

KATILARIN ELEKTRONİK YAPISININ BENZETİŞİMİ

**Katıların Titreşimsel Özellikleri:
Fononlar-2**

Doç.Dr. Yeşim Moğulkoç

E-posta: mogulkoc@eng.ankara.edu.tr

Tel: 0312 2033550

İki Tür Atomlu Zincir

- Birim hücrelerinde farklı cins atomları olan NaCl gibi iyonik bir yapıda dispersiyon ilişkisi birim hücrelerinde tek tür baz atomu içeren yapı için izlenen yolla elde edilir. Ancak bu kez iki farklı atom için iki ayrı hareket denklemi yazılmalıdır.
- Atomlararası bağları temsil eden yay sabiti (etkileşim potansiyeli) de farklı olacaktır. Ancak eşit alarak çözüme ulaşacağız. Her ne kadar gerçek durum olmasa da yine de nitel olarak iyi sonuçlar elde edilir.
- Kütleleri M ve m olan atomların yalnızca en yakın komşusu ile etkileşimi dikkate alınarak, hareket denklemi yazılacaktır.

M kütleli n. durumdaki atom için hareket denklemi;

$$F_{\text{net}} = F_{\text{sağ}} - F_{\text{sol}} \Rightarrow F_{\text{net}} = K (U_{n+1} - 2U_n + U_{n-1}) = M \frac{\partial^2 U_n}{\partial t^2}$$

m kütleli (n-1). atom için hareket denklemi

$$F_{\text{net}} = F_{\text{sağ}} - F_{\text{sol}} \Rightarrow F_{\text{net}} = K (U_n - 2U_{n-1} + U_{n-2}) = m \frac{\partial^2 U_{n-1}}{\partial t^2}$$

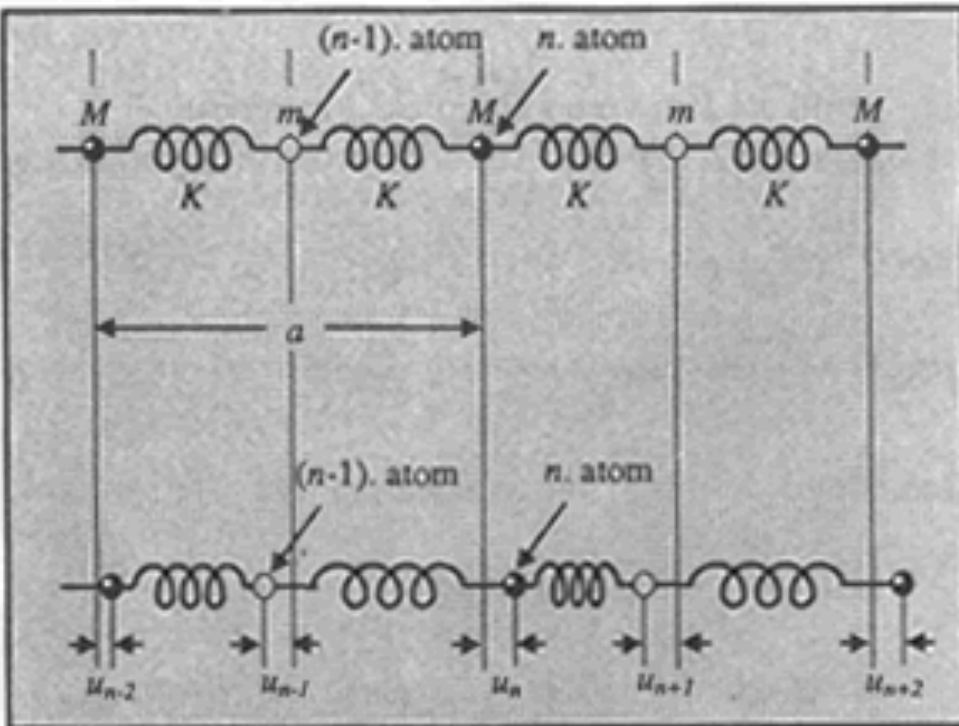
M kütleli atomlar için Hareket Denklemi'nin çözümü için

$$U_n = Ae^{i(kx_n^0 - \omega t)} \quad x_n^0 = na/2$$

m kütleli atomun titreşimi M kütlelininkisi ile aynı olamaz. Bu nedenle iki atomun titreşiminin faz ve genliğindeki farklılığı göz önüne almak için, m kütleli atom için şöyle bir çözüm kabul edilebilir:

$$U_{n-1} = \alpha Ae^{i(kx_{n-1}^0 - \omega t)}$$

$$x_{n-1}^0 = \frac{(n-1)}{2} a$$



$$-\omega^2 M e^{i(kna/2 - \omega t)} = K(\alpha e^{i[k(n+1)a/2 - \omega t]} - 2e^{i(kna/2 - \omega t)} + \alpha e^{i[k(n-1)a/2 - \omega t]})$$

