BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri

Katılar birbirlerine eşit uzaklıkta yerleşmiş atomlardan oluşmakta ve buna (gezegenler/yıldızlar arasındaki boşluklar gibi atomlar arası boşluklar olduğundan) kesikli yapı denir. Atomlar yerlerinde sabit değillerdir ve denge konumları etrafında küçük titreşimler yaparlar. Bu titreşimler o yapının sıcaklığını belirler. Örgü titreşimlerinin incelenmesinde kesikli yapı esastır. Örgünün yaptığı titreşim hareketinin dalga boyu kristalin örgü sabitinden çok büyük/uzun ise, o zaman, katının atomlardan oluşan kesikli yapısı yerine, katı sürekli bir madde ortamı olarak ele alınabilir. Böyle sürekli bir ortamdaki dalgalara genel olarak ESNEK DALGALAR denir.

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Dalga Denklemi

Esnek bir ortamda ilerleyen dalgayı veren dalga denklemi aşağıdaki şekilde verilir:

$$\frac{\partial^2 u(x,y,z,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x,y,z,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u(x,y,z,t)}{\partial y^2} = \frac{\rho}{Y}\frac{\partial^2 u(x,y,z,t)}{\partial t^2}$$ hiperbolik dalga denklemi,

Denklemdeki ρ ve Y madde ortamının yoğunluğu ve ortamın esneklik katsayısıdır (Young sabiti). Bu ifade, doğrusal, sabit katsayılı , ikinci mertebeden ve homojen hiperbolik bir kısmi diferensiyel denklemdir ve çözümü basit düzlem dalgalar formundadır. Tek boyutlu durum için dalga denkleminin çözümü: $u(x,t) = C_0 e^{i(kx-\omega t)}$

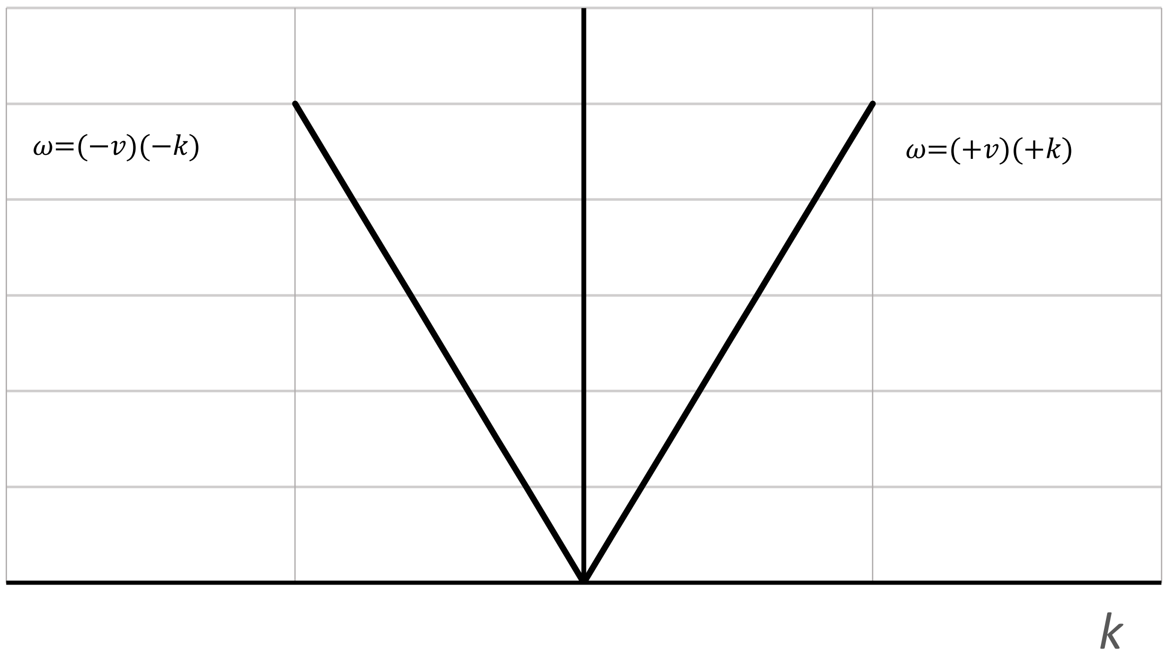
Burada C_0 bir sabit, ω-açısal frekans ve k bir-boyutlu dalga vektörünün büyüklüğüdür.

