

# Ταλαντώσεις ατόμων σε στερεά

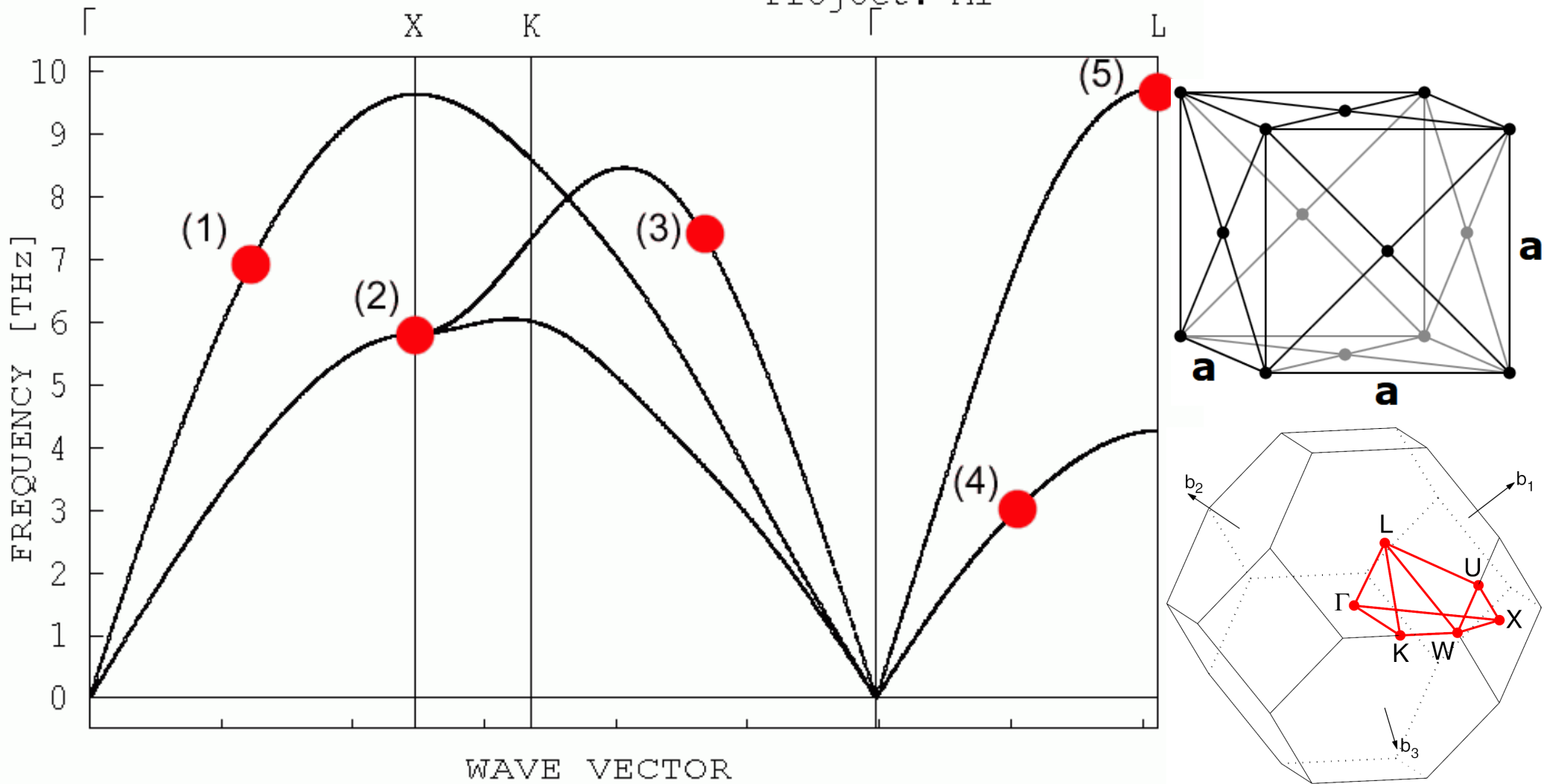
Πέρα από την προσέγγιση του ομοιογενούς υλικού (Debye, Jellium).

# Ταλαντώσεις για $q \rightarrow 0$

- $q = 2\pi / \lambda$  άρα μικρό  $q \leftrightarrow$  μεγάλο  $\lambda$  άρα περιμένω το στερεό να φαίνεται ομοιογενές και να ισχύει το μοντέλο Debye.
- Αρμονικές ταλαντώσεις,  $u = u_0 \cos(qx - \omega t)$ ,
- $\omega = cq$  με διαφορετικά, εν γένει,  $c$  για κάθε είδος ταλάντωσης (εγκάρσια, διαμήκης).