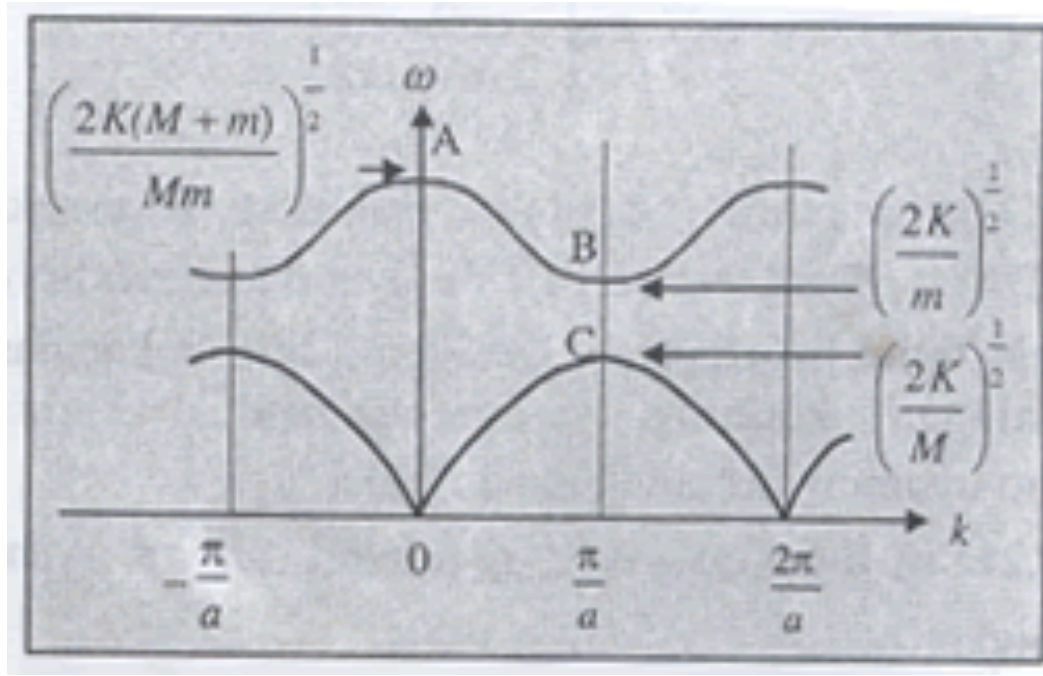
$$\rightarrow -\omega^2 M = 2K \left[\alpha \cos\left(\frac{1}{2}ka\right) - 1 \right]$$

$$-\alpha \omega^2 m e^{i(k(n-1)a/2 - \omega t)} = K(e^{i[kna/2 - \omega t]} - 2\alpha e^{i(k(n-1)a/2 - \omega t)} + e^{i[k(n-2)a/2 - \omega t]})$$

$$\rightarrow -\alpha \omega^2 m = 2K \left[\cos\left(\frac{1}{2}ka\right) - \alpha \right]$$

$$\rightarrow \alpha = \frac{2K \cos\left(\frac{1}{2}ka\right)}{2K - \omega^2 m} = \frac{2K - \omega^2 M}{2K \cos\left(\frac{1}{2}ka\right)}$$

$$mM\omega^4 - 2K(M+m)\omega^2 + 4K^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}ka\right) = 0 \rightarrow \boxed{\omega^2 = \frac{K(M+m)}{Mm} \pm K \left[\left(\frac{M+m}{Mm}\right)^2 - \frac{4}{Mm} \sin^2\left(\frac{1}{2}ka\right) \right]^{1/2}}$$



- ❖ **Dispersiyon denkleminin 2 kökü vardır:** üst dal “**OPTİK DAL**” alt dal “**AKUSTİK DAL**” dır.
- ❖ Dispersiyon eğrisi $k = 2\pi/a$ (a birim hücre boyu) periyoduna sahiptir.
- ❖ Her $2\pi/a$ aralığında N titreşim modu ve dispersiyon bağıntısının 2 dalı olduğundan, $2N$ titreşim modu vardır. Diğer bir deyişle; 2 farklı tür atom için 2 dal oluşur.
- ❖ İki dal arasında bazı frekans değerlerinde titreşim olmadığının göstergesi olan **YASAK BÖLGE** vardır

Bazı k değerlerinde dispersiyon bağıntısının incelenmesi

- $k = \pm \pi/a$ (I. Brillouin bölgesi sınırı)

