Eðlisfræði þéttefnis I:

# Hreyfifræði frumeinda í kristöllum

## Kafli 4

Jón Tómas Guðmundsson

tumi@hi.is

4. vika haust 2017

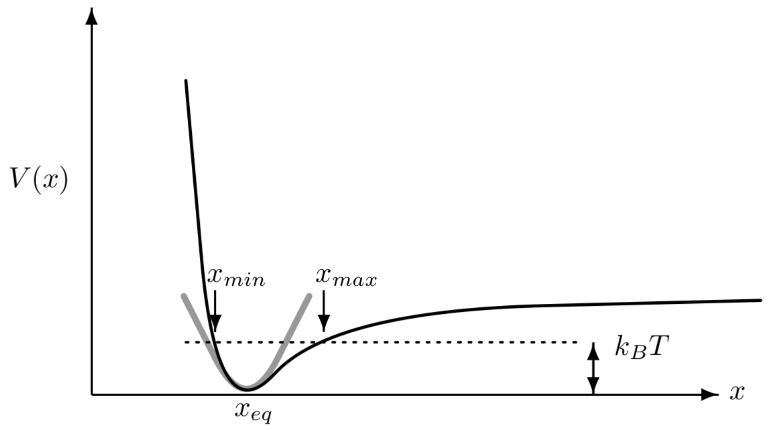
# Inngangur

- Eiginleikar þéttefnis ráðast gróft séð af
  - rafeindum
  - hreyfingu frumeinda um jafnvægisstöðu sína
- Eiginleikar sem ráðast af síðari flokknum eru t.d. hljóðhraði og varmafræðilegir eiginleikar, eins og eðlisvarmi, varmaþennsla, og fyrir hálfleiðara og einangrara, varmaleiðni

# Inngangur

- Við höfum áður séð (Kafli 1) að skilyrðið um lægstu orku hefur í för með sér að það er einhver tiltekin jafnvægisfjarlægð á milli atóma
- Hreyfing frumeinda frá þessari jafnvægisstöðu sinni er mun hægari en hreyfing rafeinda vegna massa þeirra
- Ef frumeindir víkja frá jafnvægisstöðu sinni, þá leita rafeindirnar í nýja dreifingu (með hærri heildar orku)
- Heildarorkan ræðst af stöðu allra frumeindakjarna og verður því að líta á stöðuorku (mætti) fyrir færslu frumeindanna

# Inngangur




Frá Simon (2013)

- Til einföldunar skoðum við fyrst ein-vítt kerfi atóma
- Mættið $\Phi(x)$ á milli tveggja nágranna atóma er sýnt á myndinni
- Sígild jafnvægisstaða er í botni brunnsins (e. well), táknað með $x_{\mathrm{eq}}$ á myndinni
- Fjarlægð milli atóma við lág hitastig ætti þá að vera $x_{\mathrm{eq}}$

# Inngangur

- Við getum ritað Taylor-röð fyrir mættið umhverfis lággildið

$$\Phi(x) \approx \Phi(x_{\mathrm{eq}}) + \frac{\kappa}{2}(x - x_{\mathrm{eq}})^2 - \frac{\kappa_3}{3!}(x - x_{\mathrm{eq}})^3 + \ldots$$

- Þegar frávikið er lítið eru hærri liðir óverulegir og má sleppa
- Við höfum þannig einfalt Hook ferningsmætti (e. quadratic) umhverfis lággildið
- Ef nú er lagður kraftur á kerfið sjáum við

$$-\kappa(x - x_{\mathrm{eq}}) = -\kappa(\delta x_{\mathrm{eq}}) = F$$

og formerkið er valið þannig að jákvæður (þjöppunar (e. compressive)) kraftur dregur úr fjarlgð milli atóma

# Inngangur

- Þetta er augljóslega lýsing á samþjöppun (e. compressability) þéttefnis

$$\beta = -\frac{1}{V}\frac{\partial V}{\partial p}$$

  sem einnig má rita

$$\beta = \frac{1}{L}\frac{\partial L}{\partial F} = \frac{1}{\kappa x_{\mathrm{eq}}}$$

- Í samþjappanlegum vökva er hljóðhraðinn

$$c_{\mathrm{s}} = \sqrt{\frac{B}{\rho}} = \sqrt{\frac{1}{\rho\beta}}$$

  þar sem $\rho$ er eðlismassi vökvans, og $B = 1/\beta$ er bulk modulus

# Inngangur

- Í þéttefni er eðlismassinn $M/a$ þar sem $M$ er massi agnar og $a$ er fjarlægð milli agna svo að hljóðhraðinn er

$$c_\mathrm{s} = \sqrt{\frac{\kappa a^2}{M}}$$

- Þessi jafna á eftir að skjóta upp kollinum aftur þegar við höfum lýst kristalli með hreyfijöfnum

