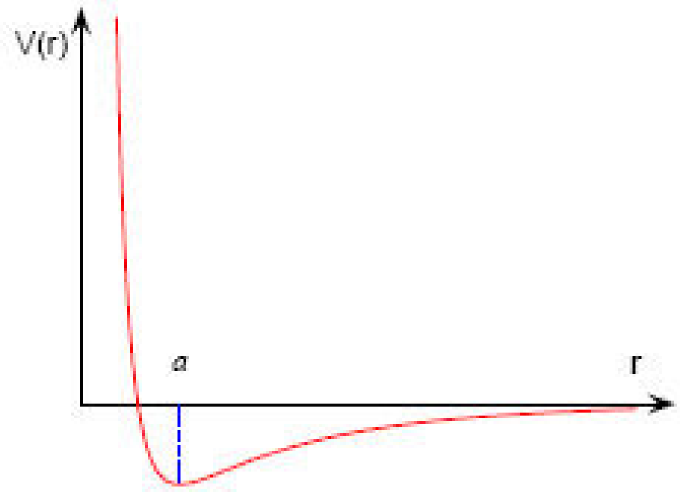
3. Dinamika kristalne rešetke

3.1. Titranje atoma u kristalima

Kristalna struktura kristala ⇒ pravilan raspored stacionarnih atoma. U stvarnosti atomi titraju oko položaja ravnoteže, čak i na temperaturi apsolutne nuli atomi moraju titrati oko ravnotežnih položaja ⇒ nulto gibanje/titranje i pripadna minimalna energija je nulta energija- u skladu sa sa Heisenbergovim principom neodređenosti $\Delta p \Delta x \geq \hbar$

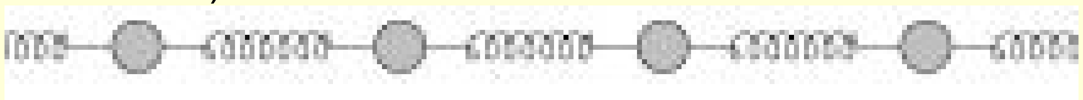
S povećanjem temperature povećavaju se amplitude titranja ⇒ u tom titranju je uskladištena unutarnja energija kristala (raste s povećanjem temperature!)



- Ako je $r < a$ => sila nastoji uvećati r.
- Ako je $r > a$ => sila nastoji umanjiti r.
- a je ravnotežna vrijednost kada je sila ≡ 0.

Svaki pomak atoma iz ravnotežnog položaja uzrokuje povratnu silu koja nastoji vratiti atom u ravnotežni položaj ⇒ atomi titraju oko položaja ravnoteže

Kao da su atomi međusobno vezani elastičnim oprugama (postoje elastične/povratne sile).



Titranje se prenosi s jednog atoma na drugi ⇒ kolektivno gibanje svih atoma u obliku elastičnog vala koji se širi kroz kristal. Ti elastični valovi nose određenu energiju –zovemo ih **fononi** (o tome više kasnije).

Atom možemo zamisliti kao mali lokalni harmonički oscilator;

tri koordinatna smjera ⇒ tri stupnja slobode

u svakom smjeru harmonički oscilator može biti u stanju ili kinetičke ili potencijalne energije ⇒ dva stupnja slobode Ukupno: 3 x 2 = 6 stupnjeva slobode

U slučaju N atoma (po molu) = 6N stupnja slobode

Prema principu ekviparticije energije svakom stupnju slobode pripada ½KT toplinske energije ⇒ ukupna unutarnja energija

$6N \times \frac{1}{2}KT = 3NKT$

Toplinski kapacitet jednak je $dU/dT \Rightarrow 3NK$ ili $3R$ (Dulong-Petit-ovo pravilo za čvrsta tijela).

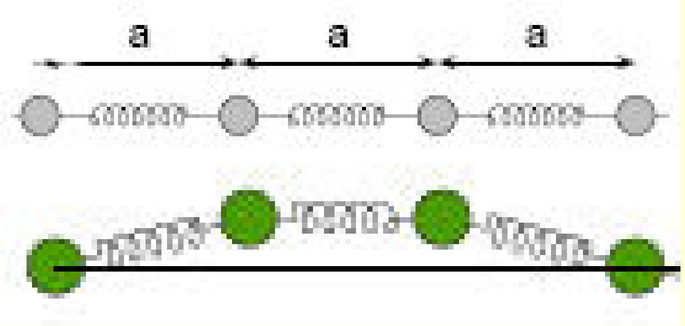
U slaganju sa eksperimentima na sobnoj temperaturi!!!

Ali sa snižavanjem temperature toplinski kapacitet smanjuje se kao T^3, dakle navedeni model nije dobar i treba naći bolji.

Uočiti: titranje atoma ne prestaje ni na apsolutnoj nuli. Već smo napomenuli da je razlog Heisebergova relacija neodređenosti $\Delta p \Delta x \geq \hbar$

Einsteinov model: svi atomi titraju s istom frekvencijom – za toplinski kapacitet je dobio eksponencijalni pad prema nuli dok se eksperimenti pokazivali smanjenje s T^3.

Debyev model: Kristalna rešetka može titrati s različitim frekvencijama, ali najmanja i najveća frekvencija su definirane kristalnom strukturom.



