

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

١٠٢٧٨٦

مجتمع علوم  
دانشکده فیزیک

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد

موضوع:

بررسی مدهای سطحی به روش طیف سنجی  $ATR$   
در چاه کوانتومی چندتایی  $In_xGa_{1-x}N/GaN$  آلاییده  
در ناحیه فروسرخ دور

استاد راهنما:

دکتر غضنفر میرجلیلی

استاد مشاور:

دکتر حسین مختاری

پژوهش و نگارش:

مصطفی پورمند

زمستان ۱۳۸۵





۱۳۸۶ / ۱۱ / ۲۸

۱۰۳۷۵۶

این پایان نامه را به  
دختر عزیزم  
تقدیم می کنم.

## تشکر و قدردانی

مَنّت خدای را ، عزّ و جلّ ، که طاعتش موجب قربت است و به شکراندرش مزید نعمت .  
از استاد ارجمند و گرانقدر جناب آقای دکتر میرجلیلی که راهبری و هدایت ایشان مرا در اتمام  
پروژه یاری نمود کمال سپاسگزاری را دارم .  
از استاد ارجمند جناب آقای دکتر مختاری که از مشاوره ایشان در انجام پروژه بهره مند شدم ،  
سپاسگزارم .  
از اساتید گرانقدر جناب آقای دکتر مجلس آرا و جناب آقای دکتر صادق زاده که داوری این پایان  
نامه را پذیرفتند و جناب آقای دکتر مدرس نماینده محترم تحصیلات تکمیلی سپاسگزارم .

<p>شناسه: ب/ک/۳</p>	<p>صور تجلسه دفاعیه پایان نامه دانشجوی دوره کارشناسی ارشد</p>	 <p>مدیریت تحصیلات تکمیلی</p>
<p>جلسه دفاعیه پایان نامه تحصیلی آقای/ خانم: مصطفی پورمند دانشجوی کارشناسی ارشد رشته/گرایش: فیزیک حالت جامد تحت عنوان: بررسی مدهای سطحی به روش طیف سنجی ATR در چاه کوانتومی چند تایی <math>In_xGa_{1-x}N/GaN</math> آلاییده در ناحیه فرو سرخ دور و تعداد واحد: ۶ در تاریخ ۸ / ۱۱ / ۱۳۸۵ با حضور اعضای هیأت داوران (به شرح ذیل) تشکیل گردید. پس از ارزیابی توسط هیأت داوران، پایان نامه با نمره: به عدد ۱۹/۵ به حروف نوزده و نیم و درجه عالی مورد تصویب قرار گرفت.</p>		
<p><u>امضاء</u></p> 	<p><u>نام و نام خانوادگی</u> غضنفر میر جلیلی</p>	<p><u>عنوان</u> استاد/ استادان راهنما:</p>
	<p> حسین مختاری</p>	<p>استاد/ استادان مشاور:</p>
<p></p>	<p>محمد علی صادق زاده محمد حسین مجلس آزاد</p>	<p>متخصص و صاحب نظر داخلی: متخصص و صاحب نظر خارجی:</p>
<p>نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه (ناظر) نام و نام خانوادگی: سید محمد صادق مدرس مصدق امضاء:</p>		

« فهرست مطالب »

صفحه	عنوان
	فصل اول: ارتعاشات شبکه و برهم کنش امواج الکترومغناطیسی طول موج بلند با نیمرسانا
۲	مقدمه
۳	۱-۱. ارتعاشات شبکه یک بعدی با دو اتم در یاخته بسیط
۹	۱-۲. کوانتشن ارتعاشات شبکه
۱۰	۱-۳. مدهای نرمال شبکه سه بعدی با پایه چند اتمی
۱۲	۱-۴. تابع دی الکتریک
۱۵	۱-۴-۱. تابع دی الکتریک ناشی از بارهای الکتریکی
۱۸	۱-۴-۲. تابع دی الکتریک ناشی از ارتعاش یونها در بلورهای یونی
۲۴	۱-۵. پلاریتون های کپه ای
	فصل دوم: انتشار موج الکترومغناطیسی قطبیده در محیط تک محوری و چاه های کوانتمی
۲۸	مقدمه
۲۸	۱-۲. مفهوم محیط تک محوری

