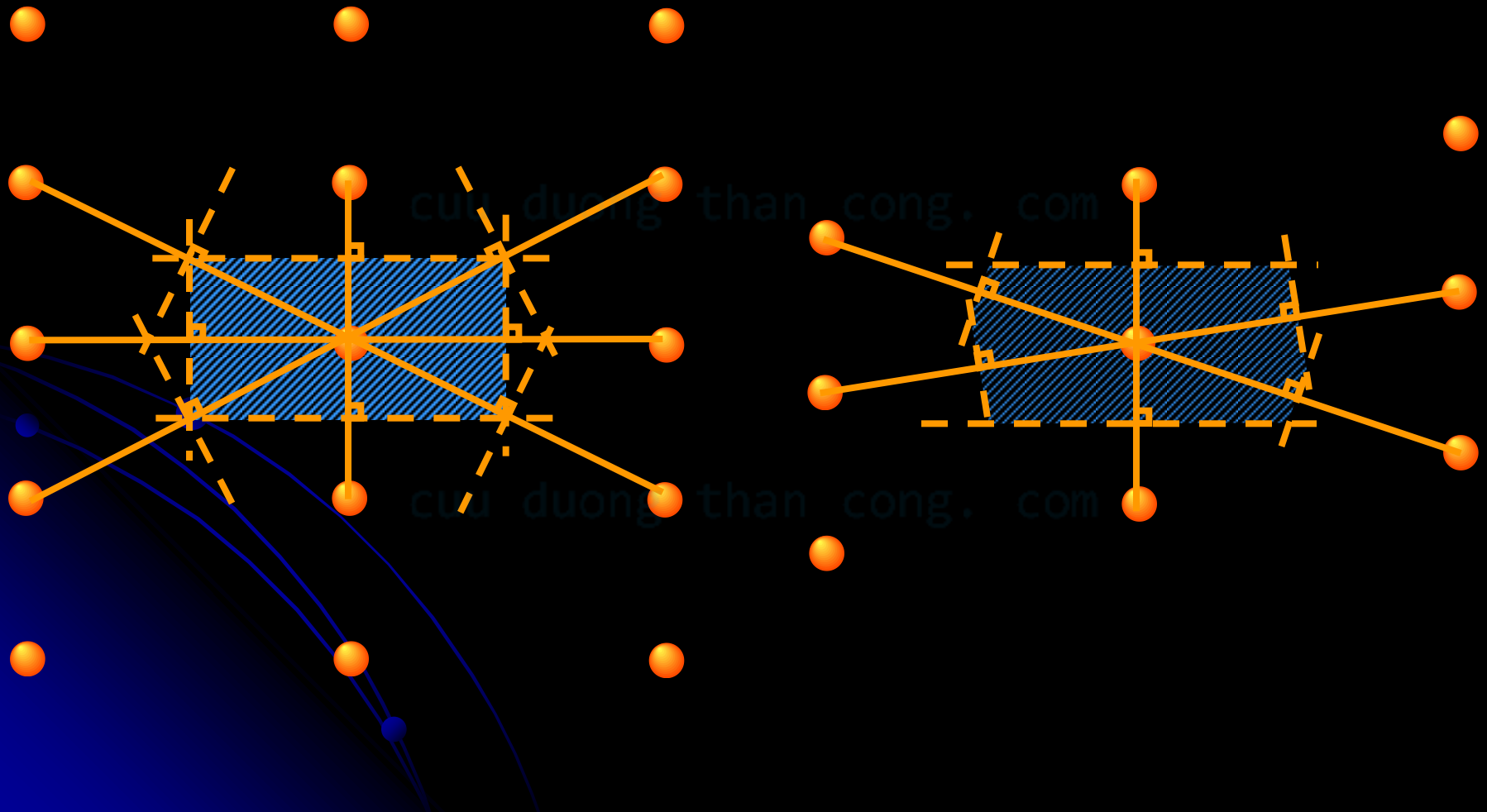
- Cũng giống như với mạng thuận, trong mạng đảo, có thể xây dựng ô sơ cấp dạng đối xứng trung tâm (kiểu ô **WIGNER – SEITZ** của mạng thuận). Trong mạng đảo, ô này được gọi là **vùng Brillouin thứ nhất**
- Nó được giới hạn bởi các mặt phẳng trung trực của các vector mạng đảo nối nút đang chọn với các nút lân cận.
- Khái niệm về **mạng đảo** và **vùng Brillouin** được sử dụng rất thuận tiện để nghiên cứu các vấn đề có liên quan đến các quá trình sóng trong vật rắn như lý thuyết về cung năng lượng, lý thuyết về dao động của mạng tinh thể, hiện tượng nhiễu xạ trong tinh thể v.v...

