

„Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych”
Wykład 10 (06.05.2020)

Tomasz Kazimierczuk

Zakład Fizyki Ciała Stałego
Instytut Fizyki Doświadczalnej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

Na podstawie materiałów prof. M. Baja

OBSADZENIE STANÓW DOMIESZKOWYCH W STANIE RÓWNOWAGI TERMODYNAMICZNEJ

Obsadzenie poziomów domieszkowych

„Obsadzanie” stanów (nie tylko zlokalizowanych – domieszek czy defektów, ale także stanów pasmowych) elektronami oznacza **wymianę cząstek (elektronów) pomiędzy rezerwuarem i rozważanym podukładem**.



wielki zespół kanoniczny (podukład wymienia cząstki i energię z otoczeniem)



Prawdopodobieństwo termodynamiczne (nieunormowane) znalezienia podukładu w stanie j , w którym znajduje się n_j cząstek (elektronów) i w którym energia podukładu wynosi E_j (jest to całkowita energia, obejmująca wszystkie n_j cząstek):

$$P_j = e^{-\beta(E_j - n_j \mu)} \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad \mu - \text{potencjał chemiczny}$$

Suma statystyczna:

$$Z = \sum_j P_j = \sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \mu)}$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Średnie statystyczne:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_j A_j e^{-\beta(E_j - n_j \mu)}}{\sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \mu)}}$$

Przykład 1 – elektron swobodny obsadzający (lub nie)
jednoelektronowy stan o danym k i danym spinie:

możliwe 2 stany podukładu:

$$n_0 = 0; E_0 = 0$$

$$n_1 = 1; E_1 = E$$

średnia liczba cząstek podukładu:

$$\langle n \rangle =$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład 2 – obsadzanie przez elektrony swobodne stanu elektronowego o danym k (spin dowolny):

możliwe 4 stany podukładu:

$$n_0 = 0; E_0 = 0$$

$$n_1 = 1; E_1 = E \text{ (spin } \uparrow)$$

$$n_2 = 1; E_2 = E \text{ (spin } \downarrow)$$

$$n_3 = 2; E_3 = 2E \text{ (spiny } \uparrow \text{ i } \downarrow)$$

średnia liczba cząstek podukładu:

$$\langle n \rangle = \cdot$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Poziomy domieszkowe/defektowe

stosunek prawdopodobieństw znalezienia domieszki/defektu z $n+1$ elektronami i z n elektronami:

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = \frac{N_{n+1}}{N_n} = \frac{\sum_{j: n_j = n+1} e^{-\beta[E_j - (n+1)\mu]}}{\sum_{k: n_k = n} e^{-\beta[E_k - n\mu]}} = \frac{g_{n+1}}{g_n} \cdot e^{-\beta[(E_{n+1} - E_n) - \mu]}$$

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = \frac{N_{n+1}}{N_n} = \frac{g_{n+1}}{g_n} \cdot e^{-\beta[E^{n+1/n} - \mu]}$$

$$\sum_n N_n = N$$

zapełnianie kolejnych poziomów domieszkowych przy podnoszeniu poziomu Fermiego

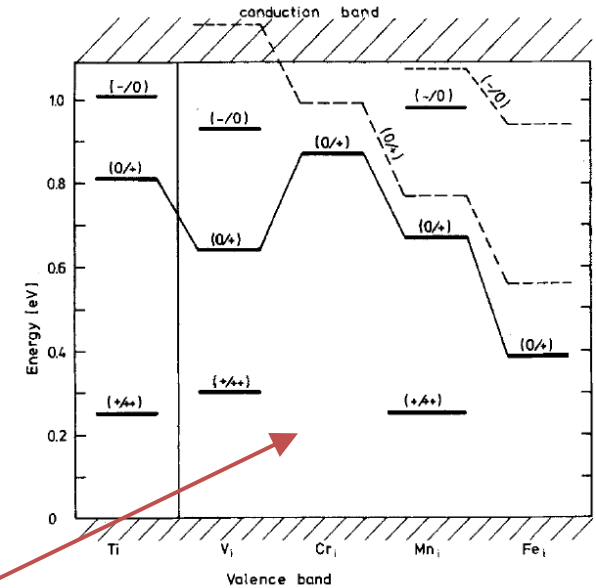


Fig. 15. Energy levels of interstitial 3d metals in silicon (full lines), see Table 3, compared with the results of X_z calculations of DeLeo et al. [15] (broken lines)

N – koncentracja domieszek

E_{n+1} i E_n – **najniższe** spośród wszystkich energii E_j podkładu odpowiednio z $n+1$ i n elektronami

Obsadzenie poziomów domieszkowych

$E^{n+1/n}$ – tzw. **energia poziomu domieszkowego/defektowego** „numerowana”
liczbami obsadzających go elektronów (stanami ładunkowymi) $n+1$ i n

g_{n+1} i g_n – tzw. **degeneracje stanów podukładu z $n+1$ i n elektronami**

Degeneracje g_{n+1} i g_n uwzględniają możliwość występowania wielu różnych stanów podukładu odpowiadających tej samej liczbie cząstek (w tym stanów wzbudzonych):

$$g_n = \alpha_{n,0} + \sum_{i=1,2,\dots} \alpha_{n,i} e^{-\beta \varepsilon_{n,i}}$$

