Lecture 4

Elastic constants and phonons

จาก Lecture 3 เราพบว่า crystal สามารถอยู่เสถียรได้. โดยการ minimize total energy และเกิด binding energy (พลังงานที่ลดลงการการเกิด crystal).

=> หา equilibrium separation

equilibrium energy.

$$U(r) = U_0 + \cancelto{0}{\left.\frac{\partial U}{\partial r}\right|_{r_0}(r-r_0)} + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}\right|_{r_0}(r-r_0)^2 + \ldots$$

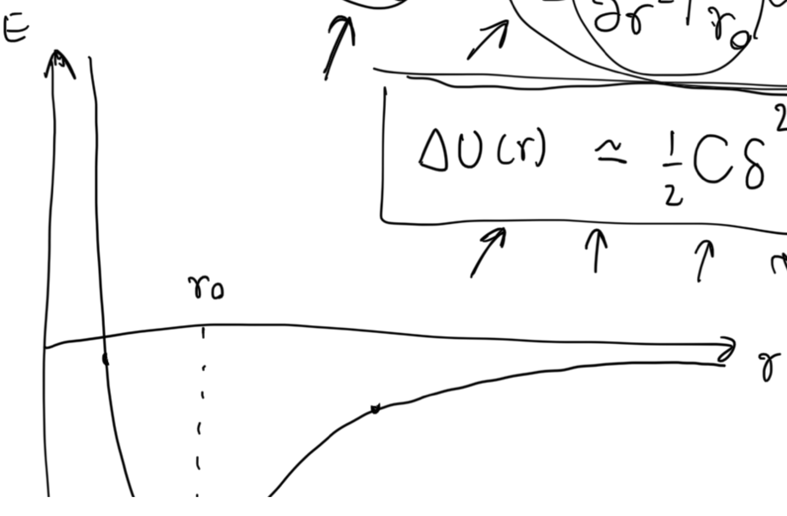
ถ้า r_0 เป็น equilibrium separation.

$$\left.\frac{\partial U}{\partial r}\right|_{r_0} = 0$$

$$U(r) \simeq U_0 + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}\right|_{r_0}\underbrace{(r-r_0)}_{\delta}^2$$

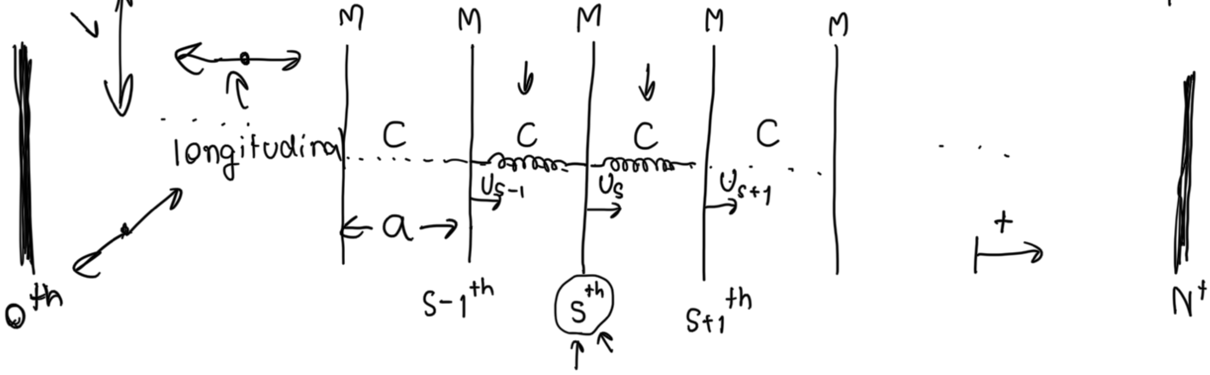
$$\boxed{\Delta U(r) \simeq \frac{1}{2}C\delta^2}$$ รอบๆ r_0.

$$U = \frac{1}{2}kx^2$$



Elastic waves ใน crystal (phonons)