$\lambda_{\text{mak}} = 2L$

$\lambda_{\text{min}} = 2a$

Podsjetnik: ako je v brzina širenja vala

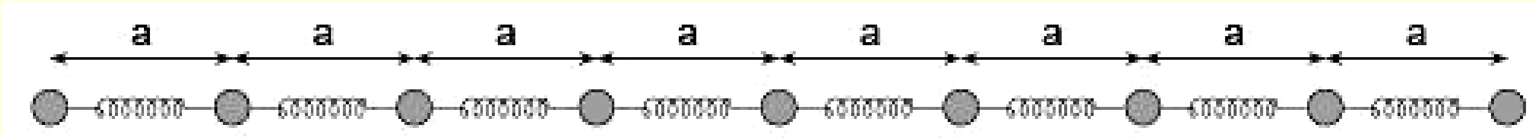
$\lambda = vT = v/\nu \Rightarrow \nu_{mak} = v/\lambda_{min} \Rightarrow \omega_{mak} = 2\pi v/\lambda_{\text{min}}$

Definiramo valni vektor $k = 2\pi/\lambda \Rightarrow k_{mak} = 2\pi/\lambda_{min} \Rightarrow k_{mak} = \pi/a$

$\omega_{mak} = k_{mak} v = v\pi/a$

3.2. Linearna jednoatomska rešetka

Jednodimenzijska kristalna rešetka istovrsnih atoma mase *M* međusobno udaljenih za *a* (parametar jedinične ćelije)

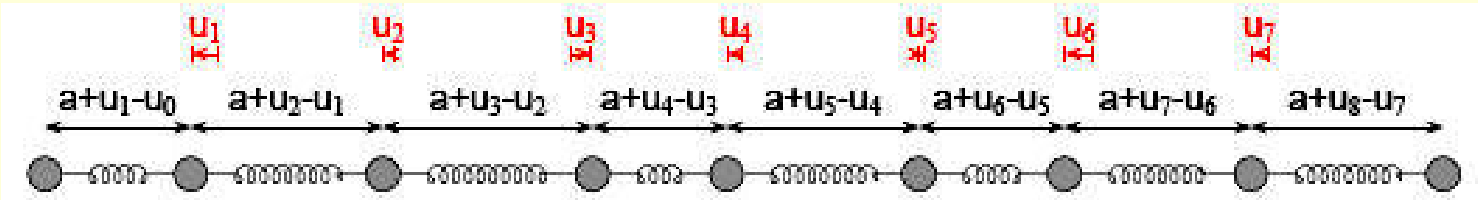


Položaj l-tog atoma, kad ne bi bilo titranje: $x=la$, odnosno

..... (l-1)a   la   (l+1)a   (l+2)a ....

Uslijed titranja amplitudom u_l trenutačni položaji atoma su

$x_l = la + u_l$ te se prema tome mijenjaju i međusobni razmaci



Pretpostavke:

1. atomi titraju oko ravnotežnih pložaja $x_l = la$

2. Međuatomske sila su kratkog dosega, međudjeluju samo prvi susjedi, amplitude titranja su male u usporedbi s $a \gg u$

Pretpostavka 2. nam omogućava primjenu harmoničke aproksimacije $\Rightarrow$potencijalna energija je kvadratična funkcija atomskih pomaka iz ravnotežnih položaja. Za oprugu $U_p = \frac{1}{2}k(\Delta a)^2$, k=konstanta opruge; u našem slučaju $\Delta a = u_l - u_{l-1}$, a za konstantu međuatomskog djelovanja stavimo β–određuje jačinu međuatomske veze. Za cijeli linearni niz atoma/ harmoničkih oscilatora

$$U_p = \frac{\beta}{2}\sum (u_l - u_{l+1})^2$$

Pogledajmo detaljnije gibanje/titranje l-tog atoma; njegova potencijalna energija ovisi o pomaku prema lijevom odnosno desnom atomu

$$U_{pl} = \frac{\beta}{2}\left[(u_l - u_{l-1})^2 + (u_l - u_{l+1})^2\right]$$

Sila je jednaka negativnoj derivaciji potencijalne energije $-\frac{\delta U_p}{\delta u_l} = M\ddot{u}_l$

Slijedi deriviranjem: (IZRAČUNATI: **ZADATAK 1.-**konačni rezultat; **disperzivna relacija sustava**)

$$M\ddot{u}_l = -\beta(2u_l - u_{l-1} - u_{l+1})$$

Uvrstimo redom l= 1, 2, 3,……, dobivamo sustav diferencijalnih jednadžbi koji određuje dinamiku kristalne rešetke.

