ORGÜ TİTREŞİMLERİ

Dinamik Matris Yöntemi

Atomları denge konumu etrafında salına
bir kristalin Hamiltonian'ı

$$H=\sum_{n\ell i}\frac{M_n}{2}\dot{u}_i^2(n,\ell)+\frac{1}{2}\sum_{n\ell i}\sum_{m\ell' j}\phi_{ij}\,u_i(n,\ell)\,u_j$$

$$\phi_{ij}=\Phi_{ij}(n\ell,m\ell')=\left.\frac{\partial^2 U}{\partial u_i(n,\ell)\,\partial u_j(m,\ell')}\right|_0$$

U: İyon-İyon etkileşme potansiyeli

$\ell(\ell')$: Birim hücre etiketi

$n(m)$: Birim hücre içindeki atomun etiketi

$i(j)$: Kartezyen koordinat bileşenleri

Hareket denklemi (klasik)

$$M_n\ddot{u}_i(n,\ell)=-\sum_{m\ell' j}\phi_{ij}(n\ell;m\ell')\,u_j(m,\ell')$$

u_i : Atomun denge konumu etrafında
yerdeğiştirmesi

Küçük salınımlar için ve peryodik simetri gözetilerek hareket denkleminin normal kip

$$u_i(n,\ell) = b_{in}\, e^{i(\vec{k}.\vec{R}_\ell - wt)}$$

çözüm önerisi denklemde yerleştirilirse

$$Mw^2 b_{in} = \sum_{m,j} D_{ij}(m,n;k)\, b_{jm}$$

burada D_{ij} dinamik matristir.

$$D_{ij}(mn;k) = \sum_{\ell'} \Phi_{ij}(n,\ell;m,\ell')\, e^{i[\vec{k}.(\vec{R}_{\ell'} - \vec{R}_\ell}$$

Bu denklemin katsayı determinantı salınım spektrumunu verecektir.

$$\det\left[D_{ij}(mn;k) - w^2 M \delta_{ij}\, \delta_{mn}\right] = 0$$

Atomlar arasındaki kuvvet sabitinin Φ_{ij} özelliklerini incelemek hesaplamalarda kolaylık sağlıyacaktır.

- $\Phi_{ij}(n\ell;m\ell') = \Phi_{ji}(m\ell';n\ell)$ (ikinci türev

- $\Phi_{ij}(n\ell;m\ell') = \Phi_{ij}(m\ell';n0)$ (0: orijin)

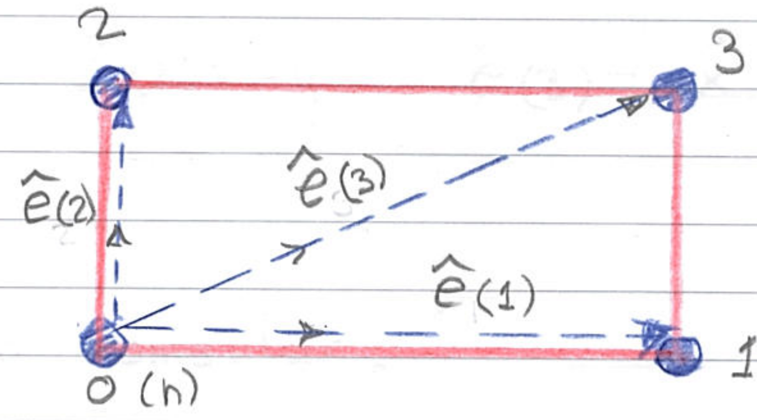
çünkü $(\vec{R}_{\ell'} - \vec{R}_\ell)$ için orijin kaydırılabi

S.ATAG

$\sum_{m,\ell'} \phi_{ij}(m\ell';no) = 0$ Tüm kristal olduğu gibi kaydırılırsa

$\phi_{ij}(m\ell';no) = \phi_{ij}(m(-\ell');no)$ İnversiyon simetrisi varsa

Atomlar arasındaki yay sabitlerini oluşturmak için $\phi_{ij}(m\ell';no)$ tensorünü uygun baz vektörleri cinsinden yazalım:



$m=1,2,$

$$\phi_{ij}(m\ell';no) = -K_m\, e_i(m)\, e_j(m)$$

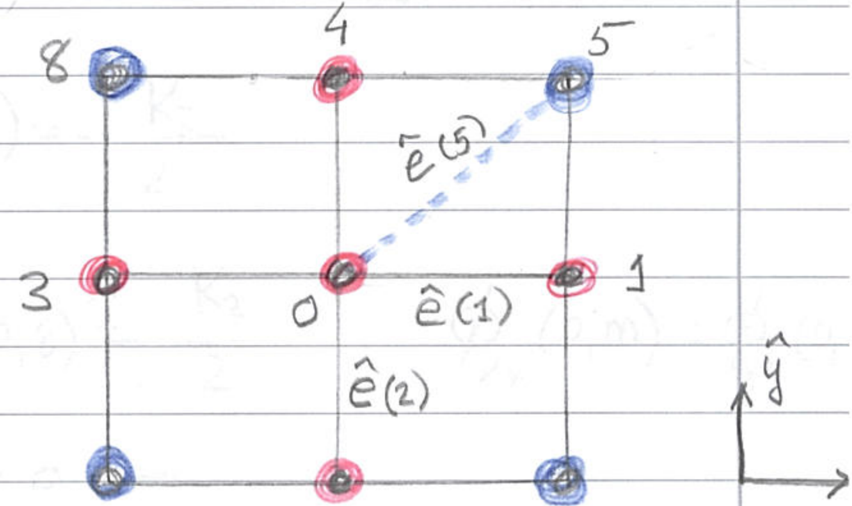
$$e_i(m) = \hat{e}(m)\cdot\hat{x} \qquad e_j(m) = \hat{e}(m)\cdot\hat{y}$$

Böylece tüm m atomlarından i-yönünde n-üzerine etkiyen kuvvet

$$F_i = \sum_{m\ell'} K_m\, e_i(m) \sum_{j} e_j(m)\, u_j(m)$$

S.ATAG

Tek Atomlu Kare Örgü



En yakın komşular: 7 2 6

$\hat{e}(1) = \hat{x}$ $\quad \hat{e}(2) = -\hat{y}$ $\quad \hat{e}(3) = -\hat{x}$

$\hat{e}(4) = \hat{y}$

İkinci yakın komşular:

$\hat{e}(5) = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{y}$, $\hat{e}(6) = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{y}$

$\hat{e}(7) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{y}$; $\hat{e}(8) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{y}$

$\phi_{ij}(me';no) \xrightarrow{\text{yerine}} \phi_{ij}(0,m)$ kullanalım
$(\ell' \to m)$

$\phi_{xx}(0,1) = \phi_{yy}(0,2) = \phi_{xx}(0,3) = \phi_{yy}(0,4) = -k$

$\phi_{xx}(0,5) = -\frac{K_2}{2} = \phi_{yy}(0,5) = \phi_{xx}(0,6) = \phi_{yy}(0,6)$

S.ATAG

$$\phi_{xx}(0,7) = \phi_{yy}(0,7) = \phi_{xx}(0,8) = \phi_{yy}(0,8) = -\frac{K_2}{2}$$

$$\phi_{xy}(0,5) = \phi_{xy}(0,7) = -\frac{K_2}{2}$$

$$\phi_{xy}(0,6) = \phi_{xy}(0,8) = \frac{K_2}{2} \qquad \phi_{xy}(0,m) = \phi_{yx}($$

— o —

$$\phi_{xx}(0,0) + \phi_{xx}(0,1) + \phi_{xx}(0,2) + \phi_{xx}(0,3) + \phi_{xx}(0,$$

$$+ \phi_{xx}(0,5) + \phi_{xx}(0,6) + \phi_{xx}(0,7) + \phi_{xx}(0,8) = 0$$

$$\phi_{xx}(0,0) - 2(K_1 + K_2) = 0$$ (Tüm kristal kay

$$\phi_{xx}(0,0) = 2(K_1 + K_2)$$

— o —

$$\phi_{yy}(0,0) = 2(K_1 + K_2)$$

— o —

$$\phi_{xy}(0,0) = 0$$

— o —

$$D_{ij}(0,k) = \sum_m \phi_{ij}(0,m)\, e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_m}$$

