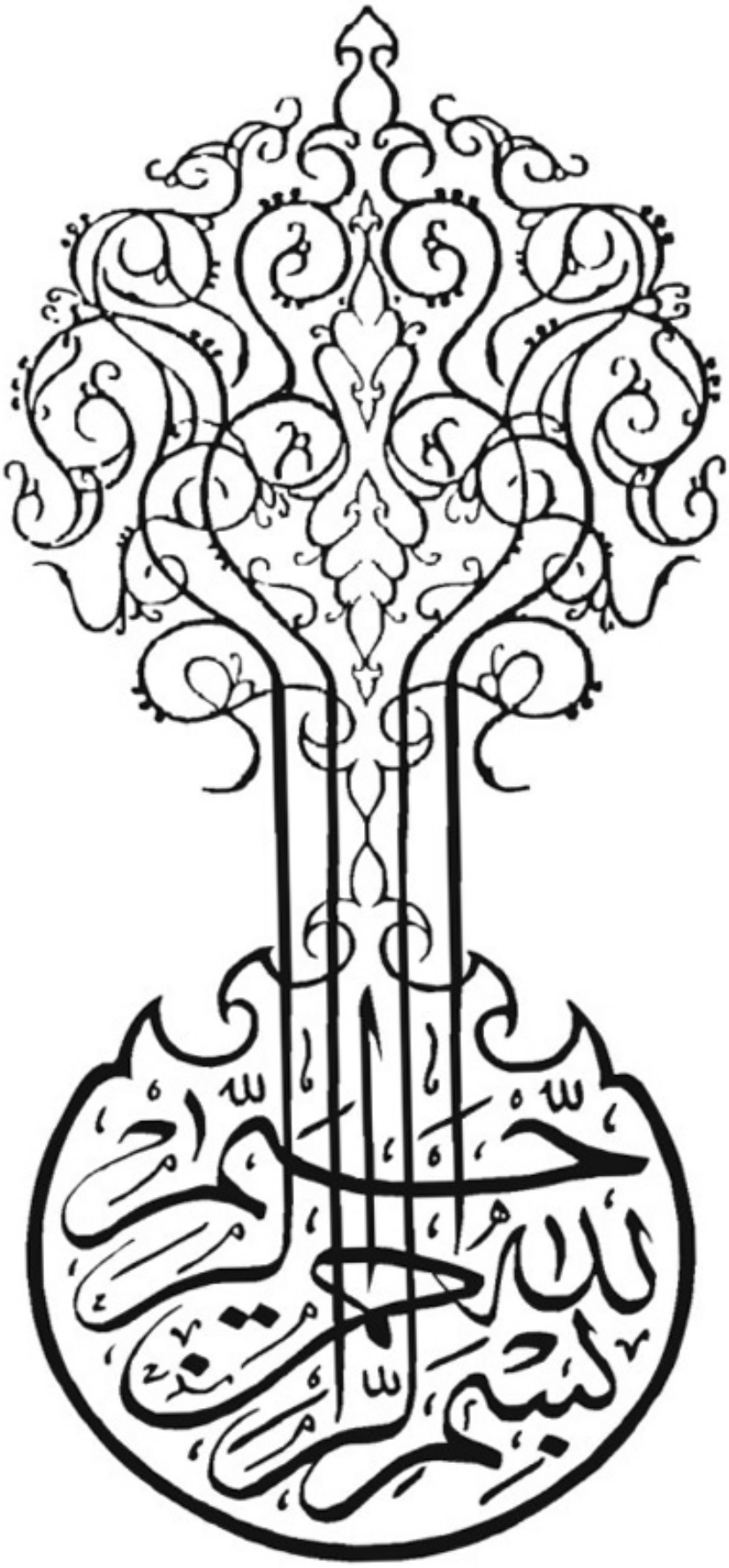

بسم الله الرحمن الرحيم

همه امتیازات این پایان نامه به دانشگاه لرستان تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب در مجلات، کنفرانس ها یا سخنرانی ها، باید نام دانشگاه لرستان (یا استاد یا اساتید راهنمای پایان نامه) و نام دانشجو با ذکر مأخذ و ضمن کسب مجوز از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر اینصورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

دانشگاه لرستان

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

عنوان:

برهمکنش الکترون – فونون در ابرشبکه‌های نیمرسانا
GaAs /AlGaAs

نگارش:

میثم ایمانی

استاد راهنما:

دکتر سالار باهر

(دانشیار)

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک

بهمن ۱۳۸۸

ای خدای بزرگ هیچکس شکر و سپاس تو را بحد کمال بجا نیارد، چرا که بر هر شکری که کند آن شکر هم نعمت و احسان تو است و شکری دیگر بر او لازم آید. و هر شخص هر قدر هم سعی و کوشش در راه اطاعت تو کند باز در انجام وظیفه طاعتت تقصیر کرده و حق طاعتت را بجا نیاورده و فضل و کرمت را سپاس‌گزاری شایسته نکرده است.

ای خدای من تمام خلایق مقر و معترفند که هر کس را تو عقاب کنی محققاً به او ظلم و بیداد نکرده‌ای و به هر کس عافیت و سلامت بخشی همه خلق گواهند که به او فضل و کرم فرموده‌ای و تمام بندگان در حق خود در انجام وظیفه شکر و طاعت شکری که تو مستوجب آنی همه بتقصیر معترفند.

ای خدای مهربان بر محمد و آل پاکش درود فرست و به من هم آنچه را آرزومندم عطا فرما.

هم هدایتت را بر من بیفزا که آن هدایت من را به هر عمل خیر موفق می‌سازد. ای خدا همانا تنها توئی که عطایت بدون حساب و کرمت بدون انتها است.