Pretpostavimo da se pomaci atoma u_l sporo mijenjaju od atoma do atoma (aproksimacija s elastičnim kontinuum); za male pomake možemo razviti u red

$$u_{l\pm1} = u(x,t) \pm a\frac{\delta u}{\delta x} + \frac{a^2}{2}\frac{\delta^2 u}{\delta x^2}$$

Dobivamo

$$\frac{\delta^2 u}{\delta t^2} = \frac{\beta a^2}{M}\frac{\delta^2 u}{\delta x^2}$$

Prisjetimo se izraza za valnu jednadžbu za širenje valova brzinom v_o u elastičnom kontinuumu

$$\frac{\delta^2 u}{\delta t^2} = \mathrm{v}_o^2 \frac{\delta^2 u}{\delta x^2}$$

Uspoređivanje daje

$$\mathrm{v}_o = a\sqrt{\frac{\beta}{M}}$$

imali smo $\omega = kv \Rightarrow \omega^2 = a^2 k^2 \beta / M$

odnosno $$\omega = ak\sqrt{\frac{\beta}{M}}$$

Titranjem atoma se dakle prenose zvučni valovi brzine v_o

Rješenje valne jednadžbe su ravni valovi

$$u(x,t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

$k = 2\pi/\lambda$

A titranje kristalne rešetke dano je nizom diferencijalnih jednadžbi

$$M\ddot{u}_l = -\beta(2u_l - u_{l-1} - u_{l+1})$$ l= 1, 2, 3,……,

Možemo pretpostaviti da će rješenje biti ravni valovi osim što stavljamo $x=la$

$$u_l(x,t) = Ae^{i(kla-\omega t)}$$ i uvrstimo u gornju dif jedn.

(derivirati; dijeliti s u_l; koristiti $2\cos\alpha = e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}$; $1-\cos\alpha = 2\sin^2(\alpha/2)$)

dobiva se:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4\beta}{M}\sin^2\frac{ka}{2}}$$ frekvencija mora biti pozitivna $\Rightarrow$

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$$ uz $$\omega_m(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}}$$ slijedi

$$\omega(k) = \omega_m\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$$ $\Leftarrow$ **disperzivna relacija sustava**

Kombinirajući relacije $\mathrm{v}_o = a\sqrt{\frac{\beta}{M}}$ i $\omega_m(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}}$

$$\omega_m = \frac{2\mathrm{v}_o}{a} \Rightarrow imali \;\; smo \;\; \omega_m = \pi\frac{\mathrm{v}_o}{a} \;\; kako \;\; je \;\; \pi \approx 2$$

može se reći da imamo slaganje s našim modelom o minimalnoj valnoj duljni odnosno maksimalnoj frekvenciji

Kako je $v_o \approx 10^5$ cm/s i $a \approx 10^{-8}$ cm $\Rightarrow$ $\omega_m \approx 10^{13}$ Hz

odnosno prema $\omega_m = v_o k_m \Rightarrow k_m \approx 10^{-8}$ cm^{-1}

Povećajmo (translatirajmo) valni vektor za iznos vektora recipročne rešetke: $k \rightarrow k+2\pi/a$ odnosno za višekratnik $k \rightarrow k+n2\pi/a$

$$\omega(k + n\frac{2\pi}{a}) = \omega_m \left| \sin\frac{(k+\frac{2\pi n}{a})a}{2} \right| = \omega_m \left| \sin(\frac{ka}{2} + n\pi) \right| = \omega(k)$$

Frekvencija se ne mijenja!!!!; frekvencija je periodična funkcija valnog broja s periodom $2\pi/a$

Sve moguće frekvencije dobivamo uzimajući valni broj iz intervala 0 do $2\pi/a$ što se obično piše

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

Područje određuje prvu Brillouinovu zonu u jednoj dimenziji, a valne vektore nazivamo reduciranim valnim vektorima.

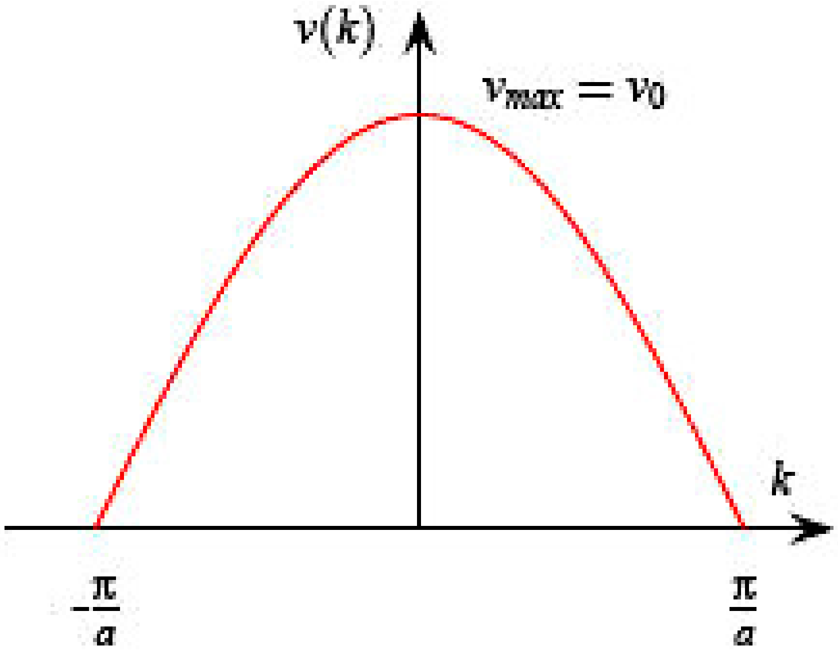
U jednodimenzijskoj rešetki vektor recipročnog prostora je

$$g_n = \frac{2\pi}{a} n$$

n= 0, ±1, ±2,...... Znači ako valni vektor povećamo za $2\pi n/a$ na $k+2\pi n/a$ ($k'=k+g_n$), tim su točkama pridružene iste frekvencije $\omega(k+g_n)= \omega(k)$

Grupna brzina

Brzine ravnih valova koja su rješenja sustava jednadžbi linearne atomske rešetke **nemaju istu brzinu širenja**!