$\alpha_{n,0}$ i $\alpha_{n,i}$ są degeneracjami odpowiednio stanu podstawowego podukładu z n elektronami oraz stanów wzbudzonych z energiami wyższymi od stanu podstawowego o $\varepsilon_{n,i}$ (energie wzbudzeń)

Tak definiowane degeneracje g_n na ogół zależą od temperatury

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład – prosty donor (pomijamy stany wzbudzone):

- stan ładunkowy (+) realizowany na 1 sposób: $g_+ = 1$
- stan ładunkowy (0) realizowany na 2 sposoby (spin \uparrow lub \downarrow): $g_0 = 2$
- energia poziomu donorowego $E^{0/+} = E_d$
- koncentracja donorów N_d

$$\frac{p_0}{p_+} = \frac{g_0}{g_+} \cdot e^{-\beta(E_d - \mu)} \quad p_+ + p_0 = 1$$

⇓

$$p_0 = \langle n \rangle = \frac{1}{1 + \frac{g_+}{g_0} \cdot e^{\beta(E_d - \mu)}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta(E_d - \mu)}}$$

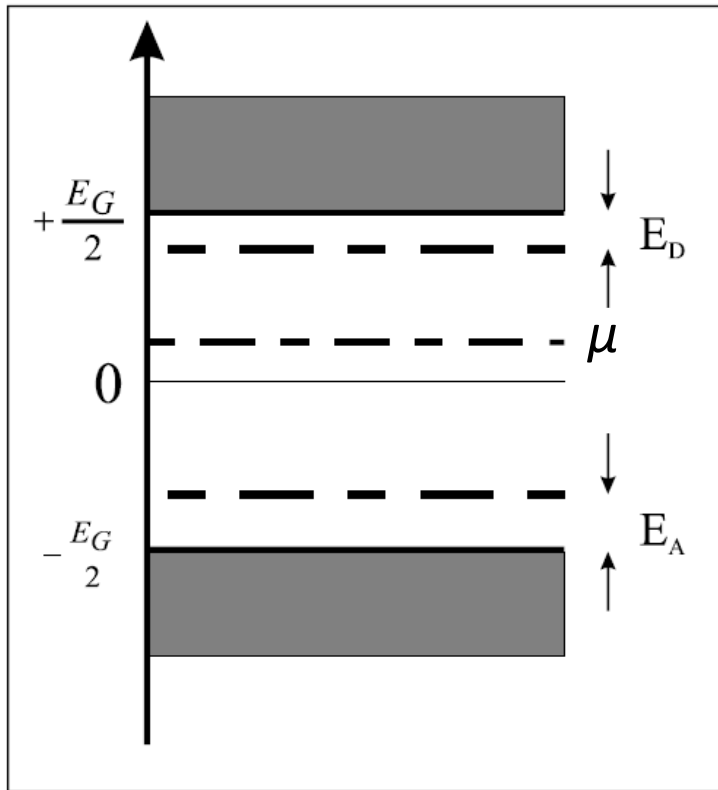
*prawdopodobieństwo
obsadzenia stanu
donorowego*

$$n_d = \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta(E_d - \mu)}}$$

*koncentracja obsadzonych donorów
(donorów neutralnych)*

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności kryształu – przykład: koncentracja nośników w niezdegenerowanym półprzewodniku niesamoistnym



N_D – koncentracja donorów

N_A – koncentracja akceptorów

N_D^0 – koncentracja neutralnych donorów

N_A^0 – koncentracja neutralnych akceptorów

n – koncentracja elektronów w paśmie przewodnictwa

p – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

***Równanie neutralności kryształu
(bilans ładunków ujemnych i dodatnich):***

$$n + (N_A - N_A^0) = p + (N_D - N_D^0)$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

- Jeśli zarówno donory jak i akceptory są płytkie, a gaz elektronowy i dziurowy nie jest zdegenerowany, to:

$$E_D - \mu \gg kT \quad \mu - E_A \gg kT$$

$$N_D^0 \ll N_D \quad N_A^0 \ll N_A$$

– **praktycznie wszystkie domieszki są zjonizowane**

$$\begin{cases} \Delta n = n - p \approx N_D - N_A \\ n \cdot p = n_s^2 \end{cases} \Rightarrow$$

$$n = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_s^2} + \Delta n \right\}$$

$$p = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_s^2} - \Delta n \right\}$$

- Jeśli $\Delta n > 0$ (półprzewodnik typu n – dla typu p rozważania są symetryczne) i $\Delta n \gg n_s$, (w T=300K: $n_s(\text{Ge}) < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $n_s(\text{Si}) < 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, $n_s(\text{GaAs}) < 10^{10} \text{ cm}^{-3}$):

$$n \approx N_D - N_A$$

$$p \approx \frac{n_s^2}{N_D - N_A} = \frac{N_C(T) \cdot N_V(T)}{N_D - N_A} \cdot e^{-\frac{E_G}{kT}}$$

koncentracja nośników większościowych określona przez efektywną koncentrację domieszek, koncentracja nośników mniejszościowych może być bardzo mała (przykład – Si)