تقدیم به او که هر آنچه در زندگی‌ام جاری است تقدیر اوست

و تقدیم به اسوه‌های علم و ادب

و آنانکه روشنایی بخش قلب کوچکم هستند.

تقدیم به **مادر** عزیزتر از جانم

و تقدیم به همه کسانی که دوستشان دارم

و تقدیم به تو ...

فصل اوّل: فونونها

۱-۱ ارتعاشات شبکه ۲
۱-۱-۱ مدهای نرمال شبکهٔ یک بعدی تک اتمی ۵
۱-۱-۲ مدهای نرمال یک شبکهٔ براوهٔ یک بعدی با پایهٔ دو اتمی ۸
۱-۲ مختصات نرمال ارتعاشات بلور ۱۲
۱-۳ کوانتش ارتعاشات شبکه «فونون» ۱٤
۱-۳-۱ عملگرهای خلق و فنای بوزن ۱۵
۱-٤ عملگرها در کوانتش دوم ۱۷
۱-٤-۱ عملگرهای میدان کوانتومی ۱۹
۱-٤-۲ کوانتش دوم ارتعاشات شبکه ۲۰

فصل دوّم: الکترونها

۲-۱ مدل الکترون آزاد ۲٦
۲-۱-۱ حالت زمینهٔ گاز الکترون ۲۷
۲-۲ ترازهای الکترونی در پتانسیلهای متناوب ۳۲
۲-۲-۱ تئوری بلوخ ۳۲
۲-۲-۲ شرط مرزی بورن- وان – کارمل ۳۳
۲-۲-۳ اثبات قضیهٔ بلوخ ۳٤
۲-۳ الکترونها در پتانسیل دورهای ضعیف ۳٦
۲-۳-۱ ترازهای انرژی نزدیک نواحی مرزی بریلوئن ٤۱
۲-۳-۲ نوارهای انرژی در یک بعد ٤۳
۲-٤ فراتر از تقریب الکترون آزاد «مستقل» ٤۵
۲-٤-۱ تقریب هارتری- فک «اثر تبادل» ٤٦
۲-۵ عملگرهای خلق و فنای فرمیون ٤۸
۲-۵-۱ کوانتش دوم الکترونها ۵۰

فصل سوم: برهمکنش الکترون و فونون

۳-۱ مقدمه ۵۵
۳-۱-۱ اصل بی‌دررو «آدیاباتیک» ۵۵
۳-۲ عناصر ماتریسی غیر قطری و پراکندگی الکترون- فونون ۵۸
۳-۳ ارزیابی جزء ماتریسی پراکندگی الکترون- فونون ۶۱
۳-۳-۱ تقریب یون- صلب ۶۱
۳-۳-۲ موج تخت الکترونها ۶۲
۳-۳-۳ مدل موت- جونز ۶۲
۳-٤ تابع جفت شدگی الکترون – فونون ٦٤
۳-٤-۱ تابع جفت شدگی $g(\vec{k},\vec{k}';\lambda)$: ٦٦
۳-۵ هامیلتونی توصیف کنندهٔ برهمکنش الکترون- فونون ٦٧
۳-٦ سیستم مکانیکی جفت شده با محیط، مدل انبار هارمونیک ٦٩
۳-٦-۱ سیستم دو حالتهٔ کوانتومی ۷۱

فصل چهارم: دیواره‌های کوانتومی

٤-۱ رشد و ساختار دیواره‌های کوانتومی نیمرسانا ۸۲
٤-۲ برهمکنش‌های الکترون- فونون در دیواره‌های کوانتومی ۸۳
٤-۲-۱ عملگر هامیلتونی ۸۳
٤-۳ نظریهٔ اختلال ۸۵

بحث و نتیجه‌گیری ۹۰
منابع ۹۲

۱-۱ n امین سلول واحد در یک شبکه ۳

۱-۲ زنجیره‌ای از یونهای تک اتمی ۵

۱-۳ یک زنجیرهٔ چهار اتمی در یک بعد، با اتمهای با جرم یکسان M ۷

۱-٤ مدهای نرمال برای زنجیرهٔ چهار اتمی در حد $k \to ۰$ ۹

۱-۵ شبکهٔ براوهٔ یک بعدی با دو یون در هر سلول یکه ۱۰

۱-٦ نمودار پراکندگی برای شبکه با پایهٔ دو اتمی ۱۱

۱-۷ اختلاف بین یک مد اکوستیکی و یک مد اپتیکی ۱۱

۱-۸ عملگرهای خلق و فنای فونون در فضای عدد اشغال ۱٦

۲-۱ نمایش شماتیک اتم‌های منفرد؛ و یک جامد ۲٦

۲-۲ نقاط واقع در یک فضای $\vec{k}$ دو بعدی ۳۰

۲-۳ ترازهای الکترون آزاد در تقریب پتانسیل ضعیف ۳۸

۲-٤ نقاط نزدیک به ناحیهٔ مرزی بریلوئن ٤۲

۲-۵ نمودار نوارهای انرژی نزدیک نواحی مرزی بریلوئن ٤۳

۲-٦ نوارهای انرژی در یک بعد ٤٤

۲-۷ عملگرهای خلق و فنای الکترون در فضای عدد اشغال ۵۰

۳-۱ فرایندهای پراکندگی الکترون- فونون ٦۹

۳-۲ طرح مولکول متیل ۷۰

۳-۳ تغییرات انرژی پتانسیل $V(q)$ بر حسب q ۷۱

۳-٤ چاه دوگانهٔ نامتقارن ۷۱

۳-۵ قسمت الکترونیکی H_e، با ثابت جفت شدگی الکترون- فونون λ ۷۲

۳-٦ طیف پراکندگی نوترونی ۷۲

۳-۷ اولین مد جفت شده با سیستم الکترونی ۷۳

۳-۸ منحنی‌های انرژی برای سیستم بدون برهمکنش الکترون- فونون ۷٦

۳-۹ منحنی‌های انرژی برای سیستم با ثابت برهمکنش الکترون- فونون $\lambda = ۰/۵$ ۷۷

۳-۱۰ منحنی‌های انرژی برای سیستم با ثابت برهمکنش الکترون- فونون $\lambda = ۱/۰$ ۷۷