# Mættið

- Í þremur víddum táknum við einingargrindina með

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$$

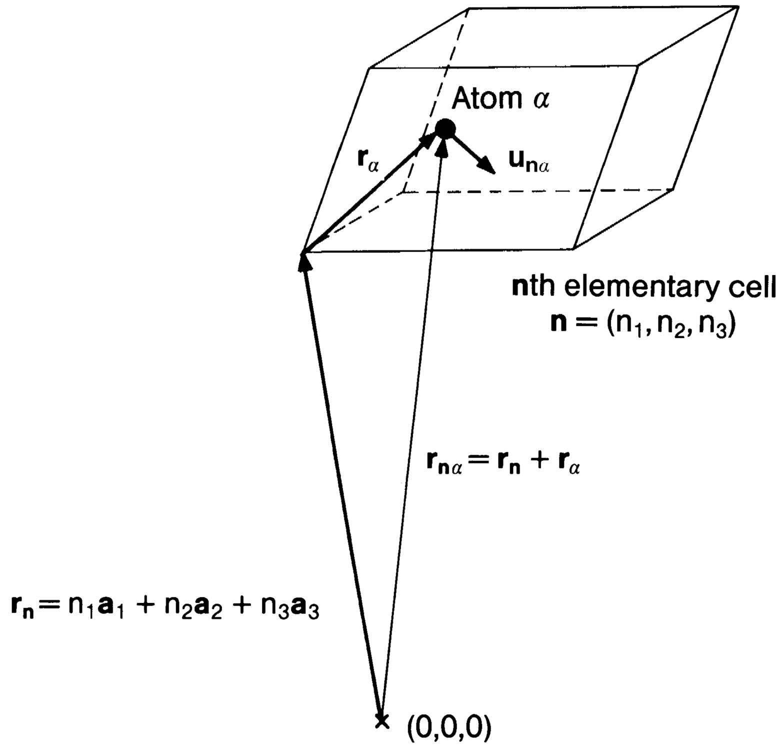
  eða

$$\mathbf{m} = (m_1, m_2, m_3)$$

  og frumeindir innan grindareiningar eru táknaðar með $\alpha$, $\beta$

- $i-$ti þátturinn af jafnvægisstöðu vigri frumeindarinnar er táknaður með $r_{n\alpha i}$ og frávik frá jafnvægi er táknað með $u_{n\alpha i}$

# Mættið




Frá Ibach and Lüth (2009)

- Skilgreining vigranna sem lýsa titringi grindar í þrívíðum kristalli.

# Mættið

- Heildarorka kristallsins er rituð sem fall af hnitum allra frumeinda sem Taylor-röð umhverfis jafnvægisstöðu

$$\Phi(r_{n\alpha i} + u_{n\alpha i}) = \Phi(r_{n\alpha i}) + \frac{1}{2}\sum_{\substack{n\alpha i\\ m\beta j}} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_{n\alpha i}\partial r_{m\beta j}} u_{n\alpha i} u_{m\beta j} + \ldots$$

- Liðirnir sem eru línulegir í $u_{n\alpha i}$ hverfa þar sem Taylor-röðin eru um jafnvægisstöðu (minnstu orku)
- Vísarnir $n, m$ taka til allra grindareininga, $\alpha, \beta$ taka til allra frumeinda í grindareiningu og $i, j$ er yfir þrjár stefnur
- Við lítum framhjá hærri liðum
- Jafnan lýsir hreintóna sveifli margra agna

# Mættið

- Afleiðan af mættinu

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_{n\alpha i} \partial r_{m\beta j}} = \Phi_{n\alpha i}^{m\beta j}$$

  og eru nefndir tengistuðlar (e. coupling constants)

- Tengistuðlarnir hafa sömu vídd og gormstuðlar (e. spring constants)

- Stærðin

$$-\Phi_{n\alpha i}^{m\beta j} u_{m\beta j}$$

  er þess vegna krafturinn sem verkar á frumeindina $\alpha$ í grindareiningu $\mathbf{n}$ í stefnu $i$ þegar frumeindin $\beta$ í grindareiningu $\mathbf{m}$ færist um $u_{m\beta j}$ í stefnu $j$

# Mættið

- Fyrir jákvæð gildi á $\Phi_{n\alpha i}^{m\beta j}$ þá verkar krafturinn í andstæða stefnu við $u$
- Við sjáum að þessi framsetning leyfir víxlverkun milli allra frumeinda óháð fjarlægð milli þeirra
- Í einföldum líkönum eru einungis skoðuð víxlverkun milli næstu granna

# Hreyfijöfnur

- Fyrir færslu $u$ á frumeind $\alpha$ í grind $\mathbf{n}$ í stefnu $i$, verður summa allra tregðukrafta að vera núll (Lögmál Newton)

$$M_\alpha \ddot{u}_{n\alpha i} + \sum_{m\beta j} \Phi_{n\alpha i}^{m\beta j} u_{m\beta j} = 0$$

- Fyrir $N$ grindareiningar sem hver hefur $r$ frumeindir gerir þetta $3rN$ diffurjöfnur sem þarf til að lýsa hreyfingu frumeindanna

- Fyrir lotubundin strúktúr má rita hliðrunarvigrana $u_{n\alpha i}$ sem planbylgjur

$$u_{n\alpha i} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} u_{\alpha i}(\mathbf{q}) \exp\left(j(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n - \omega t)\right)$$

en þessi planbylgja er aðeins skilgreind í grindarpunktinum $r_n$

# Hreyfijöfnur

- Ef þessu er stungið inn í kraftajöfnuna fæst

$$-\omega^2 u_{\alpha i}(\mathbf{q}) + \sum_{\beta j} \underbrace{\sum_{m} \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \Phi_{n\alpha i}^{m\beta j} \exp\left(j\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)\right)}_{D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q})} u_{\beta j}(\mathbf{q}) = 0$$

- Liðirnir lifa aðeins ef mismunur er $\mathbf{m} - \mathbf{n}$

- Þegar summan hefur verið tekin yfir $\mathbf{m}$ fæst stærðin $D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q})$ sem er óháð $\mathbf{n}$ og er nefnd **hreyfifylkið** og

$$-\omega^2 u_{\alpha i}(\mathbf{q}) + \sum_{\beta j} D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) u_{\beta j}(\mathbf{q}) = 0$$

er línulegt einsleitt kerfi af gráðu $3r$

# Hreyfijöfnur

- Fyrir minnstu grindareiningu er $r = 1$ og fyrir hvern bylgjuvigur eru þetta aðeins þrjár jöfnur sem leysa þarf
- Kerfi af línulegum einsleitum jöfnum hefur bara lausn ef