۲۹	۲-۲. معادلات پاشندگی امواج الکترومغناطیسی قطبیده در محیط تک محوری
۳۳	۳-۲. چاه های کوانتومی
۳۴	۱-۳-۲. چاه کوانتومی منفرد
۳۷	۲-۳-۲. چاه های کوانتومی چندتایی
۳۹	۴-۲. ابرشبهه ها
۴۲	۵-۲. مفهوم محیط مؤثر از ابرشبهه ها
۴۶	۶-۲. تابع دی الکترونیک ابرشبهه های پریود کوتاه
	<b>فصل سوم: مدهای سطحی و طیف سنجی ATR</b>
۴۹	مقدمه
۴۹	۱-۳. پلاسمون سطحی
۵۱	۱-۳-۱. شرایط ایجاد مد پلاسمای سطحی
۵۳	۱-۳-۲. معادله پاشندگی پلاسمون سطحی
۵۴	۲-۳. پلاریتون سطحی
۵۵	۱-۲-۳. شرایط ایجاد مد پلاریتون سطحی

۵۸	۲-۲-۳. رابطه پاشندگی پلاریتون سطحی
۵۹	۳-۳. برانگیزش نوری مدهای سطحی و طیف سنجی ATR
۶۰	۱-۳-۳. طیف سنجی تبدیل فوریه
۶۳	۱-۱-۳-۳. طیف سنجی DFTS
۶۴	۲-۱-۳-۳. طیف سنجی ATR
۶۷	۳-۴. امواج گذرا در بازتاب داخلی
۷۰	۳-۵. مدهای موجبر
۷۴	۳-۶. محاسبات تئوری ATR
۸۱	۳-۷. مدهای بروستر

## فصل چهارم: بررسی مدهای سطحی آلیاز $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ و چاه های

### کوانتومی چندتایی $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

۸۷	مقدمه
۸۸	۴-۱. مدهای سطحی GaN



۱۰۵	۲-۴. مدهای سطحی $In_xGa_{1-x}N$
۱۲۱	۳-۴. مدهای سطحی چاه های کوانتومی چندتایی $In_xGa_{1-x}N/GaN$
۱۴۲	۴-۴. نتیجه گیری کلی
۱۴۵	۴-۵. مقاله های استخراج شده از این پایان نامه
۱۴۶	۴-۶. برنامه های کامپیوتری
۱۵۶	چکیده
۱۵۷	منابع

## چکیده

در این پایان نامه ، مدهای پلاریتون سطحی و مد موجبر برای آلیاژ سه تایی  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  و چاه های کوانتومی چندتایی  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  با ساختارهای مکعبی در ناحیه فرسرخ دور با استفاده از طیف انعکاسی ATR تابش مایل قطبیده به صورت تئوری بررسی شده اند . طیف انعکاسی ATR نمونه ها با استفاده از تئوری استاندارد اپتیک چندین لایه ایها رسم شده است .

به دلیل عدم رشد مناسب آلیاژ سه تایی و چاه های کوانتومی چندتایی و عدم وجود داده های تجربی برای مشخصه های اپتیکی آنها ، در این بررسی برای رسم طیف بازتابندگی ، تابع دی الکتریک به صورت یک تابع دی الکتریک خطی ، آلیاژ سه تایی یک ساختار همسانگرد و چاه های کوانتومی چندتایی یک ساختار تک محوری فرض شداند . برای مؤلفه های تانسور دی الکتریک ساختار چاه های کوانتومی چندتایی از تقریب محیط مؤثر استفاده شده است .

