

www.mientayvn.com

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kỹ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

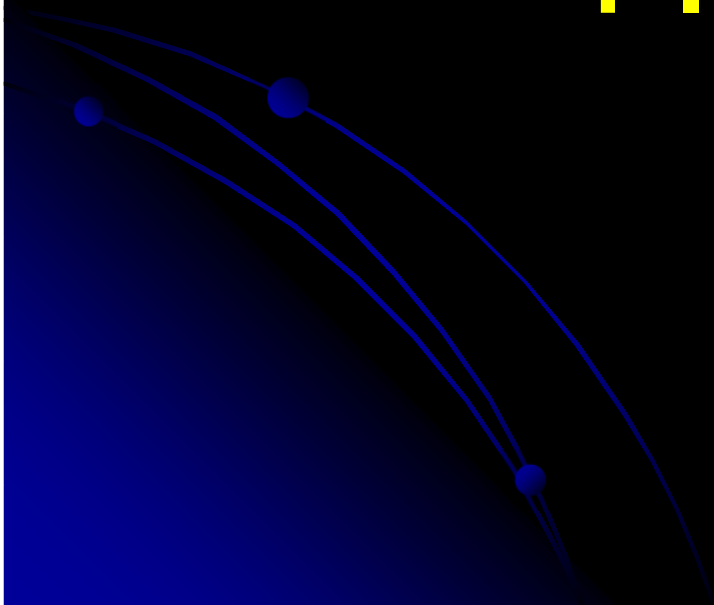
Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao i tr c tuy n t i:

http://www.mientayvn.com/chat_box_li.html

Chương III
ĐẠO NÔNG MẠI
TINH THẦN



I. ÑOÑNG LÖÖC HOÏC MAÏNG TINH THEÁ

Nhöõng tính chất quan trọng của chất rắn ñều liên quan ñến dao ñöõng maïng tinh thể

Trong tinh thể các nguyên tử này dao ñöõng quanh vị trí cân bằng của nó (nut maïng).

Dao ñöõng này ñöôc lan truyền trong maïng tinh thể tạo thành sóng trong maïng tinh thể

Sóng này phụ thuộc vào 2 yếu tố

- Loại lực liên kết trong tinh thể
- Cấu trúc của maïng tinh thể

➤ Loại liên kết thì liên quan tới bản chất của nguyên tử tạo nên tinh thể và số tổng các giốchùng.

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

Mỗi loại tinh thể cho một kiểu dao động riêng gọi là **pho phôn** của nó

Pho phôn quyết định phần lớn các tính chất quan trọng của chất rắn như: **nhệt dung, ão ãn nhiet, he số ãn ãn nhiet...**

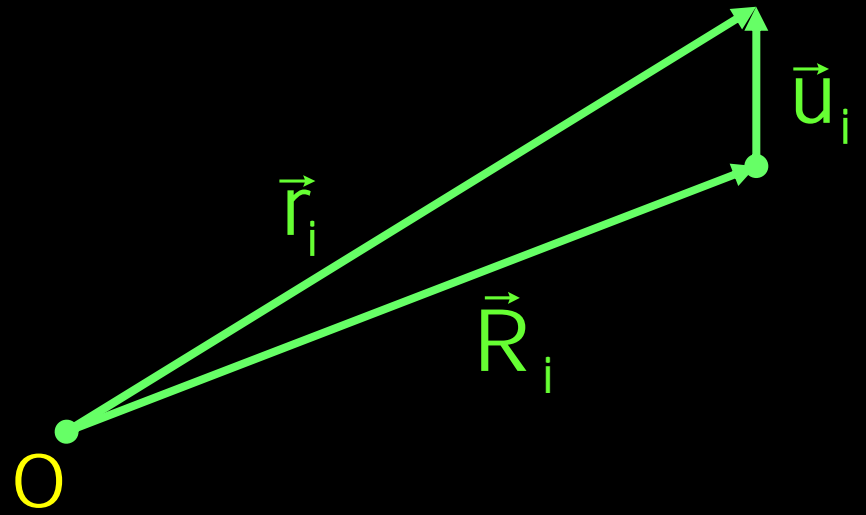
⇒ Bài toán dao ãn mạng tinh thể là một phần quan trọng của vật lý chất rắn.