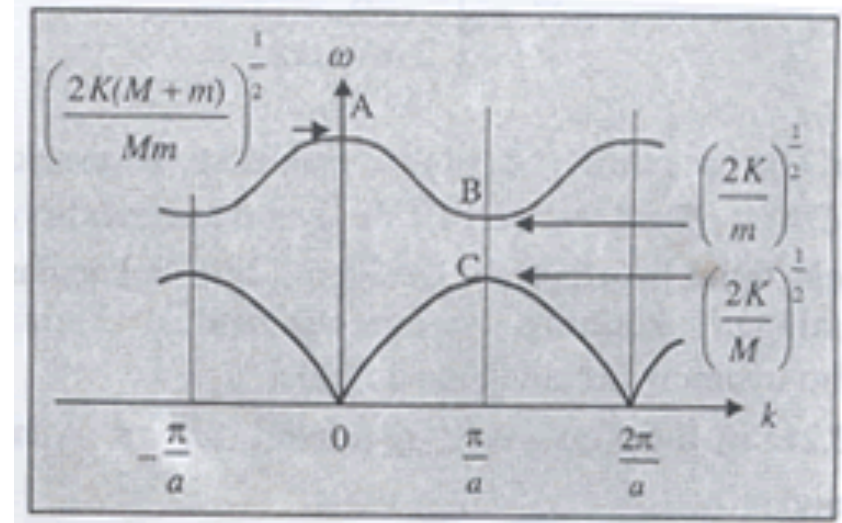
$$\omega^2 = \frac{K(M+m)}{Mm} \pm K \left[\left(\frac{M+m}{Mm} \right)^2 - \frac{4}{Mm} \sin^2 \left(\frac{1}{2} ka \right) \right]^{1/2}$$

$$\omega_A = \left(\frac{2K}{M} \right)^{1/2}$$

$$\omega_O = \left(\frac{2K}{m} \right)^{1/2}$$

$$a = 0$$

$$a = \infty$$



I. Brillouin bölgesi sınırlarında optik mod minimum, akustik mod maksimum açısal frekansta titreşim yapar. İki mod arasındaki bölgedeki frekanslarda kristale gelen dalgaları kristal geçirmez.

$a = 0$ olduğu için akustik kolda I. Brillouin bölgesi sınırında m kütleli atom durur, M kütleli titreşir (C noktası). Optik kolda ise m kütleli titreşir, M kütleli durur (B noktası).

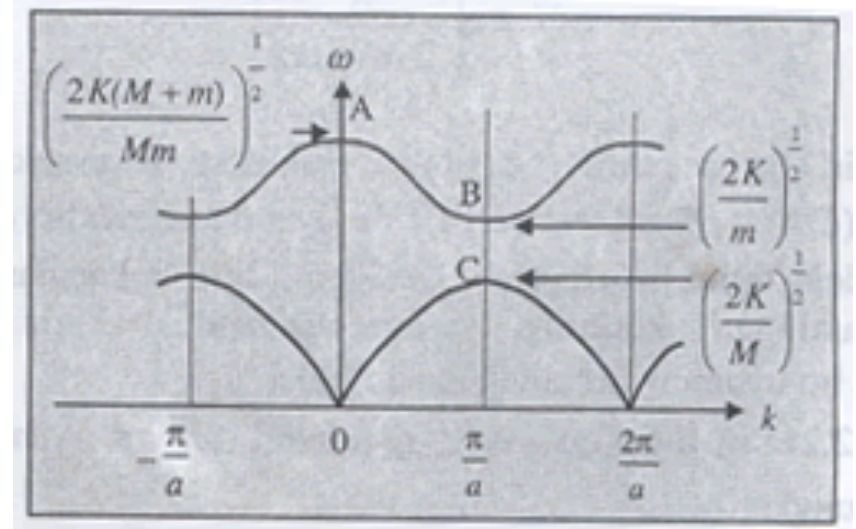
- Küçük ka değerleri için (uzun dalgaboyu bölgesi);

Küçük ka değerlerinde ($ka \ll 1$)
 $\sin(ka/2) \sim ka/2$ 'dir.

$$\omega^2 \approx \frac{K(M+m)}{Mm} \left[1 \pm \left(1 - \frac{Mm}{(m+M)^2} k^2 a^2 \right)^{1/2} \right]$$

$$\approx \frac{K(M+m)}{Mm} \left[1 \pm \left(1 - \frac{Mm}{2(m+M)^2} k^2 a^2 \right) \right]$$