اثر آلائدگی ، تغییر درصد مولی ترکیبات در آلیاژ و چاه های کوانتومی چندتایی ، ضخامت رولایه ها و ضخامت سد و چاه روی طیف بازتابندگی بررسی شده اند . جابجایی مدهای سطحی در اثر این عوامل ابزار مناسبی برای تعیین مقدار بار آزاد در چاه و سد می باشند . همچنین این جابجایی ها ابزار مناسبی برای تعیین مقدار  $\text{In}$  و  $\text{Ga}$  در ساختار آلیاژ سه تایی و چاه های کوانتومی چندتایی می باشند .

## فصل اول

ارتعاشات شبکه و برهم کنش امواج  
الکترومغناطیسی طول موج بلند با  
نیمرسانا

بر هم کنش موج الکترومغناطیسی با یک جامد به صورت میکروسکوپی یا ماکروسکوپی بررسی می شود. برای امواج فروسرخ، چونکه انرژی فوتون آنها، خیلی کوچکتر از انرژی جنبشی الکترونها و یونها در جسم جامد می باشد، بررسی ماکروسکوپی کفایت می کند. برای بررسی بر هم کنش ماکروسکوپی موج الکترومغناطیسی با جامد، اساس کار معادلات ماکسول می باشد.

بر هم کنش موج الکترومغناطیسی با جامد از طریق تابع دی الکتریک وابسته به فرکانس توضیح داده می شود. بنابراین تابع دی الکتریک  $\epsilon(\omega, \vec{K})$  که وابستگی آن به بسامد و بردار موج قوی است، پیامدهای چشمگیری در مورد ویژگیهای فیزیکی جامدات دارد. در حد طول موجهای بلند  $\epsilon = \epsilon(\omega, 0)$ ، برانگیختگیهای حجمی و سطحی پلاسمونها و پلاریتونها را توصیف می کند. در حد دیگر  $\epsilon = \epsilon(0, \vec{K})$ ، استتار الکتروستاتیکی بر هم کنشهای الکترون-الکترون، الکترون-شبهه و الکترون-ناخالصی را توصیف می کند [۱].

در این فصل پس از بحثی راجع به ارتعاشات شبکه، به بررسی تابع دی الکتریک ناشی از پلاسمونها با استفاده از مدل درود و تابع دی الکتریک ارتعاشات شبکه قطبی با استفاده از مدل نوسانگر هماهنگ ساده میرای واداشته می پردازیم. در پایان بحثی کوتاه راجع به پلاریتونهاى کپه ای<sup>۱</sup> خواهیم داشت. در توضیح مفاهیم بیان شده، فرض می کنیم دما یک مقدار ثابتی است و از آثار ناهماهنگ که برخی از ویژگیهای جامدات از قبیل انبساط حرارتی و انتقال صوت ... را توجیه می کنند چشمپوشی می کنیم.

