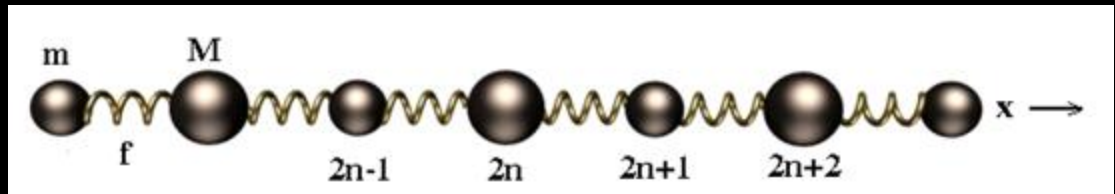


Chương III

DAO ĐỘNG MẠNG TỈNH THỂ

Dao động của mạng một chiều chứa 2 loại nguyên tử có khối lượng m và M

Để đơn giản ta đặt giả thuyết mô hình các nguyên tử đặt xen kẽ và cách đều nhau một khoảng a



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

cuduongthancong.com

Nghiệm của chúng có dạng:

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

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

cuduongthancong.com

→ Thay các nghiệm này vào phương trình chuyển động tương ứng được 2 phương trình để xác định 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. Do 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 hai tần số khác nhau ω^- và ω^+ , tùy theo việc lấy dấu trừ hay dấu cộng trong biểu thức của ω

→ Nếu biểu diễn ω theo q ta được hai nhánh tần số:

- Nhánh âm: $\omega^- (q)$

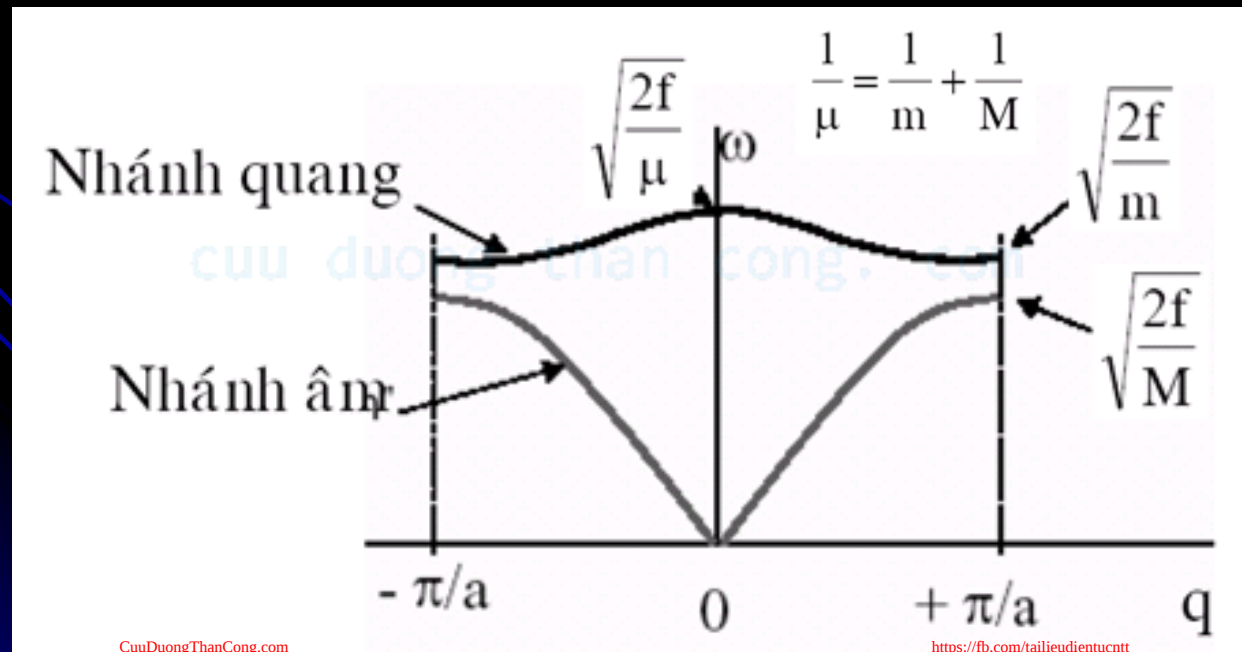
- Nhánh quang: $\omega^+ (q)$



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

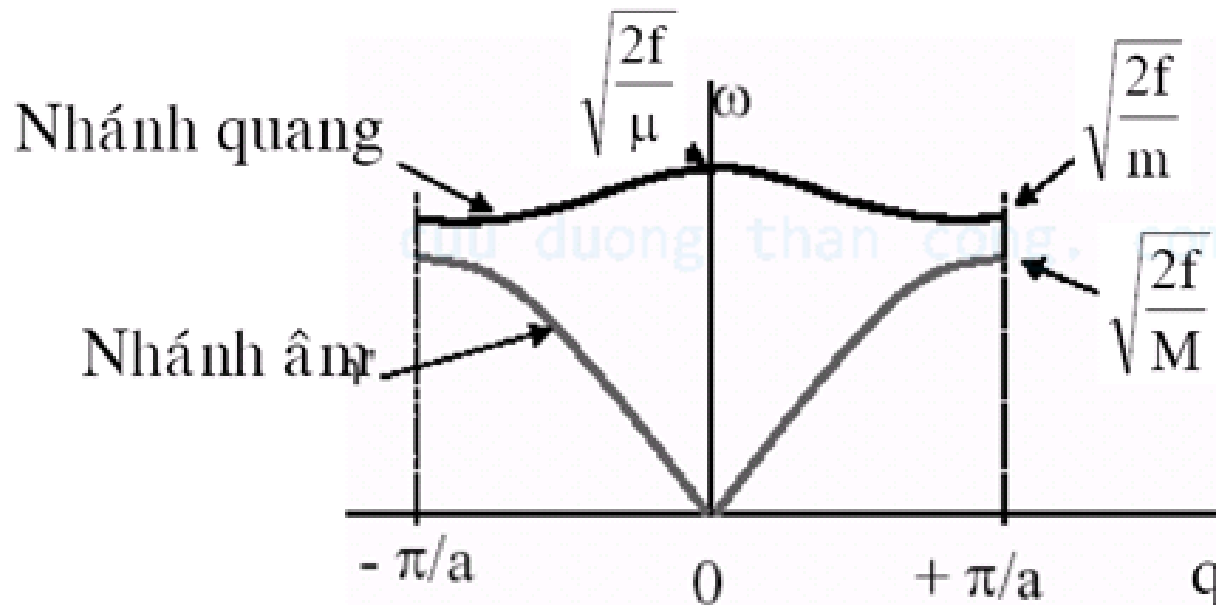
⇒ Khác với chuỗi nguyên tử một loại, trong chuỗi nguyên tử hai loại ứng với mỗi giá trị của vector sóng q có hai giá trị tần số ω . Hai giá trị tần số này ứng với hai loại: nhánh âm và nhánh quang