$$= \frac{2K(M+m)}{Mm} \quad \text{ya da} \quad = \frac{Kk^2 a^2}{2(M+m)}$$

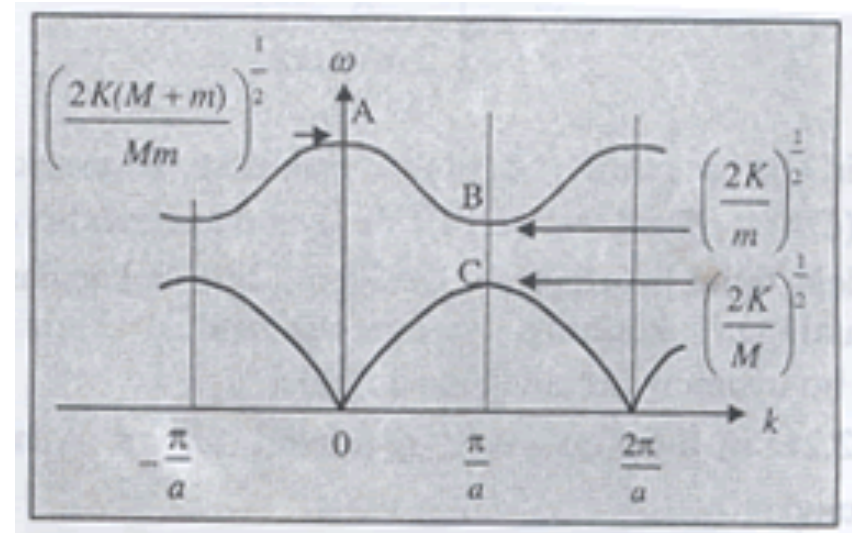


Anlatmaya çalıştığım : 😊

https://www.youtube.com/watch?v=M4WQs_U1nmU

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

$ka \ll 1$ ise; $\cos(ka/2) \sim 1$



$a = -M/m$ (A NOKTASI)

ya da

$a = 1$ (O noktası)

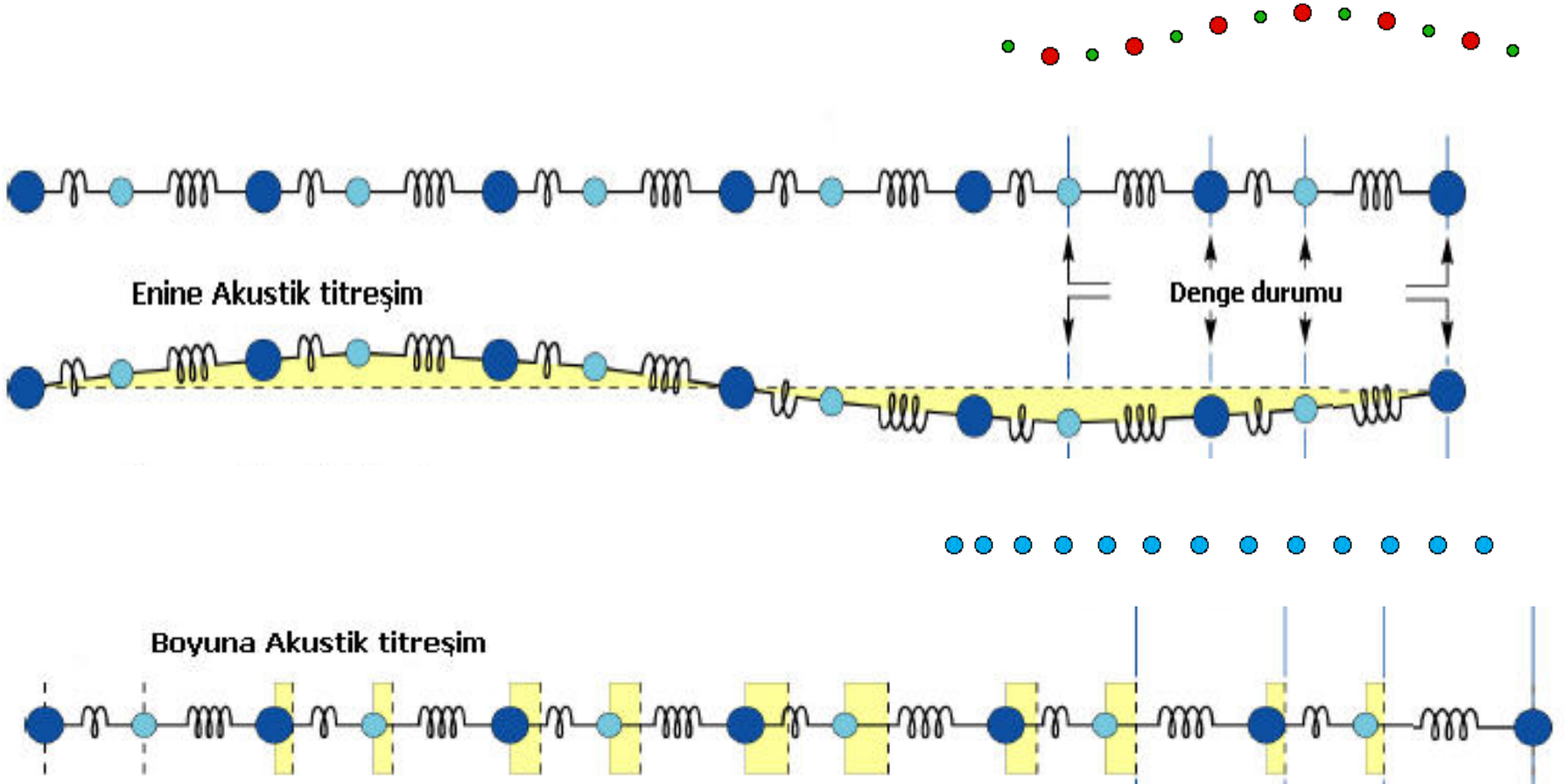
- A noktasında optik dalda $a = -M/m$ değerini alması M ve m kütleli atomların titreşimlerinin zıt fazda olmasına karşılık gelir. Bu durumda frekans yay sabiti ve $M^* = Mm/(M+m)$ ile belirlenir. Bu harekette kütle merkezi durgundur.
- O noktası civarındaki frekanslar uzun dalgaboylu ses dalgalarına karşılık gelir. İki tür atom aynı genlik ve faz ile titreşmektedir.