۳-۱۱ منحنی‌های انرژی برای سیستم با ثابت برهمکنش الکترون- فونون $\lambda = ۲/۰$ ۷۸

۳-۱۲ منحنی‌های انرژی برای سیستم با ثابت برهمکنش الکترون- فونون ۷۸

٤-۱ طرح شماتیک از دیواره‌های کوانتومی ۸۲

٤-٢ مقدار مطلق اجزاء ماتریسی برهمکنش‌های الکترون- فونون ٨٩

نام خانوادگی: ایمانی	نام : میثم
موضوع پایان نامه: **برهمکنش الکترون- فونون در ابرشبکه‌های نیمرسانا *GaAs /AlGaAs***	
استاد راهنما : دکتر سالار باهر درجه تحصیلی : دکترای تخصصی	رشته : فیزیک
محل تحصیل(دانشگاه): دانشگاه لرستان	دانشکده: علوم پایه گروه آموزشی: فیزیک
تاریخ اخذ مدرک : ۱۳۸۸/۱۱/۱۸	تعداد صفحه : ۹۳

چکیده

برای سیستم برهمکنشی از الکترونها و فونونها، هامیلتونی می‌تواند بصورت $H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph}$ توصیف شود. که H_e هامیلتونی برای الکترونهای در حال حرکت در حضور هسته‌های ثابت است، و H_{ph} هامیلتونی برای هسته‌های متحرک می‌باشد، که کوانتش توصیف کنندهٔ جابه‌جایی هسته‌ها «یونها» را فونون می‌نامند. قسمت H_{e-ph} جملهٔ برهمکنشی بین الکترونها و فونونها را توصیف می‌کند.

دیواره‌های کوانتومی نیمرسانا، ساختارهای جدیدی هستند و یکی از مباحث چالش برانگیز در حوزهٔ فیزیک ماده چگال به حساب می‌آید که دارای سابقهٔ طولانی در فیزیک است. این عرصه از فیزیک نیمرساناها هم از لحاظ نظری و هم از لحاظ تجربی از اهمیت فراوانی برخوردار است. برهمکنش الکترون- فونون یکی از مباحث مهم در این ساختارها به حساب می‌آید.

برای توصیف هامیلتونی بالا یک مدل ریاضی ارائه می‌شود و این هامیلتونی‌ها را در نمایش کوانتش اول و دوم بدست می‌آوریم. در این تحقیق مراحل زیر انجام شده است:

در فصل اول ارتعاشات شبکه در تقریب هارمونیک بررسی شده است و با تعریف عملگرهای خلق و فنای فونونها، هامیلتونی فونونها در نمایش کوانتش دوم بدست آمده است. در فصل دوم هامیلتونی الکترونها و ترازهای الکترونی بررسی شده است و با تعریف عملگرهای خلق و فنای الکترونها، هامیلتونی الکترونها در نمایش کوانتش دوم بدست آمده است. در فصل سوم برهمکنش الکترون- فونون و ماتریس پراکندگی بررسی شده است و هامیلتونی برهمکنشی بین الکترون- فونون در نمایش کوانتش دوم بدست آمده است. در فصل چهارم برهمکنش الکترون- فونون در دیواره‌های کوانتومی مورد بحث قرار گرفته است.

فصل اوّل

فونونها

۱-۱ ارتعاشات شبکه

اینکه یونها در مکان $\vec{R}$ ثابت هستند یک فرض ساختگی است، و ما باید به دو فرض ضعیف‌تر تکیه کنیم [۱]:

الف) فرض می‌کنیم که موقعیت تعادل هر یون در یک مکان شبکهٔ براوه قرار داشته باشد. یونها در مکان $\vec{R}$ قرار دارند و در حال نوسان هستند. بنابراین $\vec{R}$ مکان یون ایستا نیست، بلکه موقعیت تعادل یون است.

ب) فرض می‌کنیم جابه‌جایی هر یون از مکان تعادلش در مقایسه با فضای بین یونی کوچک است. این فرض منجر به تئوری، تقریب هارمونیک می‌شود.

با توجه به فرضهای بالا ما از تقریب شبکهٔ ایستا دور می‌شویم، به عبارت دیگر، اگر هر یون در شبکهٔ براوه ساکن باشد آنگاه در مورد مکان یون داریم $\vec{r}(\vec{R})=\vec{R}$، و در تقریب هارمونیک داریم:

$$\vec{r}(\vec{R})=\vec{R}+\vec{u}(\vec{R}) \qquad (۱-۱)$$

که $\vec{u}(\vec{R})$ اختلاف از موقعیت تعادل یون است.

اگر شبکه ایستا باشد، انرژی پتانسیل کل بلور مجموع سهم هر دو یون است:

$$U=\frac{۱}{۲}\sum_{R,R'}\phi(\vec{R}-\vec{R}')=\frac{N}{۲}\sum_{R\neq ۰}\phi(\vec{R}) \qquad (۲-۱)$$

حال اگر هر یون از موقعیت تعادل خود جابه‌جا شود با استفاده از (۱-۱) داریم:

$$U=\frac{۱}{۲}\sum_{R,R'}\phi(\vec{r}(\vec{R})-\vec{r}(\vec{R}'))=\frac{۱}{۲}\sum_{R,R'}\phi(\vec{R}-\vec{R}'+\vec{u}(\vec{R})-\vec{u}(\vec{R}')) \qquad (۳-۱)$$

اکنون انرژی پتانسیل به متغییرهای $\vec{u}(\vec{R})$ و $\vec{u}(\vec{R}')$ وابسته است، و هامیلتونی دینامیکی بلور بصورت زیر خواهد شد:

$$H=\sum_{R}\frac{\vec{P}(\vec{R})^{۲}}{۲M}+U \qquad (٤-۱)$$

که $\vec{P}(\vec{R})$ تکانه اتم در موقعیت تعادل $\vec{R}$ و M جرم اتمی است.