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Pojęcie kompensacji

- półprzewodniki kompensowane – zawierające zarówno donory jak i akceptory
- w odpowiednio wysokich temperaturach koncentracja nośników większościowych dana przez efektywną koncentrację domieszek $|N_D - N_A|$
- koncentracja centrów rozpraszających (ładunków): $N_D + N_A$
- współczynnik kompensacji – stosunek koncentracji domieszek mniejszościowych do większościowych:

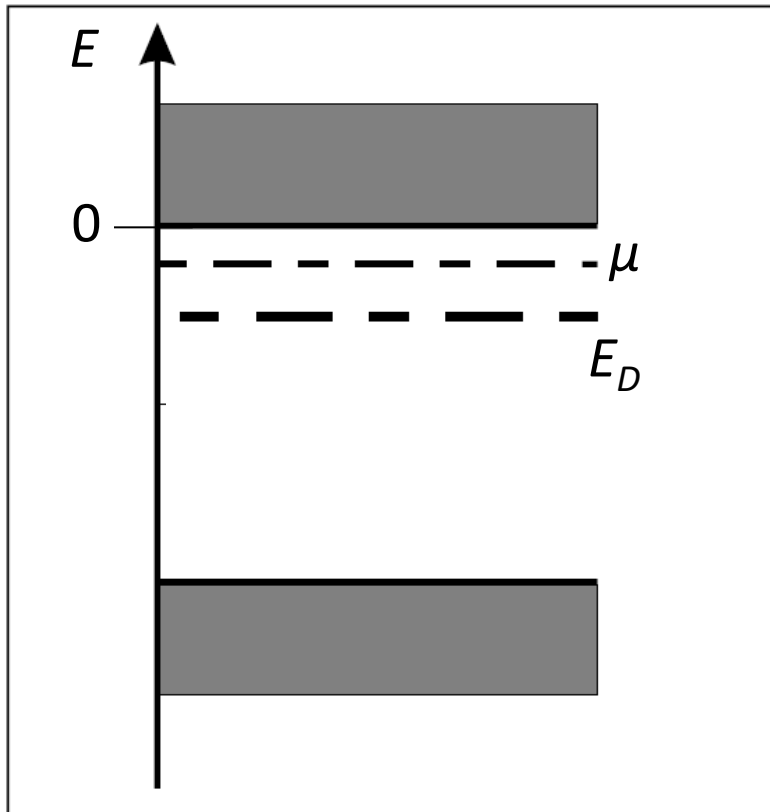
$$k = \frac{N_A}{N_D} \quad \text{– dla typu } n$$

$$k = \frac{N_D}{N_A} \quad \text{– dla typu } p$$

- w półprzewodnikach ***silnie kompensowanych*** ($k \approx 1$) silne ***fluktuacje potencjału elektrostatycznego*** pochodzącego od domieszek, ***lokalizacja związana z nieporządkiem, efekty perkolacyjne***

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności kryształu – niska temperatura, obszar jonizacji termicznej domieszek



N_D – koncentracja donorów

$N_A \approx 0$ – koncentracja akceptorów

N_D^0 – koncentracja neutralnych donorów

n – koncentracja elektronów w paśmie przewodnictwa

$p \approx 0$ – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

Równanie neutralności:

$$n = (N_D - N_D^0)$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

- teraz znaczna część donorów będzie neutralnych (energie liczone od dna pasma przewodnictwa):

$$N_D - N_D^0 = N_D - \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\frac{E_D}{kT} - \frac{\mu}{kT}}} = \frac{N_D}{1 + 2 \cdot e^{-\frac{E_D}{kT} + \frac{\mu}{kT}}} \approx \frac{N_D}{2} \cdot e^{\frac{E_D}{kT} - \frac{\mu}{kT}}$$

- do obliczenia obsadzenia pasma przewodnictwa możemy użyć rozkładu Boltzmann'a:

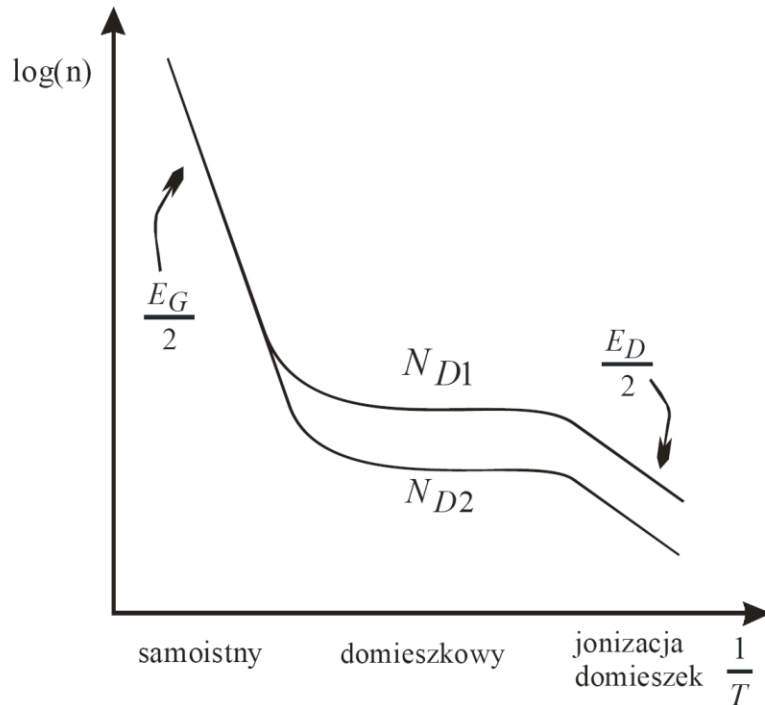
$$n = 2 \left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} = N_C(T) \cdot e^{\frac{\mu}{kT}}$$

co wobec $n = N_D - N_D^0$ daje:

$$\mu = \frac{E_D}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_D}{2N_C(T)} \right) \quad - \text{ dla } T \rightarrow 0 \quad \mu \approx E_D/2 \quad (E_D < 0 !!!)$$

$$n(T) = \sqrt{\frac{N_C(T) \cdot N_D}{2}} \cdot e^{\frac{E_D}{2kT}} \quad - \text{ nachylenie zależności } \ln(n) \text{ vs } 1/T \text{ daje } E_D/2$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

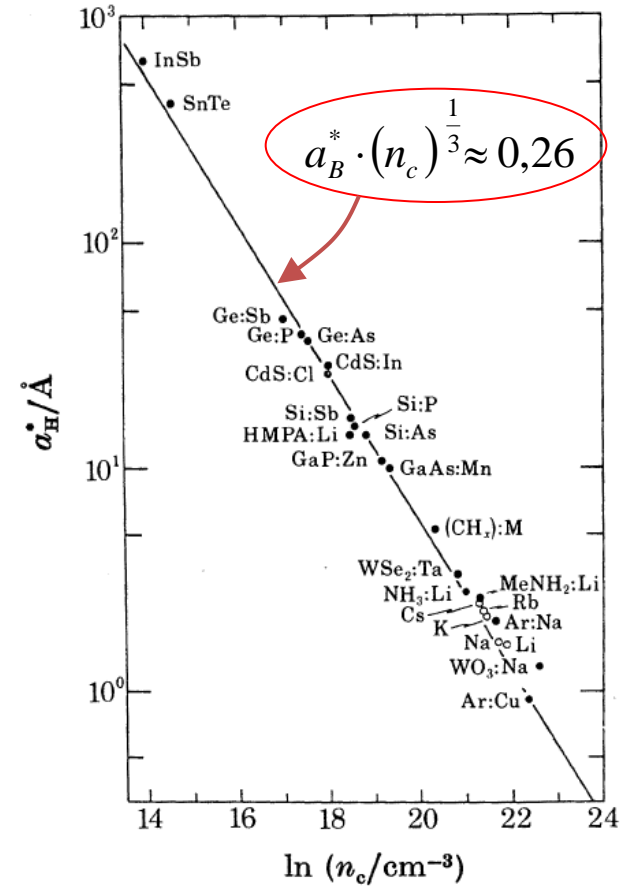
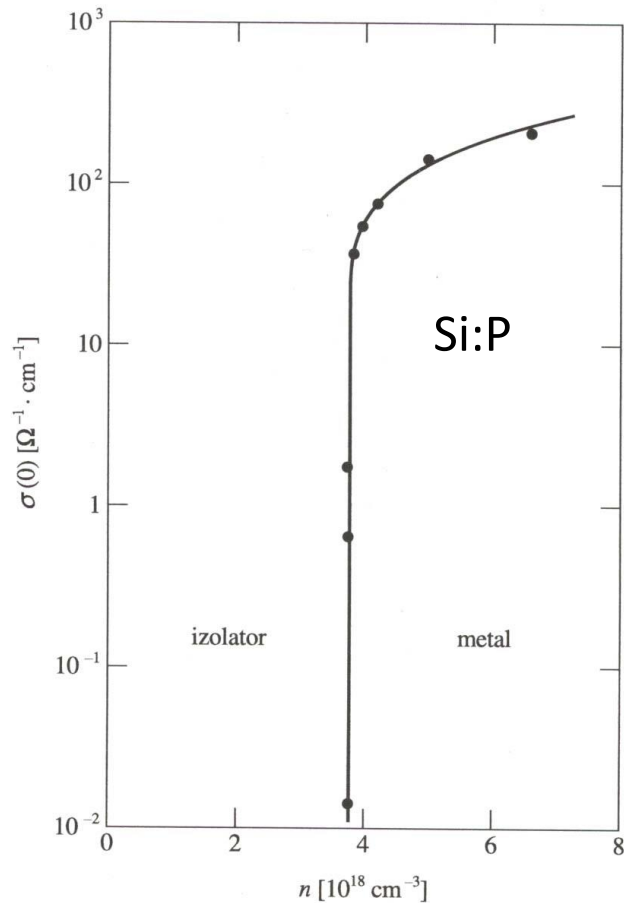


