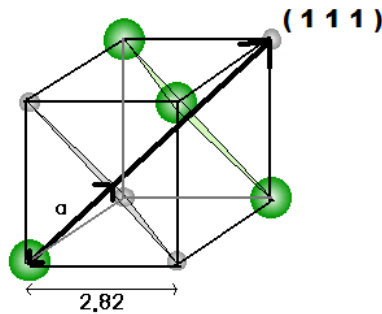


Optische en akoestische fononen in keukenzout

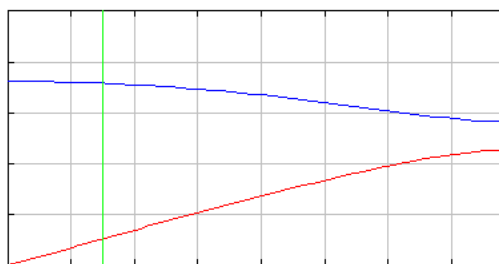
In deze opgave gaan we de fonondispersierelatie van natriumchloride bekijken. Natriumchloride zit in een fcc structuur zoals hieronder in een figuur is geschetst. Wanneer we kijken naar fononen in de richting $(1\ 1\ 1)$, aangegeven met een pijl in de figuur, dan komt het fonon om en om een vlak met ionen van één soort tegen. We kunnen in dit geval het systeem bekijken alsof het een 1-dimensionaal tweeatomig systeem is. De twee atomen zitten dan gerangschikt op een onderlinge afstand a en hebben een verschillende massa M_1 en M_2 . De krachtsconstante C tussen de atomen in dit model bedraagt 45 N/m .



a) We hebben aangenomen voor ons model dat op de plek waar de pijl een vlak loodrecht snijdt, een ion zit. De afstand a is aangegeven in het figuur. De afstand tussen een natrium- en chloride-ion is $2,82\text{ \AA}$, deze afstand is de helft van de roosterconstante van onze fcc structuur. Reken met behulp van bovenstaand figuur de waarde van a in ons model uit.

b) Geef de dispersierelatie voor de akoestische en optische tak van dit systeem voor het geval wanneer $ka \ll 1$.

Hieronder is een schets te zien van de volledige dispersierelatie. De (groene) verticale lijn is een referentie voor figuren later in deze opgave.



c) Geef de grootheden en eenheden van beide assen aan. Geef ook de maximale waarde van de horizontale as aan in de grafiek.

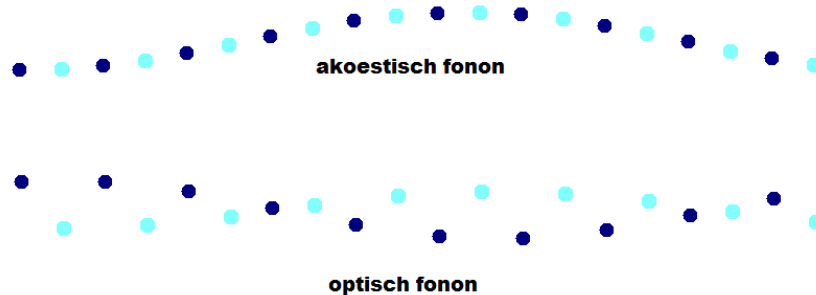
De snelheid waarmee een fonon zich voortbeweegt wordt gegeven door $\nu = \frac{d\omega}{dk}$.

d) Bereken de snelheid in meter per seconde waarmee een akoestisch fonon zich voortbeweegt voor $ka \ll 1$. U mag er vanuit gaan dat alle natriumionen een atomaire massa hebben van 23 u en alle chloorionen een atomaire massa van 35 u met u de atomaire massa-eenheid gelijk aan $1.66 \cdot 10^{-27}\text{ kg}$.

Een geluidsgolf in een materiaal bestaat uit een pakketje van fononen van verschillende grote golflengtes, groot wil zeggen dat de golflengtes vele malen groter zijn dan de waarde a .

e) Leg uit of je kunt verwachten dat dit materiaal een geluidsgolf goed of slecht propageert. Bedenk hierbij wat goed propageren moet betekenen voor het gehele golfpakketje en op welke plek je in de dispersierelatie zit met grote golflengtes.

Voor de k -waarde aangegeven met de groene verticale lijn in het figuur hierboven is op de volgende pagina een grafische weergave gegeven van de ionbewegingen bij de twee verschillende twee fononen. De uitwijking uit de evenwichtstand is weergegeven als een uitwijking loodrecht op de keten. De ionen bewegen in werkelijkheid alleen langs de 1-dimensionale as.



f) Bereken de energie in Joule van een optisch fonon bij $k = 0$.

Optische fononen hebben hun naam te danken aan het feit dat ze bij ionische roosters aangeslagen kunnen worden door infrarood licht. Ze kunnen worden aangeslagen omdat een optische fonon binnen een eenheidscel (in dit geval het natrium- en chloride-ion) voor een faseverschil tussen de ionen zorgt en daarmee een dipoolmoment creëert. Dit in tegenstelling tot een akoestisch fonon, waarbij de ionen binnen een eenheidscel in fase bewegen.

g) Leg uit aan de hand van bovenstaande figuren waarom een optisch fonon een faseverschil binnen de eenheidscel van ons systeem van natriumchloride een dipoolmoment veroorzaakt en dat een akoestisch fonon dit niet doet. Reken ook de golflengte van het licht uit corresponderend met de energie uitgerekend bij het fonon van f) en concludeer dat dit inderdaad infrarood licht betreft.

De dispersierelatie van kristalstructuren levert informatie op of een lichtgolf met een bepaalde golflengte wordt geabsorbeerd door het materiaal en wordt omgezet in fononen. Als een lichtgolf niet wordt geabsorbeerd, dan wordt het gereflecteerd of is het materiaal transparant voor deze golflengte. Toch is enkel en alleen de dispersierelatie voor fononen niet genoeg om te kunnen voorspellen of een stof transparant zal zijn voor een bepaalde golflengte, omdat licht bijvoorbeeld ook elektronen aan kan slaan binnen een atoom.

Voor een grafische weergave van tweeatomig 1-dimensionale systemen is de volgende applet inzichtelijk:

<http://dept.kent.edu/projects/ksuviz/leeviz/phonon/phonon.html>