<http://www.phonon.fc.pl/>

Project: Al

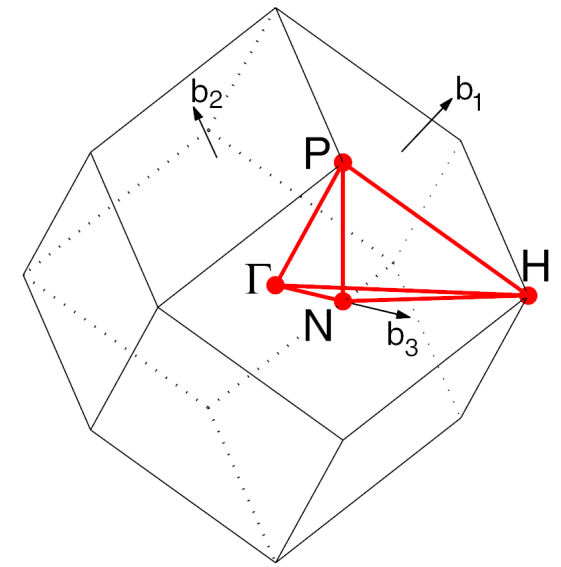
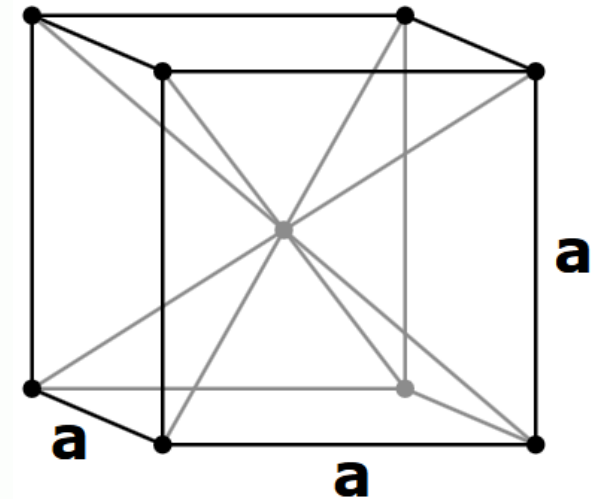
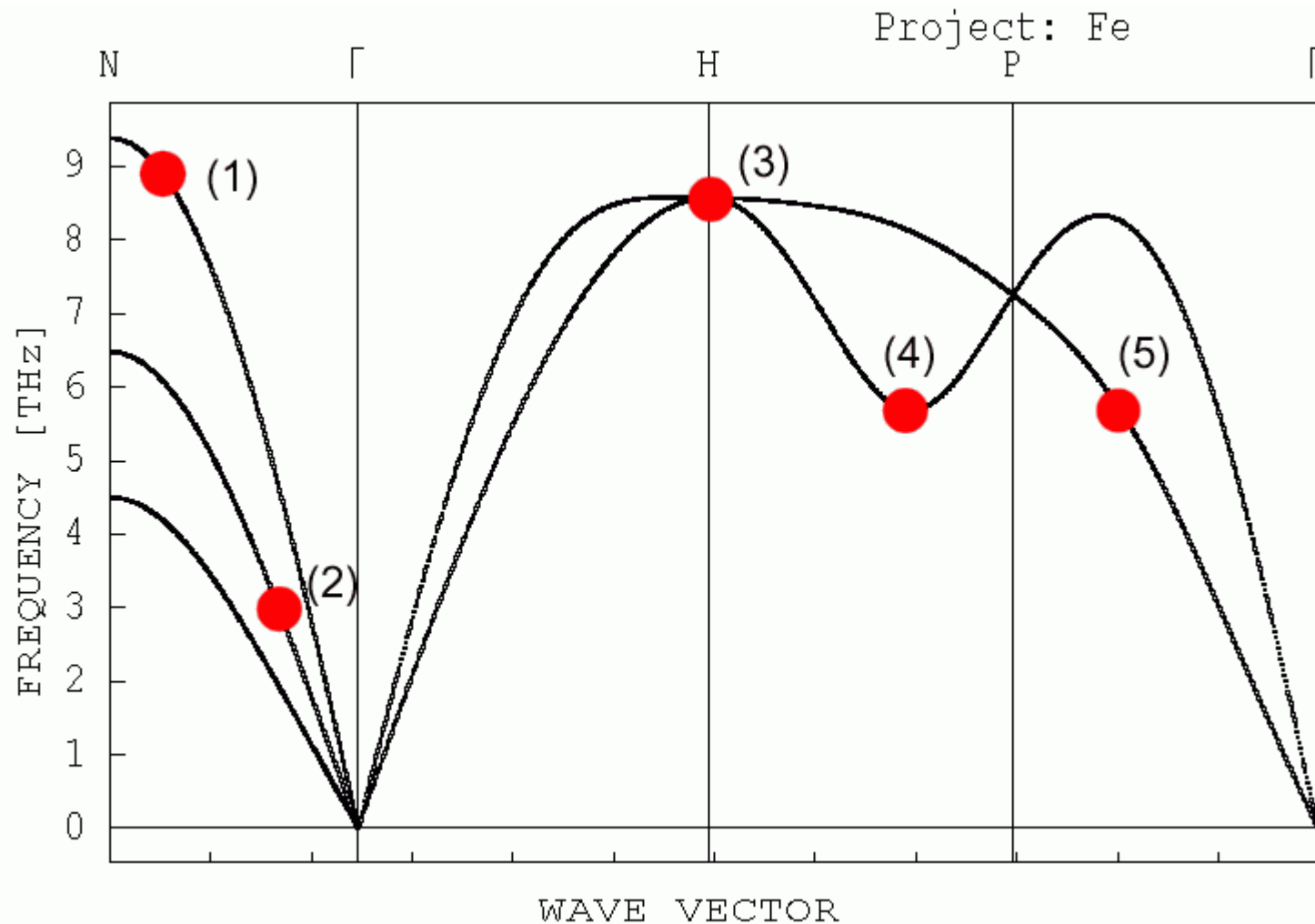