Ô WIGNER – SEITZ

Ô Wigner – Seitz là một ô nguyên tố được vẽ sao cho nút mạng nằm ở tâm ô.

- Cách vẽ ô Wigner – Seitz 2 chiều:
 - Chọn một nút mạng bất kì làm gốc O.
 - Nối O với các nút lân cận gần nhất ta được một số đoạn thẳng bằng nhau.
 - Vẽ các mặt phẳng trung trực của các đoạn thẳng đó ta thu được họ mặt thứ nhất $\Rightarrow$ tạo một miền không gian kín bao quanh O.
 - Tương tự, từ O nối với các nút lân cận tiếp theo và vẽ các mặt phẳng trung trực của các đoạn thẳng đó ta thu được họ mặt thứ hai.
 - Nếu họ mặt thứ hai nằm ngoài miền không gian bao bởi họ thứ nhất, tức họ thứ nhất xác định miền thể tích nhỏ nhất và đó là ô Wigner – Seitz.
 - Ngược lại thì ô Wigner – Seitz được xác định đồng thời cả hai loại mặt sao cho ô có thể tích nhỏ nhất.

CÁCH VẼ Ô WIGNER – SEITZ CHO MẠNG 2 CHIỀU



Dao động của mạng một chiều

- Trong tinh thể, các nguyên tử, phân tử không nằm cố định ở các **nút mạng** hoặc ở các vị trí xác định, mà luôn thực hiện các dao động nhỏ quanh các vị trí cân bằng.
- 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 dạng bài toán cơ bản của Cơ học cổ điển

- Trong thực tế, thường gặp các mạng tinh thể 3 chiều.

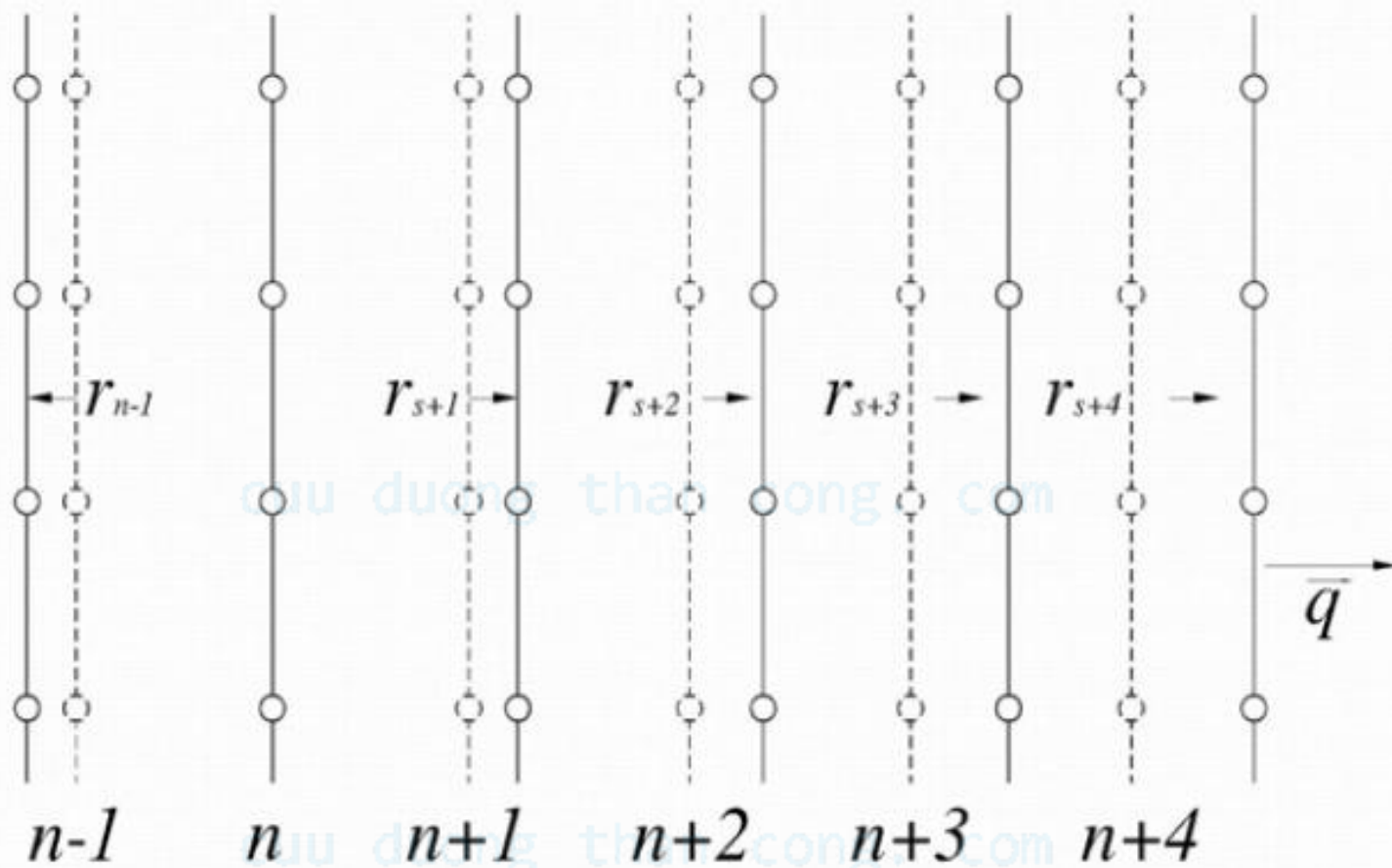
→ Câu hỏi: Trong trường hợp nào thì mạng tinh thể 3 chiều được xét như mạng tinh thể 1 chiều