- dla półprzewodników skompensowanych w niskich temperaturach energia aktywacji termicznej wynosi E_D , a nie $E_D/2$
- jeśli domieszek jest dużo, tak, że funkcje falowe związanych na nich elektronów się przekrywają – energie jonizacji maleją, tworzą się pasma domieszkowe
- przy koncentracjach domieszek rzędu:

$$a_B^* \cdot (N_D)^{\frac{1}{3}} \approx 0,26$$

zachodzi **przejście fazowe niemetal-metal (tzw. przejście Motta)**

Obsadzenie poziomów domieszkowych

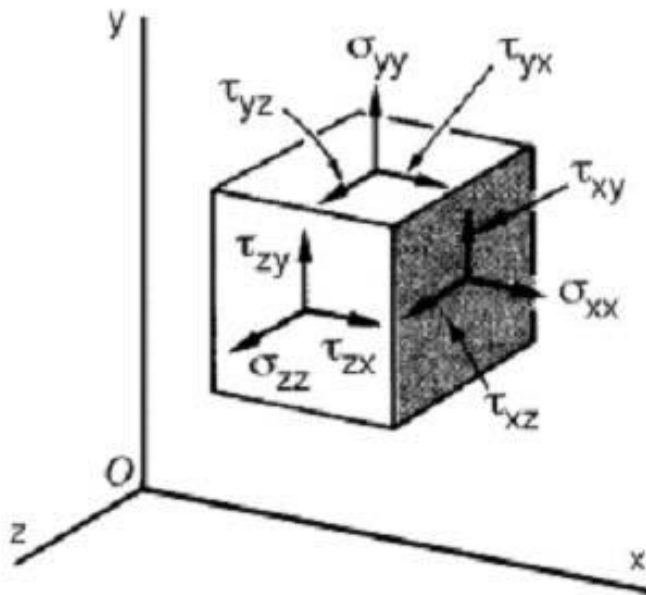


P.P. Edwards, M.J. Sienko, *J. Am. Chem. Soc.* **103**, 2967 (1981)

WŁAŚCIWOŚCI SPRĘŻYSTE CIAŁ STAŁYCH

Własności sprężyste ciał stałych – tensor naprężeń

Tensor naprężeń σ_{ij}



- naprężenie – siła na jednostkę powierzchni
- symetryczny
⇓
- 3 naprężenia osiowe σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} ,
3 ścinania $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$, $\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$, $\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$
(lub $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$, $\tau_{yz} = \tau_{zy}$)
- dla ciśnienia hydrostatycznego:

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix}$$

Własności sprężyste ciał stałych – tensor naprężeń

Notacja Voigta

$$\sigma_{ij} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix}$$

zastępujemy tensor
drugiego rzędu
wektorem

konwencja:

$$11 \rightarrow 1; \quad 22 \rightarrow 2; \quad 33 \rightarrow 3; \quad 23 \rightarrow 4; \quad 13 \rightarrow 5; \quad 12 \rightarrow 6;$$

Własności sprężyste ciał stałych – tensor naprężeń

Tensor odkształceń (deformacji) ε_{ij}

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

gdzie \vec{u} – wektor przemieszczenia
wywołany deformacją

$$\varepsilon_{ij} \rightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 1/2 \cdot \varepsilon_6 & 1/2 \cdot \varepsilon_5 \\ 1/2 \cdot \varepsilon_6 & \varepsilon_2 & 1/2 \cdot \varepsilon_4 \\ 1/2 \cdot \varepsilon_5 & 1/2 \cdot \varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix}$$

znowu zastępujemy
tensor drugiego rzędu
wektorem (*uwaga na 1/2
w definicji !*)

Własności sprężyste ciał stałych – liniowa teoria sprężystości

Liniowa teoria sprężystości (prawo Hooke'a)

- Tensory naprężeń i odkształceń są powiązane relacjami liniowymi (stosujemy konwencję sumowania po powtarzających się wskaźnikach):

$$\varepsilon_{kl} = S_{kl ij} \sigma_{ij} \quad \text{lub:} \quad \sigma_{kl} = C_{kl ij} \varepsilon_{ij}$$

gdzie $S_{kl ij}$ i $C_{kl ij}$ są tensorami 4 rzędu – odpowiednio: tensor podatności sprężystej i tensor sztywności sprężystej (tensor modułów sprężystości)