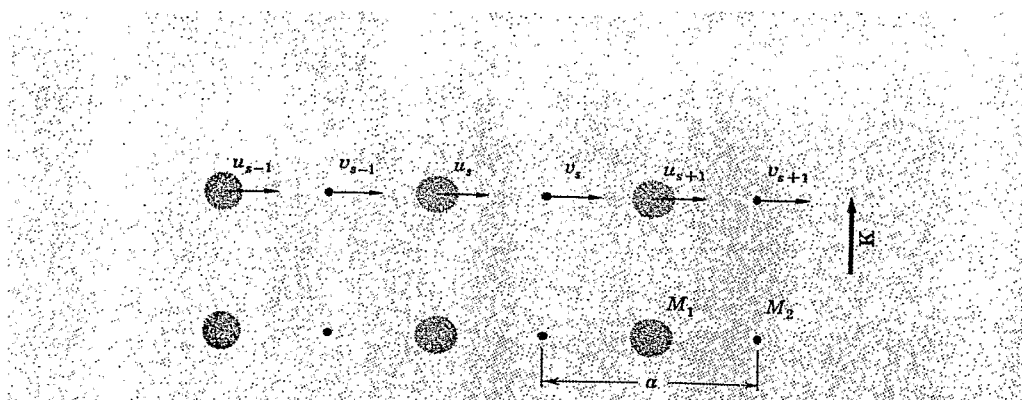
---

<sup>۱</sup>: bulk polaritons

### ۱-۱. ارتعاشات شبکه یک بعدی با دو اتم در یاخته بسیط

یک بلور مکعبی را در نظر می گیریم که در آن اتمهای با جرم  $M_1$  روی یک مجموعه از صفحات و اتمهای با جرم  $M_2$  روی صفحات واقع در بین صفحات مجموعه اول قرار می گیرند ، شکل (۱-۱) . اگر دو اتم پایه معادل نباشند ، ثابتهای نیرو یا جرمها متفاوت می باشند . در اینجا ما فرض می کنیم که جرم اتمها متفاوت می باشد و همچنین  $a$  فاصله تکرار شبکه در جهت عمود بر صفحات شبکه باشد [۱،۲] .

ما فرض می کنیم که هر اتم فقط با همسایه های اول خود بر هم کنش می کند و ثابت نیرو بین تمام زوج صفحات اول یکسان می باشد . و نیروی وارد بر هر اتم دلخواه از قانون هوک پیروی می کند [۳] .



شکل (۱-۱): ارتعاش شبکه یک بعدی دو اتمی

اگر جابجائی یونها از محل تعادلشان نسبت به فاصله بین اتمی آنها کوچک باشد ، می توان در اولین تقریب حرکت جرمهای اتمی را به عنوان یک حرکت هماهنگ توصیف کرد . از خصوصیات سیستمهای هماهنگ این است که تبادل انرژی میان یک مد ارتعاشی و مد دیگر وجود ندارد و هر مد مستقل از مد دیگر است [۴] .

جابجایی اتمهای  $M_1$  را با  $u_s, u_{s-1}, \dots, u_{s+1}$  و جابجایی اتمهای  $M_2$  را با  $v_s, v_{s-1}, \dots, v_{s+1}$  نشان می دهیم. با در نظر گرفتن بر هم کنش همسایه های نزدیک هامیلتونی پایه  $s$  ام که جابجایی اتم اول آن  $M_1$ ،  $u_s$  است و اتم دوم آن  $M_2$  است به صورت زیر است،

$$H_s = \frac{1}{2}C(u_s - v_{s-1})^2 + \frac{1}{2}C(u_s - v_s)^2 + \frac{P_s^2}{2M_s} \quad (1-1)$$

$C$  ثابت نیروی بین صفحات است، و  $P_s$  تکانه اتمی است که جابجایی آن  $u_s$  است،  $P_s$  به صورت  $P_s = M_s \frac{du_s}{dt}$  بیان می شود.

با استفاده از معادله بندادی هامیلتون

$$\frac{dP_s}{dt} = -\frac{\partial H_s}{\partial u_s} \quad (2-1)$$

معادله حرکت اتم با جرم  $M_1$  برابر است با:

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s) \quad (3-1)$$

معادله حرکت اتم با جرم  $M_2$  برابر است با:

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_s - 2v_s) \quad (4-1)$$

به دنبال پاسخی به شکل یک موج متحرک می گردیم که دامنه آن بر روی صفحات متناوباً برابر مقادیر متفاوت  $u$  و  $v$  باشد [۱،۲].

لذا جواب معادلات (۳-۱) و (۴-۱) را به صورت زیر می نویسیم:

$$u_s = u \exp i(sKa - \omega t) \quad (5-1)$$

$$v_s = v \exp i(sKa - \omega t) \quad (6-1)$$

در این معادلات  $K$  بردار موج و  $a$  فاصله بین صفحات است، اندازه فاصله بین صفحات در یک شبکه معین به جهت  $K$  بستگی دارد.

معادلات (۵-۱) و (۶-۱) را در معادلات (۳-۱) و (۴-۱) جایگذاری می کنیم، و معادلات زیر

را به دست می آوریم:

$$(2C - M_1\omega^2)u - C(1 + e^{-iKa})v = 0 \quad (7-1)$$

$$-C(1 + e^{+iKa})u + (2C - M_2\omega^2)v = 0 \quad (8-1)$$

این معادلات خطی و همگن ، وقتی پاسخ غیر صفر دارند که دترمینان ضرایب  $u$  و  $v$  صفر باشد .