cuu duong than cong. com

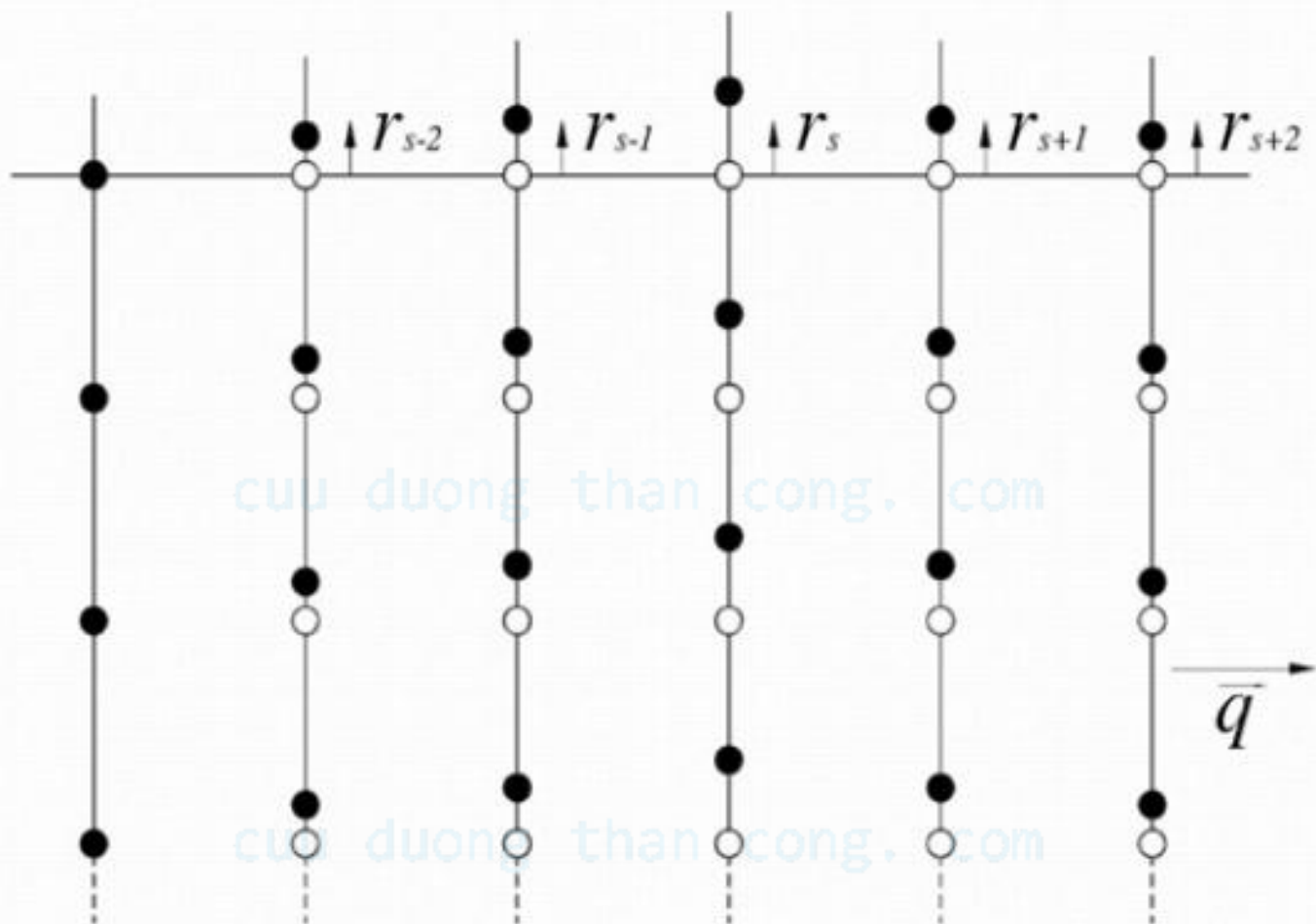
cuu duong than cong. com

- Trường hợp đơn giản nhất là trường hợp “**mạng tinh thể một chiều**” gồm các nguyên tử giống nhau, đặt cách đều nhau trên một đường thẳng.
- Kết quả của bài toán này cũng áp dụng được cho tinh thể ba chiều nếu ta xét trong một số trường hợp đặc biệt, khi sóng đàn hồi là thuần túy dọc hoặc thuần túy ngang.
- Trong sóng dọc, các nguyên tử dịch chuyển song song với phương truyền sóng
- Trong sóng ngang, các nguyên tử dịch chuyển vuông góc với phương truyền sóng.

- Trong các trường hợp này, các nguyên tử nằm trên cùng một mặt phẳng tinh thể vuông góc với phương truyền sóng thì dao động giống nhau
- Vì thế, thay cho nghiên cứu chuyển động của mọi nguyên tử trong tinh thể ta chỉ cần xét trên mỗi mặt phẳng tinh thể một nguyên tử. Bài toán được qui về trường hợp mạng tinh thể một chiều.