cuu duong than cong. com



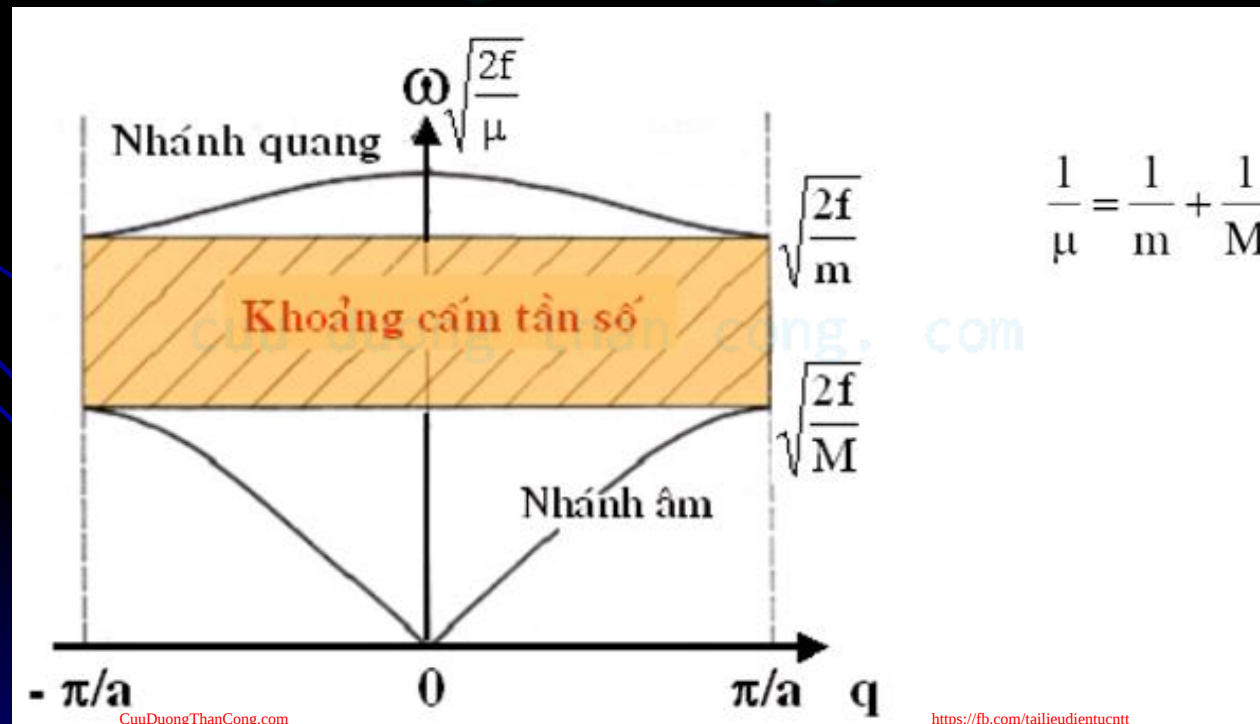
$$\omega^2 = f \left\{ \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \left[\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \frac{qa}{2}}{mM} \right]^{1/2} \right\}$$

- Nguyên nhân của sự xuất hiện hai nhánh dao động **âm học và quang học** trong phổ dao động của mạng tinh thể là kết quả của việc tinh thể **có gốc**, tức là trong một **ô sơ cấp có hai nguyên tử hoặc nhiều hơn**



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

- Dựa vào hình vẽ dưới đây, ta nhận thấy:
 - Trên phổ $\omega(q)$ có một khoảng giá trị từ $\omega^- = (2f/M)^{1/2}$ đến $\omega^+ = (2f/m)^{1/2}$ không ứng với nghiệm nào của phương trình sóng truyền trong mạng tinh thể. Nói cách khác: trong mạng tinh thể không có dao động ứng với tần số trong khoảng đó. **Đây chính là đặc điểm của mạng tinh thể chứa nhiều nguyên tử trong một ô sơ cấp.**
 - Trong trường hợp này, biên vùng Brillouin có một **khu vực cấm**. Sóng ứng với tần số trong khu vực đó không lan truyền được mà **bị hấp thụ** mạnh.



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

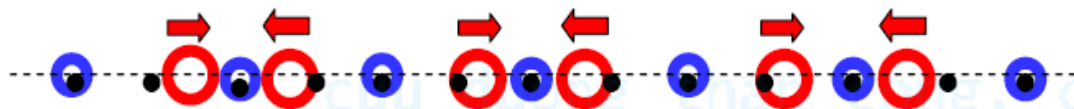
$$\omega^2 = \frac{f}{mM} [(m + M) \pm \sqrt{(m + M)^2 - 2mM(1 - \cos qa)}]$$

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



$$q = \pi/a$$

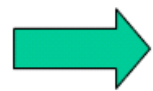
Tần số thấp : nguyên tử nhẹ dao động , nguyên tử nặng đứng yên

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

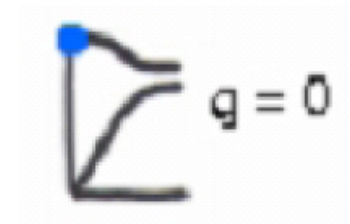
$$\omega^2 = \frac{f(m + M)}{mM} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{2mM}{(m + M)^2} \frac{(qa)^2}{2}} \right]$$



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

Cũng có 2 nghiệm :