$\omega^2 = \frac{Y}{\rho}k^2$ veya $\omega=\pm vk$ elde edilir ve $v=\sqrt{(Y/\rho)}$ ortamın özelliklerine bağlı olarak değişen dalganın grup hızıdır.

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Dağınım bağıntısı

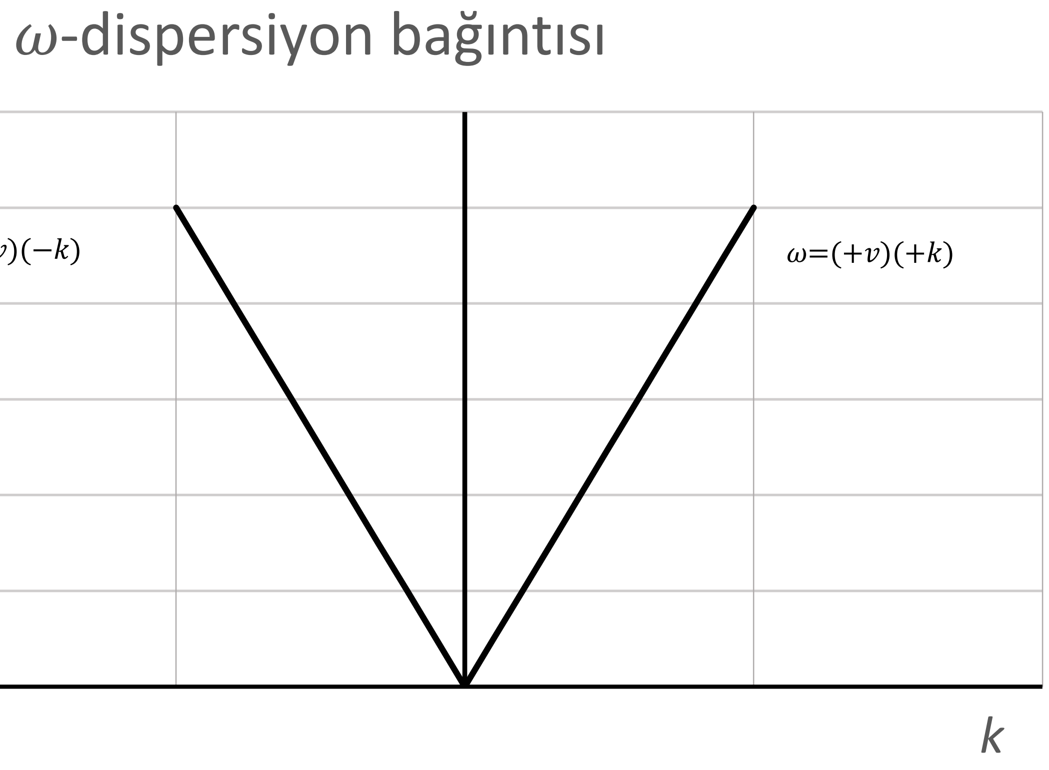
Verilen sonsuz uzunluklu, sürekli ve homojen bir ortam için v hızı sabit olduğundan ve k-dalga vektörü sürekli değerler aldığından, bu durumda elde edilen izinli ω modların sayısı sonsuz olduğu görülür. Buradan esnek dalgaların dağınım bağıntısının doğrusal ve onun eğimi, sesin o ortam içindeki yayılma hızına eşit olduğu görülür.

ω-dispersiyon bağıntısı



BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Dağınım bağıntısı

Sonsuz uzunluklu ve sürekli ortamda ilerleyen dalganın dispersiyon veya dağınım bağıntısından $dalga$ hızı ile K dalga vektörünün yönleri aynı olduğu için ω işareti daima pozitif olur. $\omega = vk$



BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Duran dalgalar

Sonsuz uzunluklu bir ortam yerine sonlu uzunluklu bir ortam alırsak, o zaman sınır şartları işin içine girer.