พิจารณา vibrational wave ใน monatomic cryst



$$\vec{F} = m\vec{a}$$

$$M\frac{\partial^2 U_s}{\partial t^2} = -CU_s + CU_{s+1} - CU_s + CU_{s-1}$$

สมมติ boundary condition แบบ periodic

=> plane N^{th} จะกลับมาต่อกับ plane 0^{th}

$$U(Na) = U(0)$$

$$M\frac{\partial^2 U_s}{\partial t^2} = -C(2U_s - U_{s+1} - U_{s-1})$$

$$U_s(t) = U(sa)\,e^{-i\omega t}$$

=> $$M\frac{\partial^2 U_s}{\partial t^2} = -M\omega^2 U_s(t)$$

ใช้สมบัติ periodicity ของ crystal (Bloch Theore

$$\boxed{u(sa) = u_0 e^{iKsa}}$$

สัมพันธ์กับ momentum

$\hbar K \leftarrow$ momentum.

$$-C\left[2U_s^{(t)} - U_{s+1}^{(t)} - U_{s-1}^{(t)}\right] = -Cu_0 e^{-i\omega t}\left[2e^{iKsa} - e^{iK(s+1)a} - e^{iK(s-1)a}\right]$$

$$= \underbrace{-Cu_0 e^{-i\omega t} \cdot e^{iKsa}}_{U_s(t)}\left[2 - \underbrace{\left[e^{iKa} + e^{-iKa}\right]}_{= 2\cos Ka}\right]$$

$$= -2CU_s(t)\left[1 - \cos Ka\right]$$

$$-M\omega^2 \cancel{U_s(t)} = -2C\cancel{U_s(t)}\left[1 - \cos Ka\right]$$

$$\boxed{\omega^2(K) = \frac{2C}{M}\underbrace{\left[1 - \cos Ka\right]}_{2\sin^2\left(\frac{Ka}{2}\right)}}$$

$$= \frac{4C}{M}\sin^2\left(\frac{Ka}{2}\right)$$

$$\boxed{\omega = \left|2\sqrt{\frac{C}{M}}\sin\left(\frac{Ka}{2}\right)\right|}$$

$\omega \rightarrow$ บอก พลังงานของการสั่น vibrational energy

phonons

$\hbar\omega \leftarrow$ พลังงาน

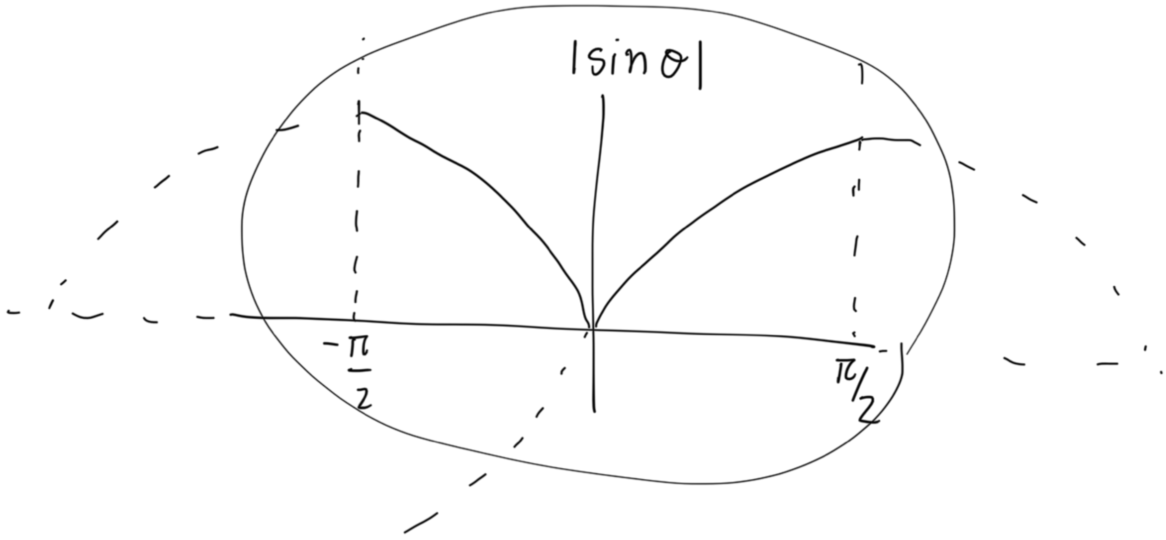
$\hbar K$ = โมเมนตัม.

เป็นความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานกับโมเมนตัม

dispersion relation.