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



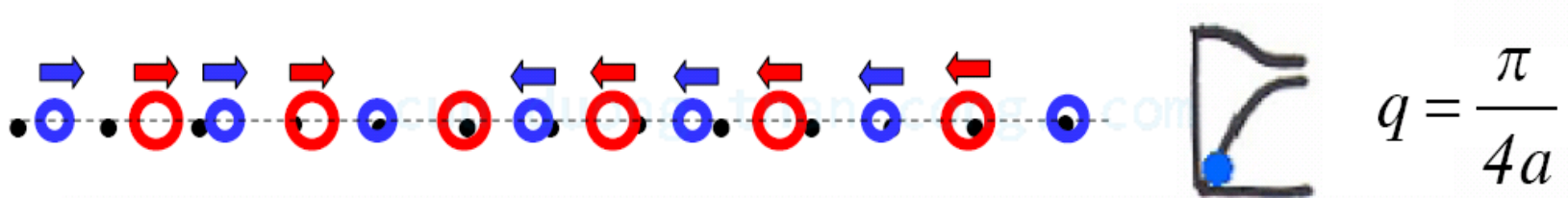
Các nguyên tử trong cùng ô ngược pha nhưng các ô lân cận thì đồng pha

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

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

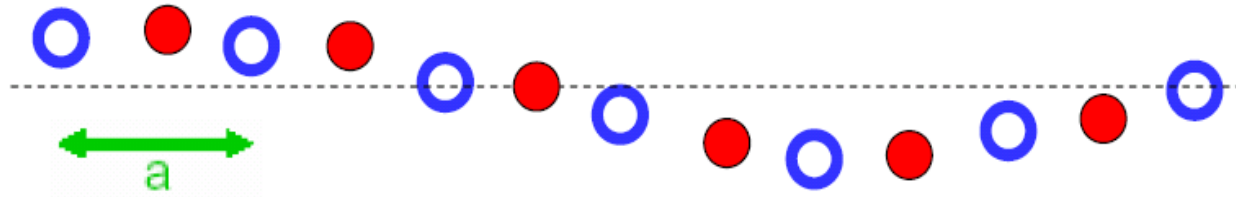
$$\omega^2 = \frac{q^2 a^2}{2} \frac{f}{m+M} \quad \rightarrow \quad \omega = qa \sqrt{\frac{f}{2(m+M)}}$$