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1\omega^2 & -C(1 + e^{-iKa}) \\ -C(1 + e^{+iKa}) & 2C - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (9-1)$$

یا

$$M_1M_2\omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos Ka) = 0 \quad (10-1)$$

حل معادله (10-1) بر حسب  $\omega^2$  به معادله زیر منجر می شود [۲،۱]

$$\omega^2 = \frac{C}{M_1M_2} \left[ M_1 + M_2 \pm \sqrt{M_1^2 + M_2^2 + 2M_1M_2 \cos Ka} \right] \quad (11-1)$$

حال روی معادله (11-1) در حالات زیر بحث می کنیم :

الف) حالتی که  $Ka \ll 1$  و  $Ka = \pm\pi$  می باشد: برای مقادیر خیلی کوچک  $Ka$  (در مرکز

منطقه بریلوئن) داریم :  $\cos Ka = 1 - 1/2K^2a^2 + \dots$  بنابراین ریشه ها به صورت زیر خواهند بود ،

$$\omega^2 \cong 2C \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{شاخه اپتیکی}) \quad (12-1)$$

$$\omega^2 \cong \frac{\frac{1}{2}C}{M_1 + M_2} K^2 a^2 \quad (\text{شاخه آکوستیکی}) \quad (13-1)$$

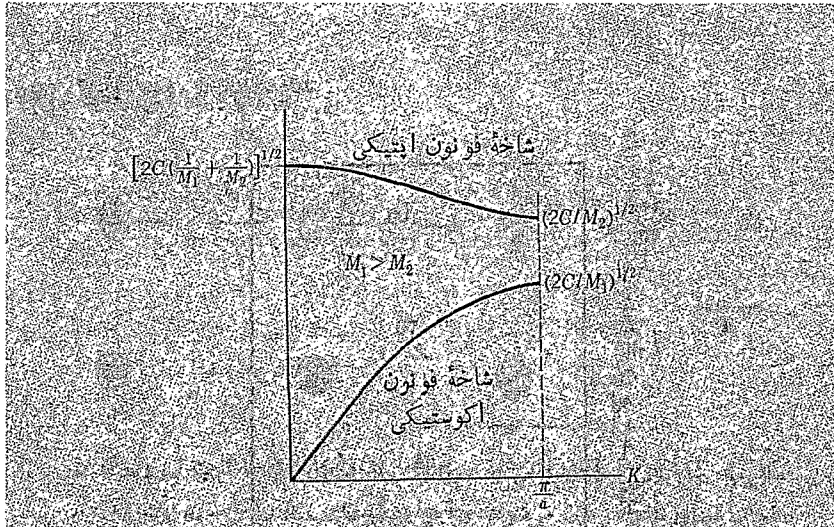
وسعت منطقه اول بریلوئن چنین است  $-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}$  ، که در آن  $a$  فاصله تکرار شبکه

است . در مرز منطقه  $K_{\max} = \pm \frac{\pi}{a}$  ، ریشه ها عبارتند از:

$$\omega^2 = \frac{2C}{M_2} \quad (\text{شاخه اپتیکی}) \quad (14-1)$$

$$\omega^2 = \frac{2C}{M_1} \quad (\text{شاخه آکوستیکی}) \quad (15-1)$$

بستگی  $\omega$  به  $K$  برای  $M_1 > M_2$  در شکل (۲-۱) رسم شده است.