اگر همهٔ $\vec{u}(\vec{R})$ها کوچک باشند می‌توانیم انرژی پتانسیل U را حول موقعیت تعادل یون بسط دهیم، برای اینکار از تئوری بسط تیلور در سه بعد استفاده می‌کنیم:

$$f(\vec{r}+\vec{a})=f(\vec{r})+\vec{a}.\vec{\nabla}f(\vec{r})+\frac{۱}{۲!}(\vec{a}.\vec{\nabla})^{۲}f(\vec{r})+\frac{۱}{۳!}(\vec{a}.\vec{\nabla})^{۳}f(\vec{r})+... \qquad (۵-۱)$$

که با جایگزینی $\vec{r}=\vec{R}-\vec{R}'$ و $\vec{a}=\vec{u}(\vec{R})-\vec{u}(\vec{R}')$ بدست می‌آوریم:

$$U = \frac{N}{2}\sum_{R}\phi(\vec{R}) + \frac{1}{2}\sum_{R,R'}[\vec{u}(\vec{R}) - \vec{u}(\vec{R}')].\vec{\nabla}\phi(\vec{R}-\vec{R}') + \frac{1}{4}\sum_{R,R'}([\vec{u}(\vec{R}) - \vec{u}(\vec{R}')].\vec{\nabla})^2\phi(\vec{R}-\vec{R}') + O(u^3) \qquad (۶-۱)$$

در جملهٔ دوّم ضریب $\vec{u}(\vec{R})$ بصورت $\sum\vec{\nabla}\phi(\vec{R}-\vec{R}')$ است که درست منفی نیروی اعمال شده به اتم $\vec{R}$ بوسیلهٔ همهٔ اتمهای دیگر است، زمانیکه اتمها در موقعیت تعادل قرار داشته باشند. این جمله باید صفر باشد چون هیچ نیروی خالصی بر اتم در موقعیت تعادل وارد نمی‌شود.

جملهٔ اوّل مربوط به بلور ساکن است، معادلهٔ (۱-۲)، بنابراین در تقریب هارمونیک فقط جملهٔ سوم مهم است. پس انرژی پتانسیل را بصورت زیر می‌نویسیم :

$$U = U^{eq} + U^{harm} \qquad (۷-۱)$$

که U^{eq} انرژی پتانسیل تعادلی و U^{harm} بصورت زیر است:

$$U^{harm} = \frac{1}{4}\sum_{R,R'}[\vec{u}_\mu(\vec{R}) - \vec{u}_\mu(\vec{R}')]\,\phi_{\mu\nu}(\vec{R}-\vec{R}')[\vec{u}_\nu(\vec{R}) - \vec{u}_\nu(\vec{R}')] \qquad (۸-۱)$$

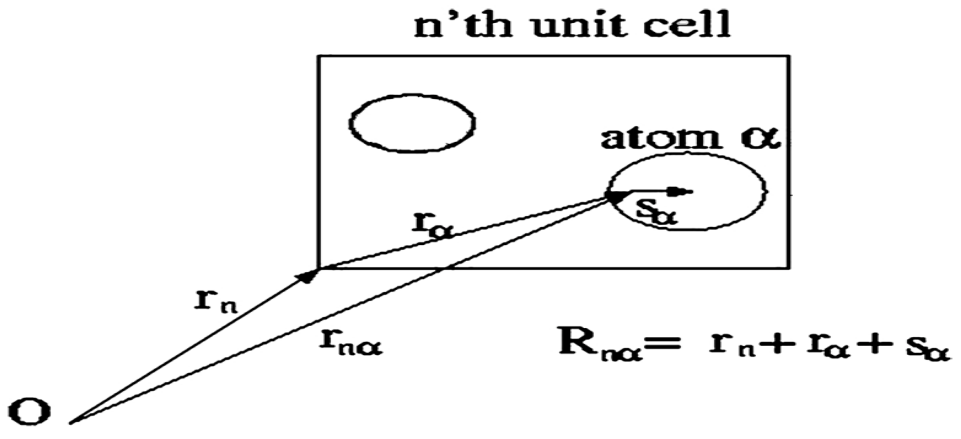
$$\phi_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{\partial^2\phi(\vec{r})}{\partial r_\mu\,\partial r_\nu}$$

انرژی پتانسیل هارمونیک را معمولاً بصورت زیر می‌نویسند [۲]:

$$U^{harm} = \frac{1}{2}\sum\vec{u}_\mu(\vec{R})\,D_{\mu\nu}(\vec{R}-\vec{R}')\,\vec{u}_\nu(\vec{R}') \qquad (۹-۱)$$

اکنون ما ارتعاشات شبکه را بصورت زیر توضیح می‌دهیم، تا اینکه ببنیم چگونه می‌توان معادلات حرکت را حل کرد [۳].

شکل(۱-۱) یک سلول واحد را نشان می‌دهد:



شکل ۱-۱: nامین سلول واحد در یک شبکه، که s_α جابه‌جایی یون αام را نشان می‌دهد.