ค่า ω จะมีค่าระหว่าง 0 ถึง $2\sqrt{\frac{C}{M}}$

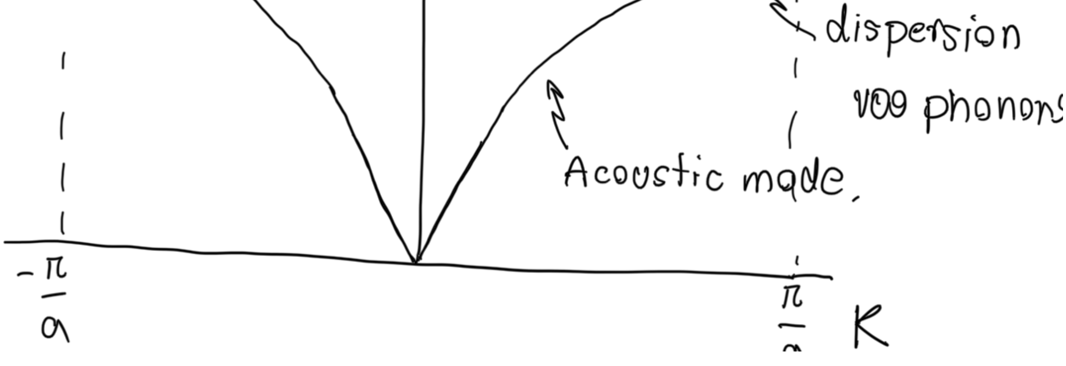
ω เป็น periodic



$\Rightarrow \left|\sin\left(\frac{Ka}{2}\right)\right| \Rightarrow \frac{Ka}{2}$ จะอยู่ระหว่าง $-\frac{\pi}{2}$ และ

$\Rightarrow K = \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$

เป็นขอบเขตของ first Brillouin zone.



group velocity V_g.

$$V_g = \frac{d\omega}{dK}$$

$$= a\sqrt{\frac{C}{M}}\cos\left(\frac{Ka}{2}\right)$$

พิจารณา ω ที่ K น้อย ๆ $Ka \ll 1$.

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

$$\Rightarrow \quad \omega = \cancel{2}\sqrt{\frac{C}{M}}\cdot\frac{Ka}{\cancel{2}} = a\sqrt{\frac{C}{M}}\,K.$$

$$\frac{d\omega}{dK} = a\sqrt{\frac{C}{M}}$$

$$\Rightarrow \quad \omega \cong VK$$

จาก Group velocity

$$V_g = V \cong a\sqrt{\frac{C}{M}} \quad \text{ที่} \quad Ka \ll 1.$$

ความเร็วของคลื่นเสียงใน crystal

พิจารณา spring constant จาก plane อื่นที่ไม่ใช่ nearest neighbor ด้วย.

$$\omega^2 = \frac{2}{M}\sum_{p>0} C_p\left[1-\cos(pKa)\right]$$

ในการทดลอง เราต้องการหา C_p.

π/a π/a

$$\underbrace{M\int_{-\pi/a} (\omega_k^2) \cos(rka)\,dk}_{} = 2\sum_{p>0} \int_{-\pi/a} C_p\left[1-\cos(pka)\right]\cos(rk\ldots)\,dk$$