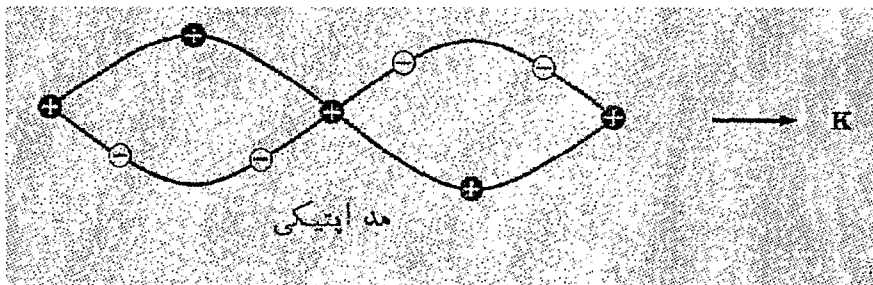


شکل (۲-۱): شاخه های اپتیکی و آکوستیکی رابطه پاشندگی برای یک شبکه خطی دو اتمی

در  $K = 0$  برای شاخه اپتیکی با جایگذاری (۱۲-۱) در (۷-۱) یا (۸-۱) به دست می آوریم:

$$\frac{u}{v} = -\frac{M_2}{M_1} \quad (۱۶-۱)$$

در این حالت اتمها مخالف یکدیگر ارتعاش می کنند، ولی مرکز جرم آنها ثابت است. اگر دو اتم حامل بارهای مخالف باشند، چنین حرکتی را می توان به کمک میدان الکتریکی یک موج اپتیکی برانگیخت و به این دلیل این شاخه را شاخه اپتیکی می نامند. شکل (۳-۱) جابجایی های ذرات را در شاخه اپتیکی عرضی نمایش می دهد.



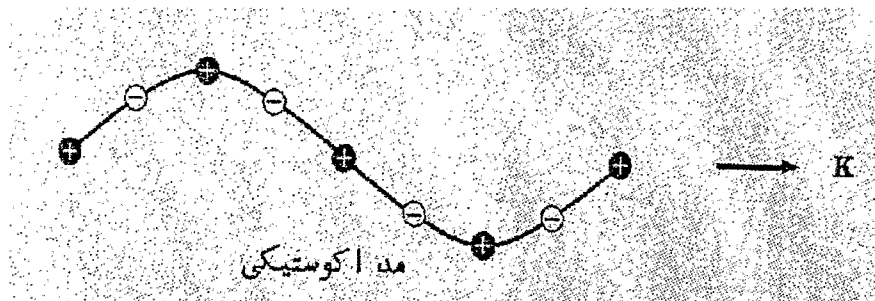
شکل (۳-۱): جابجایی ذرات در مد اپتیکی عرضی در شبکه خطی دو اتمی



در  $K=0$  ، برای شاخه آکوستیکی با جایگذاری (۱۳-۱) در (۷-۱) یا (۸-۱) به دست می آوریم ،

$$\frac{u}{v} = 1 \quad (17-1)$$

در این حالت اتمها مانند ارتعاشات آکوستیکی با طول موج بلند ، با یکدیگر حرکت می کنند ، بنابراین به این دلیل این شاخه آکوستیکی نامیده می شود . شکل (۴-۱) جایجایی ذرات را در شاخه آکوستیکی عرضی نمایش می دهد . از نقطه  $K=0$  با افزایش  $K$  منحنی شاخه آکوستیکی به طور خطی افزایش می یابد و رابطه پاشیدگی آن در همسایگی  $K=0$  به فرم  $\omega = VK$  (  $V$  سرعت انتشار موج است) می باشد که مشخصه امواج صوتی است ، شاخه های آکوستیکی وقتی که  $K$  به سمت صفر میل می کند انرژی آنها نیز صفر می شود [۱،۲].



شکل (۴-۱): جایجایی ذرات در مد آکوستیکی عرضی در شبکه یک بعدی دو اتمی

شاخه های اپتیکی دارای بسامد بالاتری بوده و تقریباً بدون پاشیدگی هستند . یعنی اینکه

انرژی آنها چنانچه  $K$  تغییر کند ، چندان تغییری نمی کند [۳].

شکل (۲-۱) نشان می دهد که برای گستره بسامد بین  $\left(\frac{2C}{M_1}\right)^{1/2}$  و  $\left(\frac{2C}{M_2}\right)^{1/2}$  پاسخهای

موج گونه وجود ندارد . این امر مشخصه امواج کشسان در شبکه های چند اتمی است .