انرژی پتانسیل در شکل (۱-۱) با توجه به بسط معادلهٔ (۱-۵) بصورت زیر خواهد شد:

$$\phi(\vec{R}_{n\alpha}) = \phi(\vec{r}_{n\alpha} + \vec{s}_{n\alpha})$$

$$\Rightarrow \phi(\vec{R}_{n\alpha}) = \underbrace{\phi(\vec{r}_{n\alpha})}_{=0} + \sum_{n\alpha} \underbrace{\frac{\partial\phi(\vec{r}_{n\alpha})}{\partial\vec{r}_{n\alpha}}}_{=0} \vec{s}_{n\alpha} + \frac{1}{2}\sum_{n\alpha,m\beta} \frac{\partial^2\phi(\vec{r}_{n\alpha})}{\partial\vec{r}_{n\alpha}\,\partial\vec{r}_{m\beta}}\,\vec{s}_{n\alpha}\,\vec{s}_{m\beta} \qquad (۱۰-۱)$$

که $\vec{s}_{m\beta}$ مربوط به سلول m ام است.

در معادلهٔ بالا دو جملهٔ اوّل و دوّم به علت توضیحات قبل در مورد معادلهٔ (۱-۶) صفر می‌شوند. با توجه به معادلهٔ بالا هامیلتونی سیستم بصورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{n\alpha} M_\alpha\,\dot{\vec{s}}^2_{n\alpha} + \frac{1}{2}\sum_{n\alpha,m\beta}\phi^{m\beta}_{n\alpha}\,\vec{s}_{n\alpha}\,\vec{s}_{m\beta} \qquad (۱۱-۱)$$

$$\phi^{m\beta}_{n\alpha} = \frac{\partial^2\phi(\vec{r}_{n\alpha})}{\partial\vec{r}_{n\alpha}\,\partial\vec{r}_{m\beta}}$$

بنابراین معادلهٔ حرکت بصورت زیر خواهد شد:

$$M_\alpha\,\ddot{\vec{s}}_{n\alpha} = -\sum_{m\beta}\phi^{m\beta}_{n\alpha}\,\vec{s}_{m\beta} \qquad (۱۲-۱)$$

که ما N سلول واحد با q یون داریم یعنی $3Nq$ معادلهٔ حرکت برقرار است. معادلهٔ بالا قابل مقایسه با قانون فنرها است یعنی:

$$M_\alpha\,\ddot{\vec{s}}_{n\alpha} = -\sum_{m\beta}\phi^{m\beta}_{n\alpha}\,\vec{s}_{m\beta} \leftrightarrow m\ddot{\vec{x}} = -K\,\vec{x} \qquad (۱۳-۱)$$

که $\phi^{m\beta}_{n\alpha}$ قابل مقایسه با ضرایب کشسان K یعنی ثابت فنر است.

برای حل معادلات حرکت می‌توان از روش فوریه استفاده کرد، یعنی ابتدا $\vec{s}_{n\alpha}$ را بصورت یک سری فوریه می‌نویسم.

$$\vec{s}_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}}\vec{u}_\alpha(\vec{q})\,e^{i(q\,\vec{r}_n - \omega t)} \Rightarrow \tau_a\,\vec{s}_{n\alpha} = e^{-i\vec{q}a}\,\vec{s}_{n\alpha} \qquad (۱۴-۱)$$

که $\vec{u}_\alpha(\vec{q})$ نوعی دامنه جابه‌جایی است و τ_a عملگر انتقال به اندازهٔ ثابت شبکه $\vec{a}$ است. این عملگر بصورت $\tau_a = 1 - i\vec{q}\cdot d\vec{x}$ است که $d\vec{x}$ جابه‌جایی بینهایت کوچک است و اگر تعداد این جابه‌جایی‌های بینهایت کوچک خیلی زیاد شود تا انتقالی به اندازهٔ $\vec{a}$ انجام شود، داریم:

$$\tau_a = \lim_{N\to\infty}\left(1 - i\vec{q}\cdot\frac{\vec{a}}{N}\right)^N = e^{-i\vec{q}\vec{a}} \qquad (۱۵-۱)$$

با جایگذاری معادلهٔ (۱-۱۴) در معادلهٔ (۱-۱۳) بدست می‌آوریم:

$$M_\alpha[-\omega^2 \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}}\vec{u}_\alpha(\vec{q})\, e^{i\,(q\,\vec{r}_n-\omega\, t)}] = -\sum_{m\beta}\frac{1}{\sqrt{M_\beta}}\phi_{n\alpha}^{m\beta}\,\vec{u}_\beta(\vec{q})\, e^{i\,(q\,\vec{r}_m-\omega\, t)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow -\omega^2\vec{u}_\alpha(\vec{q})\, e^{i\,(q\,\vec{r}_n-\omega\, t)} = \sum_{m\beta}\frac{1}{\sqrt{M_\alpha\, M_\beta}}\phi_{n\alpha}^{m\beta}\,\vec{u}_\beta(\vec{q})\, e^{i\,(q\,\vec{r}_m-\omega\, t)} \qquad (۱-۱۶)$$

اگر ماتریس دینامیکی D را بصورت زیر تعریف کنیم:

$$D_\alpha^\beta = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha\, M_\beta}}\sum_m \phi_{n\alpha}^{m\beta}\; e^{i\,\vec{q}(\vec{r}_n-\vec{r}_m)} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha\, M_\beta}}\sum_p \phi_{0\alpha}^{p\beta}\; e^{i\,\vec{q}(\vec{r}_p)} \qquad (۱-۱۷)$$