Uvodi se pojam grupne brzine:

$$v(k) = \frac{d\omega}{dk} = a\sqrt{\frac{\beta}{M}}\left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$$

Grupna brzina opisuje gibanje valnog paketa koji se sastoji od više valova različitih valnih duljina (valnih brojeva).

Grupna brzina ima maksimalnu vrijednost za male k-ove, te pada na nulu za $k = \pm\frac{\pi}{a}$.

Za *k*=0 grupna brzina iznosi $\mathrm{v}(0) = a\sqrt{\frac{\beta}{M}}$ što je ekvivalentno izrazu za brzinu zvuka

dobivenog primjenom

aproksimacije elastičnog kontinuuma: $v_o = a\sqrt{\frac{\beta}{M}}$ $\Rightarrow$

$v(0) = v_o$

Isti rezultat bilo $k \to 0$ *ili* $a \to 0$, odnosno $ka << 1$; uslijed $k = 2\pi/\lambda$ znači $\lambda >> a$; razumljivo, jer što je veća valna duljina, to će biti manje izražena svojstva kristala.

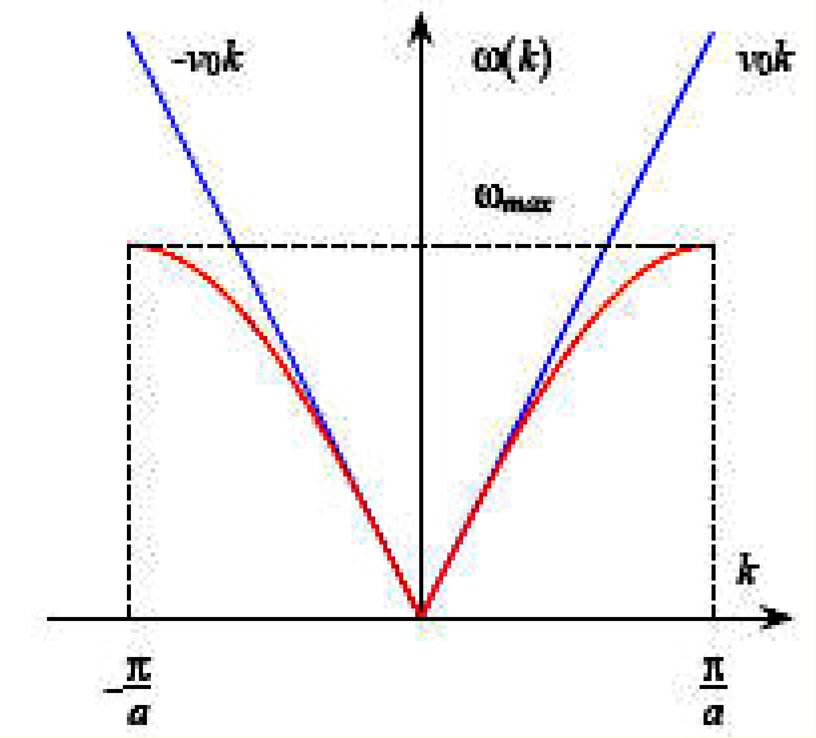
Za male *k* odnosno velike λ (**dugovalna aproksimacija),** vrijedi

sin (*ka*/2) = *ka*/2 +….. $\Rightarrow$ $\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} \cdot \frac{ka}{2} = \mathrm{v}_o\, k$

Grafički izgled disperzivne relacije $\Rightarrow$

$$\omega_m(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}}$$

U području malih valnih Vektora, $k \ll k_{max}$ izraz za frekvenciju se slaže s izrazom dobivenim iz valne jednadžbe (linearna ovisnost)



Ako je kristal beskonačan, valni broj može biti bilo koji realni broj unutar intervala [-π/a,+ π/a].

Za kristal konačnih dimenzija, skup mogućih vrijednosti valnog broja je prebrojiv. Prebrojimo!

Na rješenje $u_l(x,t) = Ae^{i(kla-\omega t)}$ postavljamo rubni uvjet$\rightarrow$invarijantnost za prostornu translaciju $L=Na$ (N= broj atoma u intervalu L)$\Rightarrow$ $u_{l+N}=u_l \Rightarrow$

$$Ae^{i\left[k(l+N)a-\omega t\right]} = Ae^{i(kla-\omega t)} \Rightarrow e^{ikNa} = 1 \rightarrow ako \cdot kNa = 2\pi n$$

odnosno $k = \frac{2\pi}{Na} n$ znači valni broj je kvantiziran!!

Za $L=Na$ jako velik, razlika između dvije uzastopne vrijednossti valnog broja postaje proizvoljno mala$\Rightarrow$praktički je valni broj kontinuiran.

Uvrštavanjem u $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a} \Rightarrow -\frac{N}{2} \leq n \leq \frac{N}{2}$

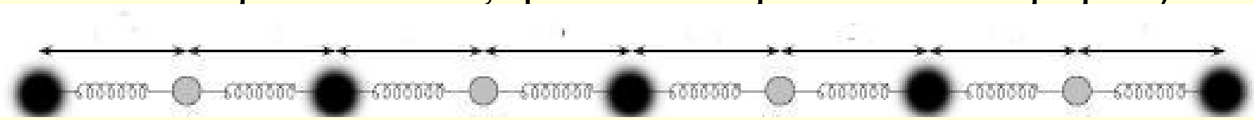
znači broj reduciranih valnih vektora jednak je broju atoma u intervalu L.