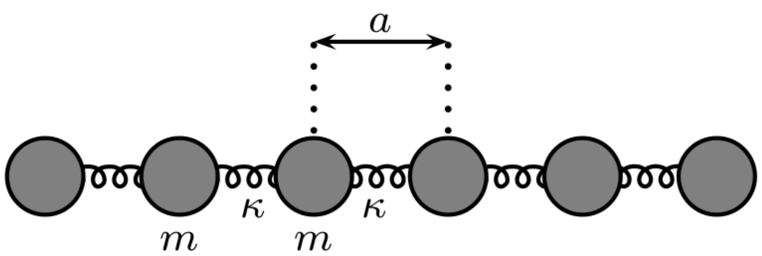
$$\mathrm{Det}\left\{D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) - \omega^2 \mathbf{1}\right\} = 0$$

- Þessi jafna hefur nákvæmlega $3r$ lausnir, $\omega(\mathbf{q})$ fyrir hvert $\mathbf{q}$
- $\omega(\mathbf{q})$ er þekkt sem **tvístrunarsamband** (e. dispersion relation)
- Hinar $3r$ mismunandi lausnir eru þekktar sem greinar (e. brances) tvístrunarsambandsins

# Einatóma línuleg keðja

- Skoðun nú einvíða keðju eins atóma hvert um sig hefur massa $M$ og jafnvægisfjarlægð milli atóma er $a$
- Segjum að $n-$ta atómið sé staðsett við $x_n$ og að jafnvægisstaða $n-$atómsins sé $x_n^{\mathrm{eq}} = na$
- Þegar atómin komast á hreyfingu þá er frávikið frá jafnvægisstöðu táknað með
$$u_n = x_n - x_n^{\mathrm{eq}}$$
- Til einföldunar gerum við ráð fyrir að aðeins næstu grannar víxlverki

# Einatóma línuleg keðja




Frá Simon (2013)

- Líkanið er þess vegna keðja massa sem haldið er saman af gormum sem hver um sig hefur jafnavægislengd $a$

- Heildarmætti keðjunnar er

$$\Phi_{\text{tot}} = \sum_i \Phi(x_{i+1} - x_i) = \sum_i \frac{\kappa}{2}(x_{i+1} - x_i - a)^2 = \sum_i \frac{\kappa}{2}(u_{i+1} - u_i)^2$$

# Einatóma línuleg keðja

- Þá er kraftajafnan fyrir $n-$ta massann gefin með

$$F_n = -\frac{\partial \Phi}{\partial x_n} = \kappa(u_{n+1} - u_n) + \kappa(u_{n-1} - u_n)$$

  sem er línuleg jafna

- Hreyfijafna Newton er þá

$$M\ddot{u}_n = F_n = \kappa(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$$

- $\kappa$ er kraftstuðull milli næstu granna og er mismunandi fyrir langsum og þversum bylgjur

- Það er hentugt að líta á $\kappa$ fyrir eitt atóm í planinu, þannig að $F_n$ er kraftur á eitt atóm í planinu $n$

# Einatóma línuleg keðja

- Hreyfijafnan fyrir atóm í plani $n$ er

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = \kappa(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$$

  þar sem $M$ er massi atómsins

- Við leitum að lausn á forminu $\exp(-j\omega t)$ þannig að

$$-M\omega^2 u_n = \kappa(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$$

- Þessi mismunajafna hefur farbylgju lausn á forminu

$$u_{n\pm 1} = u\exp(jnqa)\exp(\pm jqa)$$

  þar sem $a$ er fjarlægð milli plana og $q$ er bylgjuvigurinn

# Einatóma línuleg keðja

- Sé þessu stungið inn fæst

$$-\omega^2 M u \exp(jnqa) = \kappa u \left[\exp[j(n+1)qa] + \exp[j(n-1)qa] - 2\exp[jnqa]\right]$$

og ef við styttum út $u \exp[jnqa]$ á báðum hliðum stendur eftir

$$\omega^2 M = -\kappa \left[\exp[jqa] + \exp[-jqa] - 2\right]$$

- Með því að nýta $2\cos qa = \exp[jqa] + \exp[-jqa]$, þá fáum við tvístrunarsambandið