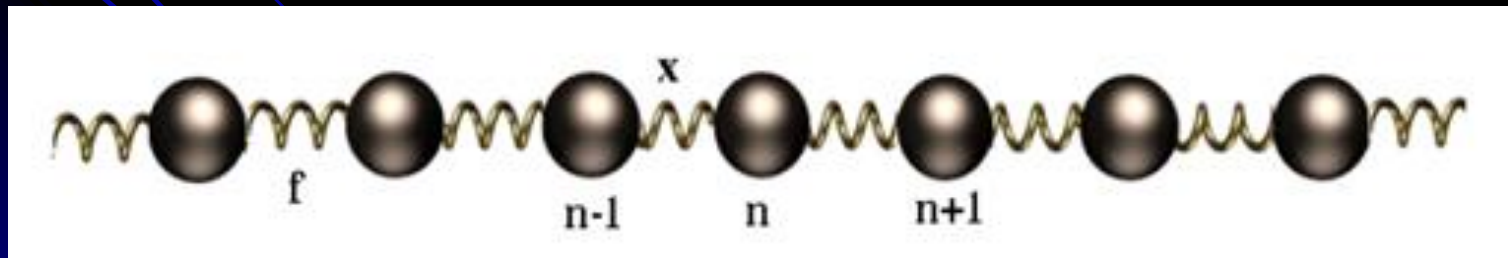
a) Sóng dọc



b) Sóng ngang

Các gần đúng nào nào đã được đưa vào để giải bài toán dao động?

- Chỉ xét **sóng ngang**, và coi như chỉ có tương tác giữa nguyên tử đang xét với hai nguyên tử gần nó nhất.
- Các nguyên tử cách đều nhau một khoảng a nên ô mạng có kích thước là a .
- Lực tương tác là lực đàn hồi, tức là tỷ lệ với độ lệch khỏi vị trí cân bằng.



Trường hợp chuỗi thẳng dài vô hạn các nguyên tử có cùng khối lượng

Ta có:

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

- Với:

x_n – là độ lệch khỏi vị trí cân bằng của nguyên tử thứ n

f – là lực đàn hồi tương tác giữa hai nguyên tử

Nghiệm của phương trình trên có dạng:

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

- Với:

q – số sóng

Thay nghiệm vào phương trình chuyển động:

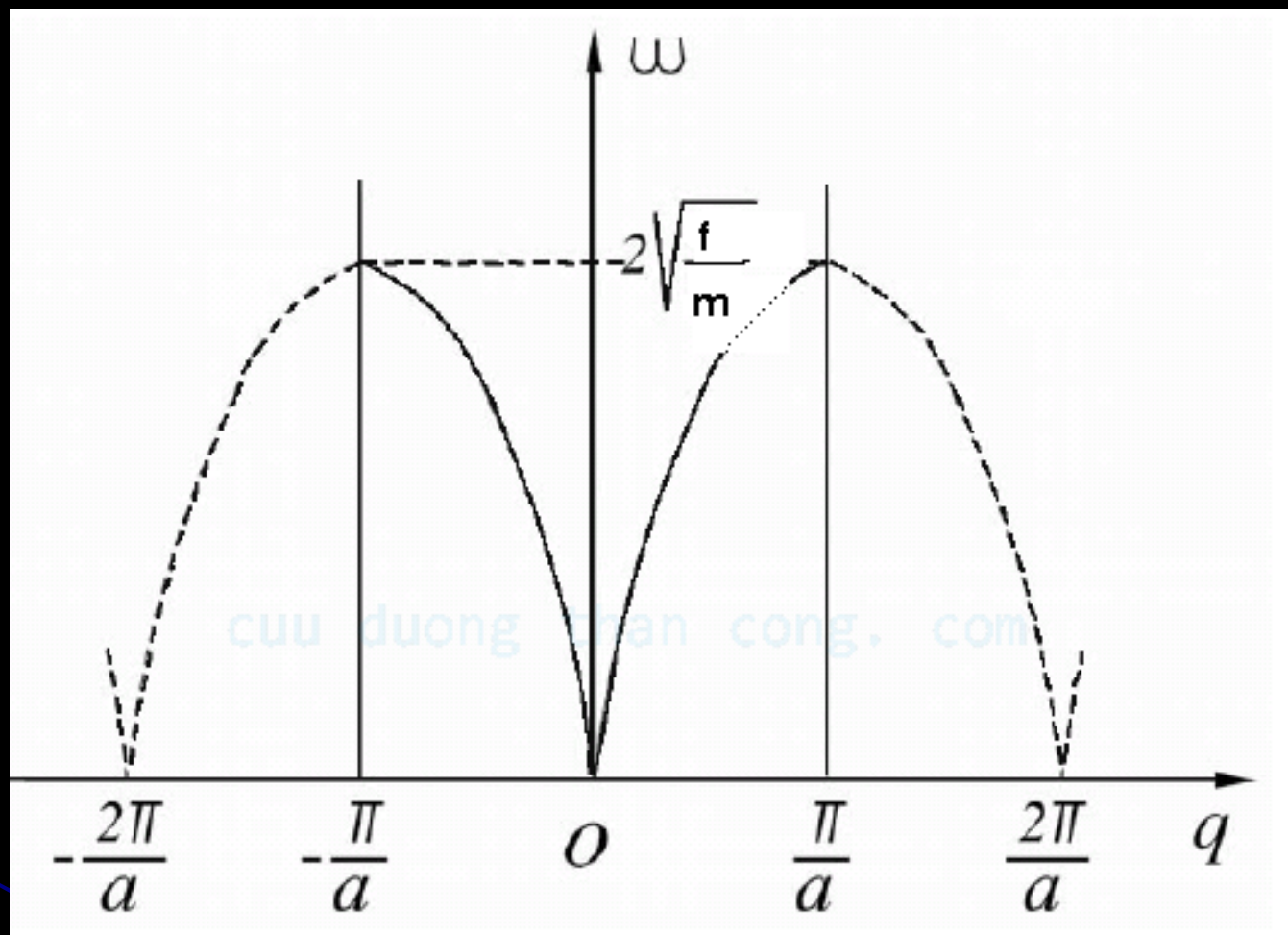
$$\omega = \pm 2\sqrt{\frac{f}{m}} \sin\left(\frac{1}{2}qa\right)$$

- Phương trình trên cho thấy sự phụ thuộc của tần số dao động ω vào số sóng q và được gọi là **hệ thức tán sắc của dao động**
- ω là hàm tuần hoàn của q với chu kỳ $2\pi/a$

Như vậy ta chỉ cần xét q trong khoảng

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}$$

→ khoảng này chứa mọi giá trị khả dĩ của ω



- q có thứ nguyên nghịch đảo chiều dài, nên nó chính là đại lượng được xét trong không gian mạng đảo.

- Trong trường hợp đang xét, mạng thuận có chu kỳ a thì mạng đảo có chu kỳ $2\pi/a$. Mạng đảo của mạng một chiều cũng là mạng một chiều.

Khoảng giá trị:

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}$$

trong mạng đảo (ở đây là trường hợp một chiều) gọi là vùng Brillouin thứ nhất.