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

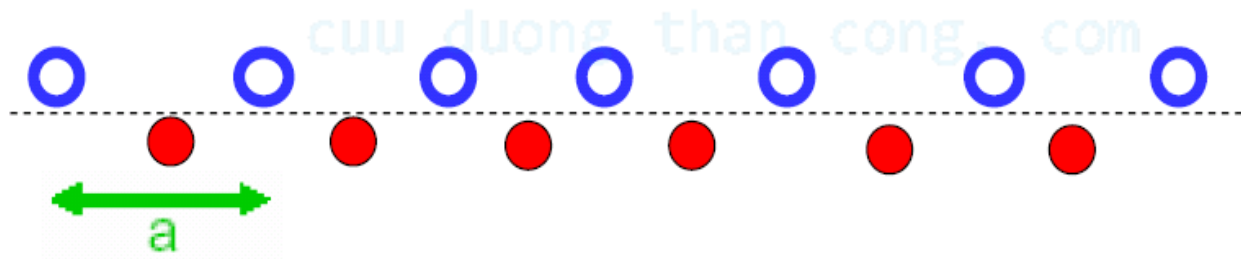


Các nguyên tử trong ô đơn vị chuyển động đồng pha, các ô lân cận cũng đồng pha

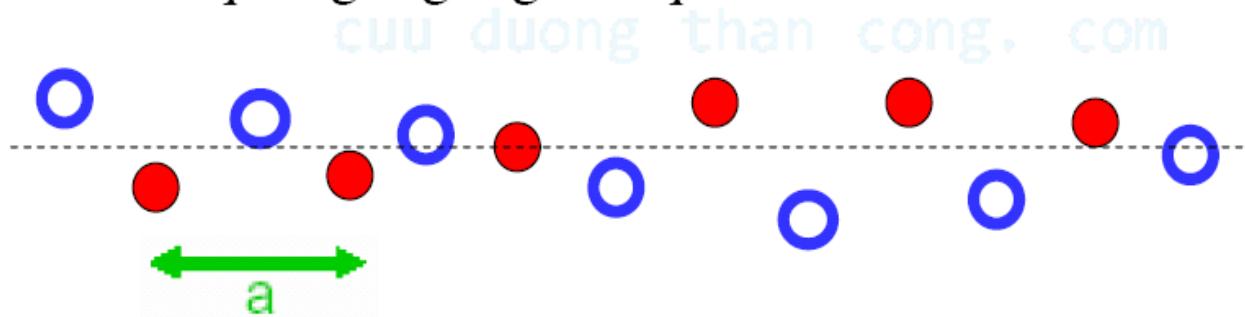
Nhánh âm ngang với q nhỏ



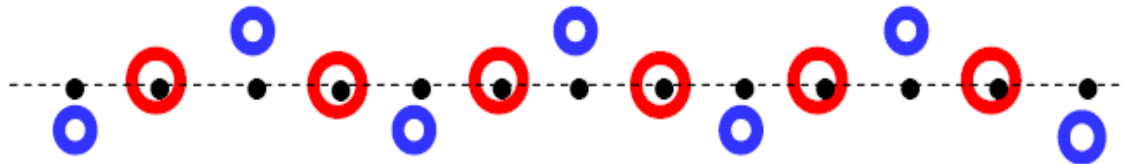
Nhánh quang ngang với $q = 0$



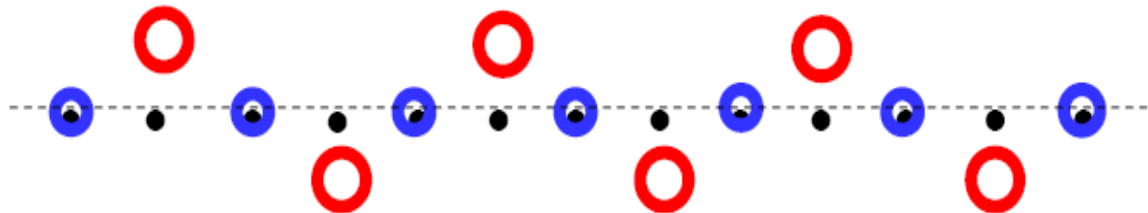
Nhánh quang ngang với q nhỏ



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

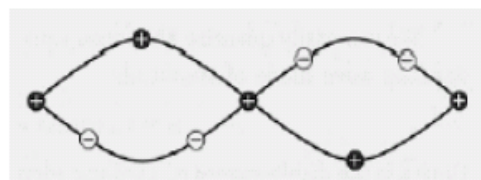
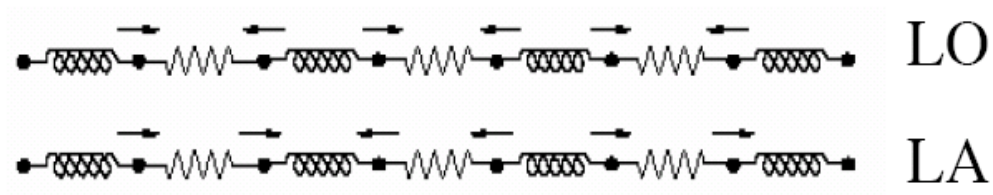
- Các hạt dao động đồng pha với biên độ bằng nhau có tần số thuộc nhánh âm với q nhỏ. Trong trường hợp này ô mạng dịch chuyển như một toàn bộ. Do đó xuất hiện các chỗ nén và giãn trong tinh thể tương tự như sự nén và giãn của tinh thể khi có sóng âm truyền qua. Vì vậy dao động trong đó cả hai nguyên tử trong ô đơn vị chuyển động đồng pha được gọi là **dao động “âm”**
- Nhánh quang tương ứng với trường hợp hai 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 moment lưỡng cực điện nhờ đó có thể tương tác mạnh với sóng điện từ → **loại dao động “quang”**



A

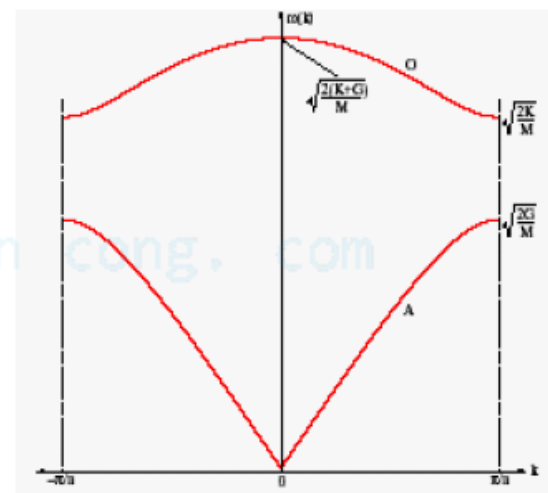
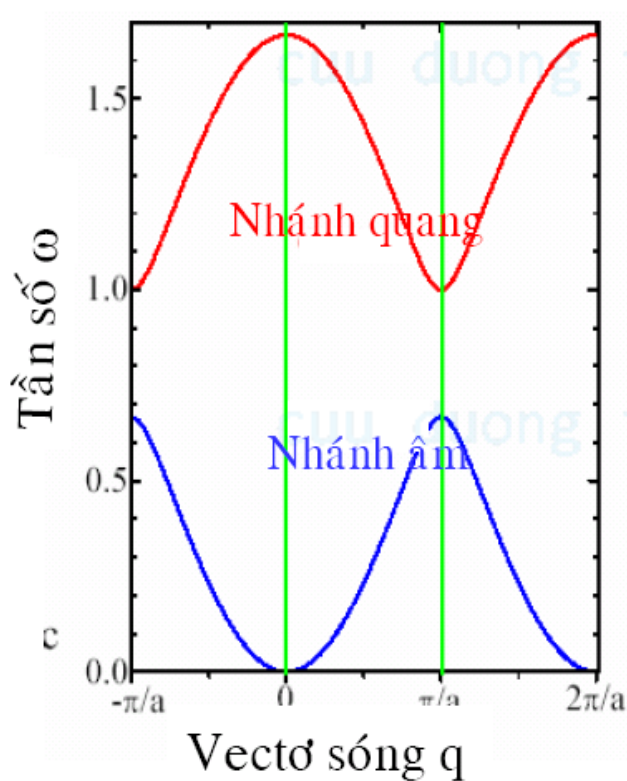


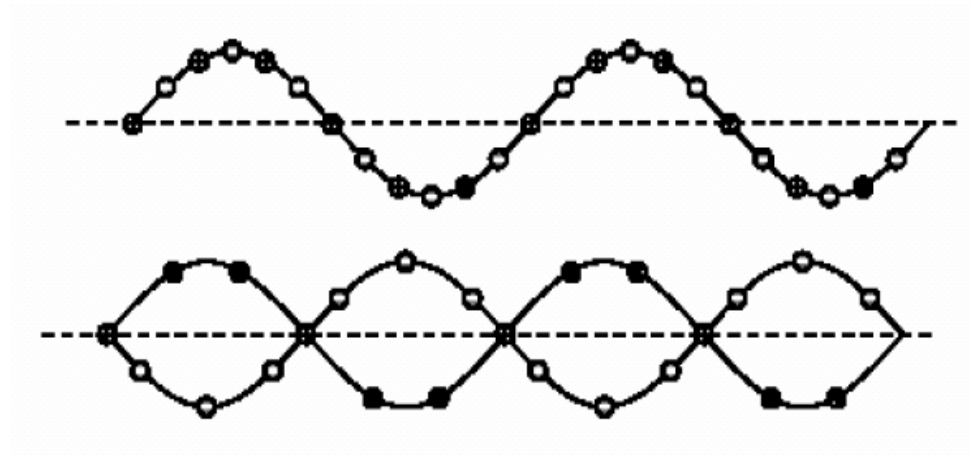
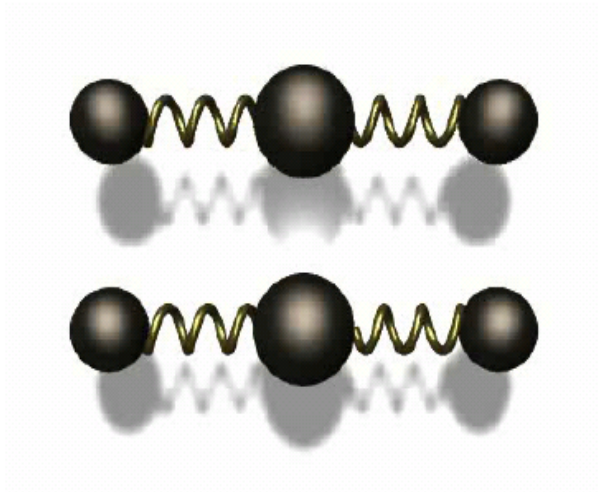
O