$$\omega^2 = \frac{2\kappa}{M}(1 - \cos qa)$$

# Einatóma línuleg keðja

- Ef notað er að $(1 - \cos(qa)) = 2\sin^2(qa/2)$ þá má rita

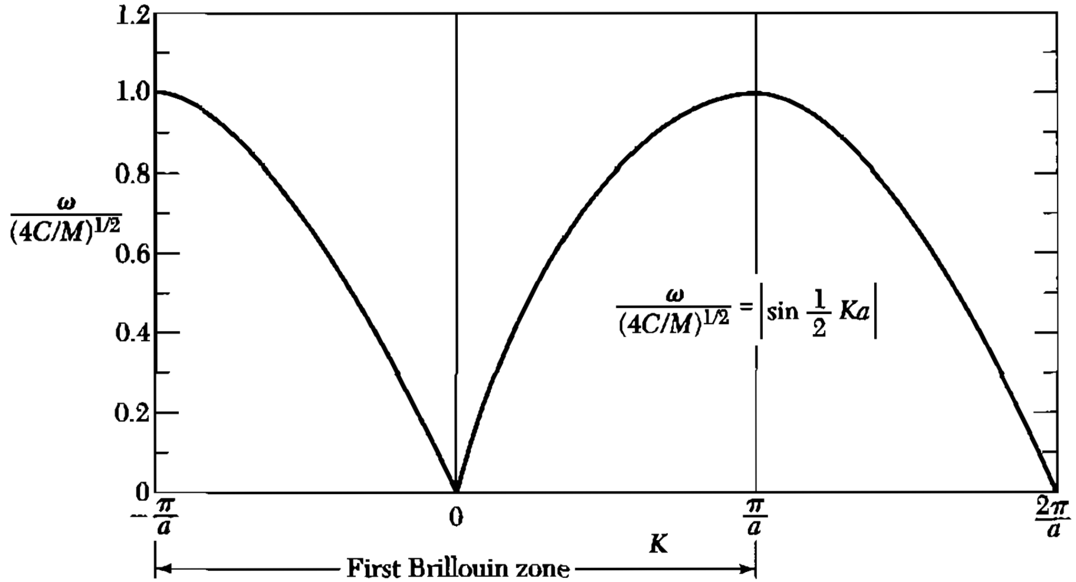
$$\omega^2 = \frac{4\kappa}{M} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$

eða

$$\omega = \left(\frac{4\kappa}{M}\right)^{1/2} \left|\sin\frac{1}{2}qa\right|$$

- Mörkin á fyrsta Brillouin svæðinu liggja við $q = \pm\pi/a$, þar sem $\sin qa = \sin(\pm\pi) = 0$

# Einatóma línuleg keðja




Frá Kittel (2005)

- Tvístrunarsamband einatóma línulegrar keðju

# Einatóma línuleg keðja

- Flutningshraði bylgjupakka er hneppishraðinn (e. group velocity)

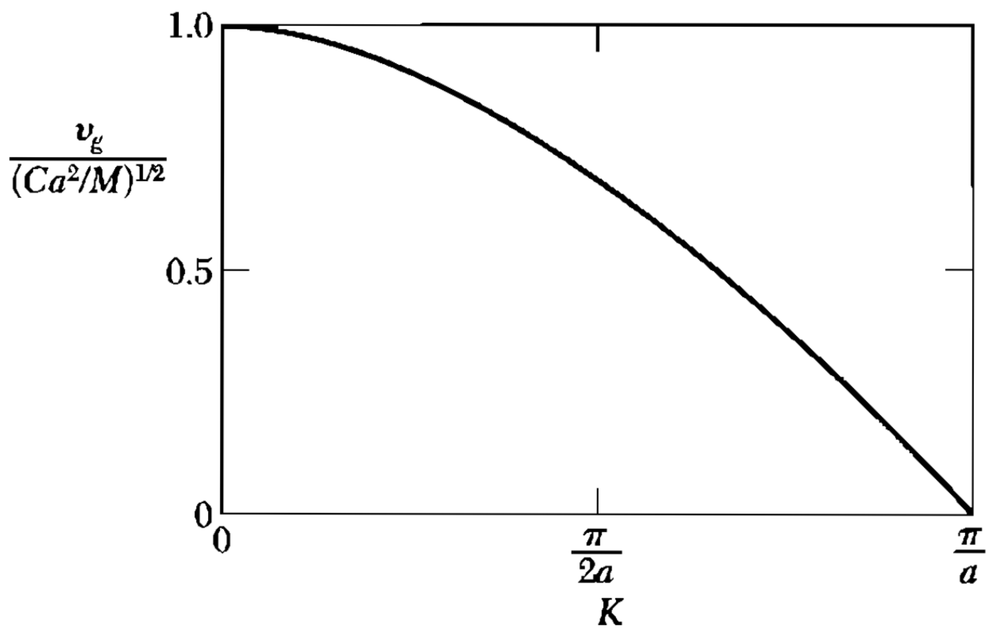
$$v_{\mathrm{g}} = \frac{d\omega}{dq}$$

  sem hér er

$$v_{\mathrm{g}} = \left(\frac{\kappa a^2}{M}\right)^{1/2} \cos \frac{1}{2} qa$$

- Þetta er núll við brúnir svæðisins þar sem $q = \pi/a$. Þar er bylgjan standbylgja (e. standing wave)

# Einatóma línuleg keðja

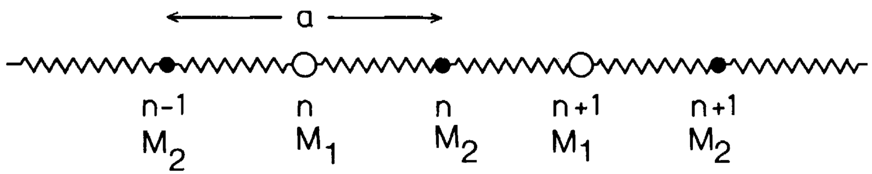



Frá Kittel (2005)

- Hneppishraðinn sem fall af bylgjutölunni $q$

# Tvíatóma línuleg keðja

- Við gerum nú ráð fyrir línulegri keðju þar sem allir næstu grannar eru tengdir með ideal-gormum með kraftstuðul $\kappa$
- Grindareining samanstendur af tveimur atómum sem hafa massa $M_1$ og $M_2$




Frá Ibach and Lüth (2009)

- Vísarnir $\alpha$ og $\beta$ taka gildin 1 og 2 og vísirinn $i$ hefur eitt gildi þar sem kerfið er einvítt