Uočimo da smo imali jedan atom po jediničnoj ćeliji.

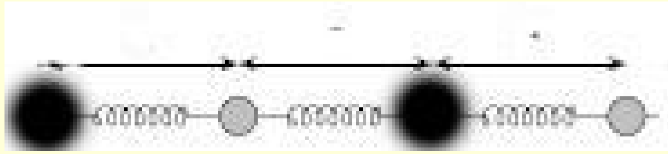
Što ako imamo više atoma po jediničnoj ćeliji

3.3. Linearna dvoatomska rešetka

Jednodimenzijska kristalna rešetka s dva različita atoma (*$M_1>M_2$)* u elemantarnoj ćeliji međusobno udaljenih za *a/2,* parametar jedinične ćelije je *a*)



M_1 a/2 M_2



..... $(2l\text{-}2)a/2$ $(2l\text{-}1)a/2$ $2la$ $(2l+1)a/2$ ....

U parnim ravnotežnim položajima smješteni su atomi veće mase. Potencijalna energija međuatomskog djelovanja kvadratna je funkcija pomaka. Jednadžbe gibanja dvaju susjednih atoma (2*l*-tog i 2*l*+1-vog) prema analogiji s jednoatomsko rešetkom glase:

$$
\begin{aligned}
M_1\,\ddot{u}_{2l} &= -\beta\,(2u_{2l}-u_{2l+1}-u_{2l-1})\\
M_2\,\ddot{u}_{2l+1} &= -\beta\,(2u_{2l+1}-u_{2l+2}-u_{2l})
\end{aligned}
$$

Rješenja tražimo u obliku ravnih valova

$$
\begin{aligned}
u_{2l} &= Ae^{i[k(2l)\frac{a}{2}\,-\,\omega t]}\\
u_{2l+1} &= Be^{i[k(2l+1)\frac{a}{2}\,-\,\omega t]}
\end{aligned}
$$

uvrstimo u

IZRAČUNATI disperzivnu relaciju (**ZADATAK 2.)** Trebat će koristiti vezu

$$2\cos x = e^{ix} + e^{ix}$$

Dobiva se homogeni sustav od dviju jednadžbi s nepoznanicama *A* i *B* (amplitude titranja)

$$\begin{aligned} \left[-M_1\omega^2 + 2\beta\right]\cdot A \quad & - 2\beta \cos\left(\frac{ka}{2}\right)\cdot B &= 0 \\ - 2\beta \cos\left(\frac{ka}{2}\right)\cdot A \quad & + \left[-M_2\omega^2 + 2\beta\right]\cdot B &= 0 \end{aligned}$$

Rješenje postoji (amplitude *A* i *B* su različite od nule) samo ako je determinanta jednaka nuli

$$\det\begin{pmatrix} \left[-M_1\omega^2 + 2\beta\right] & -2\beta\cos\left(\frac{ka}{2}\right) \\ -2\beta\cos\left(\frac{ka}{2}\right) & \left[-M_2\omega^2 + 2\beta\right] \end{pmatrix} = 0.$$

Dobivamo jednadžbu (riješiti gornju determinantu!!)

$$\omega^4 - 2\beta\omega^2 \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} + \frac{4\beta^2}{M_1 M_2}\sin^2 k\frac{a}{2} = 0$$

koja povezuje frekvenciju titranja, konstantu međuatomskog djelovanja, mase atoma, razmak istovrstnih atoma i valni broj. Rješenjem gornje kvadratične jednadžbe s nepoznanicom ω^2 dobivamo dvije **disperzivne relacije**

$$\omega_{\pm}^2(k) = \beta \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)} \right]$$

Jednadžba ima dva rješenja $\omega_+^2(k)$ *i* $\omega_-^2(k)$, dvije disperzivne relacije!!

Zbroj kvadrata frekvencija jednak je za sve valne brojeve-pravilo zbroja.

$$\omega_+^2(k) + \omega_-^2(k) = 2\beta \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}$$

Translacijom valnog broja $k \rightarrow k + \frac{2\pi n}{a}$ frekvencija ostaje nepromijenjena

$$\sin\frac{ka}{2} \rightarrow \sin\left[\frac{a}{2}\left(k + \frac{2\pi n}{a}\right)\right] \rightarrow \sin\left(\frac{ka}{2} + n\pi\right) \rightarrow \sin\frac{ka}{2}$$

Znači $\omega\left(k + \frac{2\pi}{a} n\right) = \omega(k)$ te je dovoljno uzimati valne vektore u intervalu 0 do $2\pi/a$

Odnosno ograničiti na prvu Brillouinovu zonu $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$

Pomoću periodičnosti rješenja jednadžbi kvantizirajmo valni broj

Postavljamo rubni uvjet$\rightarrow$invarijantnost za prostornu translaciju $L=Ga$ (G= broj kristalnih ćelija; broj atoma u intervalu L je $N=2G$) $\Rightarrow u_{l+N}=u_l \Rightarrow$

$$Ae^{i\left[k(l+N)\frac{a}{2}-\omega t\right]} = Ae^{i(kl\frac{a}{2}-\omega t)} \Rightarrow e^{ikN\frac{a}{2}} = e^{ikGa} = e^{ikL}$$

slijedi $kL = 2\pi n \Rightarrow k = \dfrac{2\pi}{L}n$ odnosno uslijed $L=Ga$ $k = \dfrac{2\pi}{Ga}n$

valni broj je kvantiziran!!