1. Çubuğun her iki ucu aynı hareketi yapmaya zorlamak (periyodik sınır şartı). Bu durumda çubuk bir çember gibi olduğu kabul edilir. Bu durumda $u(x = a, t) = u(x = b, t)$

2. Çubuğun her iki ucunun da hareketsiz kalmasını sağlamak. Bu durumda $u(x = a, t) = u(x = b, t) = 0$

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Periyodik sınır şartları

Taşıyıcı çubuğun uzunluğu L olsun ve koordinat başlangıcı olarak çubuğun sol ucu $x = 0$'da olsun.

Periyodik sınır şartları $u(x = 0, t) = u(x = L, t)$ çözüm fonksiyonu $u(x, t) = B_0 e^{-i\omega t} e^{ikx}$'da kullanılırsa,

$B_0 e^{-i\omega t} e^{ik0} = B_0 e^{-i\omega t} e^{ikL}$; $e^{\pm i2\pi n} = 1$ olduğundan (burada n tam sayı) $kL = 2\pi n$

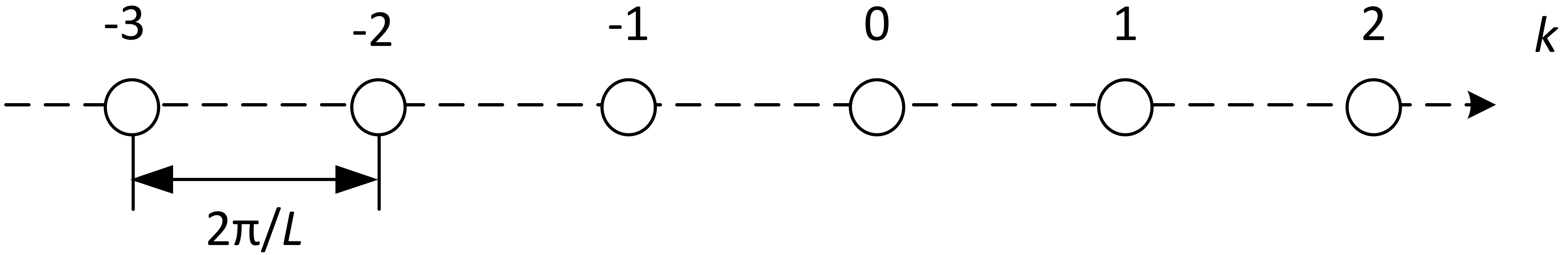
şartını sağlamalı; $k = n\frac{2\pi}{L}$ $(n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Periyodik sınır şartları

İzinli her k değeri, titreşimin bir modunu temsil eder. Her mod, denge konumu civarında kendi bağımsız hareketini tekrarlar ve kendi dalga boyu ile titreşir. Bu dalgaların her biri birer duran dalgadır. Bu dalgaların düğüm noktaları zaman içinde hareketsizdir.

Bu k değerini ilerleyen dalga çözümünde yerine yazarsak duran dalga çözümü elde edilir.

$u(x,t) = B_0 e^{-i\omega t} e^{i\left(\frac{2\pi n}{L}\right)x}$ Bu çözüm fonksiyonu için dağınım bağıntısı $\omega = vk$ yapısındadır. Fakat k kesikli değerler alır. Yani k her değeri alamaz.



BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Periyodik sınır şartları

2.sınır şartından $u(x=0,t)=u(x=L,t)=0$ olmalı $u(0,t)=B_0e^{-i\omega t}e^{ik0}=B_0e^{-i\omega t}e^{ikL}=0$ durumunda ilerleyen dalga : $u(x,t)=e^{-i\omega t}\{A\cos(kx)+B\sin(kx)\}$

denklemdeki A ve B keyfi sabitlerdir. $u(x=0,t)=0$ şartından $A=0$ olmalıdır. Bu durumda ilerleyen dalga : $u(x,t)=e^{-i\omega t}\{B\sin(kx)\}$

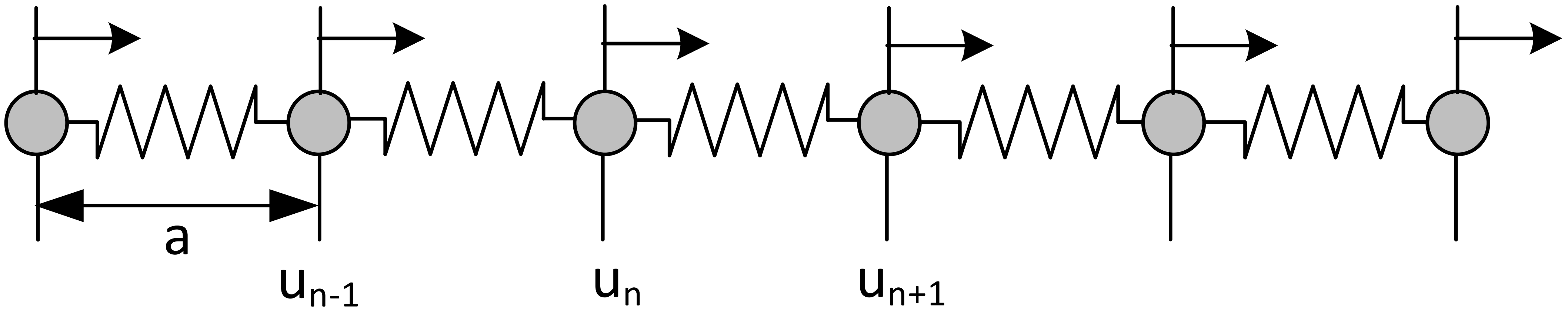
$u(x=L,t)=0$ sınır şartının sağlanabilmesi için ilerleyen dalganın bileşenlerinden biri olan $\sin(kL)=0$ olmalıdır. $\sin(kL)=0$ eşitliği ancak $kL=n\pi$ veya $k=n\frac{\pi}{L}$ ve $n=1,2,3,\ldots$ olduğu zaman sağlanır. Bu durumda dalga fonksiyonu $u(x,t)=e^{-i\omega t}\{B\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\}$ duran dalga fonksiyonu olarak elde edilir. k'nın alacağı her değer normal mod olarak adlandırılır ve mod $\frac{\pi}{L}$ aralığında olacaktır.

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Tek tipli atomlar zinciri

Tespih tanelerinin gergin bir ip üzerine aralarında sanki yaylar varmış gibi dizildiğini kabul edelim. Bu tek boyutta ve tek tipteki atomlardan oluşan kristal yapısını tanımlamak için uygun olacaktır. n ile gösterilen atoma $n+1$ ve $n-1$ ile gösterilen atomlar yay sabiti C olan küçük yay kuvveti uygulayacaktır.

$F_{n+1} = C(u_{n+1} - u_n)$ ve $F_{n-1} = C(u_{n-1} - u_n)$ toplamda n atomuna etki eden toplam kuvvet

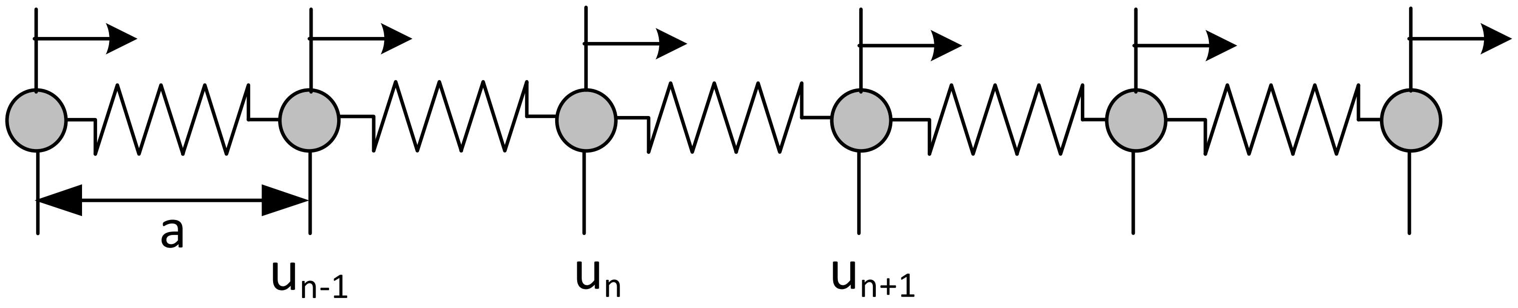
$$F_T = F_{n+1} + F_{n-1} = C(u_{n+1} - u_n) + C(u_{n-1} - u_n) = C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$$



BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Dalga hareketi

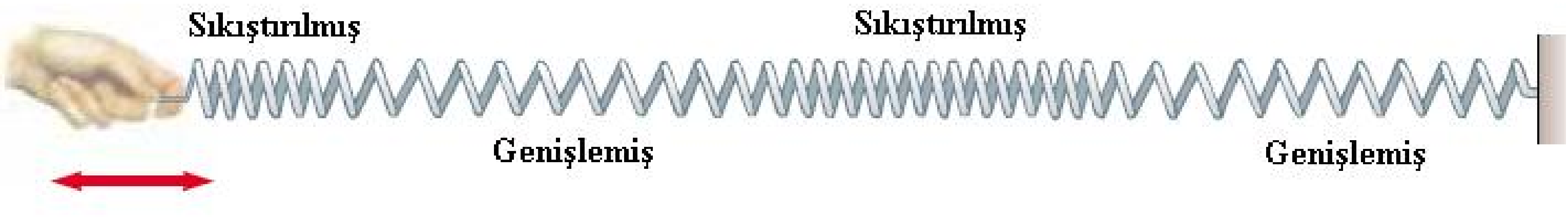
İp üzerindeki P noktası mavi okla gösterildiği gibi yukarı aşağı hareket ederken kırmızı okla gösterilen dalga duvara doğru ilerler. Dalga ortamın elemanlarının etkileşmesi ile (ilerleme yönüne göre) ilerleme yönüne göre dik ise bunlara **enine dalgalar** (transverse waves) denir.

Tespih tanelerinin gergin bir ip üzerine aralarında sanki yaylar varmış gibi dizildiğini kabul edelim.



BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Dalga hareketi

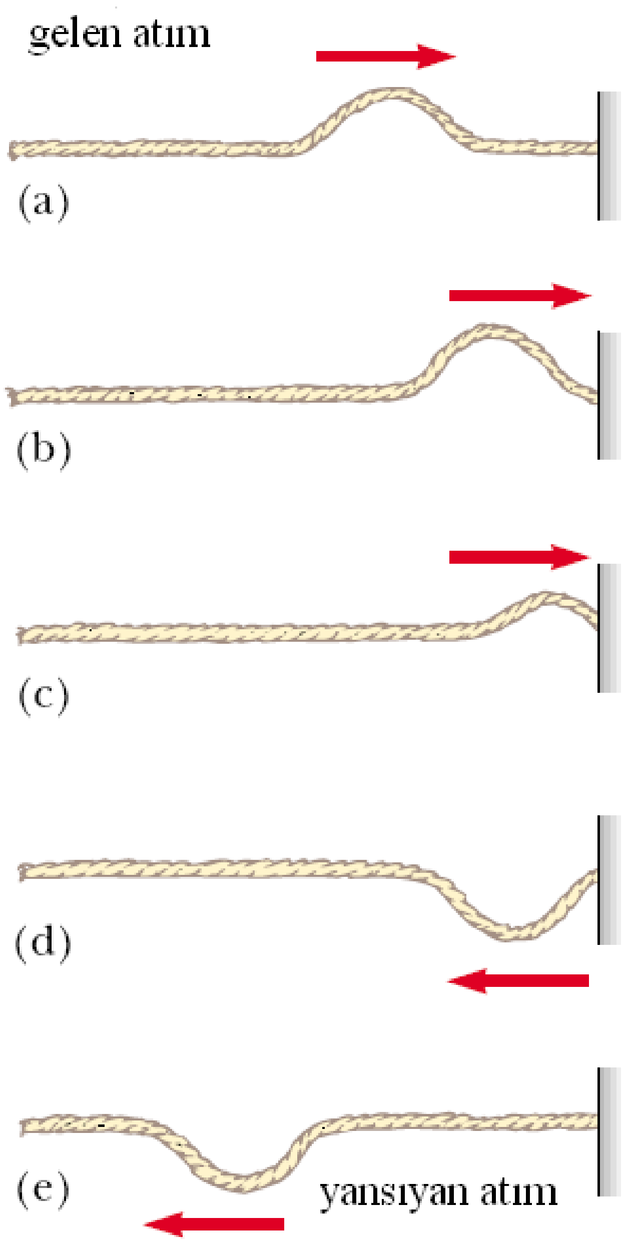
Dalganın ileleme yönü ile ortamın içindeki elemanların hareket doğrultusu aynı yönde ise bu tür dalgalara **enine dalgalar** (longitidunal waves) denir.



BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Dalga hareketi

Bir ucu bağlı ipte ilerleyen atımın duvardan yansıması. Atım duvardan yansıdıktan sonra ters dönmüş fakat şekli değişmemiştir. Ters dönen atıma dikkat ediniz. Bu ters dönme şöyle açıklanabilir: Atım ipin sabitlenmiş ucuna erişince bağlı olduğu noktadaki yere yukarı doğru bir etki kuvveti uygulayacaktır. Newton un üçüncü yasasına göre bu etki kuvvetine duvardan da ters yönde bir tepki aşağı yönde kuvveti gelecektir. Bu kuvvet atımın ters dönmesini sağlayacaktır.

Yansıma = reflection, Geçme = transmission.



BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Tek tipli atomlar zinciri

$F_n = m\frac{d^2u_n(x,t)}{dt^2} = \sum_p C_p\,(u_{n+p} - u_n)$

$F_n = m(-iw)^2 u_0 e^{ikna} e^{-i\omega t} = \sum_p C_p\,(u_0 e^{i(k(n+p)a)} e^{-i\omega t)} - u_0 e^{ikna} e^{-i\omega t)})$

$-mw^2 u_0 e^{ikna} e^{-i\omega t} = \sum_p C_p\,(u_0 e^{ikna} e^{ikpa} e^{-i\omega t} - u_0 e^{ikna} e^{-i\omega t})$

$-mw^2 u_0 e^{ikna} e^{-i\omega t} = \sum_p C_p\, u_0 e^{ikna} e^{-i\omega t}(e^{ikpa} - 1)$

$mw^2 = -\sum_p C_p\ (e^{ikpa} - 1)$ bu ifade öteleme simetrisine sahip bir kristali tanımlar.

Öteleme simetrisinden dolayı $C_p = C_{-p}$ alınırsa,

$mw^2 = -\sum_{p>0} C_p\ (e^{ikpa} + e^{-ikpa} - 1)$ p'nin sadece pozitif durumları dikkate alınır.

e^{ikpa} ifadesi için $2\cos(kpa) = e^{ikpa} + e^{-ikpa}$ kullanılırsa,

$w^2 = \frac{1}{m}\sum_{p>0} C_p\ (1 - \cos(kpa))$

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Tek tipli atomlar zinciri

$\cos(kpa)$ yerine $1 - 2\sin^2(\frac{kpa}{2})$ alınırsa,

$$w^2 = \frac{1}{m}\sum_{p>0} C_p \left(1 - 1 + 2\sin^2\left(\frac{kpa}{2}\right)\right) = \frac{2}{m}\sum_{p>0} C_p \left(\sin^2\left(\frac{kpa}{2}\right)\right)$$

$$w(k) = \sqrt{\frac{4}{m}}\sum_{p>0}\sqrt{C_p}\,\left|\sin\left(\frac{kpa}{2}\right)\right|$$