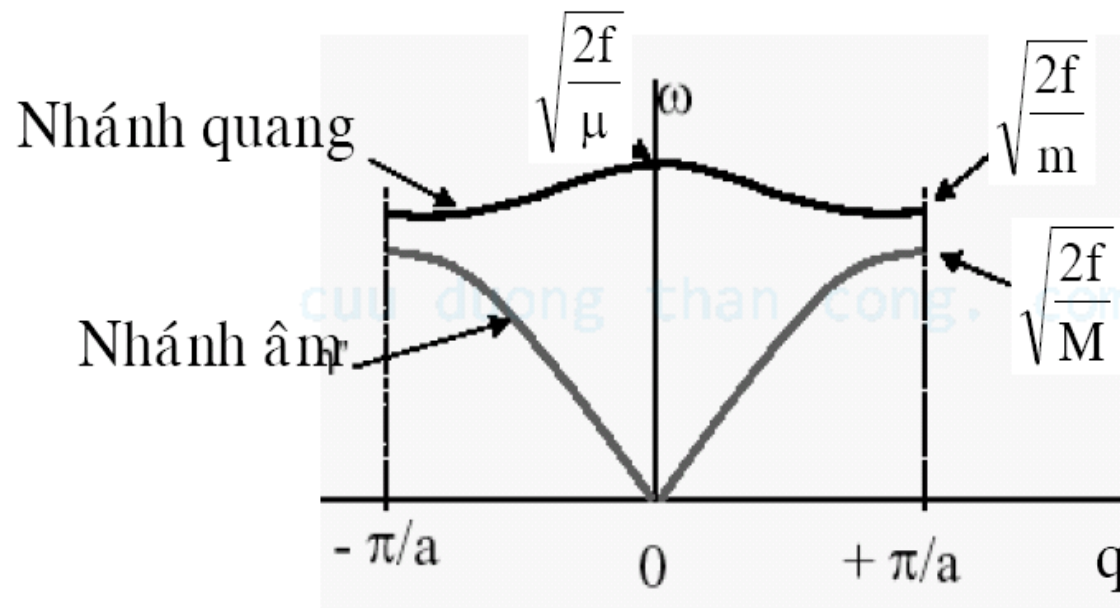
TO

TA





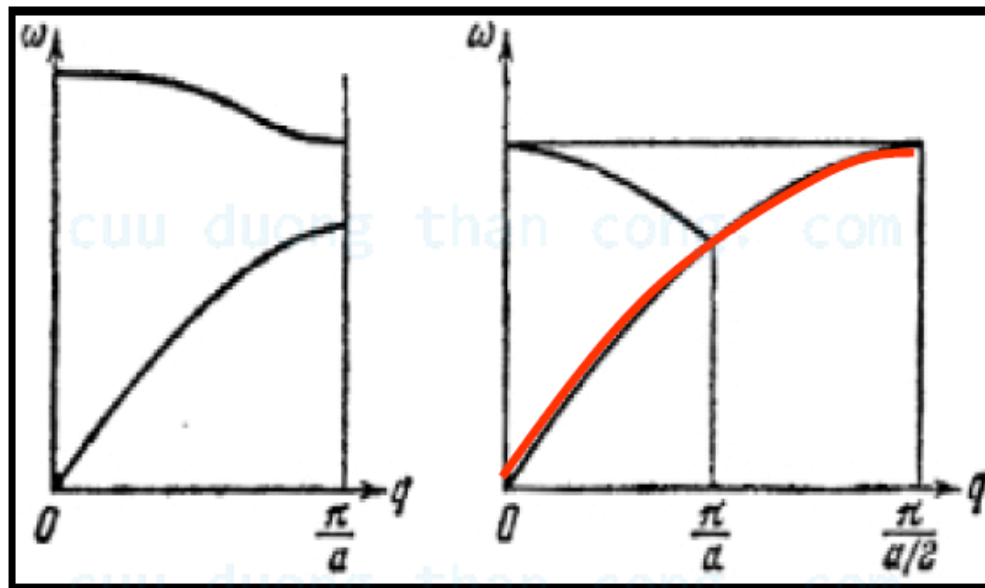
cuu duong than cong. com



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

Khi $m = M$: suy biến .

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



Dao động của mạng tinh thể 3 chiều

Các kết quả nêu trên có thể mở rộng cho mạng tinh thể 3 chiều.

- 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 ra khỏi vị trí cân bằng.
- Khai triển V thành chuỗi quanh vị trí cân bằng
- Khi độ dịch chuyển của các nguyên tử là nhỏ, có thể bỏ qua.
- Khi độ dịch chuyển của các nguyên tử đủ lớn lúc này trong mạng tinh thể sẽ xuất hiện các nhánh dao động âm và quang