Bu durumda ses hızı aşağıdaki formül ile verilir:

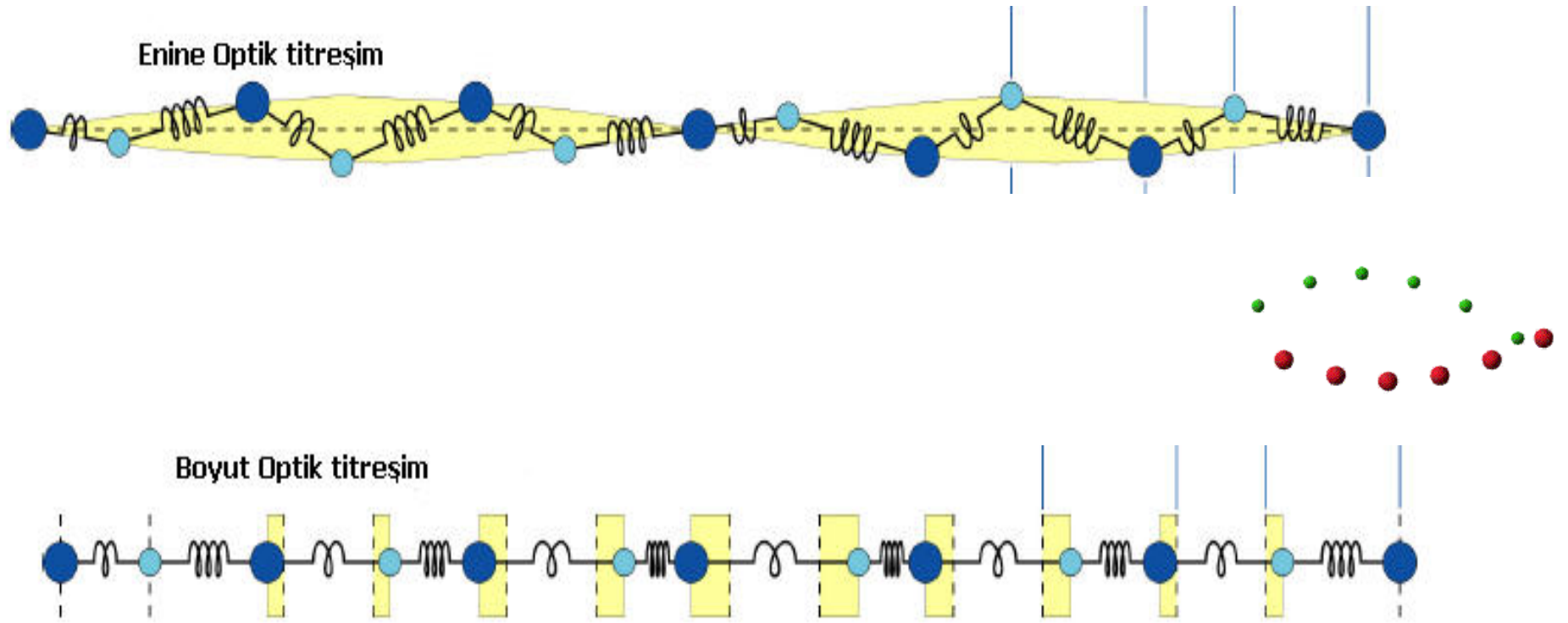
$$v_s = \frac{\omega}{k} = a \left(\frac{K}{2(M+m)} \right)^{1/2}$$

Akustik ile Optik modların davranışları

- Uzun dalgaboyu sınırında yani $k \rightarrow 0$



Her iki atom da aynı fazda ve aynı genlikte titreşiyor yani molekül titreşir ve kütle merkezi sağa-sola hareket eder. Bir bütün olarak örgü titreşir. Ses dalgalarının ortamda yayılması gibi. Bu nedenle bu dal akustik olarak adlandırılır.



Optik modda komşu atomlar zıt fazda titreşirler, kütle merkezleri sabit kalır.