$$= \sum_{p>0} -\frac{2\pi C_p}{a}\,\delta_{p,r}$$

$$= -\frac{2\pi C_r}{a}$$

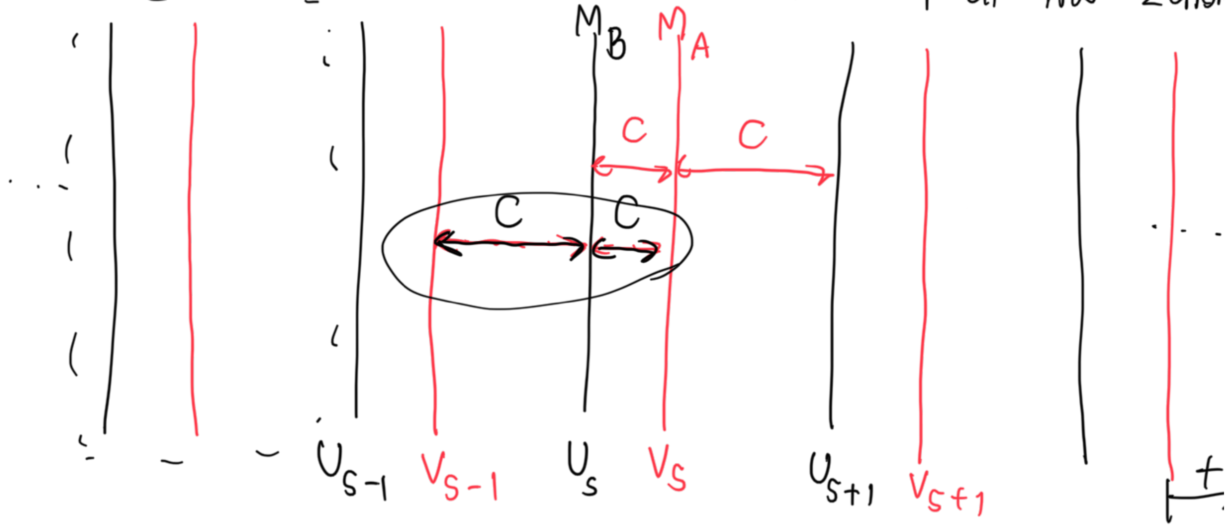
$$\Rightarrow \boxed{C_r = -\frac{Ma}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk\, \omega_k^2 \cos(rka)}$$

ใน 3D crystal mode ของการสั่น (polarization

- 1 longitodinal mode
- 2 transverse mode

1 atom ใน 1 unit cell มี degree of freedom เท่ากับ 3

พิจารณา Vibrational wave ใน crystal ที่มี 2 atom



$$M\,\frac{d^2u_s}{\ldots} = C[u \ldots]$$

$$M_B \frac{d^2 u_s}{dt^2} = -C\left[2u_s - v_s - v_{s-1}\right]$$

$$M_A \frac{d^2 v_s}{dt^2} = -C\left[2v_s - u_s - u_{s+1}\right]$$

ให้

$$u_s(t) = u_0 e^{-i\omega t} e^{iksa}$$

$$v_s(t) = v_0 e^{i\omega t} e^{iksa}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -\omega^2 M_B u_0 = Cv_0(1+e^{-ika}) - 2Cu_0 \\ -\omega^2 M_A v_0 = Cu_0(1+e^{ika}) - 2Cv_0 \end{cases}$$

เปลี่ยนเขียนในรูปของ Matrix

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 2C - \omega^2 M_B & -C(1+e^{-ika}) \\ -C(1+e^{ika}) & 2C - \omega^2 M_A \end{bmatrix}}_{=M} \begin{bmatrix} u_0 \\ v_0 \end{bmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \det M = 0$$

ต้องการหา dispersion relation หรือ $\omega(k) = ?$

$$(2C - \omega^2 M_B)(2C - \omega^2 M_A) - C^2(1+e^{ika})(1+e^{-ika}) = 0$$

$$\omega^4 M_A M_B - 2\omega^2 C(M_A + M_B) + 4C^2 - C^2(\underbrace{1}_{} + \underbrace{e^{ika} + e^{-ika}}_{=2\cos ka} + \cdot$$

$$\omega^4 M_A M_B - 2\omega^2 C(M_A + M_B) + \cancel{4}C^2 - \cancel{2}C^2 - 2C^2\cos ka)$$

$$\underline{\omega}^4 M_A M_B - 2\underline{\omega}^2 C (M_A + M_B) + \underbrace{2C^2(1-\cos Ka)}_{= 4C^2 \sin^2 \frac{Ka}{2}} = 0$$

$= 0$

$$\omega^2 = \frac{+2C(M_A+M_B) \pm \sqrt{4C^2(M_A+M_B)^2 - 4 M_A M_B\, 4C^2 \sin^2 \ldots}}{2 M_A M_B}$$

$$\omega^2 = C\left(\frac{M_A+M_B}{M_A M_B}\right) \pm C\left[\left(\frac{M_A+M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{4\sin^2\frac{Ka}{2}}{M_A M_B}\right]$$

reduced mass

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} = \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} \Rightarrow M_A M_B = (M_A + \ldots$$

M

$\Rightarrow M_A M_B = M\ldots$

$$\omega^2 = \frac{C}{\mu} \pm C\left[\left(\frac{1}{\mu}\right)^2 - \frac{1}{M\mu} 4\sin^2\frac{Ka}{2}\right]^{1/2}$$

$$\boxed{\omega^2 = \frac{C}{\mu} \pm \frac{C}{\mu}\left[1 - \frac{4\mu}{M}\sin^2\frac{Ka}{2}\right]^{1/2}}$$

$\Rightarrow$ เราจะพบว่ามี 2 solution เป็น + และ - solution

$\Rightarrow$ dispersion มี 2 branches สำหรับทุกค่า K.