- Ponieważ σ_{ij} i ε_{ij} są symetryczne, to: $C_{kl ij} = C_{lk ij} = C_{kl ji}$ (podobnie dla $S_{kl ij}$)
- Żądanie jednoznaczności gęstości energii sprężystej:

$$u = \frac{1}{2} C_{kl ij} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{ij}$$

prowadzi do: $C_{kl ij} = C_{ij kl}$



$C_{kl ij}$ i $S_{kl ij}$ mają co najwyżej po 21 niezależnych współczynników

Własności sprężyste ciał stałych – macierze sprężystości

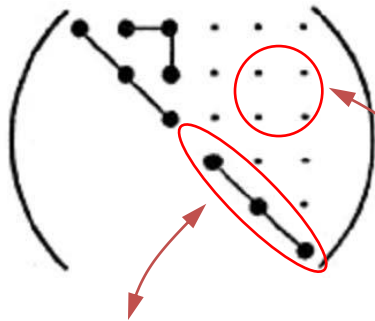
- Stosując konsekwentnie notację Voigta otrzymujemy:

$$\varepsilon_i = S_{ij} \sigma_j \qquad \sigma_i = C_{ij} \varepsilon_j$$

gdzie σ_i i ε_i są 6-wymiarowymi wektorami odpowiednio naprężeń i odkształceń, zaś S_{ij} i C_{ij} są macierzami 6x6 odpowiednio współczynników podatności sprężystej i modułów sprężystości (współczynników sztywności)

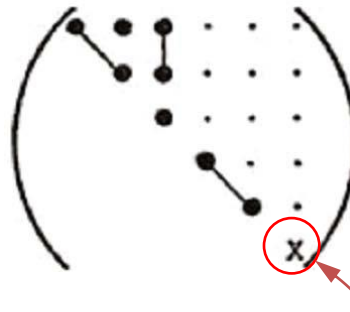
- Macierze sprężystości S_{ij} i C_{ij} :

struktura kubiczna (3)



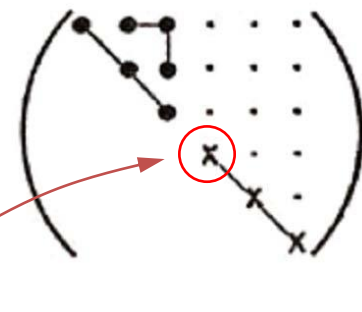
współczynniki jednakowe

struktura heksagonalna (5)



równe odpowiednio $2(S_{11}-S_{12})$ lub $\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$

ciało izotropowe (2)



Własności sprężyste ciał stałych – macierze sprężystości

- W ogólności współczynniki macierzy S_{ij} i C_{ij} można wyrazić przez siebie poprzez odwrócenie macierzy

- Dla struktury regularnej:

$$\begin{cases} C_{44} = S_{44}^{-1} \\ C_{11} - C_{12} = (S_{11} - S_{12})^{-1} \\ C_{11} + 2C_{12} = (S_{11} + 2S_{12})^{-1} \end{cases}$$

- Ścisłość dla struktury regularnej.** Ciśnienie hydrostatyczne:

$$\sigma_i = \begin{bmatrix} -p \\ -p \\ -p \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \varepsilon_i = -p \cdot \begin{bmatrix} S_{11} + 2S_{12} \\ S_{11} + 2S_{12} \\ S_{11} + 2S_{12} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \frac{\Delta V}{V} = -p \cdot 3(S_{11} + 2S_{12})$$

ściśłość:

$$\kappa = -\frac{1}{V} \cdot \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = 3(S_{11} + 2S_{12})$$

moduł sprężystości objętościowej:

$$B = \kappa^{-1} = \frac{1}{3} (S_{11} + 2S_{12})^{-1}$$

Własności sprężyste ciał stałych – macierze sprężystości

- Moduł Younga E i współczynnik Poissona ν dla struktury regularnej.*

Napężenie osiowe:

$$\sigma_i = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \varepsilon_i = \sigma_1 \cdot \begin{bmatrix} S_{11} \\ S_{12} \\ S_{12} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{aligned} \varepsilon_1 &= \sigma_1 \cdot S_{11} = \frac{\sigma_1}{E} \\ \varepsilon_2 &= \varepsilon_3 = \sigma_1 \cdot S_{12} = -\nu \cdot \varepsilon_1 \end{aligned}$$

\Downarrow

moduł Younga:

$$E = \frac{1}{S_{11}}$$

współczynnik Poissona:

$$\nu = -\frac{S_{12}}{S_{11}}$$

Własności sprężyste ciał stałych – macierze sprężystości

- Moduł ścinania G dla struktury regularnej.** Naprężenie ścinające:

$$\sigma_i = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \Rightarrow \varepsilon_i = \sigma_6 \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ S_{44} \end{bmatrix} \Rightarrow \varepsilon_6 = \sigma_6 \cdot S_{44} = \frac{\sigma_6}{G}$$

moduł ścinania:

$$G = \frac{1}{S_{44}}$$

struktura regularna:

$E = \frac{1}{S_{11}}$	$\nu = -\frac{S_{12}}{S_{11}}$	$B = \kappa^{-1} = \frac{1}{3}(S_{11} + 2S_{12})^{-1} = \frac{E}{3(1-2\nu)}$	$G = \frac{1}{S_{44}}$
------------------------	--------------------------------	------------------------------------------------------------------------------	------------------------

ciało izotropowe:

$E = \frac{1}{S_{11}}$	$\nu = -\frac{S_{12}}{S_{11}}$	$B = \kappa^{-1} = \frac{1}{3}(S_{11} + 2S_{12})^{-1} = \frac{E}{3(1-2\nu)}$	$G = \frac{E}{2(1+\nu)}$
------------------------	--------------------------------	------------------------------------------------------------------------------	--------------------------

Własności sprężyste ciał stałych

Ciśnienia hydrostatyczne:

- zmieniają strukturę pasmową (energie stanów, a więc np. przerwy energetyczne, masy efektywne etc.)