Eğer atomlar zıt yüklüyse elektromagnetik dalganın elektrik alanıyla bu tür bir hareket yaratılır. Bu nedenle bu dal optik olarak adlandırılır.

Optik kol dispersiyon eğrisinin A noktasındaki ($k \sim 0$) frekans değerinde elektromagnetik dalgalarla bir çiftlenim oluşturur. Bu frekans bölgesi kırmızıaltı bölgeye karşılık gelir.

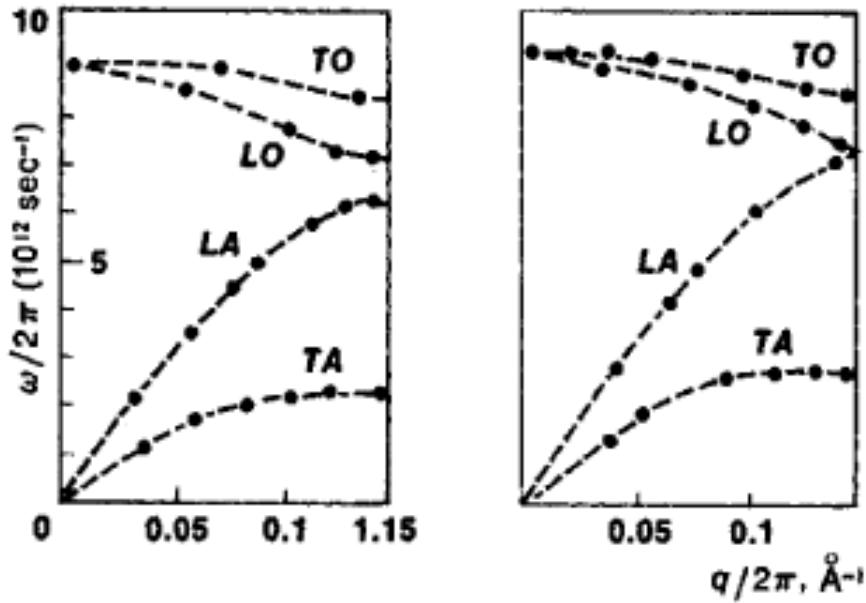
ÜÇ BOYUTLU KRİSTALLERİN ÖRGÜ TİTREŞİMLERİ

Eğer kristalin birim hücrelerinde **tek tip atom varsa** ve kristal N tane atomdan oluşuyorsa, kristalde **3 boyutta 3N titreşim modu** vardır.

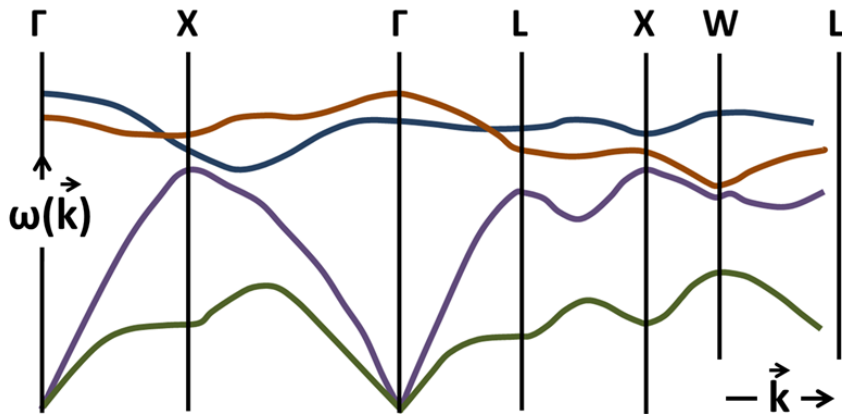
Farklı iki tip atom içeren primitif hücreli kristalde ise **tek boyutta 2N titreşim modu, 3 boyutta ise 6N titreşim modu** olur. **3 optik, 3 akustik** dal vardır. Bu modlar titreşimin doğrultusuna göre boyuna ve enine modlar ayrılır (Boyuna optik – LO, enine optik – TO, boyuna akustik – LA, enine akustik –TA). İki enine doğrultuda titreşim frekansları eşittir yani enine modlar dejeneredir.

KURAL:

Kristalin ilkel (primitive) hücrelerinde **s sayıda farklı atom** varsa, optik dal sayısı: **3s - 3** ve akustik sayısı : **3** tür. **s-1 boyuna ve 2s -2 enine** dir.