พิจารณา long-wavelength limit $Ka \ll 1$.

$K \ll \frac{1}{a}$

$$\Rightarrow \sin^2\frac{Ka}{2} \approx \left(\frac{Ka}{2}\right)^2$$

$$\omega^2(K) \simeq \frac{C}{\mu} \pm \frac{C}{\mu}\left[1 - \underbrace{\frac{\cancel{4}\mu}{M}\cdot\frac{(Ka)^2}{\cancel{4}}}\right]^{1/2}$$

$Ka \ll 1 \Rightarrow (Ka)^2 \ll$

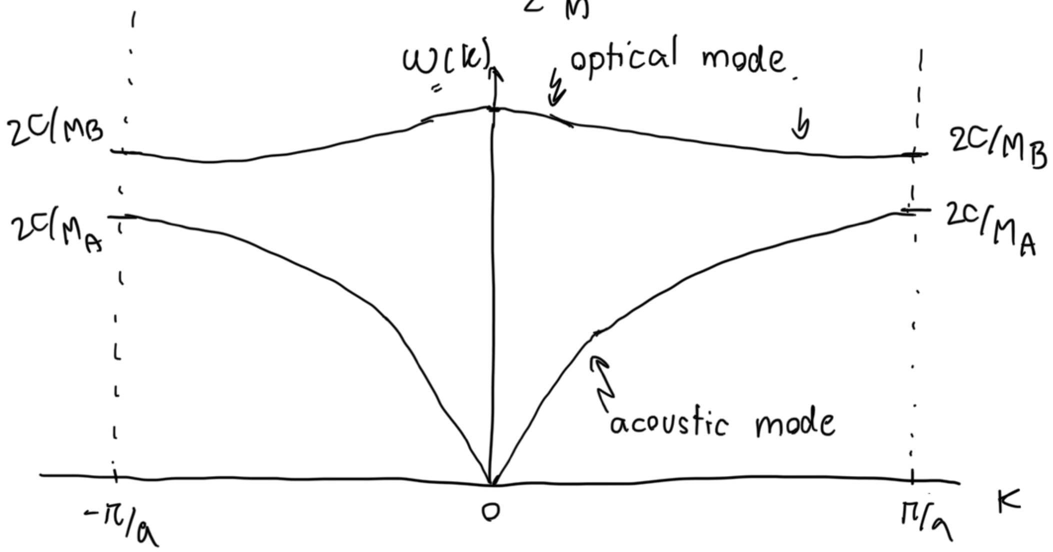
ใช้การประมาณ $(1+x)^n \simeq 1 + nx \quad ; \quad x \ll 1.$

$$\omega^2(K) \approx \frac{C}{\mu} \pm \frac{C}{\mu}\left(1 - \frac{1}{2}\frac{\mu}{M}K^2a^2\right)$$

$$\omega^2(K) = \begin{cases} \dfrac{2C}{\mu} - \dfrac{1}{2}\dfrac{C}{M}K^2a^2 & \text{for } + \\ +\dfrac{1}{2}\dfrac{C}{M}K^2a^2 & \text{for } - \end{cases}$$

ใน limit ที่ $K \to 0 \quad \dfrac{C}{\mu} \gg \dfrac{C}{M}K^2a^2$

$$\Rightarrow \omega^2(K) = \begin{cases} \dfrac{2C}{\mu} & \text{for } + \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{C}{M}K^2a^2 & \text{for } - \end{cases}$$



ในอีก limit ที่มีค่า Maximum K. $\Rightarrow K = \dfrac{\pi}{a}$

$\Rightarrow \quad Ka = \pi$

$\Rightarrow \quad \sin^2\dfrac{\pi}{2} = 1.$

1/2

$$\Rightarrow \omega^2(K) = \frac{C}{\mu} \pm \frac{C}{\mu}\left[\underbrace{1-\frac{4\mu}{M}}\right]$$