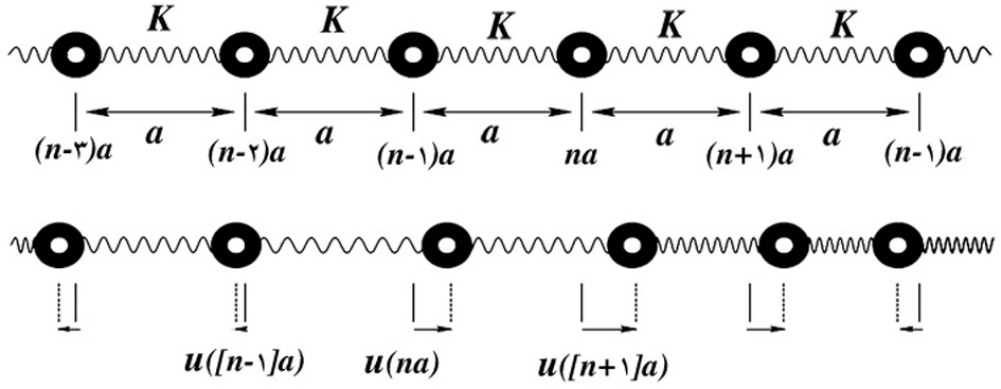
که $p=m-n$ و $\vec{r}_p = \vec{r}_n - \vec{r}_m$ است. آنگاه با تطبیق معادلات (۱-۱۶) و (۱-۱۷) داریم:

$$\omega^2\vec{u}_\alpha(\vec{q}) = \sum_\beta D_\alpha^\beta\,\vec{u}_\beta(\vec{q}) \;\Leftrightarrow\; \sum_\beta (D_\alpha^\beta - \omega^2\,\delta_\alpha^\beta)\,\vec{u}_\beta(\vec{q}) = 0 \qquad (۱-۱۸)$$

معادلهٔ بالا در صورتی درست است که برای $\vec{q}$، $det(D(\vec{q})-\omega^2 I)=0$ باشد. بنابراین می‌بینیم که برای حل معادلهٔ حرکت باید دترمیتال بالا را حل کرده تا با اینکار مقادیر $\omega^2(\vec{q})$ و به نوبهٔ آن $\vec{u}(\vec{q})$ را بدست آوریم.

۱-۱-۱ مدهای نرمال شبکهٔ یک بعدی تک اتمی

یک زنجیره از یونهایی به جرم M را که بر روی یک خط و به فاصلهٔ جدایی $\vec{a}$ از هم قرار دارند را در نظر می‌گیریم. که این حالت را در شکل (۱-۲) نشان داده‌ایم.



شکل ۱-۲: زنجیره‌ای از یونهای تک اتمی که به فاصلهٔ جدایی $\vec{a}$ از هم قرار دارند، و K ثابت نیرو بین دو یون است.

برای سادگی فرض می‌کنیم فقط نزدیکترین همسایه‌ها با یکدیگر برهمکنش می‌کنند، و در تشابه با قانون فنرها بجای ماتریس دینامیکی $D_{\mu\nu}$ در معادلهٔ (۱-۹) ثابت فنر K را قرار می‌دهیم. بنابراین انرژی پتانسیل هارمونیک برای شکل (۱-۲) چنین می‌شود:

$$U^{harm} = \frac{1}{2} K \sum_n [u(n\vec{a}) - u([n+1]\vec{a})]^2 \qquad (۱-۱۹)$$

و معادلهٔ حرکت بصورت زیر خواهد شد:

$$M \frac{d^2 u(n\vec{a})}{dt^2} = -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u(n\vec{a})} = -K\left[2u(n\vec{a}) - u([n-1]\vec{a}) - u([n+1]\vec{a})\right] \qquad (۱-۲۰)$$

اگر N تا یون داشته باشیم و N خیلی بزرگ باشد و اگر اثرات یونهای مرزی برای ما مهم نباشد، می‌توانیم نقاط ابتدای را به نقاط انتهای وصل کنیم. بنابراین :

$$u([n+1]\vec{a}) = u(\vec{a}) \;;\; u(0) = u(N\vec{a}) \qquad (۱-۲۱)$$

برای حل معادلهٔ (۱-۲۰) تابع $u(n\vec{a})$ را بصورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$u(n\vec{a}, t) \propto e^{i(kna - \omega t)} \qquad (۱-۲۲)$$

با استفاده از این تابع، شرط مرزی (۱-۲۱) ایجاب می‌کند که:

$$\begin{aligned} & e^{ikNa} = 1 = e^{i2\pi m} \\ & \Rightarrow k = \frac{2\pi}{a}\frac{m}{N} \quad , \; m = 0,1,2,... \end{aligned} \qquad (۱-۲۳)$$

با جایگزینی (۱-۲۲) در (۱-۲۰) بدست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} -M\omega^2 e^{i(kna-\omega t)} &= -K[2 - e^{-ika} - e^{ika}]\, e^{i(kna-\omega t)} \\ &= -2K[1 - Cos(ka)]\, e^{i(kna-\omega t)} \end{aligned} \qquad (۱-۲۴)$$

از اینرو رابطهٔ پراکندگی $\omega = \omega(k)$ بصورت زیر می‌شود:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2K[1 - Cos(ka)]}{M}} = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| Sin\left(\frac{1}{2}ka\right) \right| \qquad (۱-۲۵)$$

و مدهای نرمال برابر خواهند بود با:

$$u(na, t) \propto \begin{cases} Cos(kna - \omega t) \\ Sin(kna - \omega t) \end{cases} \qquad (۱-۲۶)$$

مثالی دیگر از زنجیرهٔ یک بعدی، مورد آموزنده‌ای است که در شکل (۱-۳) نشان داده شده، که یک زنجیرهٔ چهار اتمی با جرمهای یکسان است.