Xét mẫu tinh thể đơn giản nhất là Argon

- Các nguyên tử Argon trung hòa xếp đều đặn với các lớp vỏ điện tử bao bọc 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 năng lượng của các nguyên tử quanh vị trí cân bằng của nó
- Theo mẫu Einstein: mỗi nguyên tử trong tinh thể dao động nhỏ hơn trong một giếng thế tạo bởi các lực tổng tác của nó với các nguyên tử lân cận ⇒ Thế Lennard - Jones.

➤ Giới hạn của mẫu dao động trong nhiều kiến nhiệt độ cao.

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



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

\vec{R}_i = vectơ 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 dao động $E_{\vec{n}} = \sum_i \frac{1}{2} M_i \vec{u}_i^2 = \sum_i \frac{P_i^2}{2M_i}$

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

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

Khai triển hàm U thành chuỗi Taylor quanh VTGB 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 nhiều hạt dạng:

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

$$\Rightarrow U = U_0 + U_{\text{nhiều hạt}} = U_{\text{nhiều hạt}}$$

Phương trình dao động còn dạng phương trình dao động nhiều hạt:

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

Hay:

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

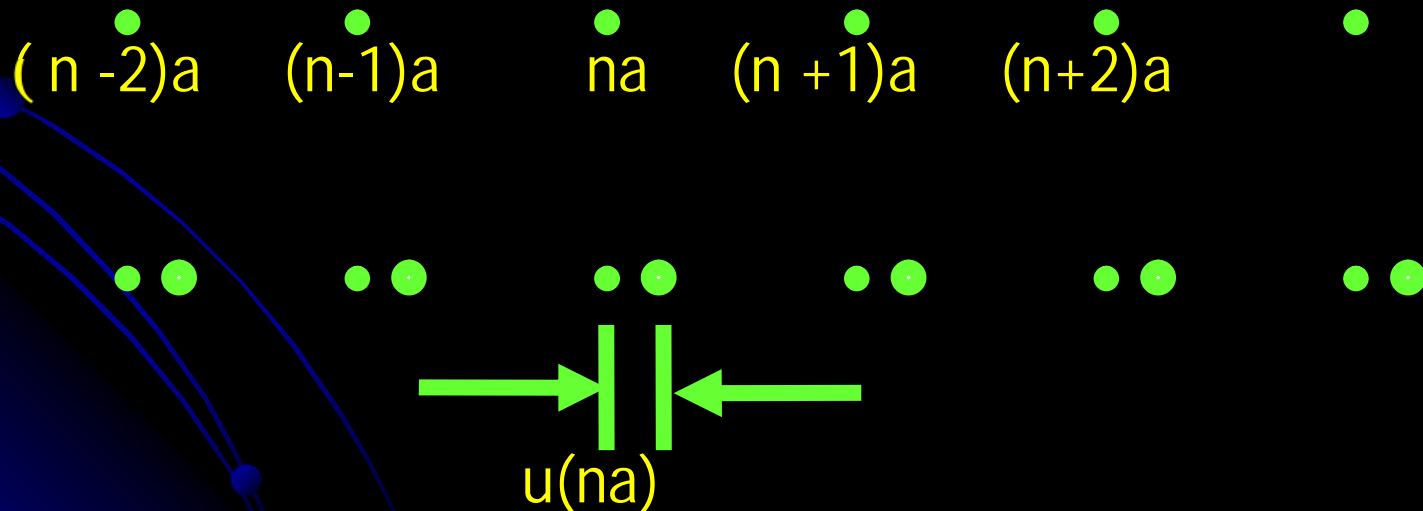
Lực tác dụng gây ra dao động của nguyên tử có dạng lực hồi phục:

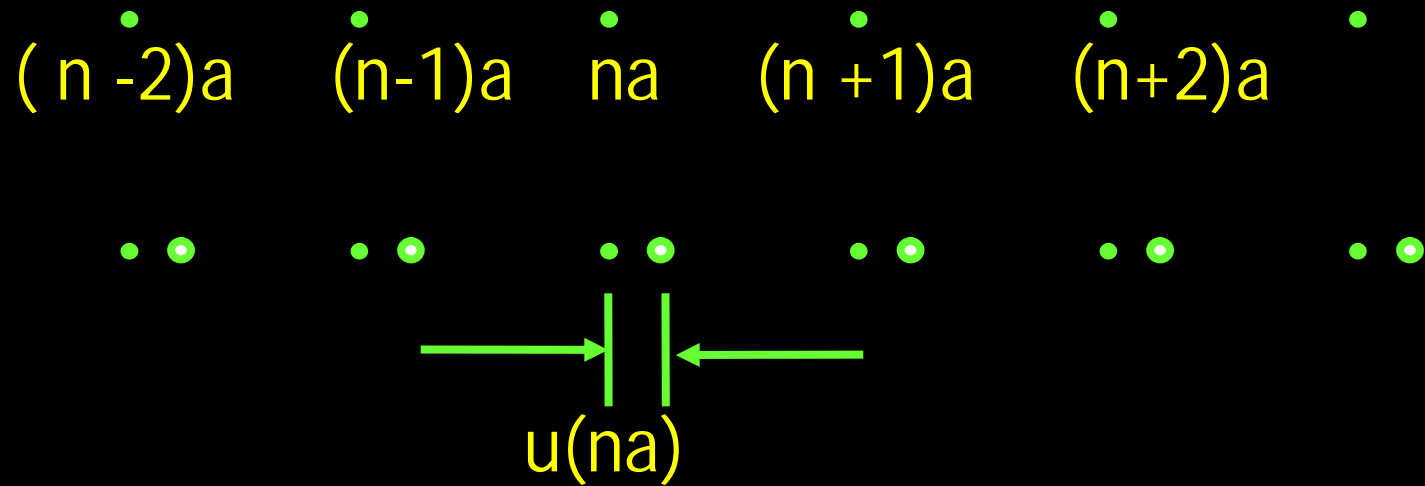
$$\vec{F}_i = -\alpha \vec{u}_i \quad \alpha = \text{hằng số hồi}$$

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 trục thẳng
- Chúng chỉ tương tác với các nguyên tử gần nhất.
- Khoảng cách giữa các nguyên tử gần nhất là a .





Xét nguyên tố thời ô ở vị trí nút $R = na$.

Nội dung của nút này là $u(na)$.

The năng trong trường hợp này có dạng:

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

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

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

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

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

Giải :

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

Điều kiện biên dẫn tới:

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

Từ (1) và (2) ta suy ra ñöôc:

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

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

Trong ñöôc

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

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

NHÃN XÉT

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

Vậy các dao động mang tên như thế khi:

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

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

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

Nhà biểu diễn số phụ thuộc của ω theo k gọi là **đường cong tán sắc**.

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

Bất kỳ 1 giá trị nào của vectơ sóng \vec{k} nằm ngoài vùng Brillouin nếu có thể tìm thấy một giá trị của ω trong vùng Brillouin.

⇒ Vì vậy chỉ cần khảo sát trong vùng Brillouin.