- Nếu xét tại một thời điểm, thì trạng thái dao động của tinh thể lặp lại một cách tuần hoàn trong không gian, với chu kỳ là bước sóng λ .
- Ở tâm vùng Brillouin thứ nhất, tức là với $qa \ll 1$, thì

$$\sin \frac{qa}{2} \approx \frac{qa}{2}$$

- Do đó:

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{f}{m}} \frac{qa}{2} = \text{const}$$

→ Vận tốc truyền sóng

$$v_p = \frac{d\omega}{dq}$$

- Như vậy với giá trị q nhỏ, tức là với dao động có bước sóng λ rất lớn, vận tốc truyền năng lượng dao động cũng là hằng số.
- Kết quả này cũng giống như đối với sóng đàn hồi truyền trong môi trường liên tục. Điều này cũng dễ hiểu vì khi bước sóng rất lớn so với hằng số mạng, thì chuỗi nguyên tử có thể coi gần đúng như một

- Khi đó sóng phẳng đơn sắc là sóng truyền với vận tốc không đổi và không phụ thuộc vào vector sóng.
- Kết luận nêu trên đúng với dải tần số kéo dài đến 10^{12} Hz, đó là dải tần số của sóng âm và sóng siêu âm, vì vậy các dao động ứng với trường hợp này được gọi là dao động âm

- Xét giá trị q lớn, lúc này vận tốc truyền sóng không còn là hằng số

$$v_g = \frac{d\omega}{dq} = a \sqrt{\frac{f}{m}} \cos \frac{qa}{2}$$

- Ở giá trị

$$q = q_{\max} = \pm \frac{\pi}{a}$$

- Vận tốc truyền sóng $v_g = 0$. Điều này chứng tỏ không có năng lượng được truyền đi, nói cách khác tại biên vùng các kiểu dao động này không đặc trưng cho sóng chuyển động mà đặc trưng cho sóng dừng trong mạng.
- Như vậy ở biên vùng Brillouin vận tốc truyền sóng bằng không ứng với sự tạo thành sóng đứng.

→ Hiện tượng: các kiểu dao động ứng với biên vùng Brillouin có bước sóng $\lambda = 2a$ thỏa mãn điều kiện nhiễu xạ Bragg, với $d = a$; $\theta = \pi/2$ và $n = 1$. Như vậy sóng phản xạ và sóng tới giao thoa nhau sẽ tạo thành sóng dừng

- Với

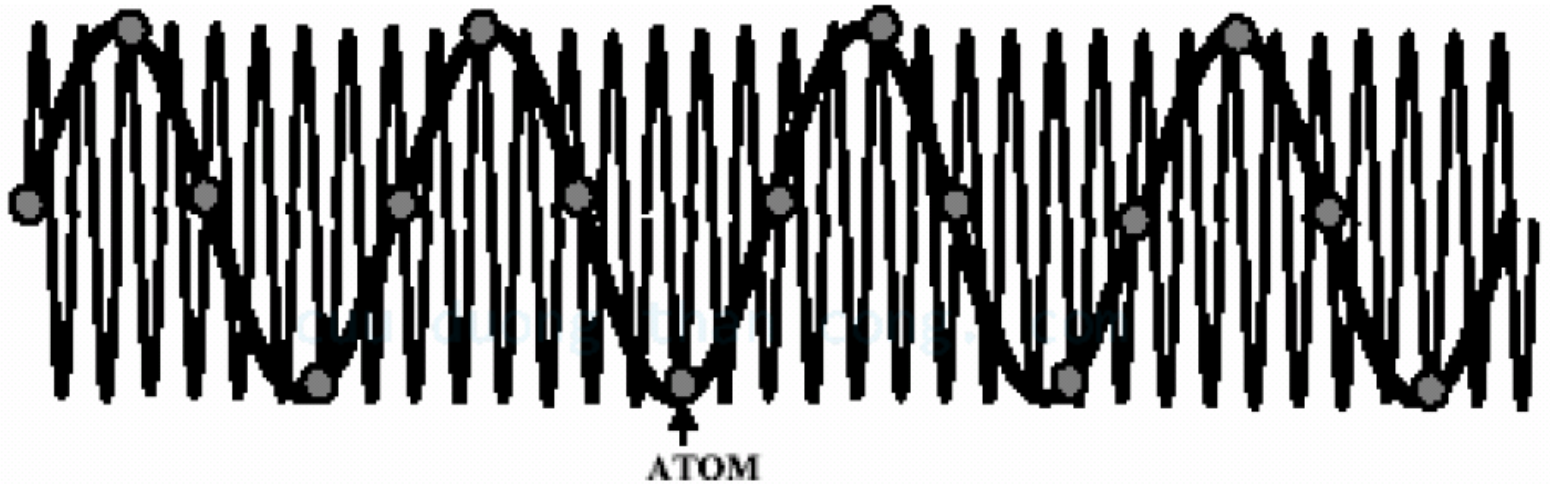
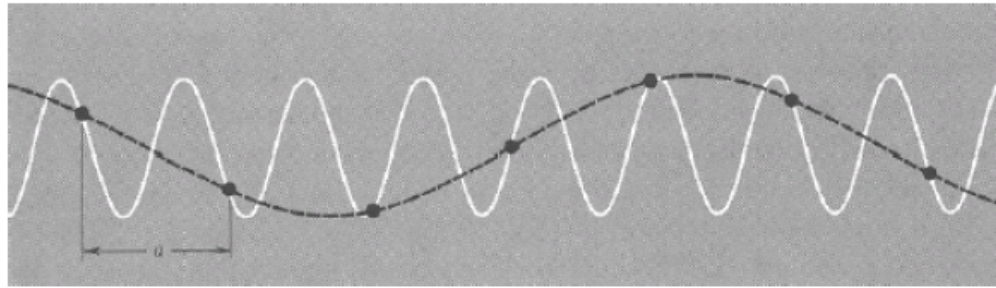
$$q = q_{\max} = \pm \frac{\pi}{a}$$