Germanyum'da 2 farklı doğrultuda (soldaki: [111] ve sağdaki : [100] dispersiyon eğrisi



GaAs'in farklı doğrultularda dispersiyon eğrisi (Γ : [000], X [100], L: [111])

ÖRGÜ TİTREŞİMLERİNİN KUANTASI: FONONLAR

Dispersiyon ilişkisini incelerken k dalgavektörünün sürekli olmadığını, belli değerleri alabildiğini gördük. Dolayısıyla bir kristal örgünün titreşimleri de yalnızca belli değerleri alabilir. Bu durumda örgü titreşimleri kuantizedir ve **fonon** örgü titreşimlerinin kuantasıdır. Kristallerdeki esnek dalgalar fononlardan oluşmaktadır. **Fononlar** fotonlar gibi bozondur ve yaratılıp, yok edilebilirler yani **korunumlu değildirler**. Açısal frekansı ω olan bir modun enerjisi, mod n durumuna uyarıldığında; aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Fononlar; Bozondurlar, Bose Einstein istatistiğine uyarlar. Korunumlu değildirler; çarpışmalarla yaratılabilir ya da yok edilebilirler.

Normal titreşim modları kristal boyunca yayılan düzlem dalgalarıdır. Yani fononlar lokalize değildirler.

Bununla birlikte fononlar; fotonlar ve elektronlar gibi birbirine yakın frekans ve buna karşılık gelen dalgaboyu değerlerinde oldukça lokalize bir dalga paketi oluşturabilirler.

Fonon Nedir?

- Atomların periyodik yerleřtiđi bir üniform katıda, atomların titreřimleriyle iliřkili enerji vardır. Fakat atomlar birbirlerine bađlarla bađlı olduđundan bađımsız titreřemezler.
- Titreřimler katı iinde yayılan kollektif modlar řeklinindedir. Bu tür yayılan örgü titreřimleri ses dalgaları olarak düşünölebilir. Bu durumda yayılma hızı katı iindeki ses dalgalarının hızıdır.
- Moleküllerin titreřim enerjileri kuantizedir ve kuantum harmonik osilatörü olarak tanımlanır. Kuantum osilatörünün enerjisi kesiklidir. Katıdaki titreřim enerjisi de kesikli miktarda enerjisi olan kollektif titreřimlerdir. Bu enerjinin kuantası **fonon**lardır.
- Fononlar Bose-Einstein istatistiđine uyarlar.

Fonon Nedir?

- Şimdiye kadar örgü titreşimlerini klasik bir yolla tanımladık. Ancak bir örgü titreşim modunun basit bir harmonik osilatör olarak düşünülmesi ile kuantum mekaniğine geçilebilir:

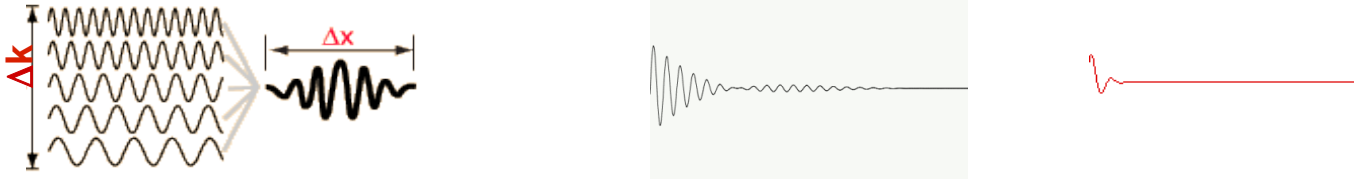
$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

- ε_n durumu, herbirinin enerjisi $\hbar \omega$ olan n tane uyarılmış durumun taban durumuna eklenerek oluştuğu durum enerji olarak göz önüne alınabilir. Bu durumda ε_n durumu aynen fotonda olduğu gibi herbirinin enerjisi $\hbar \omega$ olan n tane fonona karşılık gelir. Normal modlar kristal boyunca yayıldığından fononlar yerleşmiş değildir. $\hbar k$ momentumu tam olarak bilindiğinden konum belirlenemez. Ancak frekansı ve dalgaboyu arasında küçük farklılıklar olan fononlar bir dalgapaketi oluşturarak lokalize dalga paketi oluşturabilir ve bu durumda grup hızıyla yayılırlar.

Fonon Kavramı

Örnek olarak, k değerleri $\pi/10a$ kadar yayılmış fononları ele alırsak, bunların 10 birim hücre içinde lokalize olduklarını söyleyebiliriz.

Bu nedenle fononları, belirsizlik prensibinin limitleri içinde lokalize tanecikler olarak alabiliriz. Bu durumdaki bir dalga paketinin hızı grup hızıdır. Yani, fononlar grup hızıyla hareket ederler.



Şekilde dispersiyonsuz ve dispersiyonlu bir ortamda dalga paketinin hareket görülmektedir.

Örgü titreşimleri için elde edilmiş olan dispersiyon bağıntıları, yani ω ve k bağıntısı, kolayca fonon enerjisi $E = \hbar\omega$ ve momentumu $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ şeklinde fononların dispersiyon bağıntısı olarak ele alınabilir.

Buradaki \mathbf{p} momentumunun gerçek bir tanecik momentumu olmadığına dikkat etmek gerekir. Zira, tek tip atomlu zincirde gördüğümüz gibi k ile $k+2\pi n/a$ tamamen aynı özelliklere sahiptir.