TA, LA, LO (TO) phonons

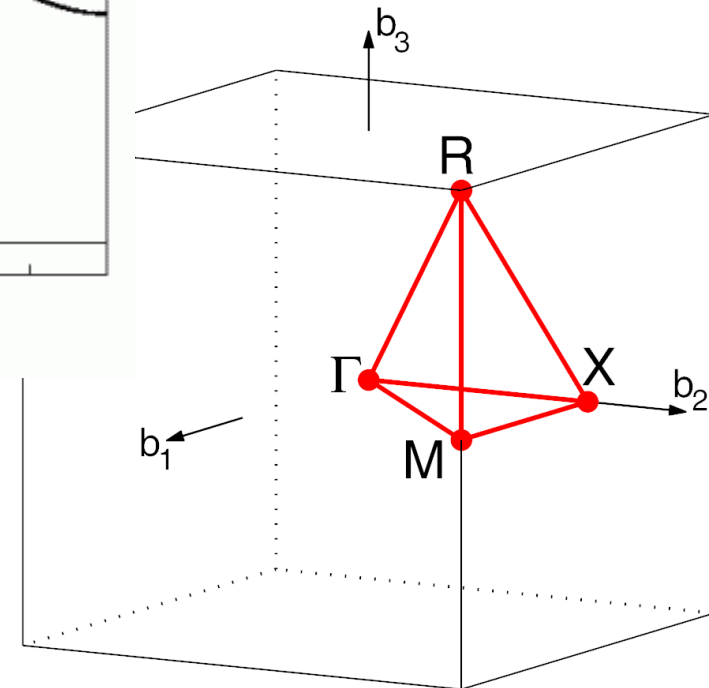
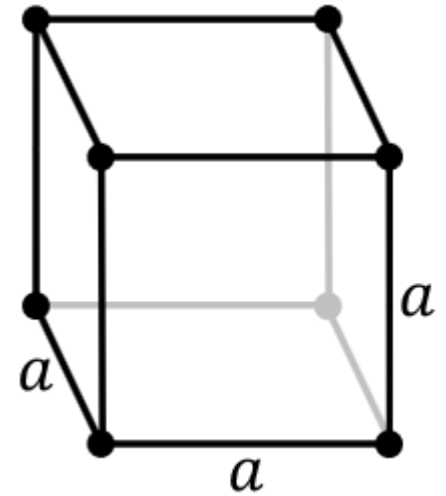
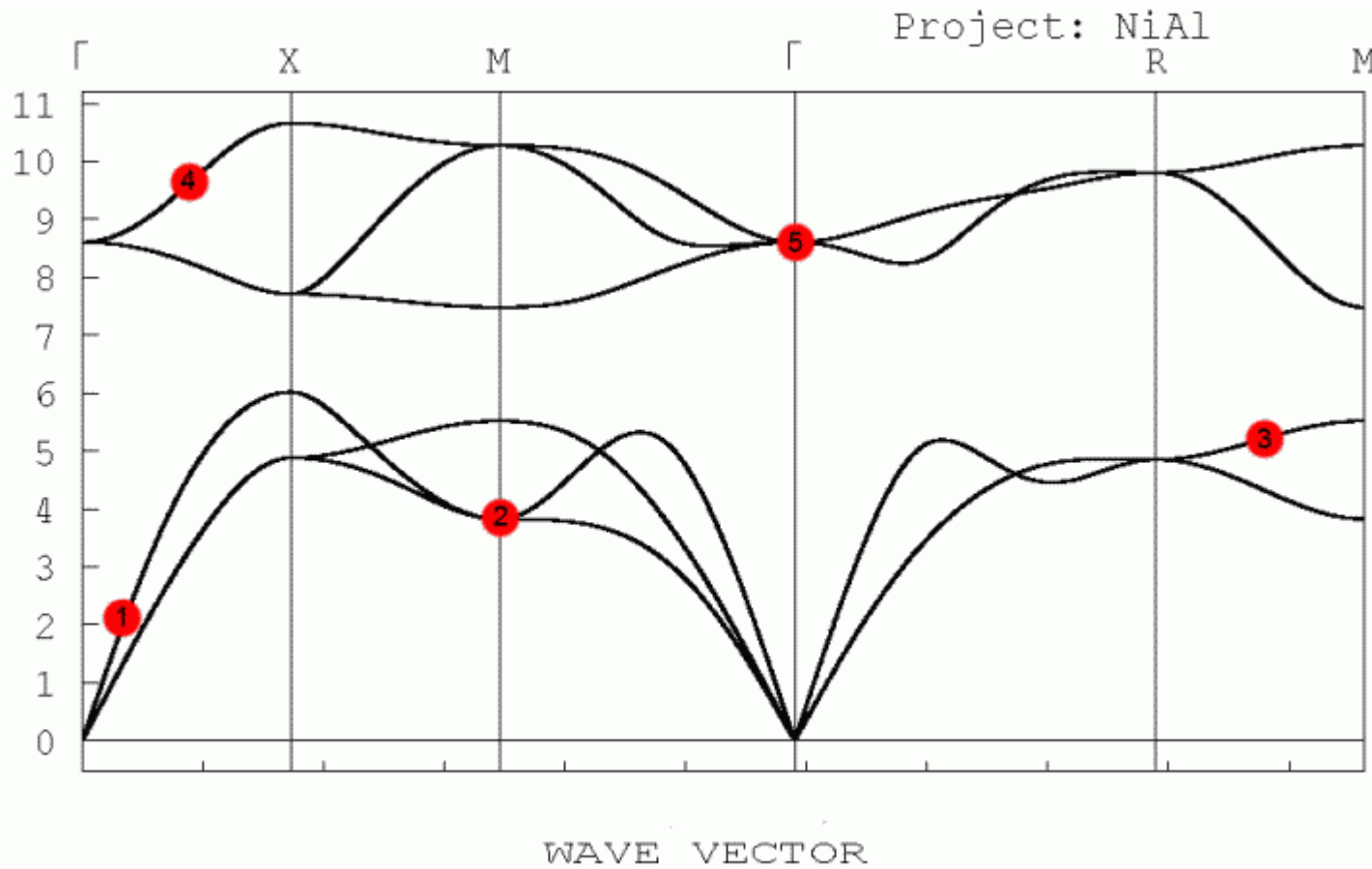
FCC path:  $\Gamma$ -X-W-K- $\Gamma$ -L-U-W-L-K|U-X