# Tvíatóma línuleg keðja

- Þar sem aðeins næstu grannar víxlverka tekur vísirinn $m$ aðeins gildin $n+1$, $n$, og $n-1$ og því er

$$M_1\ddot{u}_{n1} + \Phi_{n1}^{n-1,2}u_{n-1,2} + \Phi_{n1}^{n1}u_{n1} + \Phi_{n1}^{n2}u_{n2} = 0$$

$$M_2\ddot{u}_{n2} + \Phi_{n1}^{n2}u_{n1} + \Phi_{n2}^{n2}u_{n2} + \Phi_{n+1,1}^{n2}u_{n+1,1} = 0$$

- Þá er

$$\Phi_{n1}^{n-1,2} = \Phi_{n2}^{n1} = \Phi_{n1}^{n2} = \Phi_{n+1,1}^{n2} = -\kappa$$

og

$$\Phi_{n1}^{n1} = \Phi_{n2}^{n2} = 2\kappa$$

- Þá fæst

$$M_1\ddot{u}_{n1} + \kappa(2u_{n1} - u_{n2} - u_{n-1,2}) = 0$$

$$M_2\ddot{u}_{n2} + \kappa(2u_{n2} - u_{n1} - u_{n+1,1}) = 0$$

# Tvíatóma línuleg keðja

- Planbylgjan er

$$u_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} u_\alpha(\mathbf{q}) \exp\left(j(\mathbf{q}an - \omega t)\right)$$

sem er stungið inn

$$\left(\frac{2\kappa}{M_1} - \omega^2\right) u_1 - \kappa \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} \left(1 + \exp(-jqa)\right) u_2 = 0$$

$$-\kappa \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} \left(1 + \exp(jqa)\right) u_1 + \left(\frac{2\kappa}{M_2} - \omega^2\right) u_2 = 0$$

og hreyfifylkið er þá

$$\begin{pmatrix} \frac{2\kappa}{M_1} & \frac{-\kappa}{\sqrt{M_1 M_2}} \left(1 + \exp(-jqa)\right) \\ \frac{-\kappa}{\sqrt{M_1 M_2}} \left(1 + \exp(-jqa)\right) & \frac{2\kappa}{M_2} \end{pmatrix}$$

# Tvíatóma línuleg keðja

- Ef ákveða fylkisins er sett sem núll fæst

$$\omega^2 = \kappa\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm \left[\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]^{1/2}$$

  sem er lotubundið í $q$ þar sem lotan er

$$\frac{qa}{2} = \pi$$

  eða

$$q = \frac{2\pi}{a}$$

  sem er nákvæmlega einn grindarfasti í nykurgrindinni

- Þetta gildir fyrir allar grindur

# Tvíatóma línuleg keðja

- Við sjáum að

$$D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) = D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q} + \mathbf{G})$$

  með

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_n = 2\pi m$$

  og þar með er

$$\omega(\mathbf{q}) = \omega(\mathbf{q} + \mathbf{G})$$

- Að auki gildir

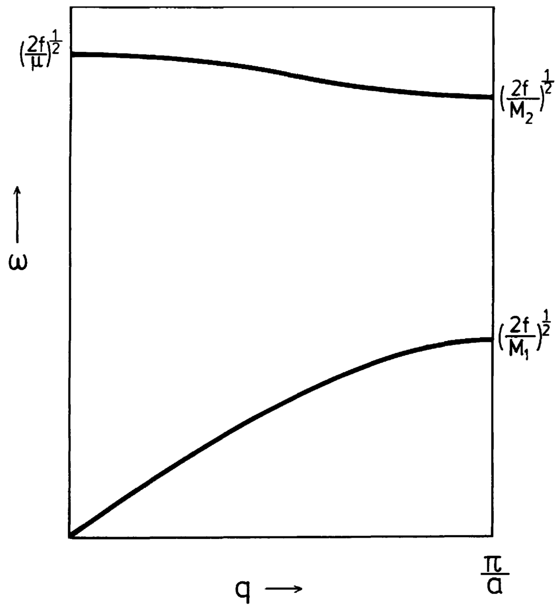
$$\omega(-\mathbf{q}) = \omega(\mathbf{q})$$

  þar sem $u(-\mathbf{q})$ er bylgja sem er eins og $u(\mathbf{q})$ en ferðast í andstæða stefnu

# Tvíatóma línuleg keðja

- Ef skipt er á $\mathbf{q}$ og $-\mathbf{q}$ þá svarar það til þess að skipt sé á vísum $\mathbf{m}$ og $\mathbf{n}$ í hreyfifylkinu
- Gefið ofansagt þá er nægjanlegt að sýna $\omega(\mathbf{q})$ á bilinu $0 \leq \mathbf{q} \leq \mathbf{G}/2$
- $\mathbf{q} = \mathbf{G}/2$ liggur nákvæmlega á brún Brillion svæðisins
- Fallinu $\omega(\mathbf{q})$ má að fullu lýsa með því að skoða einn áttung Brillion svæðisins

# Tvíatóma línuleg keðja




Frá Ibach and Lüth (2009)

- Sem dæmi fyrir línulega tvíatóma keðjuna skoðum við tvær greinar tvístrunarsambandsins fyrir massahlutfallið $M_1/M_2 = 5$
- Greinin sem stefnir á núll við lítil $q$ er þekkt sem **hljóðgrein** (e. acoustic branch)