Naprężenia osiowe, planarne etc.:

- mogą zmieniać symetrię, co prowadzi do rozszczepień stanów zdegenerowanych (np. pasm walencyjnych w strukturze diamentu i blendy cynkowej, bocznych minimów pasm przewodnictwa, stanów domieszkowych etc. etc.)

Potencjał deformacyjny:

- Zmiana energii danego stanu pod wpływem deformacji jest w przybliżeniu liniowym proporcjonalna do deformacji, np. zmiana energii ekstremum pasma pod wpływem deformacji zmieniającej objętość:

$$\delta E_{nk} = a_{nk} \left(\frac{\delta V}{V} \right)$$

podobnie dla innych deformacji, w tym ścinających

Własności sprężyste ciał stałych

– efekt piezoelektryczny

W kryształach bez środka inwersji naprężenia prowadzą do zjawisk piezoelektrycznych:

$$D_i = d_{ijk} \sigma_{jk} + \epsilon_{ij} E_j$$

Przyczynik od efektu piezoelektrycznego

\vec{D} – wektor indukcji elektrycznej
 \vec{E} – wektor natężenia pola elektr.
 ϵ_{ij} – tensor przenikalności elektr.

W notacji Voigta dla kryształu o strukturze wurcytu:

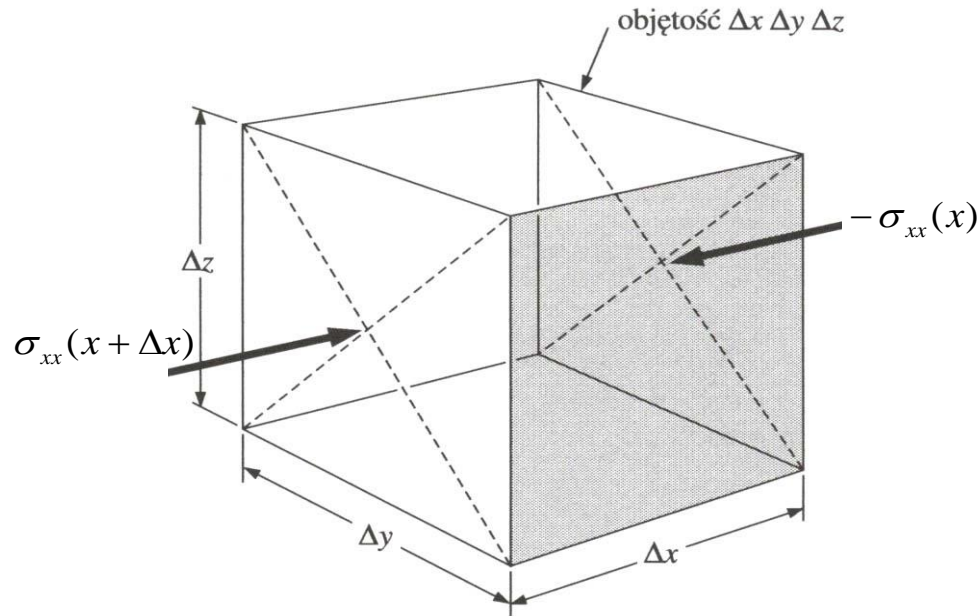
$$\begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix}$$

Macierz współczynników piezoelektrycznych

FALE SPRĘŻYSTE W OŚRODKACH CIAĞŁYCH

Fale sprężyste w ośrodkach ciągłych

Spróbujmy napisać *równanie ruchu* dla kostki o wymiarach $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$



- x -owa składowa siły działającej na powierzchnie prostopadłe do osi x :

$$F_{xx} = [\sigma_{xx}(x + \Delta x) - \sigma_{xx}(x)] \cdot \Delta y \Delta z \approx \frac{\partial \sigma_{xx}(x)}{\partial x} \cdot \Delta x \Delta y \Delta z$$

Fale sprężyste w ośrodkach ciągłych

- analogicznie można napisać dla x-owych składowych sił działających na **pozostałe powierzchnie**, co prowadzi do wyrażenia na x-ową składową siły wypadkowej:

$$F_x = \left(\frac{\partial \sigma_{xx}(x)}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}(x)}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}(x)}{\partial z} \right) \cdot \Delta x \Delta y \Delta z$$

- Równanie ruchu na x-ową składową wektora wychylenia $\vec{u}(\vec{r}, t)$

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} \quad \rho - \text{gęstość}$$