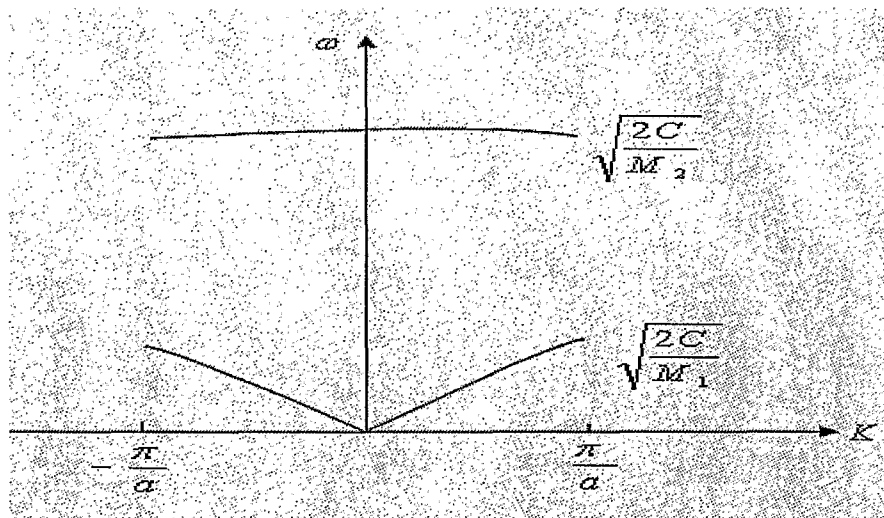
بنابراین در مرز منطقه اول بریلوئن  $K_{\max} = \pm \frac{\pi}{a}$  یک گاف بسامد وجود دارد. اگر در این ناحیه به دنبال پاسخهای با  $\omega$  حقیقی باشیم بردار موج  $K$  مختلط خواهد شد در نتیجه موج در فضا میرا خواهد شد [۱،۳].

(ب) حالتی که  $M_1 \gg M_2$  می باشد: در این حالت بسط معادله (۱۱-۱) نتایج زیر را به دنبال دارد،

$$\omega^2 \cong \frac{2C}{M_1} \sin^2\left(\frac{1}{2}Ka\right) \quad (18-1) \quad (\text{شاخه آکوستیکی})$$

$$\omega^2 = \frac{2C}{M_2} \quad (19-1) \quad (\text{شاخه اپتیکی})$$

شکل (۵-۱) نمودار  $\omega$  بر حسب  $K$  را برای این حالت در منطقه اول بریلوئن نشان می دهد،



شکل (۵-۱): نمودار پاشندگی برای شبکه یک بعدی دو اتمی

بنابراین با توجه به معادله (۸-۱) داریم:

$$\frac{u}{v} = -\frac{M_2\omega^2 - 2C}{C + Ce^{+iKa}} \quad (20-1)$$

از معادله (۹-۱) به دست می آوریم:

$$|C + Ce^{-iKa}| = \sqrt{(M_1\omega^2 - 2C)(M_2\omega^2 - 2C)} \quad (21-1)$$

حال اگر معادله (۲۱-۱) را در معادله (۲۰-۱) جایگذاری کنیم به دست می آوریم که:

$$\frac{u}{v} = \frac{M_2 \omega^2 - 2C}{\sqrt{(M_1 \omega^2 - 2C)(M_2 \omega^2 - 2C)}} \quad (22-1)$$

با جایگذاری معادله (۱۸-۱) در معادله (۲۲-۱) برای شاخهٔ آکوستیکی خواهیم داشت:

$$\frac{u}{v} = \frac{4C \cos Ka}{\sqrt{(M_1 \omega^2 - 2C)(M_2 \omega^2 - 2C)}} \quad (\text{شاخهٔ آکوستیکی}) \quad (23-1)$$

طرف راست معادله (۲۳-۱) مثبت است، بنابراین در حالت آکوستیکی هر دو ذره  $M_1$  و  $M_2$  در یک جهت حرکت می کنند. مثل این است که سلولهای  $M_1 + M_2$  با پایه ای که حاوی دو اتم است با هم حرکت می کنند. چونکه  $M_1 \gg M_2$  بنابراین  $M_1 + M_2 \cong M_1$ ، مثل این است که در هر نقطه تنها ذره  $M_1$  وجود دارد و تنها این ذره حرکت می کند.