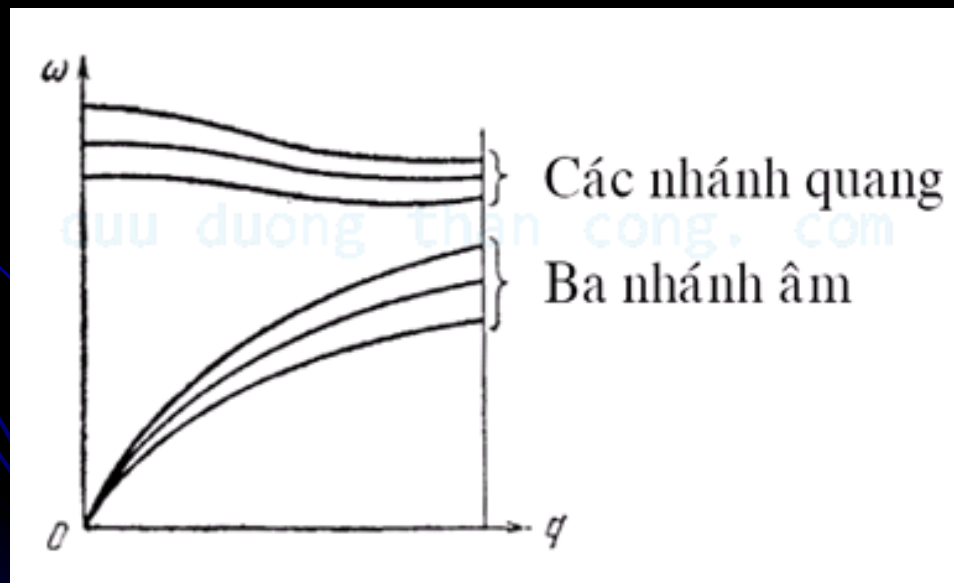
- Cách làm trên có thể tổng quát cho trường hợp tinh thể có nhiều loại nguyên tử hoặc trong ô chứa nhiều nguyên tử

Kết quả cho thấy:

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

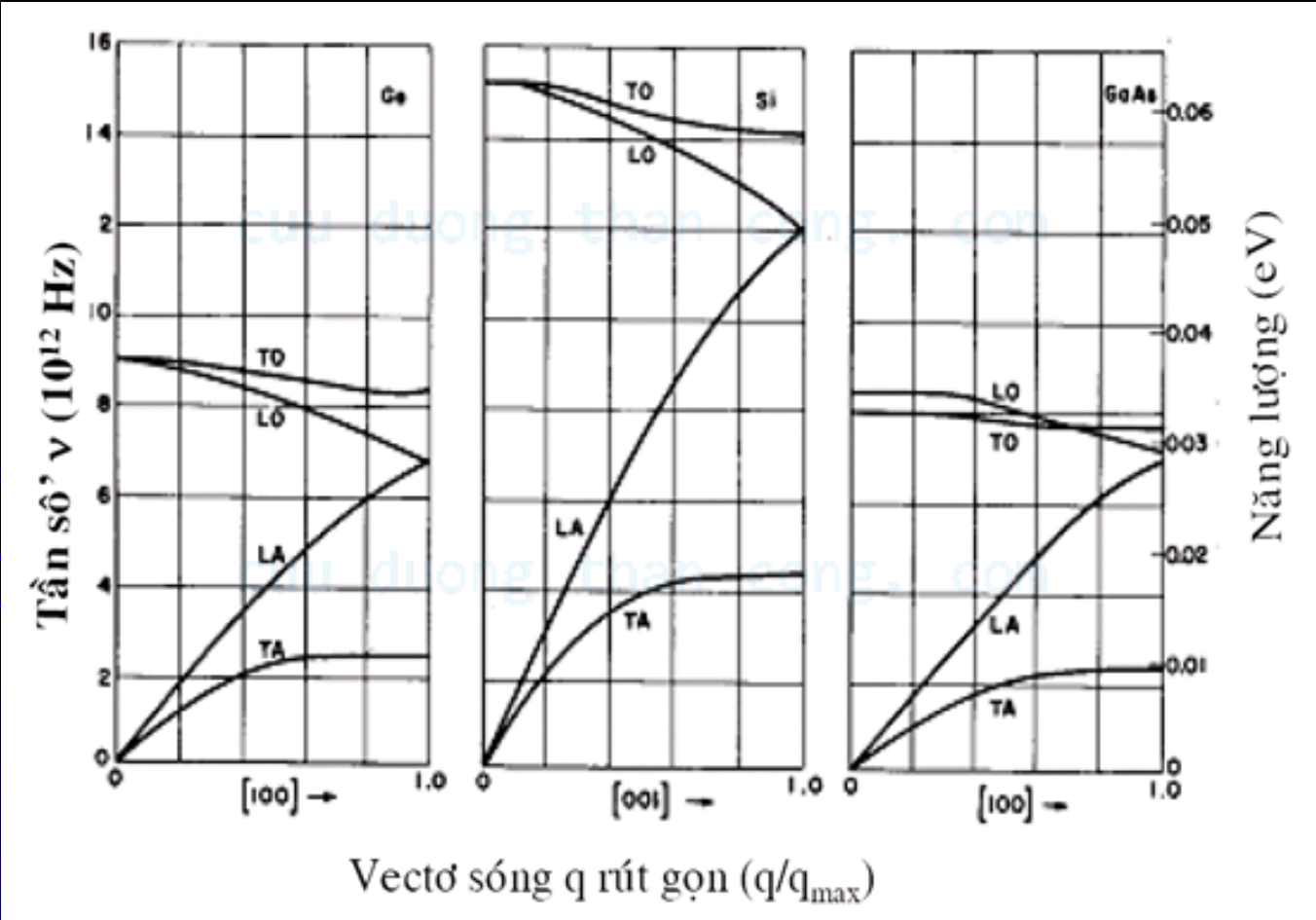
$$\omega_1(q); \omega_2(q); \omega_3(q) \dots \omega_p(q)$$