- Składowe tensora naprężeń σ_{ij} , w ramach liniowej teorii sprężystości dają się wyrazić przez składowe tensora odkształceń ε_{ij} (które z kolei są odpowiednimi pochodnymi wychyleń u_i):

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

oraz macierz współczynników sztywności C_{ij}

Fale sprężyste w ośrodkach ciągłych

- Dla różnych kryształów otrzymane wzory będą się różniły; **dla kryształu kubicznego** otrzymuje się:

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} \right)$$

są to klasyczne równania falowe

Fale sprężyste w ośrodkach ciągłych

- **Fale rozchodzące się w kierunku [100]:** $\vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}_0 e^{i(kx - \omega t)}$



$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2}$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = C_{44} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2}$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = C_{44} \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2}$$

– fala podłużna poruszająca się z prędkością $v_{\parallel} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}$

– 2 zdegenerowane fale poprzeczne poruszające się z prędkością

$$v_{\perp} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} < v_{\parallel}$$

prędkość fal poprzecznych jest mniejsza

Fale sprężyste w ośrodkach ciągłych

- Fale rozchodzące się w kierunku [110]:** $\vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}_0 e^{i\left(\frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}} - \omega t\right)}$



$$\left. \begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + (C_{12} + C_{44}) \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} \\ \rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} &= C_{11} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + C_{44} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + (C_{12} + C_{44}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} \\ \rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} &= C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \right\}$$

– fala podłużna poruszająca się z prędkością $v_{\parallel} = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}}$ oraz fala poprzeczna $\vec{u}_0 \parallel [1 \bar{1} 0]$ poruszająca się z prędkością

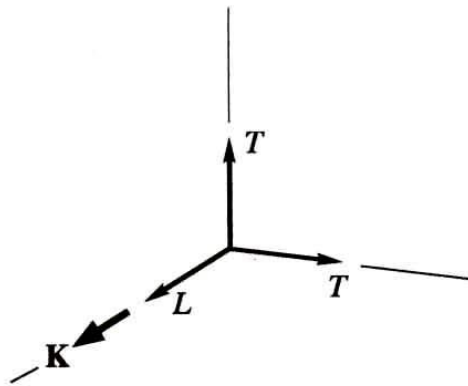
$$v_{1\perp} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}}$$

fala poprzeczna $\vec{u}_0 \parallel [001]$ poruszająca się z prędkością

$$v_{2\perp} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$$

Wyznaczenie 3 prędkości fal rozchodzących się w kierunku [110] umożliwia wyznaczenie wszystkich współczynników C_{ij}

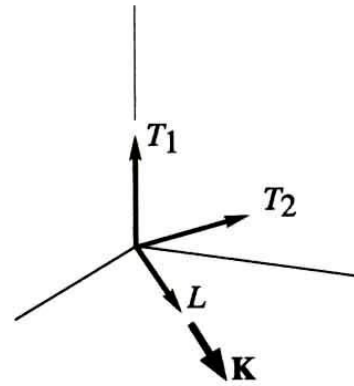
Fale sprężyste w ośrodkach ciągłych



fala w kierunku [100]

$$L : C_{11}$$

$$T : C_{44}$$

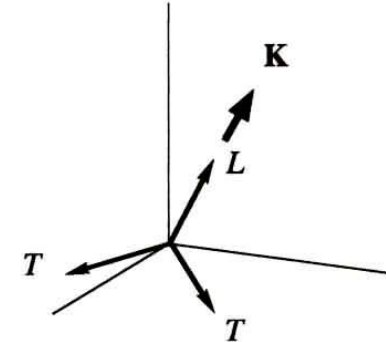


fala w kierunku [110]

$$L : \frac{1}{2} (C_{11} + C_{12} + 2C_{44})$$

$$T_1 : C_{44}$$

$$T_2 : \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12})$$



fala w kierunku [111]

$$L : \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})$$

$$T : \frac{1}{3} (C_{11} - C_{12} + C_{44})$$

Rys. 20. Efektywne moduły sprężystości dla trzech rodzajów fal sprężystych, rozchodzących się wzdłuż trzech głównych kierunków w kryształach o strukturze regularnej. Dwie fale poprzeczne, które rozchodzą się w kierunkach [100] i [111], są zdegenerowane

Ch. Kittel, „Wstęp do fizyki ciała stałego”

Fale sprężyste w ośrodkach ciągłych

Podsumowanie:

- Dla każdego kierunku rozchodzenia się fali (wektora propagacji) istnieją 3 rodzaje fal – 1 „podłużna” i 2 „poprzeczne” z klasycznymi (liniowymi) relacjami dyspersyjnymi
- W ogólności wszystkie te fale mają różne prędkości
- Czasami fale poprzeczne są zdegenerowane (tzn. mają te same prędkości, a więc i takie same relacje dyspersyjne)
- Dla dowolnego kierunku propagacji fale *nie są ani ściśle podłużne, ani ściśle poprzeczne*