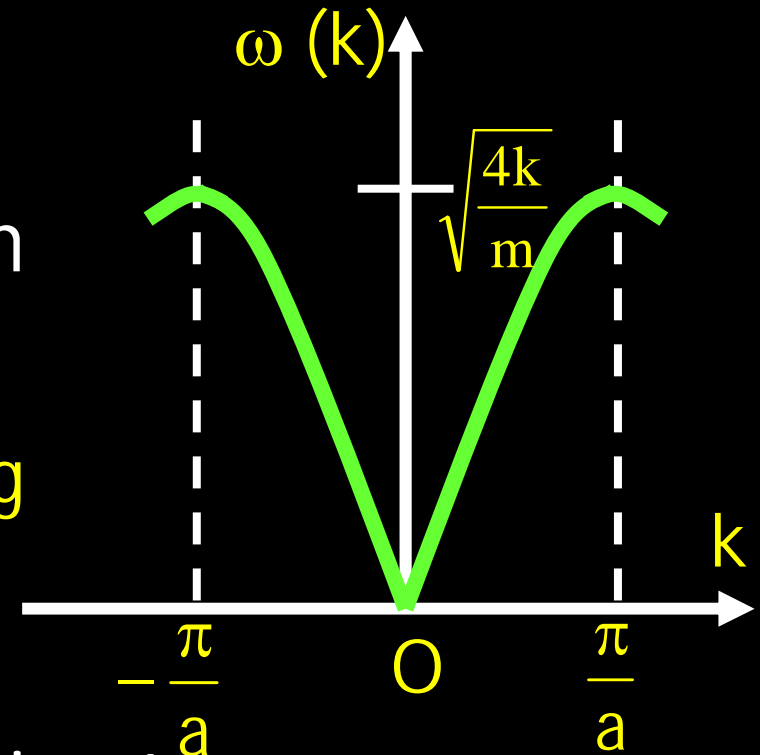
➤ Khi $ka \ll 1$ thì:

$\omega \approx \sqrt{\frac{\alpha}{M}} ka \Rightarrow \omega(k)$ gần như tuyến tính với k

⇒ $\omega(k) \sim k \Rightarrow$ sóng nằm ngoài trong môi trường liên tục

➤ Khi $k = \frac{\pi}{a}$ thì: hàm $\omega(k)$ có tiếp tuyến nằm ngang

⇒ $\omega(k)$ không còn tuyến tính với $k \Rightarrow$ Sóng tán xạ



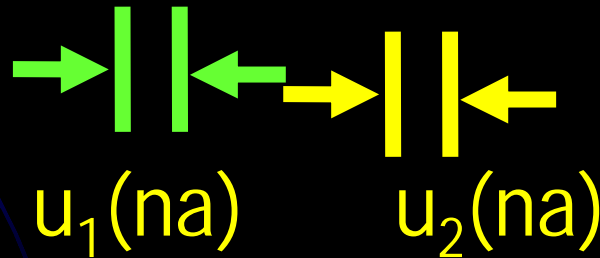
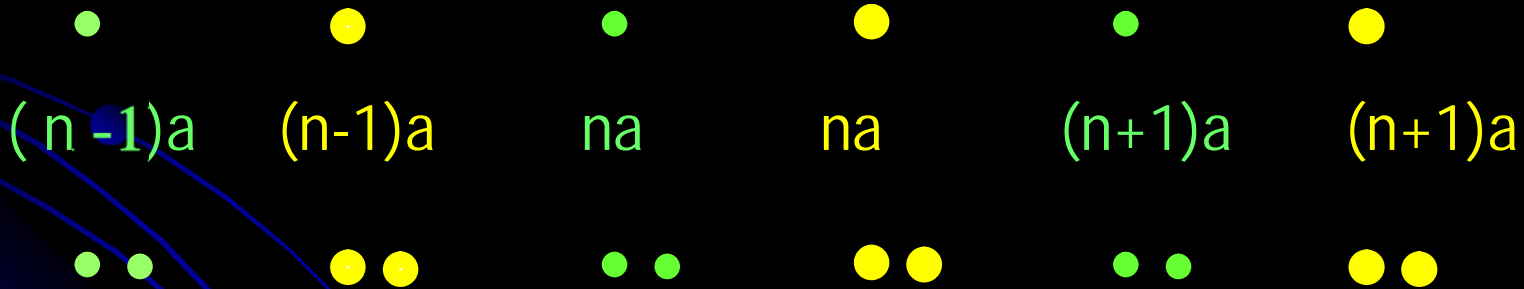
III. DAO ĐỘNG MÃNG CỦA MÃNG MỘT CHIỀU GỒM HAI LOẠI NGUYÊN TỬ

Xét trong hộp mạng một chiều, trong đó có 2 loại nguyên tử khối lượng M_1 và M_2 có hàng số lồi α 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 .