# Tvíatóma línuleg keðja

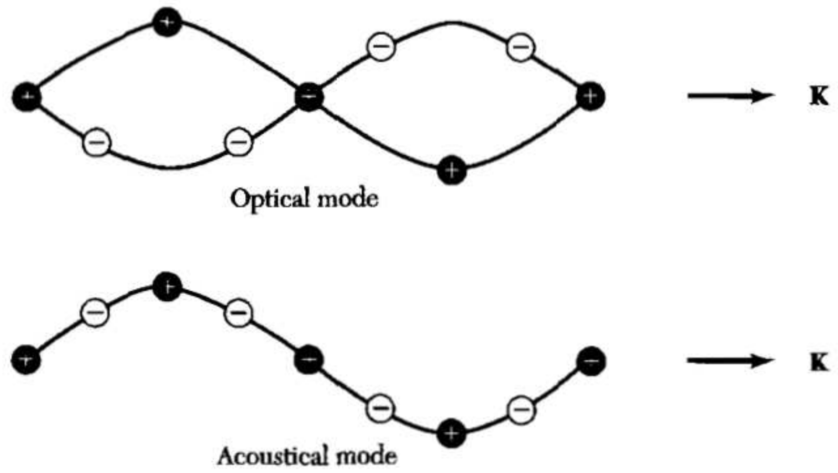
- Við lítil $q$ ($q \ll \pi/a$) er horntíðnin í réttu hlutfalli við $q$
- Þá lýsir hljóðgreinin tvístrunarfrírri útbreiðslu hljóðbylgna
- Greinin þar sem $\omega(q) \neq 0$ við $q = 0$ er nefnd **ljósgrein** (e. optical branch)
- Ef massahlutfallið er aukið verður ljósgreinin flatari
- Við $q = 0$ eru færslur atóma í sérhverri grindareiningu eins
- Undirgrindur léttra og þungra frumeinda sveiflast á móti hvor annari
- Þá erum við með kerfi tveggja massa með kraftstuðul $2\kappa$ og skertan massa

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_2} + \frac{1}{M_1}$$

# Tvíatóma línuleg keðja

- Við $q = \pi/a$ er önnur þessara undirgrinda föst og þess vegna verða tíðnir bylgjuvigursins $(2\kappa/M_2)^{1/2}$ eða $(2\kappa/M_1)^{1/2}$
- Fyrir tvíatóma línulegu keðjuna er eina leyfða færslan eftir keðjunni
- Slíkar bylgjur eru nefndar langsum bylgjur
- Fyrir þrívíðan kristall eru tvær viðbótar þversum bylgjur
- Slík aðgreining er þó aðeins möguleg í tilteknar samhverfu stefnur í kristalli

# Tvíatóma línuleg keðja



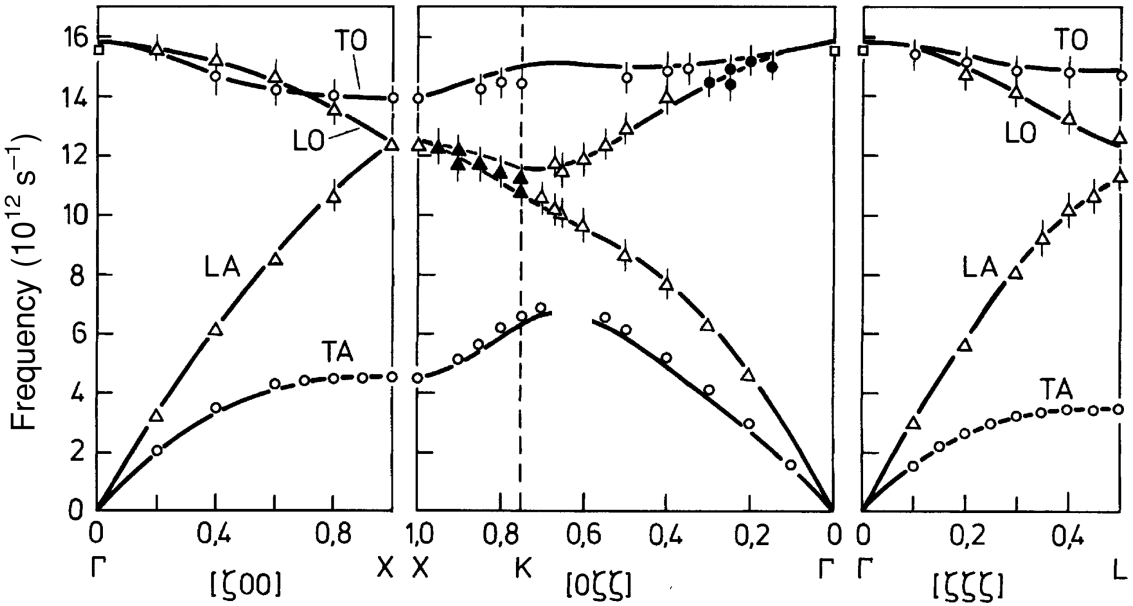

Frá Kittel (2005)

- Hljóðgreinin hefur þetta nafn þar sem hún leiðir til sveiflna með langar bylgjulengdir – hljóðhraða
- Ljósgreinin er titringur við hærri tíðni og þörf er á tiltekinni orku til að örva þennan hátt. Það má örva þessi hætti með rafsegulbylgjum