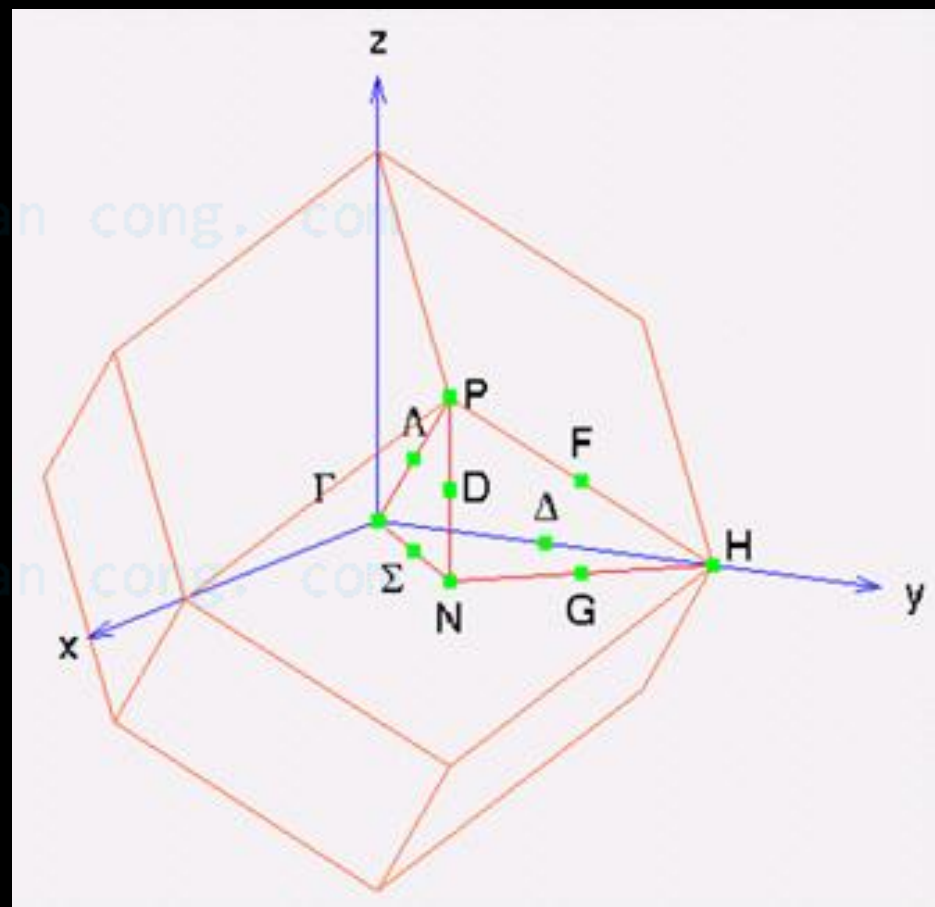
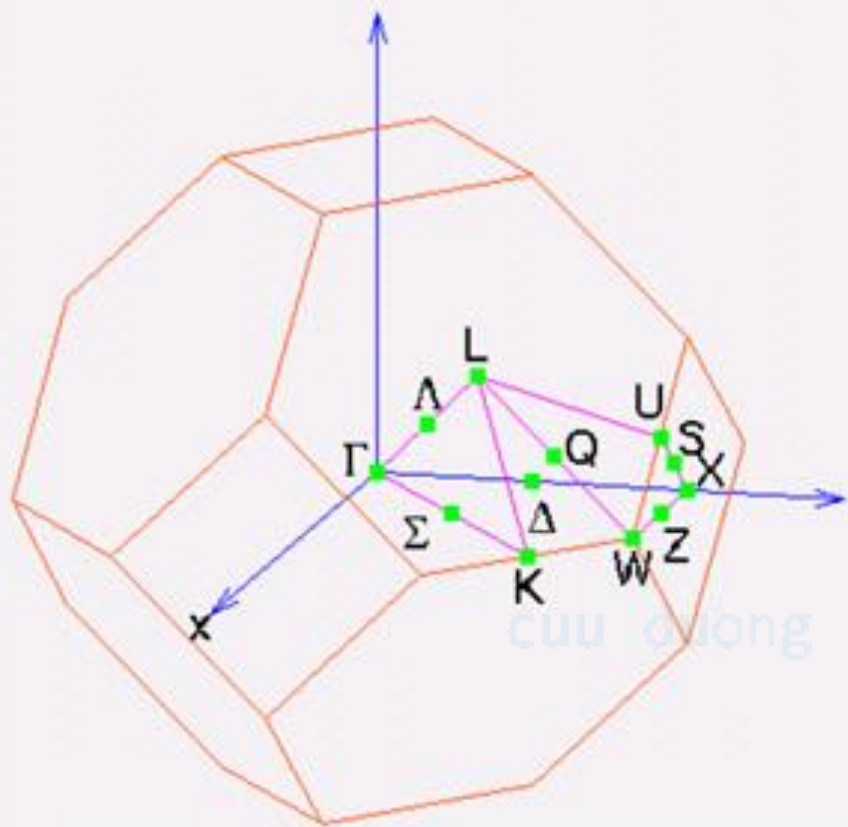
Trong đó có 3 nhánh âm và $3p-3$ nhánh quang