$M_1 [(n-1)a]$ $M_2 [(n-1)a]$ $M_1 (na)$ $M_2(na)$ $M_1 [(n+1)a]$ $M_2 [(n+1) a]$



➤ Nối với nguyên tử lân cận:

The 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:

$$M_1 \ddot{u}_1 = - \frac{\partial U}{\partial u_1}$$

$$\Rightarrow M_1 \ddot{u}_1 = M_1 \omega^2 u_1 = -2\alpha u_1 + 2\alpha \cos ka u_2$$

$$\Rightarrow (2\alpha - M_1 \omega^2) u_1 - 2\alpha \cos ka u_2 = 0 \quad (1)$$

➤ **Loại với nguyên tử thứ hai:**

The năng trong trường hợp này có dạng:

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

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

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

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

Để tìm ω ta giải hệ phương trình (1) và (2):

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

⇒ giải phương trình ãnh thời:

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

Phương trình cõng 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 $k = \frac{\pi}{2a}$: $\sin ka = 1$: $\omega^{+2} = \frac{2\alpha}{M_2}$; $\omega^{-2} = \frac{2\alpha}{M_1}$

NHÃN XEÙT

Nhà thò của ω^+ và ω^- cho thấy:

+ Nói với nghiệm ω^- :

➤ $k \approx 0$: $\omega^-(k) \sim k \Rightarrow$ dao
oãng âm hoïc (vì nòt ng tòi
nhỏ dao oãng sóng dài trong
môã tr òng liên tục ãn hoã)

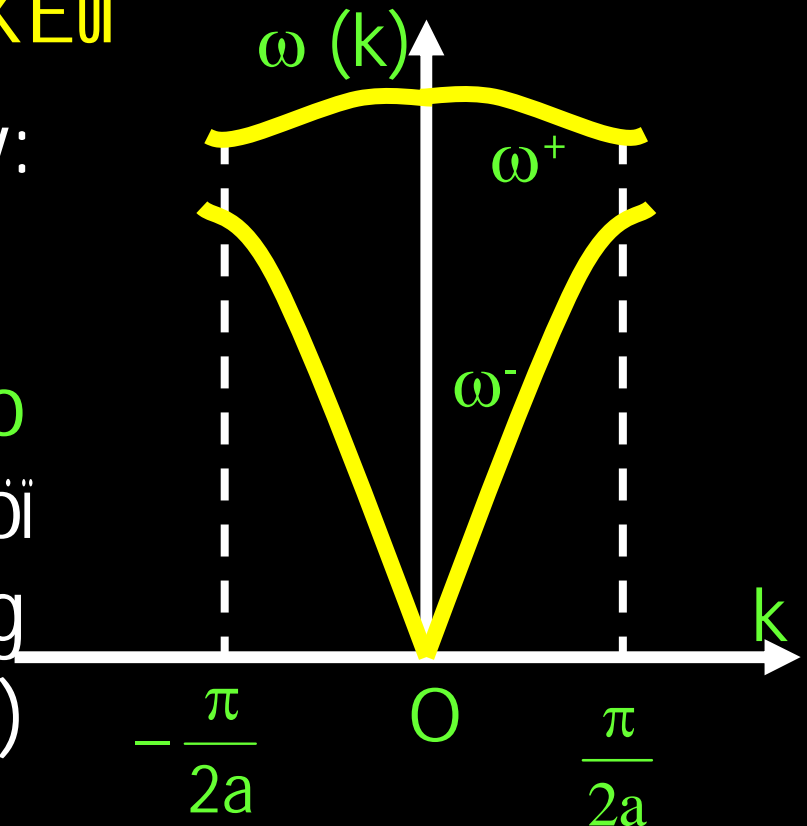
\Rightarrow Nhãn âm

+ Nói với nghiệm ω^+ :