$\vec{R}_n(\ell) = 0$

orijin

$$D_{xx} = \phi_{xx}(0,0) + \phi_{xx}(0,1)\, e^{ik_xa} + \phi_{xx}(0,3)\, e^{-ik_xa}$$
$$+ \phi_{xx}(0,5)\, e^{i(k_xa+k_ya)} + \phi_{xx}(0,6)\, e^{i(k_xa-k_ya)}$$
$$+ \phi_{xx}(0,7)\, e^{-i(k_xa+k_ya)} + \phi_{xx}(0,8)\, e^{i(-k_xa+k_ya)}$$

$$D_{xx} = 2(K_1+K_2) - K_1 e^{ik_xa} - K_1 e^{-ik_xa}$$
$$- \frac{K_2}{2} e^{i(k_xa+k_ya)} - \frac{K_2}{2} e^{i(k_xa-k_ya)}$$
$$- \frac{K_2}{2} e^{-i(k_xa+k_ya)} - \frac{K_2}{2} e^{i(-k_xa+k_ya)}$$

$$D_{xx} = 2(K_1+K_2) - K_1\left(e^{ik_xa} + e^{-ik_xa}\right)$$
$$- \frac{K_2}{2}\left(e^{i(k_xa+k_ya)} + e^{-i(k_xa+k_ya)}\right)$$
$$- \frac{K_2}{2}\left(e^{i(k_xa-k_ya)} + e^{-i(k_xa-k_ya)}\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned} D_{xx} &= 2(K_1+K_2) - 2K_1 \cos k_xa \\ &- K_2\left(\cos(k_xa+k_ya) + \cos(k_xa-k_ya)\right) \end{aligned}}$$

S.ATAG

$$D_{yy} = \phi_{yy}(0,0) + \phi_{yy}(0,2)\, e^{-ik_y a} + \phi_{yy}(0,4)\, e^{ik_y a}$$

$$\phi_{yy}(0,5)\, e^{i(k_x a + k_y a)} + \phi_{yy}(0,6)\, e^{i(k_x a - k_y a)}$$

$$+ \phi_{yy}(0,7)\, e^{-i(k_x a + k_y a)} + \phi_{yy}(0,8)\, e^{i(-k_x a + k_y a)}$$

$$D_{yy} = 2(K_1 + K_2) - K_1\left(e^{-ik_y a} + e^{ik_y a}\right)$$

$$- \frac{K_2}{2}\left(e^{i(k_x a + k_y a} + e^{-i(k_x a + k_y a)}\right)$$

$$- \frac{K_2}{2}\left(e^{i(k_x a - k_y a)} + e^{-i(k_x a - k_y a)}\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned} D_{yy} &= 2(K_1 + K_2) - 2K_1 \cos k_y a \\ &\quad - K_2\left(\cos(k_x a + k_y a) + \cos(k_x a - k_y a)\right) \end{aligned}}$$

$$D_{xy} = \phi_{xy}(0,5)\, e^{i(k_x a + k_y a)} + \phi_{xy}(0,6)\, e^{i(k_x a - k_y}$$

$$+ \phi_{xy}(0,7)\, e^{-i(k_x a + k_y a)} + \phi_{xy}(0,8)\, e^{i(-k_x a + k}$$

$$D_{yy} = 2(K_1+K_2) - 2K_1 \cos k_y a - 2K_2 \cos k_x a \cos k_y a$$

$$D_{yy} = 2K_1(1-\cos k_y a) + 2K_2(1-\cos k_x a \cos k_y a)$$

— o —

$$D_{xx} = 2K_1(1-\cos k_x a) + 2K_2(1-\cos k_x a \cos k_y a)$$

$$D_{xy} = -K_2 \cos(k_x a + k_y a)$$
$$+ K_2 \cos(k_x a - k_y a)$$

$$\boxed{D_{xy} = K_2 \left(\cos(k_x a - k_y a) - \cos(k_x a + k_y a\right)}$$

$$D_{xy} = 2K_2 \sin k_x a \sin k_y a$$

$$\det\left[M\omega^2 \delta_{ij}\, \delta_{00} - D_{ij}\right] = 0$$

$$\det \begin{vmatrix} M\omega^2 - D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & M\omega^2 - D_{yy} \end{vmatrix} = 0$$

$$\left[M\omega^2 - D_{xx}\right]\left[m\omega^2 - D_{yy}\right] - D_{xy} D_{yx} = 0$$