# Tvíatóma línuleg keðja

- Allir kristallar hafa þrjár hljóðgreinar
- Fyrir sérhverja auka frumeind í (minnstu) grindareiningu fást þrjár viðbótar ljósgreinar
- Fyrir teningsstrúktúra eru hinar tvær þversumgreinar margfaldar í $[001]$ og $[111]$ stefnur
- Þetta gildir fyrir demantgrindina
- Þá inniheldur minnsta grindareining tvær frumeindir og því til viðbótar við hljóðgreinarnar ljósgreinar
- Hugtakið "ljós" er notað fyrir allar greinar þar sem $\omega(\mathbf{q}) \neq 0$ við $q = 0$
- Það segir ekki nauðsynlega til um ljóseiginleika

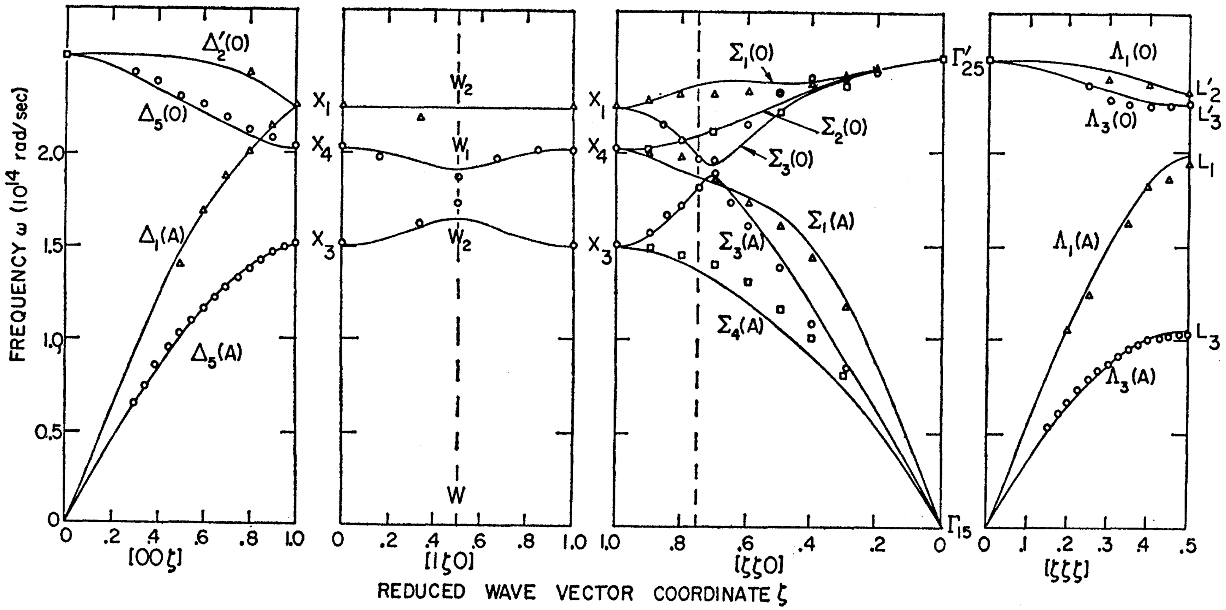
# Tvíatóma línuleg keðja




Frá Ibach and Lüth (2009)

- Tvístrun hljóðeinda í kísli. Hringir og þríhyrningar eru mæld gildi og heilu línurnar eru niðurstöður líknareikninga.

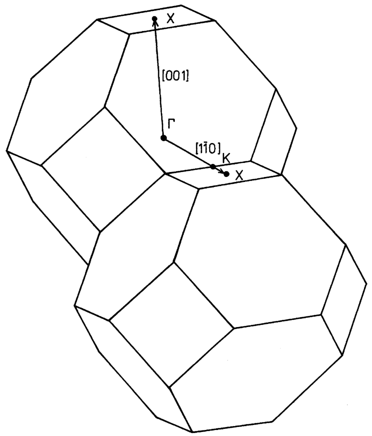
# Tvíatóma línuleg keðja




Frá Warren et al. (1967)

- Tvístrun hljóðeinda í demanti. Hringir og þríhyrningar eru mæld gildi og heilu línurnar eru niðurstöður líknareikninga.

# Tvíatóma línuleg keðja




Frá Ibach and Lüth (2009)

- Tvö nærliggjandi Brillion svæði.
- Við sjáum að þegar farið er eftir [110] frá $\Gamma$ til $K$ er komið í $X$ þegar haldið er áfram um skil Brillion svæðanna.

$\Longrightarrow$ Dæmi 4.1.

$\Longrightarrow$ Dæmi 4.2.

$\Longrightarrow$ Dæmi 4.3.

# Tvístrun frá tímaháðum strúktúr - litrófsgreining

- Lausnir hreyfijafna frumeinda eru planbylgjur
- En hafa þessar bylgjur líka agnaeiginleika ?
- Hvernig víxlverkar sú ögn þá við rafeindir, nifteindir, frumeindir og ljóseindir ?
- Við byggjum á tvístrunarfræðum sem áður voru komin
- Tvístrunarútslagið er

$$A_{\mathrm{B}} \propto \int \rho(\mathbf{r}(t)) \exp(-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}(t)) \mathrm{d}\mathbf{r}$$

# Tvístrun frá tímaháðum strúktúr - litrófsgreining

- Við gerum ráð fyrir að frumeindirnar séu punkt tvístrunarmiðjur og staðsettar í tímaháðu stöðunni $\mathbf{r}_n(t)$
- Þar með er

$$\rho(\mathbf{r}, t) \propto \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n(t))$$

og þá er

$$A_\mathrm{B} \propto \exp(-j\omega_0 t) \sum \exp(-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n(t))$$

- Við skiptum hverjum vigri $\mathbf{r}_n(t)$ upp í grindarvigur $\mathbf{r}_n$ og færslu úr grindarsæti $u_n(t)$ þ.a.