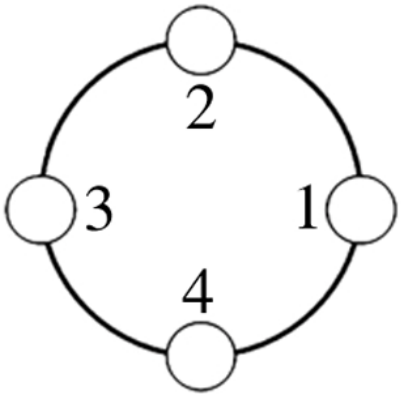
انرژی هارمونیک برای این شکل چنین است:

$$U^{harm} = \frac{1}{2} K_n \sum_n [u(n\vec{a}) - u([n+1]\vec{a})]^2 \qquad (۱-۲۷)$$

که K_n همان نقش ثابت فنر را دارد. اگر جابه‌جایی یونها را با u_1, u_2, u_3, u_4 نشان دهیم، آنگاه معادلهٔ حرکت یونها بصورت زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned}
M\,\ddot{u}_1 &= -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_1} = -K_1(u_1 - u_2) - K_4(u_1 - u_4) \\
M\,\ddot{u}_2 &= -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_2} = -K_1(u_2 - u_1) - K_2(u_2 - u_1) \\
M\,\ddot{u}_3 &= -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_3} = -K_2(u_3 - u_2) - K_3(u_3 - u_4) \\
M\,\ddot{u}_4 &= -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_4} = -K_3(u_4 - u_3) - K_4(u_4 - u_1)
\end{aligned} \qquad (۱-۲۸)$$

که در معادلات بالا K_4, K_3, K_2, K_1 بترتیب به منزلهٔ ثابت فنر بین یونهای یک و دو، یونهای دو و سه، یونهای سه و چهار، یونهای چهار و یک می‌باشند.



شکل ۱-۳: یک زنجیرهٔ چهار اتمی در یک بعد، با اتمهایی با جرم یکسان M.

معادلهٔ (۱-۲۸) را می‌توان با استفاده از ماتریسها بصورت زیر نوشت:

$$M\begin{pmatrix} \ddot{u}_1 \\ \ddot{u}_2 \\ \ddot{u}_3 \\ \ddot{u}_4 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} K_4 + K_1 & -K_1 & 0 & -K_4 \\ -K_1 & K_1 + K_2 & -K_2 & 0 \\ 0 & -K_2 & K_2 + K_3 & -K_3 \\ -K_4 & 0 & -K_3 & K_3 + K_4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \qquad (۱-۲۹)$$

اگر قرار دهیم $K = K_{۴} = K_{۳} = K_{۲} = K_{۱}$ ، و u_iها را بصورت زیر انتخاب کنیم:

$$u_n \propto e^{i(k\,na-\omega t)} \qquad (۳۰-۱)$$

آنگاه با جایگذاری معادلهٔ (۱-۳۰) در (۱-۲۹) داریم:

$$\begin{pmatrix} ۲K-M\omega^{۲} & -Ke^{ika} & ۰ & -Ke^{-ika} \\ -Ke^{-ika} & ۲K-M\omega^{۲} & -Ke^{ika} & ۰ \\ ۰ & -Ke^{-ika} & ۲K-M\omega^{۲} & -Ke^{ika} \\ -Ke^{ika} & ۰ & -Ke^{-ika} & ۲K-M\omega^{۲} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{۱} \\ u_{۲} \\ u_{۳} \\ u_{۴} \end{pmatrix} = ۰ \qquad (۳۱-۱)$$

برای اینکه این معادله جواب داشته باشد، باید دترمینال ماتریس معادلهٔ بالا صفر باشد. از اینرو با حل این دترمینال بدست می‌آوریم، البته با تقسیم دو طرف معادلهٔ بالا بر M و قرار دادن $\omega'^{۲} = \sqrt{K/M} = ۱$، که این کار را برای سادگی محاسبات انجام می‌دهیم.

$$(۲-\omega^{۲})^{۴} - ۲(۲-\omega^{۲})^{۲} - (e^{i۴ka} - e^{-i۴ka}) = (۲-\omega^{۲})^{۴} - ۲(۲-\omega^{۲})^{۲} - ۲iSin\,(۴ka) = ۰ \qquad (۳۲-۱)$$

رابطهٔ بالا را با تغییر متغییر $x = (۲-\omega^{۲})^{۲}$ حل می‌کنیم:

$$(x)^{۲} - ۲x - ۲iSin\,(۴ka) = ۰$$

$$x_{۱,۲} = \frac{۲ \pm [۴ + ۸iSin\,(۴ka)]^{\frac{۱}{۲}}}{۲} = ۱ \pm [۱ + ۲iSin\,(۴ka)]^{\frac{۱}{۲}} \qquad (۳۳-۱)$$

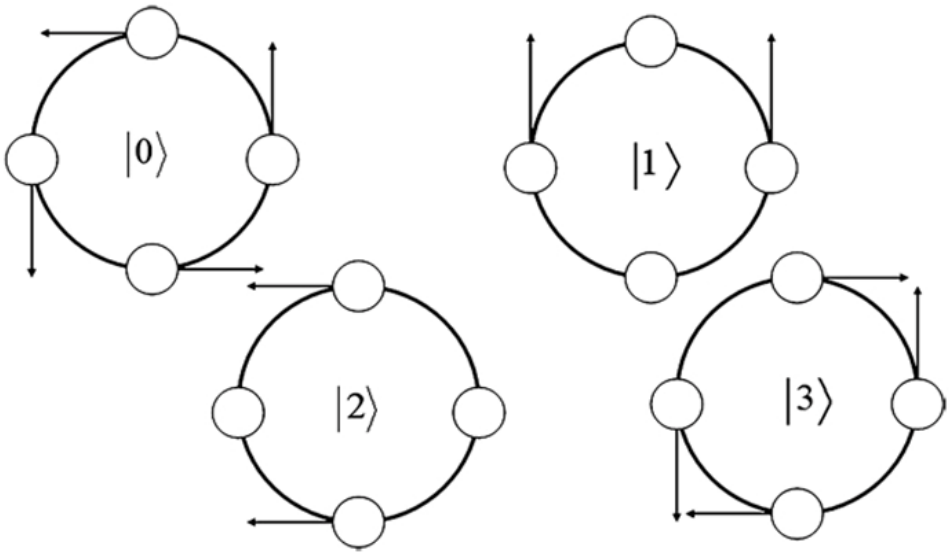
که در حد $k \to ۰$ داریم:

$$x_{۱,۲} = ۱ \pm ۱ = \begin{cases} ۲ \\ ۰ \end{cases} \Rightarrow (۲-\omega^{۲})^{۲} = \begin{cases} ۲ \Rightarrow \omega^{۲} = ۲ + \sqrt{۲} \Rightarrow \omega \approx ۰,۲ \\ ۰ \Rightarrow \omega^{۲} = ۲ \Rightarrow \omega = \pm\sqrt{۲} \end{cases} \qquad (۳۴-۱)$$