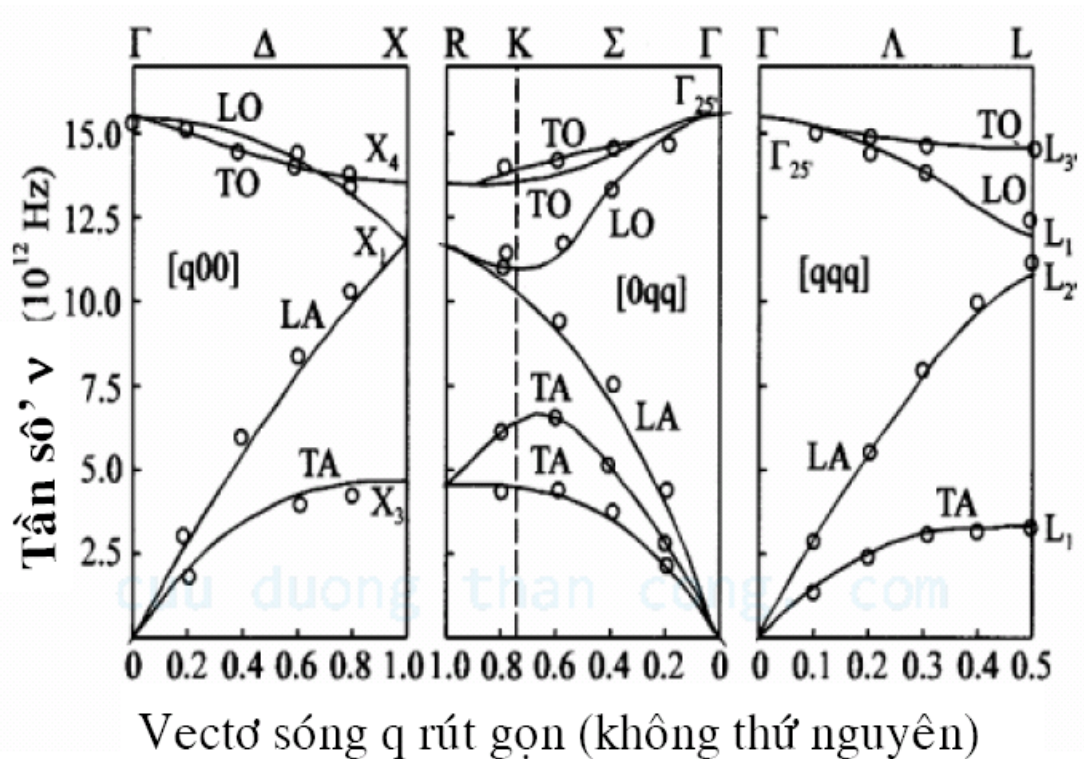


- Các nhánh này tùy theo sự đối xứng của mạng tinh thể có thể trùng nhau theo một số chiều nào đó (suy biến)

Ví dụ minh họa



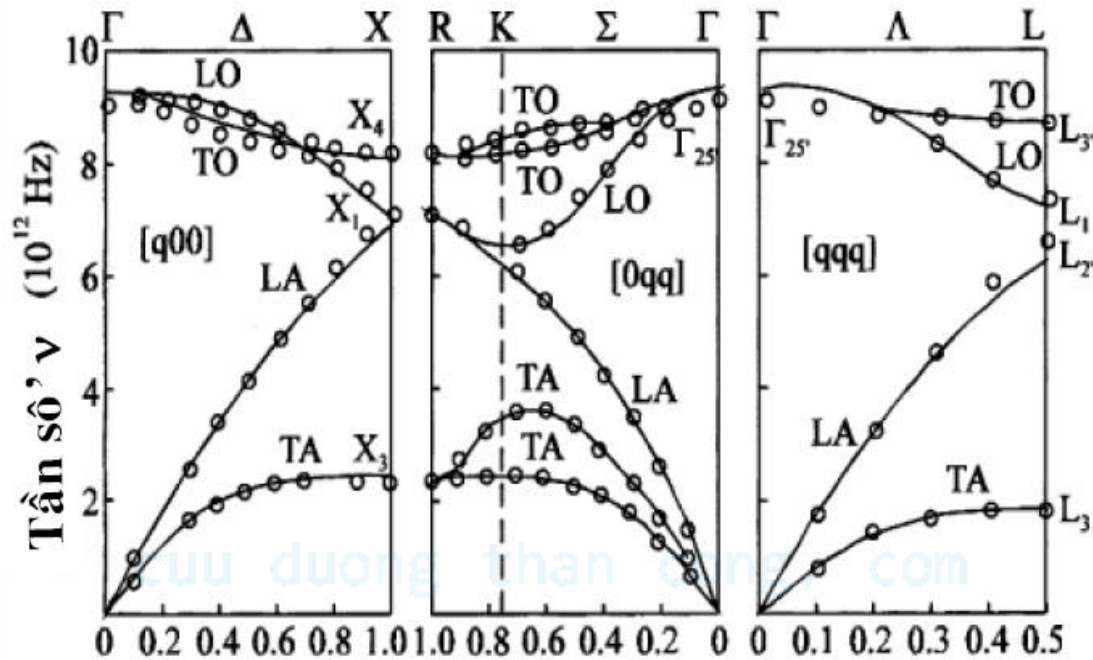




Si : Tần số phonon
(đơn vị 10^{12} Hz)

T=300K

$\nu_{\text{LTO}}(\Gamma_{25'})$	$15.5 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TA}}(X_3)$	$4.5 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{LAO}}(X_1)$	$12.3 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TO}}(X_4)$	$13.9 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TA}}(L_3)$	$3.45 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{LA}}(L_{2'})$	$11.3 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{LO}}(L_1)$	$12.6 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{\text{TO}}(L_{3'})$	$14.7 \cdot 10^{12}$ Hz



Vectơ sóng q rút gọn (không thứ nguyên)

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

$T=300K$

$\nu_{LTO}(\Gamma_{25'})$	$9.02 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{TA}(X_3)$	$2.385 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{LAO}(X_1)$	$7.14 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{TO}(X_4)$	$8.17 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{TA}(L_3)$	$1.87 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{LA}(L_{2'})$	$6.63 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{LO}(L_1)$	$7.27 \cdot 10^{12}$ Hz
$\nu_{TO}(L_{3'})$	$8.55 \cdot 10^{12}$ Hz

- Tinh thể có N nguyên tử có thể xem như 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 hoà
 - **Dao động tập thể** 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.
 - Với tọa độ chuẩn, **dao động của mạng tương đương với $3N$ dao động điều hoà độc lập**
- **Mỗi 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 là 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 1 hạt.
- Khi các hạt không tương tác với nhau, năng lượng và hàm sóng của hệ là:

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

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

- Q_s là toạ độ suy rộng, E_s và ψ_s thoả 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 hoà đã được giải trong cơ học lượng tử. Giá trị riêng của nghiệm là:

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

trong đó: n_s - số nguyên dương hoặc bằng 0

- Khác với lý thuyết cổ điển, theo lý thuyết lượng tử **năng lượng chỉ có thể lấy các giá trị gián đoạn**
- **Năng lượng $\eta \omega_s$ chỉ có thể xem là một lượng tử của dao động với tần số $\omega_s \rightarrow$ 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 lựa chọn cho số lượng tử của dao động có dạng:

$$\Delta n_s = \pm 1$$

- Khi $\Delta n_s = -1$ mạng dịch chuyển vào trạng thái có năng lượng thấp hơn: năng lượng $\hbar\omega_s$ được truyền cho các hạt tải điện hoặc vật xung quanh $\rightarrow$ 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 là: $E_p = \hbar \omega_s$
- Chuẩn xung lượng của phonon: $P_p = \hbar q_s$
- 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

Câu hỏi

- Nêu nguyên nhân của sự xuất hiện hai nhánh âm học và quang học
- Thế nào là vùng cấm. Đặc điểm của vùng cấm
- Trong trường hợp mạng 3 chiều, có bao nhiêu trạng thái trong vùng Brillouin thứ nhất?