$$\mathbf{r}_n(t) = \mathbf{r}_n + u_n(t)$$

# Tvístrun frá tímaháðum strúktúr - litrófsgreining

- Þá er

$$A \propto \sum \exp(-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n)\exp(-j\mathbf{k}\cdot u_n(t))\exp(-j\omega_0 t)$$

- Fyrir litla færslu $u_n(t)$ er hægt að skrifa Taylor röð

$$A \propto \sum \exp(-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n)\left[1 - j\mathbf{k}\cdot u_n(t) + \ldots\right]\exp(-j\omega_0 t)$$

- Ef færslan er rituð sem planbylgja

$$u_n(t) = u\frac{1}{\sqrt{M}}\exp\left(\pm j\left[\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_n - \omega(\mathbf{q}t)\right)\right)$$

þá fæst fjaðurtvístrun

$$A_{\text{inel}} \propto \sum \exp\left(-j(\mathbf{K}\mp\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}_n\right) j\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}\frac{1}{\sqrt{M}}\exp\left(-j(\omega_0 \pm \omega(\mathbf{q}))t\right)$$

# Tvístrun frá tímaháðum strúktúr - litrófsgreining

- Þannig að tvístraða bylgjan hefur tíðni sem er ólík innkomandi bylgju sem nemur grindartitringi
- Þessar tvístruðu bylgjur verða að uppfylla að summan yfir $\mathbf{n}$ leggur aðeins til þegar $\mathbf{K} \mp \mathbf{q}$ er jafn grindarvigri nykurgrindarinnar $\mathbf{G}$

$$\omega = \omega_0 \pm \omega(q)$$

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 \mp \mathbf{q} = \mathbf{G}$$

og ef margfaldað er með $\hbar$

$$\hbar\omega - \hbar\omega_0 \pm \hbar\omega(q) = 0$$

$$\hbar\mathbf{k} - \hbar\mathbf{k}_0 \mp \hbar\mathbf{q} - \hbar\mathbf{G} = 0$$

# Tvístrun frá tímaháðum strúktúr - litrófsgreining

- Þannig að fyrri jöfnuna má túlka sem varðveislu orku
  - + táknar örvun titrings kristallsins með tvístrun agnar
  - - táknar að titringur grindar tapar orku til tvístrunar agnar
- Síðari jafnan er varðveisla skriðþunga ef $\hbar\mathbf{q}$ er skriðþungi titrings kristallsins
- Við getum því talað um agnir og vísað til þessa titrings sem hljóðeinda
- Við notum hugtakið quasimomentum fyrir stærðina $\hbar\mathbf{q}$
- Athugið að þessi umræða var öll sígild

# Tvístrun frá tímaháðum strúktúr - litrófsgreining

- Ófjaðrandi tvístrun ljóss innan eða umhverfis sýnilega sviðið er þekkt sem Ramantvístrun eða þegar víxlverkunin er við hljóðbylgjur sem Brilliontvístrun

- Tvístrunin verður vegna skautunar frumeindarinnar í sviðinu og útgeislun tvípólsgeislunar

- Á tíðnisviði sýnilegs ljóss er stærsti bylgjuvigur

$$2k_0 = \frac{4\pi}{\lambda} \sim 2 \times 10^{-3} \quad \text{Å}^{-1}$$

  það er um það bil 1/1000 af grindarvigri nykurgrindar

- Þetta segir okkur að Raman tvístrun má nota til að skoða grindartitring í miðju Brillion svæðisins (þ.e. umhverfis $\mathbf{q} = 0$)

# Tvístrun frá tímaháðum strúktúr - litrófsgreining

- Þetta er ekki tilfellið með ófjaðrandi Röntgengeisla
- Ljóseindaorkan er um $10^4$ eV en náttúruleg breidd Röntgenlína er um 1 eV, en orka hljóðeinda er á bilinu 1 – 100 meV
- Til að framkvæma litrófsgreiningu hljóðeinda þarf því einlitan Röntgengeisla með 1 meV, sem hægt er að fá með litrófsgreini
- Ef við diffrum jöfnu Bragg

$$\lambda = 2d \sin\theta$$

þannig að

$$\Delta\lambda = 2\Delta d \sin\theta + 2d\Delta\theta \cos\theta$$

og

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = -\frac{\Delta E}{E} = -\frac{\Delta d}{d} + \Delta\theta \cot\theta$$

# Tvístrun frá tímaháðum strúktúr - litrófsgreining

- Fyrir Röntgengeisla þarf

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \sim 10^{-7}$$

  sem er aðeins hægt að uppfylla í samhraðli (e. synchrotron)

- Einnig er erfitt að finna kristalla til að uppfylla

$$\frac{\Delta d}{d} \sim 10^{-7}$$

# Frekari upplýsingar

- Umfjöllun um einvíðar grindur er byggð á kafla 4 hjá Kittel (2005) og köflum 8 – 10 hjá Simon (2013). Umfjöllun um þrívíða kristalla er að mestu byggð á kafla 4 hjá Ibach and Lüth (2009).

# Heimildir


Ibach, H. and H. Lüth (2009). *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science* (4 ed.). Berlin Heidelberg: Springer Verlag.

Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics* (8 ed.). New York: John Wiley & Sons.

Simon, S. H. (2013). *The Oxford Solid State Basics*. Oxford: Oxford University Press.

Warren, J. L., J. L. Yarnell, G. Dolling, and R. A. Cowley (1967). Lattice dynamics of diamond. *Physical Review 158*(3), 805–808.