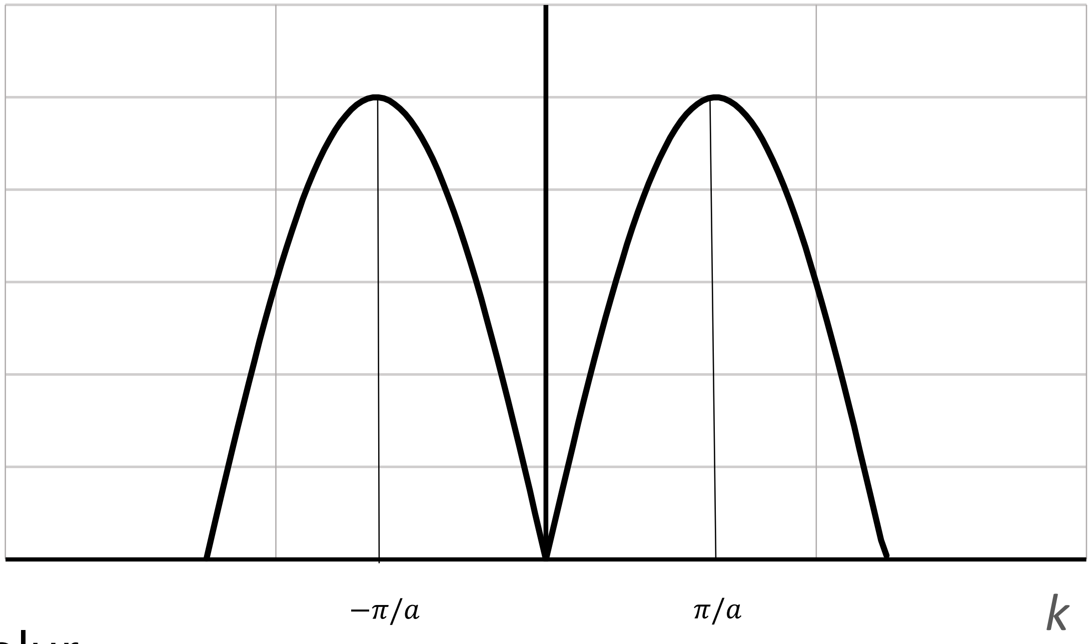
$p = 1$ en yakın komşu atomlar için

kullanılırsa $w(k) = \sqrt{\frac{4C_1}{m}}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$

İfadesi ile tek tipli atomlardan oluşmuş

örgüde dipersiyon-dağınım bağıntısı elde edilmiş olur.

ω-dispersiyon bağıntısı



BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Sürekli ve Kesikli Ortam

Kristal örgü merkez simetrisine sahip olduğu için k-uzayında $w(k) = w(-k)$ şartı sağlanır. $+k$ sağa doğru ilerleyen dalga, $-k$ sola doğru ilerleyen dalgayı temsil eder. $+k$ ve $-k$ aynı dalgalardır.

Faz hızı açısal frekansı ve dalga vektörü kesin olarak belli bir dalganın yayılma hızını gösterir.

Grup hızı ise ortalama açısal frekansı ve dalga vektörü bilinen bir dalga atmasının bir hızı olmalıdır. Grup hızı enerji ve momentum taşıma hızıdır.

Bir örgüde dalgalar sonsuza kadar yayılamazlar ve bazı noktalardan yansıma yaparlar. Yansımanın olduğu noktalarda dalganın hızı sıfırdır. Bu son derece önemlidir.

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Sürekli ve Kesikli Ortam

Sürekli ortam için dalganın yayılma bağıntısı

$w(k) = v\,k$

Bu dalganın grup hızı

$v_g = \frac{\partial w}{\partial k} = v$ sabit bir değer elde edilimiş olur. Yani omojen bir ortam için gru hızı sabittir.