Uslijed $-\dfrac{\pi}{a} \leq k \leq \dfrac{\pi}{a}$ imamo $-\dfrac{G}{2} \leq n \leq \dfrac{G}{2}$

znači broj reduciranih valnih vektora u prvoj Brillouinovoj zoni jednak je broju kristalnih ćelija G.

Potražimo omjer ampliduda A/B uzimajući u obzir da postoje dva rješenja $\omega_{\pm}^2(k)$

$$[-M_1\omega^2 + 2\beta]\cdot A \quad - 2\beta\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\cdot B \quad = 0 \qquad (1)$$

$$-2\beta\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\cdot A \quad + [-M_2\omega^2 + 2\beta]\cdot B \quad = 0 \qquad (2)$$

Jednadžbu (2) preuredimo tako da s lijeve strane imamo omjer $(A/B)_{\pm}$, a na desnoj strani uvrstimo za $\omega_{\pm}^2(k)$ prije dobiveni izraz. Dobiva se (**ZADATAK br.3**)

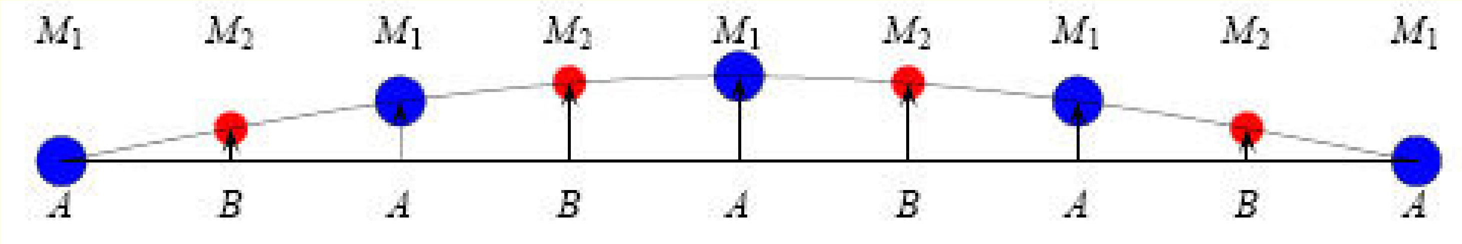
$$\left(\frac{A}{B}\right)_{\pm} = \frac{1}{\cos\frac{ka}{2}}\left\{1 - \frac{M_1 + M_2}{2M_1}\left[1 \pm \sqrt{1 - 4\frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}\sin^2\frac{ka}{2}}\right]\right\}$$

Pogledajmo omjer za velike valne duljine, odnosno male valne brojeve: $ka \ll 1$
$\Rightarrow$ $\cos(ka/2) \approx 1$ i $\sin(ka/2) \approx 0$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_{\pm} = 1 - \frac{M_1 + M_2}{2M_1}(1 \pm 1)$$

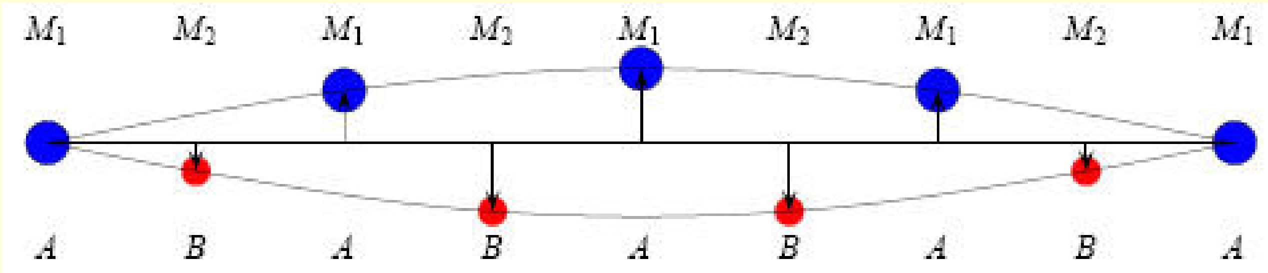
$\Rightarrow$ $A_- = B_-$ (*) odnosno $A_+ M_1 + B_+ M_2 = 0$ (**)

$\Rightarrow$U slučaju (*) obje podrešetke titraju s približno istim amplitudama. Tip titranja kao kod jedanoatomske rešetke$\rightarrow$prenose se zvučni valovi $\rightarrow$ frekvencije $\omega_-(k)$ nazivamo **akustičke frekvencije.**



Frekvencijska ovisnost akustičkog titranja slična je titranju jednoatomske rešetke. Pomaci atoma *A* i *B* su u fazi.

Za frekvencije $\omega_+(k)$ $(A_+M_1 + B_+M_2=0)$ atomi različitih masa titraju izvan faze. Pomaci/amplitude atoma su proporcionalni masama atoma i titraju tako da težište jedinične ćelije ostaje približno nepomično.



