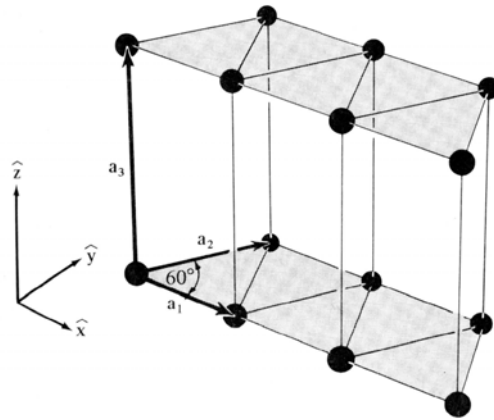


Kristalli võnkumised ühemõõtmelises lihtkristallis

Rait Rand

Baasvektorid

- Kristalli baasvektorid on vektorid mille kaudu saab kirjeldada suvalise tüvirakus oleva aatomi asukohta.

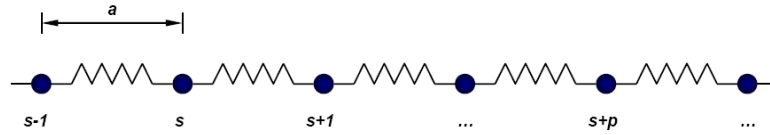


$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x}, \quad \mathbf{a}_2 = a/2\hat{x} + \sqrt{3}a/2\hat{y}, \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{z}$$

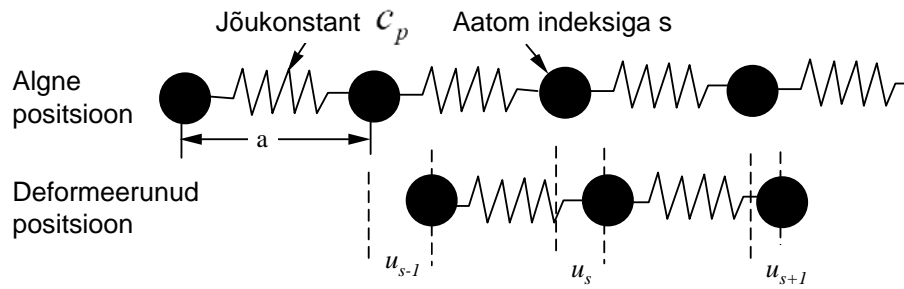
Hexagonal close-packed structure

Liikumisvõrrandid, harmooniline lähendus

- 1d mudel: ühesuused aatomid ühendatud ideaalsete vedrudega.



- Vaatleme juhtu kus aatomid nihkuvad tasakaaluasendist vaid väikesele kaugusele u_s



C_p sõltub indeksist p , st. on kõige suurem lähemate aatomite vahel.

Liikumisvõrrandid, harmooniline lähendus

- Vastavalt Hooke'i seadusele saab kirjutada liikumisvõrrandi aatomile indeksiga s :

$$F_s = M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_p c_p (u_{s+p} - u_s)$$

Kus c_p on jõukonstant aatomite s ja p vahel.

- Dispersiooni valem lähimate naabrite jaoks, mis seob omavahel võre võnkumiste lainearvu ja sageduse (tuletan tahvlil)

$$\omega^2 = \frac{4}{M} c_1 \sin^2 \frac{qa}{2}$$

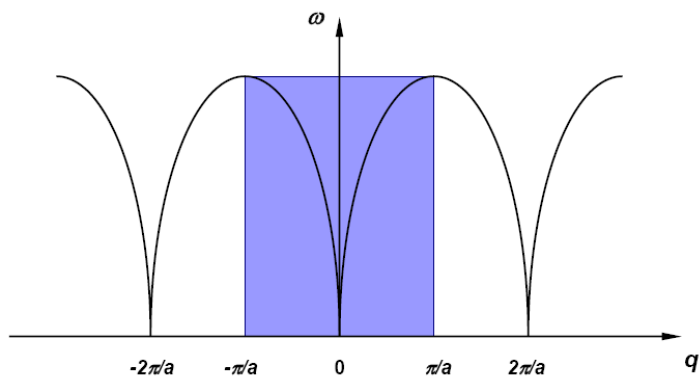
Kus q on lainearv ja a on võre konstant.

Dispersiooni valem üldisel kujul:

$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{p>0} c_p (1 - \cos qpa) = \frac{4}{M} \sum_{p>0} c_p \sin^2 \frac{qpa}{2}$$

Võre lained 1d kujul

- Nagu dispersiooni valemist lähtub, on dispersioonikõver perioodiline ning piisab, kui vaatlеме lainearvu vahemikku:



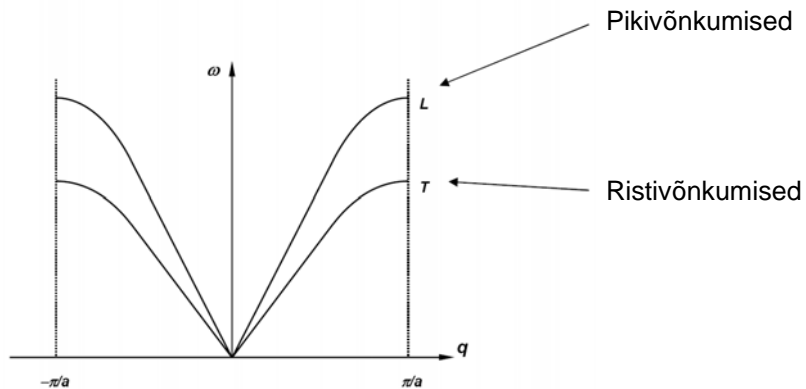
$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}$$

Sageduse maksimum saabub kui
Lainepikkusega $2a$

$$\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{c_1}{M}}$$

Võre lained 1d kujul

- Lisaks pikilainetele eksisteerivad võres ka ristilained.
- Ristivõnkumistele mõjuvad üldjuhul väiksemad jõud kui pikivõnkumistele, seetõttu ka ristivõnkumiste dispersioonigraafik allpool pikivõnkumiste oma.



Nanotorude väiksed mõõtmed ning struktuuri sümmeetrisus lubasid oletada huvitavaid kvantefekte ning elektrilisi ja magnetilisi omadusi.

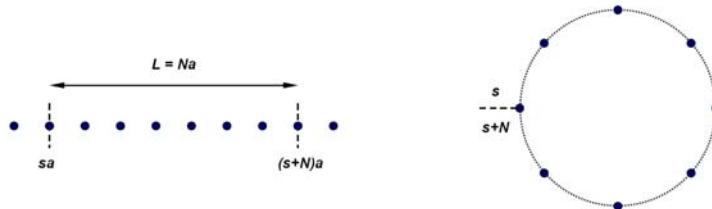
Need oletused on ka kinnitust leidnud katsete ning tõestuste näol.

$$D=1,356$$

$$Y=3,2$$

Rajatingimused

- Vaatleme lõpliku aatomite arvuga struktuuri. Seega peab see "kett" vastama ääritingimustele.
- Eeldame et "keti" otsad võnguksid samas faasis, teisisõnu kett on keeratud rõngasse.



- Aatomite nihetest saame luua järgnevad seosed:

$$\begin{aligned}
 u_s &= ue^{i(qsa - \omega t)} \\
 u_s &= u_{s+N}
 \end{aligned}
 \Rightarrow
 ue^{iqsa} = ue^{iq(s+N)a}
 \Rightarrow
 e^{iqNa} = 1
 \Rightarrow
 q = \frac{2\pi}{Na}n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Saadud valem näitab, et aatomite võnkumised ühedimensionaalses lõplikus ketis on kvantiseeritud, s.t. vaid teatud moodid on lubatud.

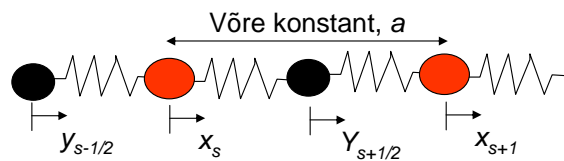
* MOODI all mõtleme me võre mingit kindla lainearvu ja sagedusega võnkumist.

* Lubatud lainearvud asuvad k-ruumis teineteisest võrdsetel kaugustel:

Seega dispersioonikõver lõplikus kristallis koosneb reast lubatud punktidest.

* Praktiliselt aga on kristalli aatomite arv ülisuur, mistõttu punktid sulavad ikkagi näiliseks kõveraks.

Erinevate aatomitega kett



$$F_X = M_1 \frac{d^2 x_s}{dt^2} = c_1 (y_{s+1/2} + y_{s-1/2} - 2x_s) \quad y_s = ye^{i(qsa - \omega t)}$$

$$F_Y = M_2 \frac{d^2 y_{s+1/2}}{dt^2} = c_2 (x_{s+1} + x_s - 2y_{s+1/2}) \quad x_s = xe^{i(q(s+1/2)a - \omega t)}$$

Sedasi jõuame järgmise dispersiooni võrrandini

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2c_1 (M_1 + M_2) \omega^2 + 4c_1^2 \sin^2 \frac{qa}{2} = 0$$

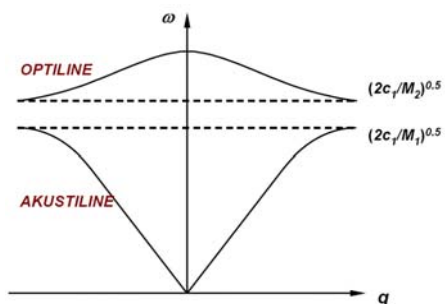
$$\omega_{\pm}^2 = c_1 \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \pm \sqrt{\left[c_1 \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right]^2 - 4 \frac{c_1^2}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{qa}{2}}$$

C on jõukonstant

X ja y on nihked

Optilised ja akustilised võnkumised

- Saadud võrrandil tekib pikivõnkumistele 2 haru



- AKUSTILISES moodis võnguvad aatomid teineteisega ühes faasis
- OPTILISES moodis vastasfaasides.