[Setyawan & Curtarolo, DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.05.010]

<http://www.phonon.fc.pl/>



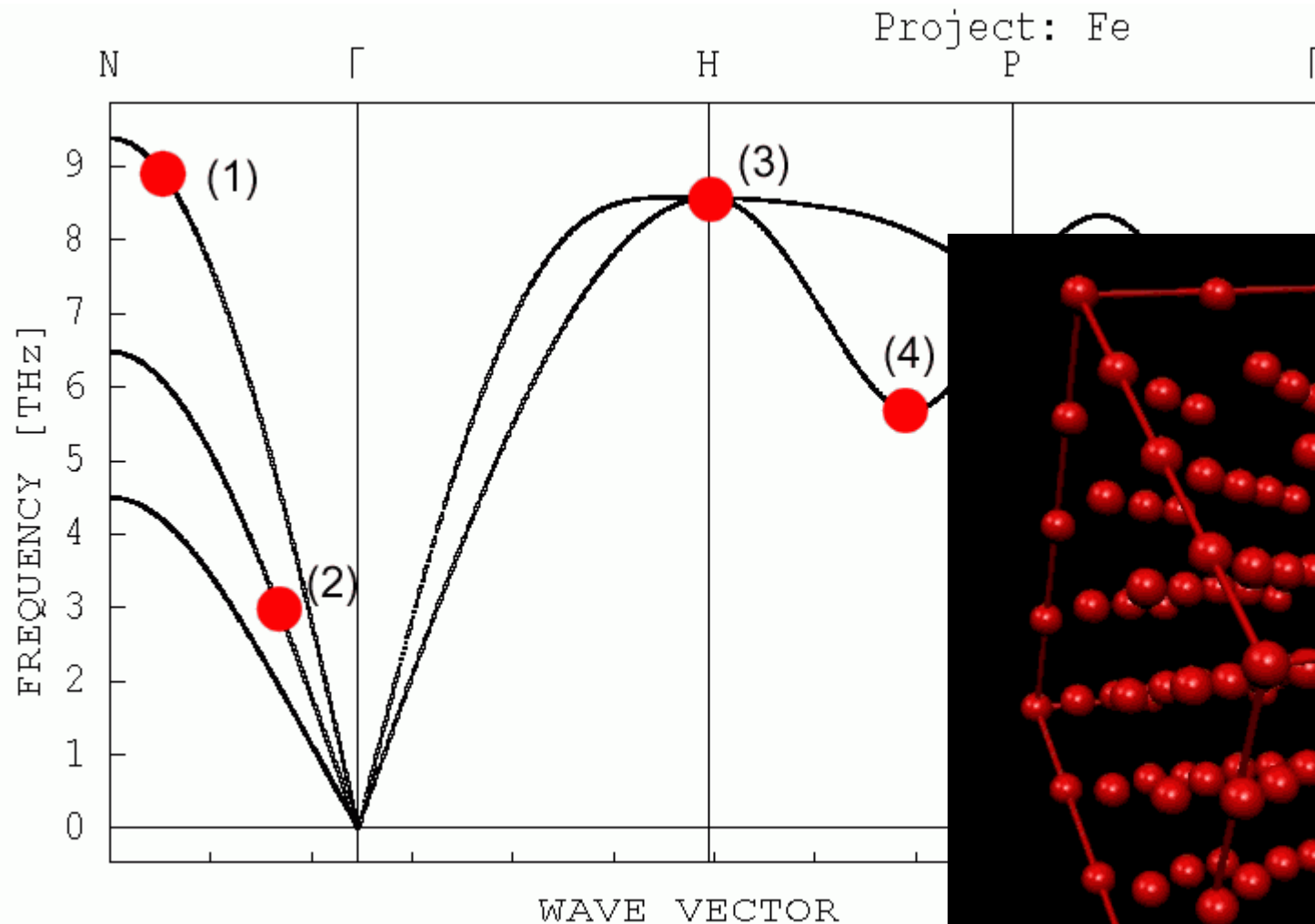
<http://www.phonon.fc.pl/>



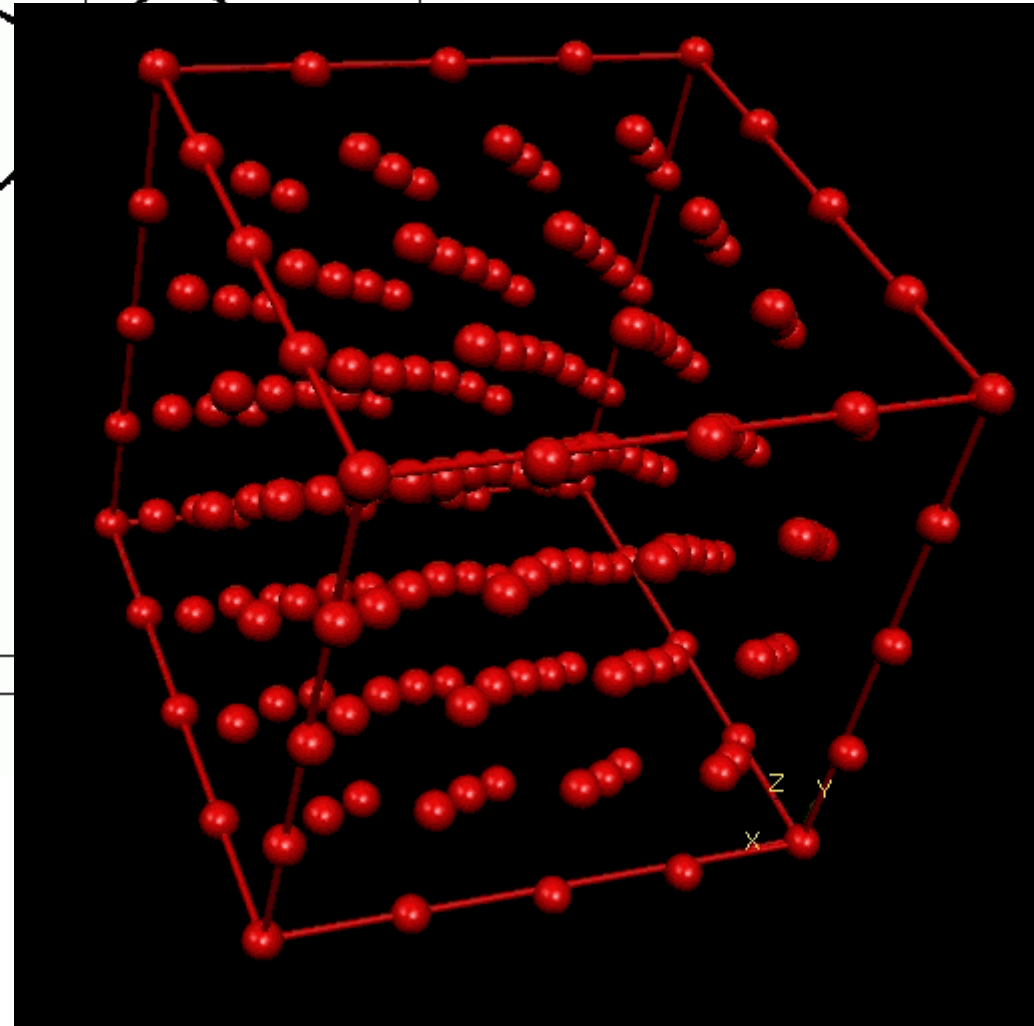
NiAl has same structure as CsCl.