Ako su atomi masa M_1 *i* M_2 nabijeni suprotnim predznacima $\Rightarrow$ svaka ćelija djeluje kao električni dipol. O frekvenciji titranja ovisi dielektrična funkcija koja određuje optička svojstva sustava $\rightarrow$ zato $\omega_+(k)$ nazivamo **optička frekvencija.**

Ovisnost $\omega_{\pm}(k)$ o valnom broju $-\frac{\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$

$$\omega_{\pm}^2(k) = \beta \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4 M_1 M_2}{(M_1+M_2)^2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)} \right]$$

Dugovalna aproksimacija (mali valni brojevi)

ka<<1, koristimo $\sin^2(\frac{ka}{2}) \approx \frac{k^2a^2}{4}$ te $\sqrt{1-x} = 1 - \frac{1}{2}x + ...$

$$\omega_{\pm}^2(k) = \beta \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\left[1 \pm (1 - \frac{M_1 M_2}{2(M_1+M_2)^2} k^2 a^2)\right]$$

Akustička grana $\omega_{-}(k)$

$k=0 \Rightarrow \omega_{-} = 0$; $k \neq 0 \Rightarrow$ $\omega_{-}^2(k) = k^2 \frac{\beta a^2}{2(M_1 + M_2)}$ $\Rightarrow$ $\omega_{-}(k) = ka\sqrt{\frac{\beta}{2(M_1+M_2)}}$

Isto ako kod jednoatomske rešetke (kristalna rešetka titra kao elastični kontinuum)

$\omega_{-}(k) = vk$; faktor proporcionalnost jednak je brzini zvučnih valova

$$v = a\sqrt{\frac{\beta}{2(M_1+M_2)}}$$

brzina ovisi o ukupnoj masi atoma unutar ćelije

za $M_1=M_2=M$ dobivamo izraz kao kod jednoatomske rešetke $v = a\sqrt{\frac{\beta}{2M_1}}$

Optička grana $\omega_+(k)$ $\omega_+^2(k) = \beta\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}\left[1+(1-\frac{M_1M_2}{2(M_1+M_2)^2}k^2a^2)\right]$

k=0 $\Rightarrow$ $\omega_+^2(0) = 2\beta\;\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}$; pomoću izraza $v = a\sqrt{\frac{\beta}{2(M_1+M_2)}}$

pišemo $\beta = \frac{2(M_1+M_2)}{a^2}v^2$ uvrstimo u ; dobivamo $\omega_+(0) = \frac{2v}{a}\frac{M_1+M_2}{\sqrt{M_1M_2}}$

Uz v=3x10^5 cm/s; a=5x10^{-8} cm; $M_1 = 4M_2$ dobivamo $\omega_+(0) = 3\text{x}10^{13}$ Hz (infracrveni dio spektra) = maksimalna optička frekvencija

Kratkovalna aproksimacija (maksimalni valni vektor $\pm\pi/a$; rub Brillouinove zone)

$$\omega_\pm^2(k)| = \beta\,\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}\left[1\pm\sqrt{1-\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right]$$

$\sin^2(\pi/2) = 1$

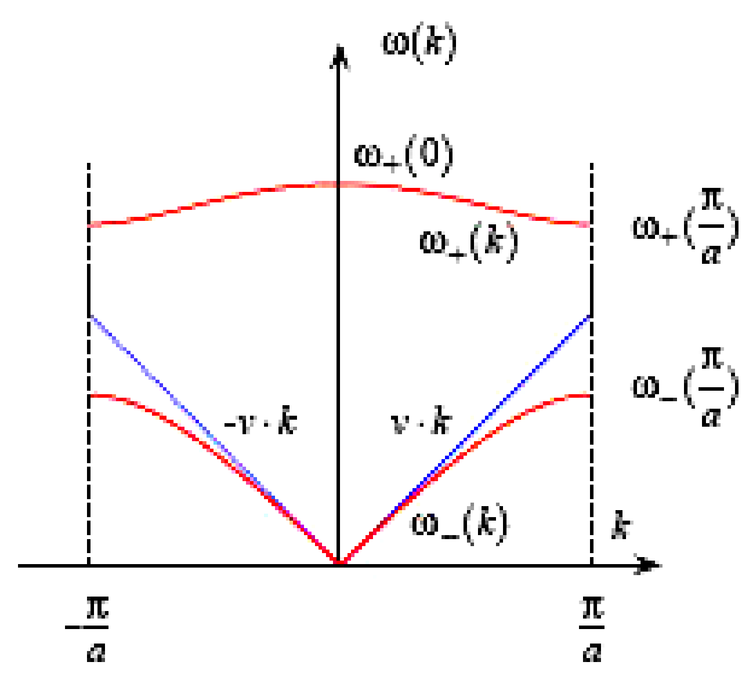
$$\omega_\pm^2(\pm\frac{\pi}{a}) = \beta\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}(1\pm\frac{|M_1-M_2|}{M_1+M_2})$$

Akustička grana IZRAČUNATI **Zadatak 4!!** **Optička grana**

$$\omega_-(\pm\frac{\pi}{a}) = \sqrt{\frac{2\beta}{M_1}} \qquad \omega_+(\pm\frac{\pi}{a}) = \sqrt{\frac{2\beta}{M_2}}$$

Uslijed $M_1 > M_2$ slijedi $\dfrac{\beta}{M_2} \triangleright \dfrac{\beta}{M_1} \Rightarrow \omega_+ > \omega_-$