Kesikli ortam için grup hızı,

$$v_g = \frac{\partial w}{\partial k} = \frac{dw}{dk}\{\sqrt{\frac{4}{m}}\sum_{p>0}\sqrt{C_p}\,|\sin\left(\frac{kpa}{2}\right)|\}$$

$$v_g = \sqrt{\frac{4}{m}}\sum_{p>0}\sqrt{C_p}\,\frac{pa}{2}\,|\cos\left(\frac{kpa}{2}\right)|\}$$

Grup hızı $\frac{kpa}{2}$'nın büyüklüğüne bağlı olarak değişir.

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Sürekli ve Kesikli Ortam

Kesikli ortamın grup hızı sabit değildir. Grup hızı $\frac{kpa}{2}$'nın büyüklüğüne bağlı olarak değişmektedir.

Şimdi grup hızını sıfır yapan k değerlerini hesaplayalım Bu değerler Brillouin bölgesindeki sınırlara karşılık gelir.

$w(k) = \sqrt{\frac{4}{m}} \sum_{p>0} \sqrt{C_p} \left|\sin\left(\frac{kpa}{2}\right)\right|$ $ve \cos\left(\frac{kpa}{2}\right) = 0$, $\frac{kpa}{2} = (p - \frac{1}{2})\pi \rightarrow k = \left(p - \frac{1}{2}\right)\frac{2\pi}{pa}$ dispersiyon bağıntısı

$p = 1$ en yakın komşuluk için

$k = \frac{1}{2}\frac{2\pi}{a} = \frac{\pi}{a}$ ve $\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$ ve $w(k) = \sqrt{\frac{4C_1}{m}} \left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$ durumunda $k_{max} = \pm\frac{\pi}{a}$

Bölgenin dışına çıkıldığı zaman dalga kendini tekrarlayacağından Brillouin bölgesi içinde hesaplamalar yapmak veya bu bölgenin özelliklerini bilmek yeterli olacaktır.

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Sürekli ve Kesikli Ortam

Komşu atomların bölgelerindeki dalga genlikleri

$\frac{u_{n+1}}{u_n} = \frac{u_0 e^{ika(n+1)}}{u_0 e^{inka}} = e^{ika} e^{i2\pi n} = e^{i\left(k+n\frac{2\pi}{a}\right)a} = e^{ik'a}$ ve $w(k) = w(k + \frac{2\pi}{a})$ ve $k' = k + n\frac{2\pi}{a}$

Sonuç olarak k' dalga vektörü k dalga vektörünün temsil ettiği hareketi tekrarlar yani $w(k)$ dağınım fonksiyonu k uzayında $\frac{2\pi}{a}$ periyodikliğine sahiptir. $u_0 e^{inka}$ ifadesinde k yerine k_{max} değeri yazılırsa $\pm\frac{\pi}{a}$

$nk_{max}a = \pm n\frac{\pi}{a}a \rightarrow nk_{max}a = \pm n\pi$ ve $u_n = u_0 e^{inka}$ ve $u_n = u_0 e^{\pm in\pi} = u_0(-1)^n$ ileri geri peş peşe yasımalar üst üste duran dalgalar oluştururlar. Bu duran dalga n'nin tek veya çift oluşuna göre $u_n = \pm u$ değerlerini alır. Yani bir biri ardına gelen atomlar zıt fazlarda salınırlar. Bu durumda dalga ne sağa ne de sola doğru ilerler. Bu X-ışınlarının Bragg yansımasına eşdeğerdir. Bragg şartı sağlandığında ilerleyen bir dalga örgü içinde yol alamaz.

BÖLÜM 4-Kristal Örgü Titreşimleri-Sürekli ve Kesikli Ortam

Sonuç olarak dağınım fonksiyonu : $w(k) = \sqrt{\frac{4C_1}{m}} |\sin\left(\frac{ka}{2}\right)|$

Grup hızı ise $v_g = \frac{\partial w}{\partial k} = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{m}} |\cos\left(\frac{ka}{2}\right)|$

Yukarıdaki grup hızı 1.BB sınırında yani $-\pi/a$ ve π/a noktalarında sıfır değerini alır. Bu duran dalganın beklenen bir özelliğidir.