- Ta có

$$\lambda_{\min} = 2a$$

→ Đó là giá trị bước sóng ngắn nhất có thể tồn tại trong mạng tinh thể. Nó ứng với trường hợp hai nguyên tử lân cận dao động ngược pha nhau.

- Trong thực tế không có tinh thể lớn vô hạn mà chỉ có tinh thể chứa rất nhiều nguyên tử $N \gg 1$. Nếu tinh thể là hữu hạn, thì các tính chất của tinh thể hữu hạn, chẳng hạn như tính đối xứng tịnh tiến không còn nữa. Ta phải xét ảnh hưởng của biên tinh thể. Trong trường hợp mạng một chiều đó chính là đầu và cuối của dãy nguyên tử. Tuy nhiên nếu mạng tinh thể đủ lớn, thì ảnh hưởng của biên là rất nhỏ, và tính chất của tinh thể cũng gần giống như khi là mạng vô hạn.



- 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 vector sóng cho dao động mạng nằm trong vùng Brillouin thứ nhất

→ Do đó, có tất cả N giá trị được phép của vector sóng (và bước sóng) nằm trong khoảng: $-\pi/a < q < \pi/a$

→ Mỗi giá trị đó tương ứng một mode dao động của mạng. Mode đó được gọi là **mode chuẩn**.

cuu duong than cong. com

cuu duong than cong. com

- Vận tốc pha của sóng chuỗi

$$v_p = \frac{\omega}{q} = a \sqrt{\left(\frac{f}{m}\right)} \left| \frac{\sin \frac{qa}{2}}{\frac{qa}{2}} \right|$$

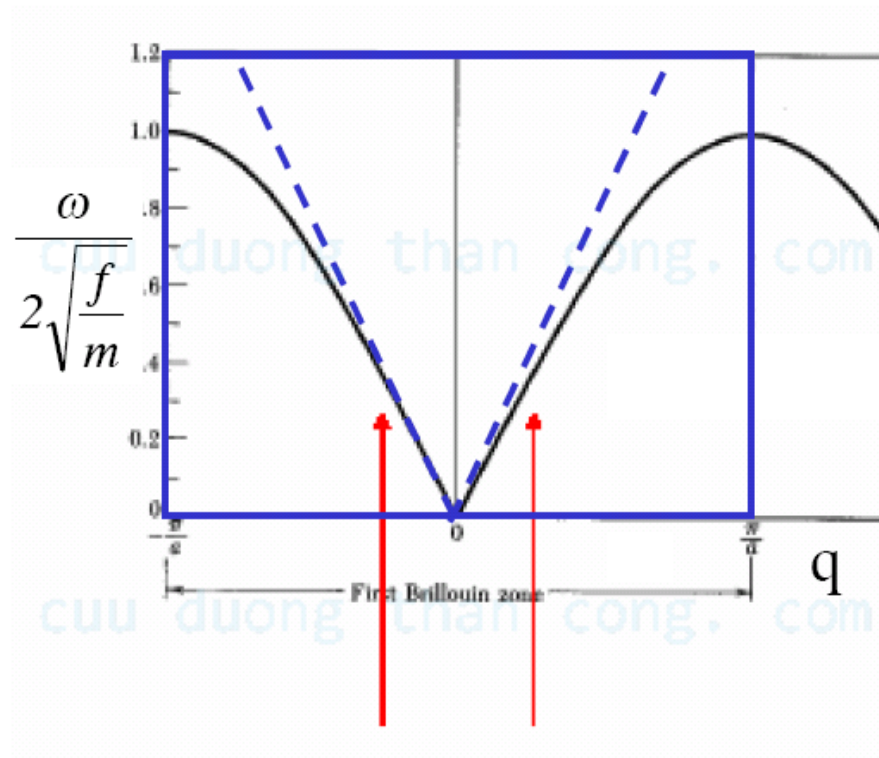
- Với q nhỏ (bước sóng dài) vận tốc pha $v_p = a(f/m)^{1/2}$ không đổi và bằng vận tốc truyền âm trong tinh thể ($\sim 3.10^5$ cm/s)
- Khi q tăng, vận tốc giảm: hiện tượng tán sắc xảy ra. Sự tán sắc là do sự ảnh hưởng lẫn nhau giữa phần nén và dẫn của sóng. Với bước sóng ngắn các phần đó rất gần nhau.
- Khi λ giảm đến $2a$ các phần nén và dẫn bù trừ nhau làm sóng biến mất $\rightarrow$ vận tốc bằng 0
- Vận tốc truyền năng lượng: vận tốc nhóm