Locate the TA, LA, O phonons!

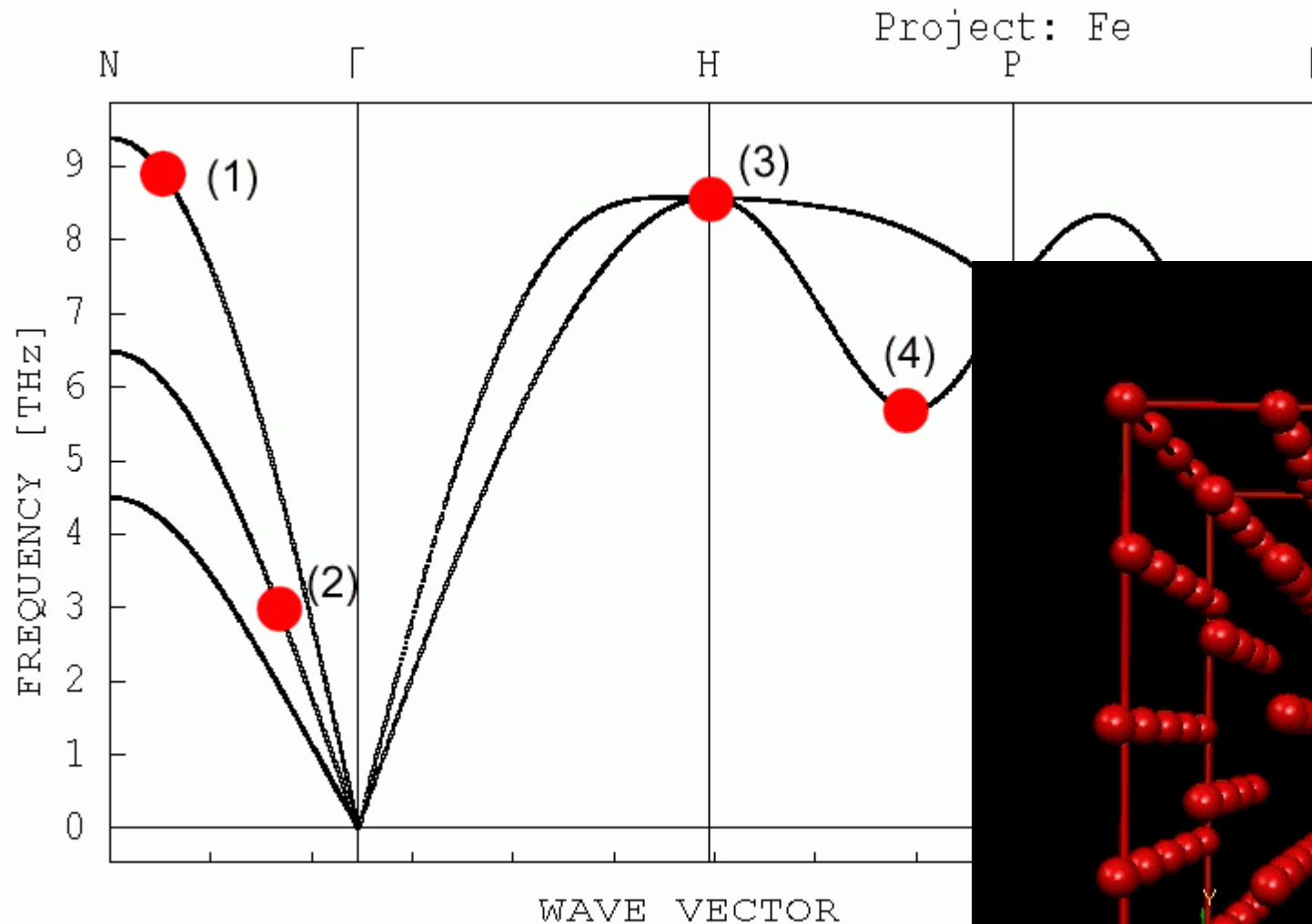