با قرار دادن این چهار مقدار برای ω در رابطهٔ (۱-۳۱) در حد $k \to ۰$ ، مدهای نرمال را بدست می‌آوریم:

$$|0\rangle=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\end{pmatrix}\;;\;|1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\\0\end{pmatrix}\;;\;|2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\-1\end{pmatrix}\;;\;|3\rangle=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\\1\\-1\end{pmatrix} \qquad (۳۵-۱)$$

این مدهای نرمال در شکل (۱-٤) نشان داده شده است.



شکل ۱-٤: مدهای نرمال برای زنجیرهٔ چهار اتمی در حد $k\to 0$.

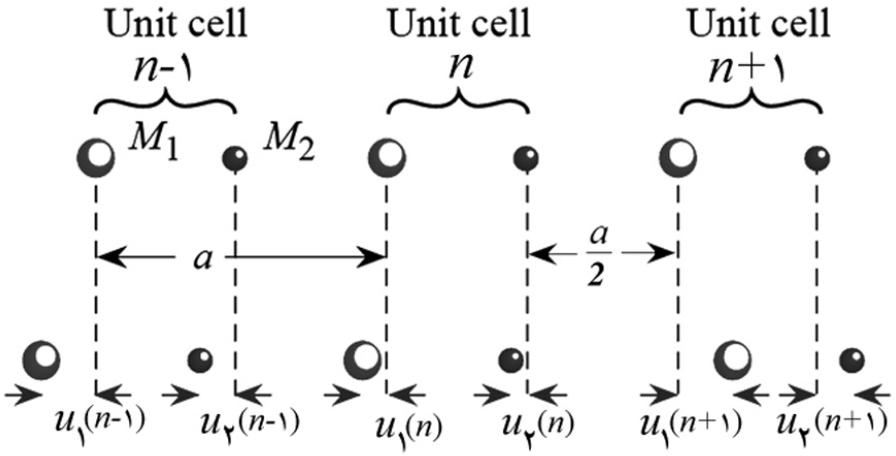
۱-۱-۲ مدهای نرمال یک شبکهٔ براوهٔ یک بعدی با پایهٔ دو اتمی

حال یک شبکهٔ براوهٔ یک بعدی با دو یون در هر سلول یکه را در نظر می‌گیریم، با مکانهای تعادل na و $(n+\frac{1}{2})a$ و جرمهای M_1 و M_2. برای سادگی فرض می‌کنیم که فقط نزدیکترین همسایه‌ها با هم برهمکنش دارند. این شبکه را در شکل (۱-۵) نشان داده‌ایم.

انرژی هارمونیک بصورت زیر است:

$$U^{harm}=\frac{K}{2}\sum_n[u_1(n\vec{a})-u_2(n\vec{a})]^2+\frac{K}{2}\sum_n[u_1(n\vec{a})-u_2([n+1]\vec{a})]^2 \qquad (۳۶-۱)$$

که u_2,u_1 بترتیب، جابه‌جایی یون اول و دوم می‌باشند.



شکل ۱–۵: شبکهٔ براوهٔ یک بعدی با دو یون در هر سلول یکه، با مکانهای تعادل na و $(n+\frac{۱}{۲})a$ و جرمهای $M_۱$ و $M_۲$.

معادلات حرکت یونها بصورت زیر خواهد بود:

$$\begin{aligned} M_۱\,\ddot{u}_۱(na) &= -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_۱(na)} \\ &= -K\,[u_۱(na)-u_۲(na)] - K[u_۱(na)-u_۲([n-۱]a)] \\ M_۲\,\ddot{u}_۲(na) &= -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_۲(na)} \\ &= -K\,[u_۲(na)-u_۱(na)] - K[u_۲(na)-u_۱([n+۱]a)] \end{aligned} \qquad (۳۷–۱)$$

برای حل این معادلات، توابع $u_۲, u_۱$ را بصورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$\begin{aligned} u_۱(na) &= A_۱\,e^{i(kna-\omega t)} \\ u_۲(na) &= A_۲\,e^{i(kna-\omega t)} \end{aligned} \qquad (۳۸–۱)$$

که $A_۱$ و $A_۲$ دامنه‌های این توابع هستند.

با جایگذاری (۱–۳۸) در (۱–۳۷)، دو معادلهٔ کوپل شده بدست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} (M_۱\omega^۲ - ۲K)A_۱ + K(۱+e^{-ika})A_۲ &= ۰ \\ K(۱+e^{ika})A_۱ + (M_۲\omega^۲ - ۲K)A_۲ &= ۰ \end{aligned} \qquad (۳۹–۱)$$

برای اینکه این معادلات جواب داشته باشند باید دترمینال ضرایب صفر شود، یعنی:

$$\begin{vmatrix} M_۱\omega^۲ - ۲K & K(۱+e^{-ika}) \\ K(۱+e^{ika}) & M_۲\omega^۲ - ۲K \end{vmatrix} = ۰ \qquad (۴۰–۱)$$