Khi $k \approx 0$: nhãn ω^+ nằm xa nhãn ω^-

Khi k tăng: nhãn ω^+ tiến gần nhãn ω^-

\Rightarrow dao oãng quang hoïc \Rightarrow Nhãn quang



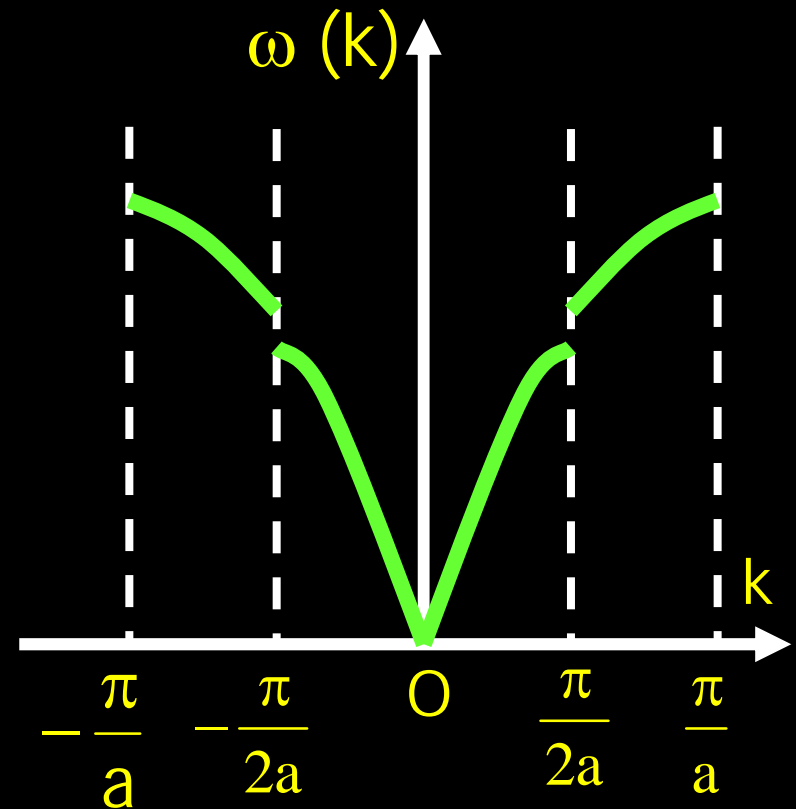
➤ Nếu thay đổi khối lượng nguyên tử sẽ làm xuất hiện các biên mới của vùng tại điểm $\pm \frac{\pi}{2a}$

➤ Khi qua các biên này tần số thay đổi một cách gián đoạn tạo thành một khe .

➤ Tổng thì 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 hoặc và 2 nhánh quang học.



TOÀN 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 PHOTON

Tính chất của Trường điện từ

+ Tính chất sóng: sóng điện từ là sóng bức xạ sóng λ

+ Tính chất hạt: các lượng tử = photon

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

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

Trong đó

ω = tần số góc

\vec{k} = vectơ sóng của sóng điện từ

Tổng cộng, ta có thể coi mạng tinh thể dao động ngoài tính chất sóng như con có tính chất hạt, những hạt này gọi là **phoноn**.

Mỗi phoноn sẽ mang một **lượng động** và một **xung lượng**:

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

Trong đó ω = tần số góc

\vec{q} = vectơ sóng của sóng dao động mạng.

Trong phép gần đúng dao động nhỏ, các phoноn coi như **chuyển động** tự do tạo thành **khí phoноn lý tưởng**.

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

Khí phonon tuân theo **phân bố Bose – Einstein**, tức là số phonon trung bình có năng lượng trung bình ($\hbar\omega$) ở nhiều kiến 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 vận tốc 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