با جایگذاری معادله (۱۹-۱) در معادله (۲۲-۱) برای شاخهٔ اپتیکی خواهیم داشت:

$$\frac{u}{v} = \frac{2C \left( \frac{M_1}{M_2} - 1 \right)}{\sqrt{(M_1 \omega^2 - 2C)(M_2 \omega^2 - 2C)}} \quad (\text{شاخهٔ اپتیکی}) \quad (24-1)$$

چونکه  $M_1 \gg M_2$  است، بنابراین طرف راست معادله (۲۴-۱) منفی است، پس در حالت اپتیکی دو جرم در جهت خلاف یکدیگر حرکت می کنند. با توجه به اینکه  $M_1 \gg M_2$  است، و بسامد حرکت  $\omega^2 = \frac{2C}{M_2}$  است، تنها  $M_2$  حرکت می کند. مثل اینکه جرم  $M_2$  توسط دو فنر به جایی بسته شده است و حرکت نوسانی انجام می دهد [۲].

## ۲-۱. کوانتش ارتعاشات شبکه

انرژی ارتعاش شبکه کوانتمی است. کوانتم این انرژی در تشابه با فوتون برای موج الکترومغناطیسی، فونون نامیده می شود. امواج کشسان در بلورها از فونونها تشکیل شده اند.

ارتعاشات گرمایی در بلورهای فونونهای هستند که به صورت گرمایی بر انگیزته شده اند ، مانند فوتونهای که در تابش الکترومغناطیس جسم سیاه درون یک کاواک به صورت گرمایی بر انگیزته می شوند . انرژی یک مد کشسان با بسامد زاویه ای  $\omega$  ، هنگامی که این مد تا عدد کوانتمی  $n$  برانگیزته شود ، یعنی وقتی با  $n$  فونون اشغال شود به صورت زیر است [۵]:

$$\varepsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (25-1)$$

یک فونون با بردار موج  $\vec{K}$  یا ذراتی مانند فوتونها ، نوترونها و الکترونها به گونه ای بر هم کنش می کند که گویی دارای اندازه حرکت  $P = \hbar \vec{K}$  است . اما در واقع فونون به جزء حالت ( $K = 0$ ) دارای اندازه حرکت فیزیکی نیست ، زیرا مختصات فونون به مختصات نسبی اتمی بستگی دارد . حالت  $K = 0$  انتقال بلور به طور یکجا را نشان می دهد ، چنین حالتی دارای اندازه حرکت است . اندازه حرکت  $\hbar \vec{K}$  فونون را گاهی اوقات اندازه حرکت بلوری می نامند [۱] .

تعداد متوسط فونونها در یک مد مقدار ثابتی نیست و به دما بستگی دارد . تعداد متوسط فونونها در دمای تعادل  $T$  با استفاده از توزیع پلانک داده می شود [۱] .

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{K_B T}} - 1} \quad (26-1)$$

$\hbar$  ثابت پلانک کاهش یافته ؛  $\omega$  فرکانس زاویه ای ،  $K_B$  ثابت بولتزمن و  $T$  دماست . در دمای

$T = 0$  ، تعداد فونونها برابر صفر است ، در دماهای بالا به صورت زیر است .

$$\langle n \rangle \cong \frac{K_B T}{\hbar \omega} \quad (27-1)$$

بنابراین تعداد فونونها در یک سیستم پایسته نیست ، این برخلاف الکترونها و فوتونهاست که تعداد آنها پایسته است [۵] .

### ۳-۱. مدهای نرمال شبکه سه بعدی با پایه چند اتمی