<http://www.phonon.fc.pl/>



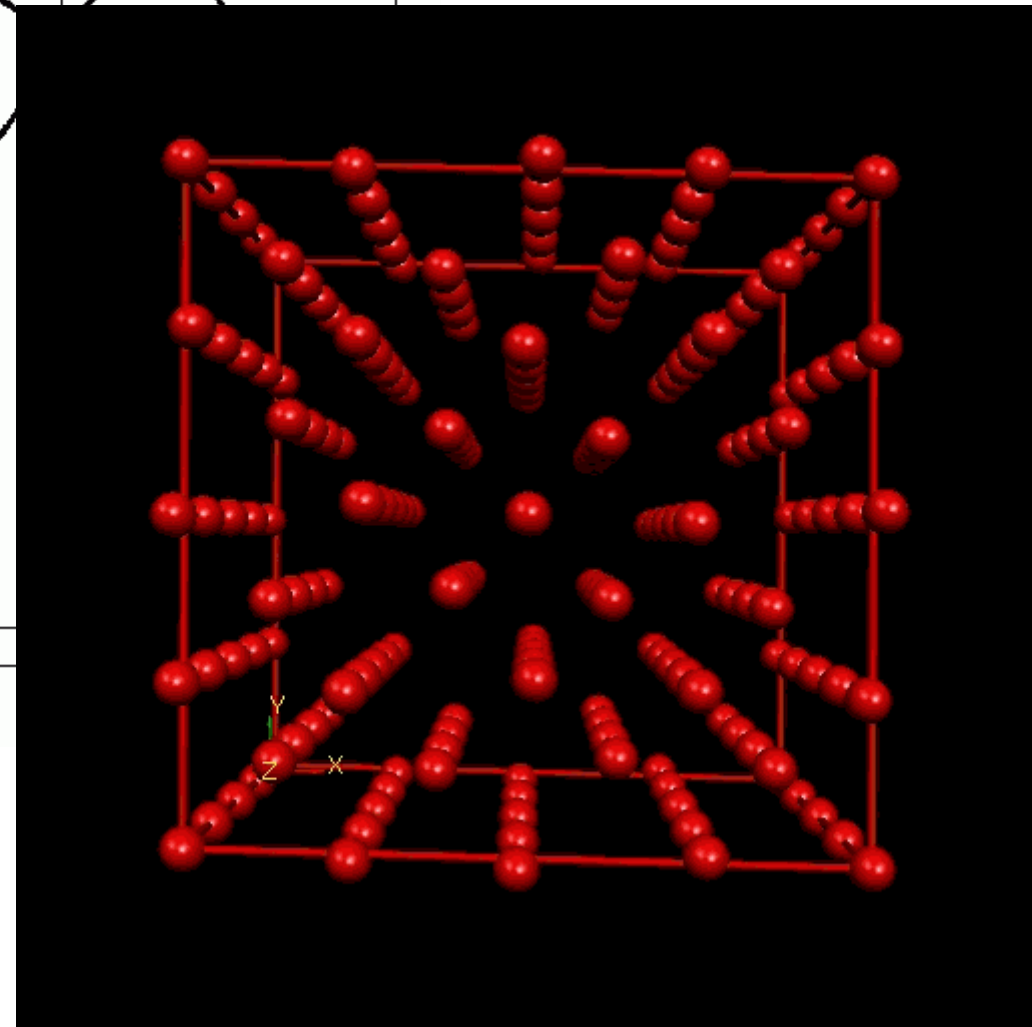
Point 2 (TA)