เปลี่ยน $\mu \rightarrow M_A, M_B$

$$1-\frac{4\mu}{M} = 1 - 4\cdot\frac{M_A M_B}{(M_A+M_B)}\cdot\frac{1}{(M_A+M_B)}$$

$$= \frac{(M_A+M_B)^2 - 4M_A M_B}{(M_A+M_B)^2}$$

$$= \frac{(M_A-M_B)^2}{(M_A+M_B)^2}$$

$$\sqrt{1-\frac{4\mu}{M}} = \left|\frac{M_A-M_B}{M_A+M_B}\right|$$

$$\omega^2(K) = C\cdot\frac{(M_A+M_B)}{M_A M_B} \pm C\frac{\cancel{(M_A+M_B)}}{M_A M_B}\left(\overbrace{\frac{M_A-M_B}{\cancel{M_A+M_B}}}\right)$$

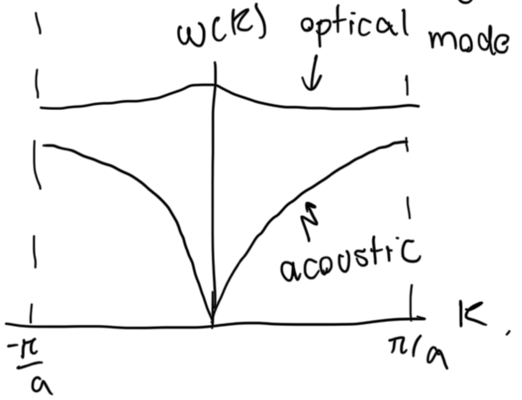
สมมติให้ $M_A > M_B$

$$\omega^2(K) = C\frac{(M_A+M_B)}{M_A M_B} \pm C\frac{(M_A-M_B)}{M_A M_B}$$

$$\omega^2(K) = \begin{cases} \frac{C}{M_A M_B}(M_A + \cancel{M_B} + M_A - \cancel{M_B}) \\ \frac{C}{M_A M_B}(\cancel{M_A} + M_B - \cancel{M_A} + M_B) \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \dfrac{2C\cancel{M_A}}{\cancel{M_A}M_B} & \text{for } + \\ \dfrac{2C\cancel{M_B}}{M_A\cancel{M_B}} & \text{for } - \end{cases}$$

$$\Rightarrow \omega^2(K) = \begin{cases} 2C/M_B & \text{for } + \\ 2C/M_A & \text{for } - \end{cases}$$



optical mode
- 3 polarizations
  1 longitudinal mode
  2 transverse modes.

acoustic mode : 2 atoms จะสั่นแบบ in-phase

for acoustic mode at $\boxed{K = 0 \quad \omega^2 = 0}$

พิจารณา equation of motion ของ u และ v.

$$\rightarrow -\omega^2 M_B u_0 = Cv_0(1+e^{-iKa}) - 2Cu_0 \leftarrow$$

$$-\omega^2 M_A v_0 = Cu_0(1+e^{iKa}) - 2Cv_0 \leftarrow$$

$$0 = Cv_0(1+1) - 2Cu_0$$

$$\Rightarrow 2Cv_0 = 2Cu_0$$

$$\Rightarrow v_0 = u_0 \quad \text{สั่นไปพร้อมกัน.}$$

optical mode. ที่ $K = 0$ $\omega^2 = \dfrac{2C}{\mu} = \dfrac{2C(M}{M_A M_B}$

$2C\left(\dfrac{M_A+M_B}{\ }\right).\cancel{M_B}u_0 = 2CV_0 - 2Cu$

$$- \left(\frac{\quad}{M_A M_B} \right) \ldots = 2CV_0 - 2CU_0$$

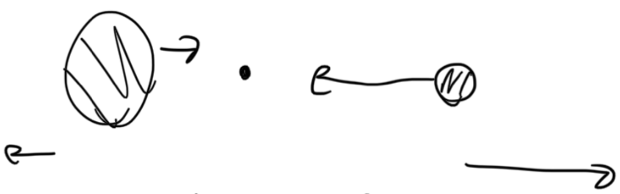
$$-\cancel{2C}(M_A + M_B)u_0 = \cancel{2C}V_0 M_A - \cancel{2C}u_0 M_A$$