Nacrtano disperzivne relacije za akustičko i optičko titranje izgledaju:



$$\omega_+(k=0) = \sqrt{2\beta \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}}$$

$$\omega_\pm\left(k = \frac{\pi}{a}\right) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2\beta}{M_2}} & (+) \\ \sqrt{\dfrac{2\beta}{M_1}} & (-) \end{cases}$$

Akustičko titranje na rubu Brillouinove zone ima frekvenciju $\sqrt{\dfrac{2\beta}{M_1}}$ pri čemu se pomiču samo teži atomi ($B \equiv 0$), dok optičko titranje na rubu Bri. zone ima frekvenciju $\sqrt{\dfrac{2\beta}{M_2}}$ a pomiču se samo lakši atomi ($A \equiv 0$)

Broj različitih vrsta titranja (akustičko, optička) jednako je broju atoma po jediničnoj ćeliji. Samo jedno od njih (akustičko) ima frekvenciju jednaku nuli kada je valni vektor jednak nuli. Ostala su titranja optička.

U realnim kristalima koji su 3D, sa n atoma po jediničnoj ćeliji, postoje 3n titraja, od toga su 3 akustička titranja, a 3(n-1) su optička.

Ako kristalna rešetka u jednom molu atoma (*N*) ima G ćelija, onda je broj atoma po ćeliji *n=N/G* i broj optičkih titranja po ćelije je 3(*N/G*)-3, odnosno za *G* ćelija 3G(N/G)-1.

Pretpostavimo da je $M_1 >> M_2 \Rightarrow M_1 + M_2 \approx M_1$ i $M_2/M_1 << 1$ uslijed čega se relacija ω_+^2 za male valne brojeve

$$\omega_+^2(k) = \beta \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\left[1 + (1 - \frac{M_1 M_2}{2(M_1 + M_2)^2} k^2 a^2)\right]$$

Svodi na $\omega_+(k_{mali}) = \sqrt{\frac{2\beta}{M_2}}$ **(IZRAČUNATI! Zadatak 5!!!)**

A to je isto kao $\omega_+(\pm\frac{\pi}{a}) = \sqrt{\frac{2\beta}{M_2}}$, što znači da za $M_1 >> M_2$ optička frekvencija se ne mijenja s valnim vektorom. To je bila osnovna pretpostavka Einsteinovog modela iz 1907.g. Model se može aproksimativno primijeniti za opisivanje optičkog titranja u rešetkama izrazito asimetrične građe.

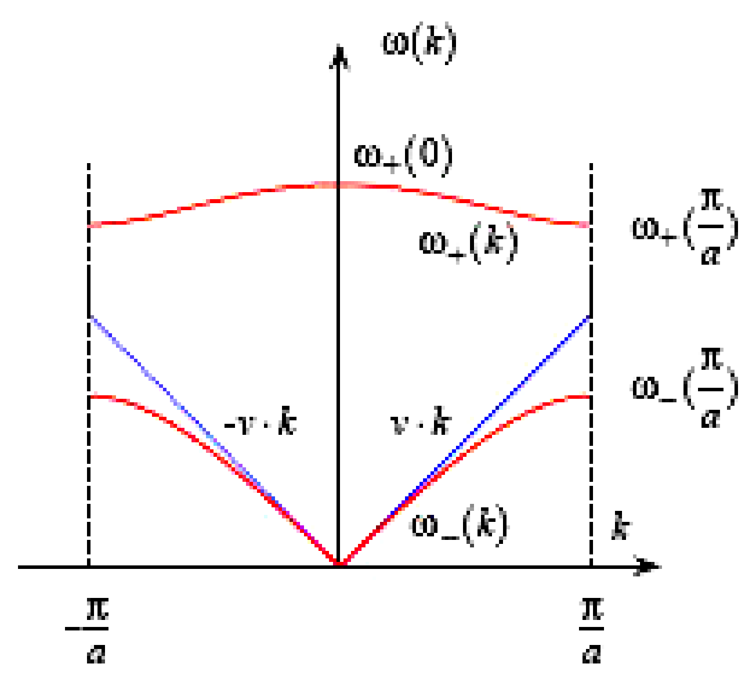
Na slici uočavamo da je maksimalna akustička frekvencija niža od minimalne optičke, da akustička i optička vrpca imaju određenu frekvencijsku širinu (Δ_{ak}, Δ_{op}) kao i da postoji frekventni procijep (Δ_{pro}) između akustičke i optičke vrpce.

IZRAČUNATI **(Zadatak 6)**

$$\Delta_{ak} = \sqrt{\frac{2\beta}{M_1}}$$

$$\Delta_{op} = \Delta_{ak}\sqrt{\frac{M_1}{M_2}}\left(\sqrt{1+\frac{M_2}{M_1}}-1\right)$$

$$\Delta_{pro} = \Delta_{ak}\left(\sqrt{\frac{M_1}{M_2}}-1\right)$$



Povećanjem razlike masa atoma, povećava se procijep, a smanjuje širina optičkog spektra.

Smanjenjem razlike masa atoma, smanjuje se procijep, a širina optičkog spektra povećava.

U granici ($M_1 \approx M_2$), širina frekventnog procijepa pada na nuli, a širina optičkog spektra postaje maksimalna.