$$v_{nhóm} = \frac{d\omega}{dq} = a \sqrt{\frac{f}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right|$$

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

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

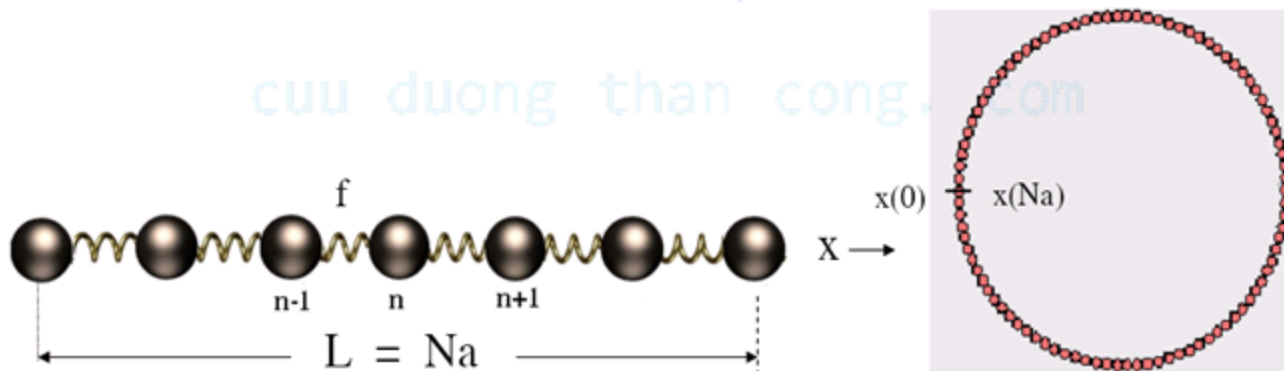
Với q nhỏ



Có sự phụ thuộc tuyến tính trong miền này

Điều kiện biên tuần hoàn

- Để bảo toàn tính đối xứng tịnh tiến của mạng tinh thể, ta đưa ra **điều kiện biên tuần hoàn Born-Karman** như sau: dao động của nguyên tử ở cuối dãy (nút thứ N) giống hệt như dao động của nguyên tử ở đầu dãy (nút thứ 1). Bằng cách đó, ta coi như các dãy giống nhau được xếp kế tiếp nhau thành một dãy dài vô hạn. Cũng có thể tưởng tượng là mạng một chiều có đầu và cuối nối nhau thành một vòng kín. Giả thiết về điều kiện biên tuần hoàn giúp cho việc tính toán được thuận lợi nhưng không ảnh hưởng gì tới kết quả vật lý.



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

- Từ điều kiện biên tuần hoàn ta có:

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

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

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

Với: j - là số nguyên

Trong mạng một chiều ta có:

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}$$

Vì vậy các giá trị n nằm trong khoảng

$$-\frac{N}{2} \leq n \leq \frac{N}{2}$$

Hệ quả của điều kiện biên tuần hoàn

- Nghiệm tổng quát thu được là:

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

- Các giá trị này của n cho ta N giá trị khác nhau của q . Như vậy điều kiện biên tuần hoàn đã đưa đến sự gián đoạn của giá trị vector sóng q .
- Các giá trị này cách nhau $2\pi/N$
- Trong phổ $\omega(q)$ chỉ có các giá trị của ω ứng với N giá trị đó của q .

Câu hỏi

1. Trong trường hợp nào thì dao động của mạng ba chiều có thể coi như dao động của mạng một chiều?
2. Các gần đúng nào đã được đưa ra để giải bài toán dao động của mạng tinh thể một chiều? Tại sao các giả thiết đó có thể chấp nhận được?
3. Hệ thức tán sắc và đồ thị mô tả $\omega(q)$?
4. Các tính chất của ω và vận tốc nhóm của dao động tại tâm và biên vùng Brillouin?
5. Điều kiện biên tuần hoàn và hệ quả của điều kiện biên tuần hoàn dẫn đến điều gì?