S.ATAG

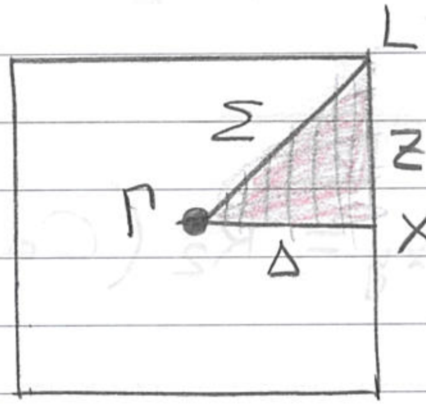
$$M\omega^2 = \frac{1}{2}\left[D_{xx} + D_{yy} \pm \left\{(D_{xx} - D_{yy})^2 + 4D_{xy}^2\right\}^{1/2}\right]$$

—— o ——

$\Delta(\Gamma - X)$ $\quad k_y = 0$

$$\omega_1^2 = \frac{2}{M}(K_1 + K_2)(1 - \cos k_x a)$$

$$\omega_2^2 = \frac{2K_2}{M}(1 - \cos k_x a)$$



—— o ——

$\Sigma(\Gamma - L)$ $\quad k_y = k_x$

$$\omega_1^2 = \frac{2K_1}{M}\left[1 - \cos k_x a\right] + \frac{4K_2}{M}\sin^2 k_x a$$

$$\omega_2^2 = \frac{2K_1}{M}(1 - \cos k_x a)$$

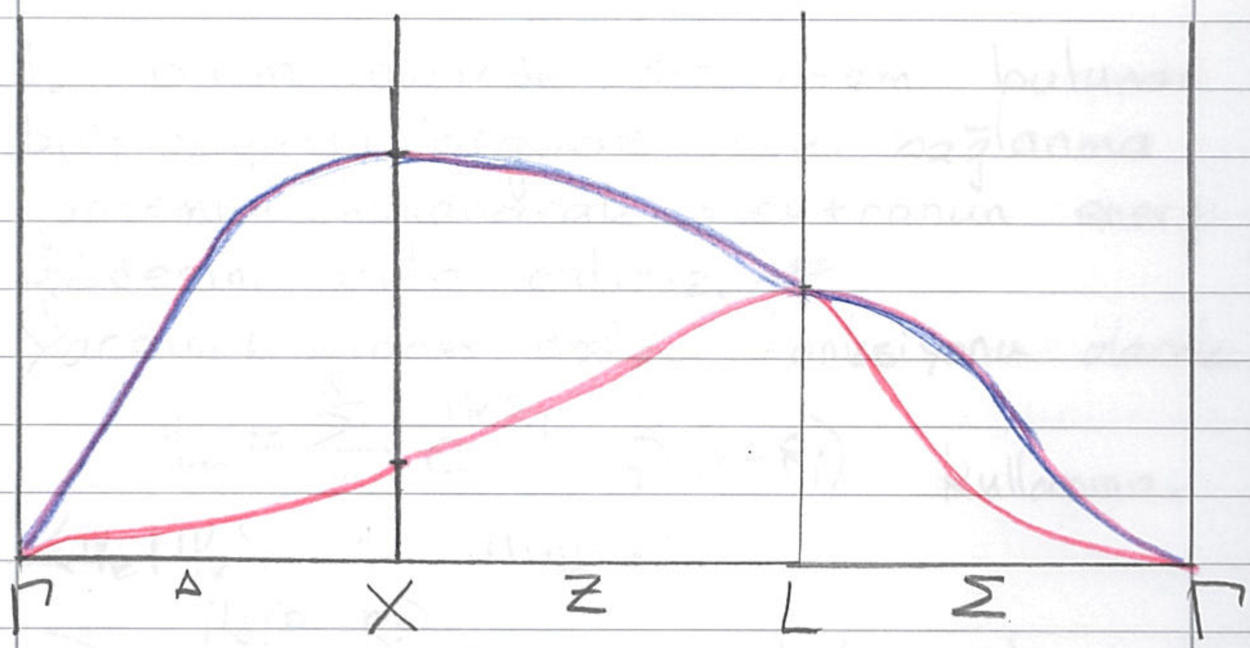
—— o ——

$Z(X - L)$ $\quad k_x = \frac{\pi}{a}$

$$\omega_1^2 = \frac{4K_1}{M} + \frac{2K_2}{M}(1 + \cos k_y a)$$

$$\omega_2^2 = \frac{2K_1}{M}(1 - \cos k_y a) + \frac{2K_2}{M}(1 + \cos k_y a)$$

S ATAG


Γ
Δ
X
Z
L
Σ
Γ