Bu nedenle, bu şekilde tanımlanan $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ momentumuna **kristal momentumu** adı verilir.

FONONLAR

- Örgü titreşimlerinin kuantası
- Fonon enerjisi kuantizedir.

$$E_{\text{fonon}} = \hbar\omega = \frac{h\nu}{\lambda}$$

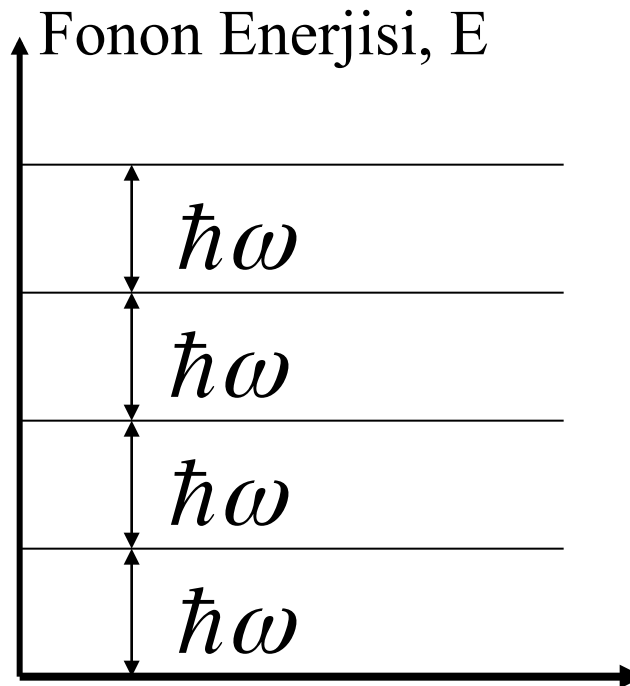
$$\lambda \sim 10^{-10}\text{m}$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

FOTONLAR

- Elektromagnetik dalgaların kuantası
- Foton enerjileri kuantizedir.

$$E_{\text{foton}} = \frac{hc}{\lambda} \quad \lambda \sim 10^{-6}\text{m}$$



$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

$$\Delta \varepsilon = \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

$$\Delta \varepsilon = \underbrace{\left(n_2 - n_1 \right)}_{\text{unity}} \hbar \omega \Rightarrow \Delta \varepsilon = \hbar \omega$$



fonon
soğurulması

Enerjileri meV mertebesinde

Kristal Momentumu

Tek boyutlu bir kristalde k dalgasayılı bir fonon ile $k + 2n\pi/a$ dalgasayılı fonon özdeşdir. Bu nedenle fonona tek bir k değerini atfetmek olanaksızdır. Fononlar momentum taşımaz, çünkü aslında fononların koordinatları atomların bağlı koordinatlarına bağlıdır. Bu nedenle $\hbar k$ momentumu fononun momentumu görünmekle birlikte kristal momentumu olarak düşünülmesi daha uygundur.

- Bir boyutta kristal momentumu (bütün atomların yerdeğiřtirmeleri dikkate alınarak):

$$p = m \frac{d}{dt} \sum u_n = m \left[\frac{d}{dt} (e^{-i\omega t}) \right] \sum_n e^{ikna}$$

- N atomlu bir kristal için $n = N$ alınıp $y = \exp(ika)$ seçimi yapılır ve ařağıdaki seri momentum ifadesinde kullanılırsa;

$$\sum_{n=0}^{N-1} y^n = \frac{1 - y^N}{1 - y}$$

$$p = m \left[\frac{d}{dt} (e^{-i\omega t}) \right] \frac{1 - e^{ikNa}}{1 - e^{ika}}$$

Kristal Momentumu

- Periyodik sınır şartlarındaki k 'nin izinli değerleri;

$$k = \frac{2\pi}{L}q = \frac{2\pi}{Na}q \quad (q \text{ tam sayı}) \quad \longrightarrow \quad e^{ikNa} = e^{iNa[2\pi q / Na]} = 1$$

$$e^{ikNa} = e^{iNa[2\pi q / Na]} = 1 \quad \longrightarrow \quad p = m \left[\frac{d}{dt} (e^{-i\omega t}) \right] \frac{1 - e^{ikNa}}{1 - e^{ika}} = 0$$

Fonon momentumu sıfırdır (**$k = 0$ modu hariç**).

$k = 0$ modu;

$$p = m \frac{d}{dt} \sum u_n = m \left[\frac{d}{dt} (e^{-i\omega t}) \right] \sum_n e^{ikna} = m \left[\frac{d}{dt} (e^{-i\omega t}) \right]$$

Kristal bir bütün olarak ötelenir ve bu tür bir ötelenme momentum taşır. Pekçok uygulamada fonon momentum taşır gibi dikkate alınır.