$$\cancel{-M_A u_0} - M_B u_0 = M_A V_0 \cancel{- M_A u_0}$$

$$-M_B u_0 = M_A V_0$$

$$\boxed{\frac{u_0}{V_0} = -\frac{M_A}{M_B}}$$

displacement ของ u และ v จะ out-of-phas



และเนื่องจากการสั่นแบบนี้สำหรับคู่ atom (ions) ที่มีประจุ สามารถถูกกระตุ้นได้โดย electromagnetic wave mode นี้จึงถูกเรียกว่า optical mode.

สมมติว่ามี 3 atoms ใน 1 unit cell. 9 d.o.f.

- acoustic 3 polarizations
- optical 6 polarizations
  - 2 longitudinal
  - 4 transvese,

p atoms ใน 1 unit cell
- 1 LA
- 2 TA

- acoustic 3 polarizations
- optical 3(p−1) polarizations

p−1 longitudinal (LO

2(p−1) transverse (TO

phonons : collective behavior ของการสั่น.

quasi-particle

phonon momentum : $\hbar\vec{K}$ ← crystal momentum

$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$ การเปลี่ยนแปลงของ wave vector ของคลื่น ใน diffraction

$\hbar\vec{K} = \underbrace{\hbar\vec{k} - \hbar\vec{k}'}$

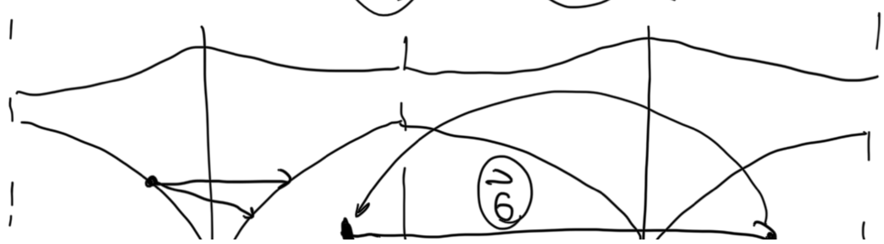
crystal momentum

momentum change ของคลื่น

ใน diffraction $\vec{K}$ ต้องเท่ากับ reciprocal lattice vector, $\vec{G}$.

จึงจะทำให้เกิด Bragg peak.

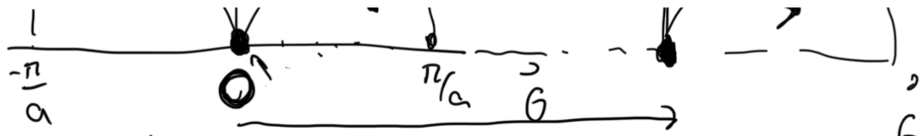
$\vec{K} = \vec{G}$



$\vec{k}$

$\vec{G} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2$

$+ m_3 b_3$



$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$

1^{st} process: phonon ถูกสร้างขึ้น.

$$\vec{k}' + \vec{K} = \vec{k} + \vec{G}$$

phonon รับ momentum จากคลื่น.

scattered wave vector

$$\Rightarrow \vec{K} = \vec{k} - \vec{k}' + \vec{G}.$$

$$\boxed{\vec{K} + \vec{G} = \vec{k} - \vec{k}'} \leftarrow \vec{k}' + \vec{K} = \vec{k} +$$

2^{nd} process: phonon ถูกทำลาย.

$$\vec{k} + \vec{K} + \vec{G} = \vec{k}'$$

phonon ให้ momentum กับคลื่น.

$$\boxed{\vec{K} + \vec{G} = \vec{k}' - \vec{k}} \leftarrow \vec{k}' - \vec{K} = \vec{k}$$

เกิดไม่ได้ที่ $T = 0$

จาก conservation ของพลังงานและโมเมนตัม จะได้

$$\vec{k}' \pm \vec{K} = \vec{k} + \vec{G}$$

ผลทำให้ phonon อยู่ 1^{st} BZ

phonon created.

neutron scattering

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_n} \pm \hbar\omega$$

phonon destroyed

มวลของ neutron