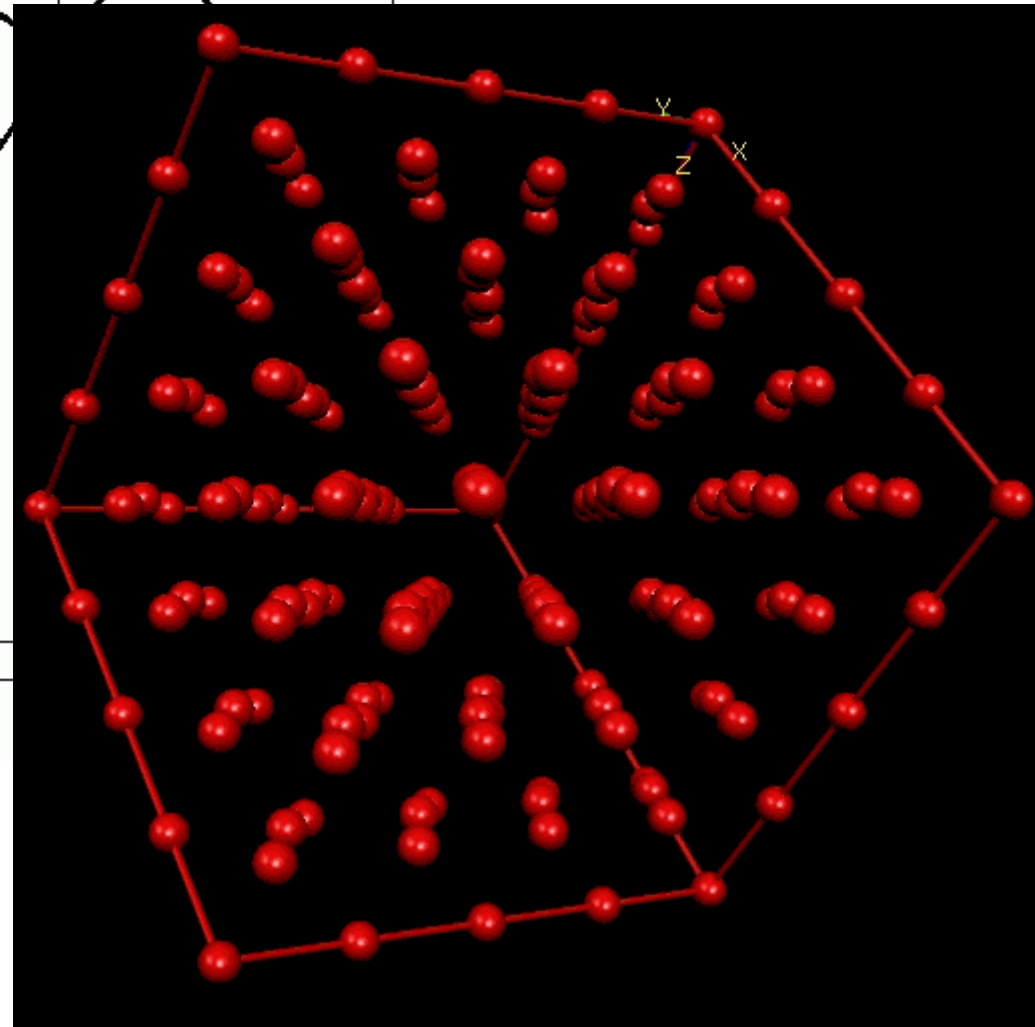
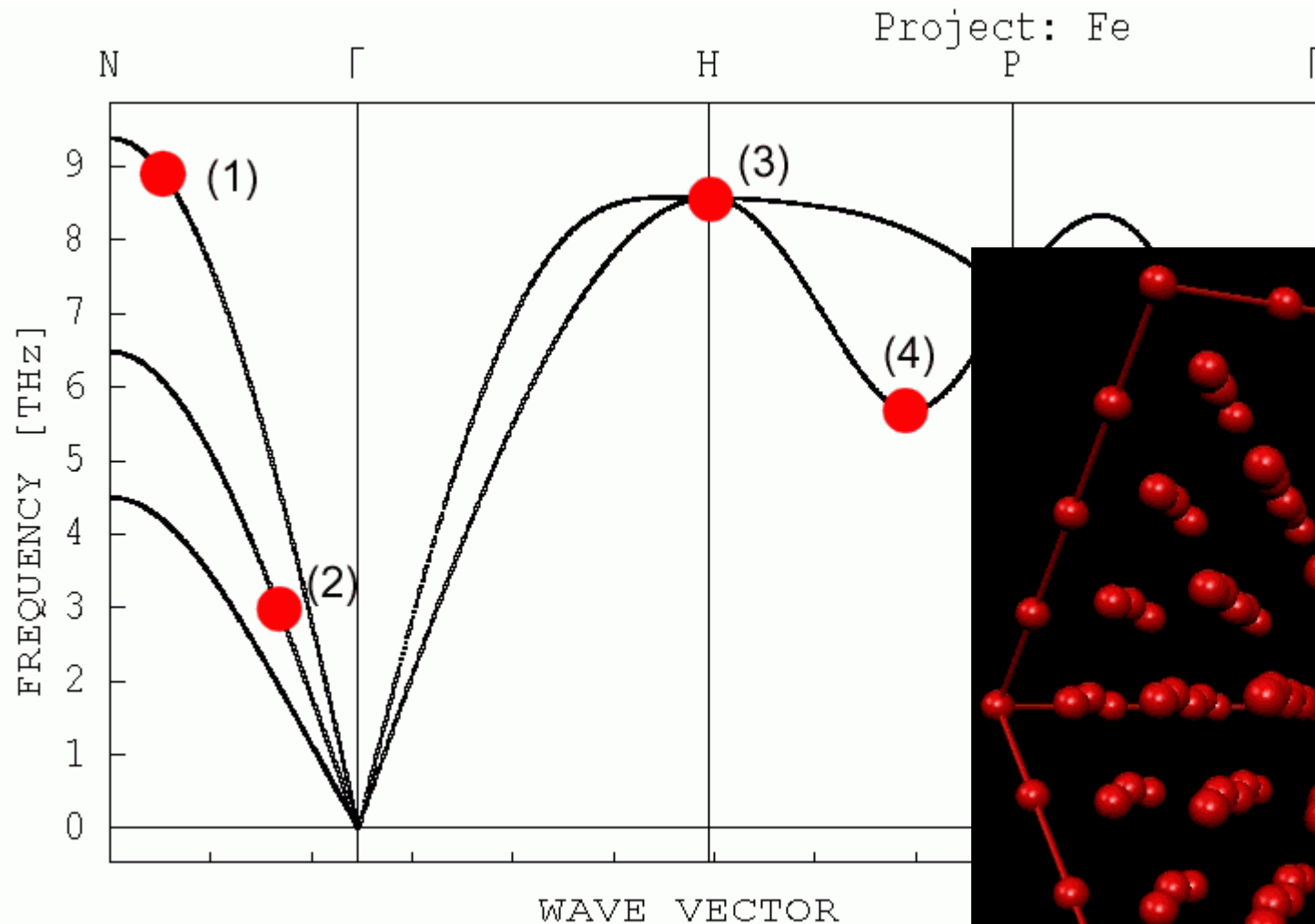
<http://www.phonon.fc.pl/>



Point 1 (LA)



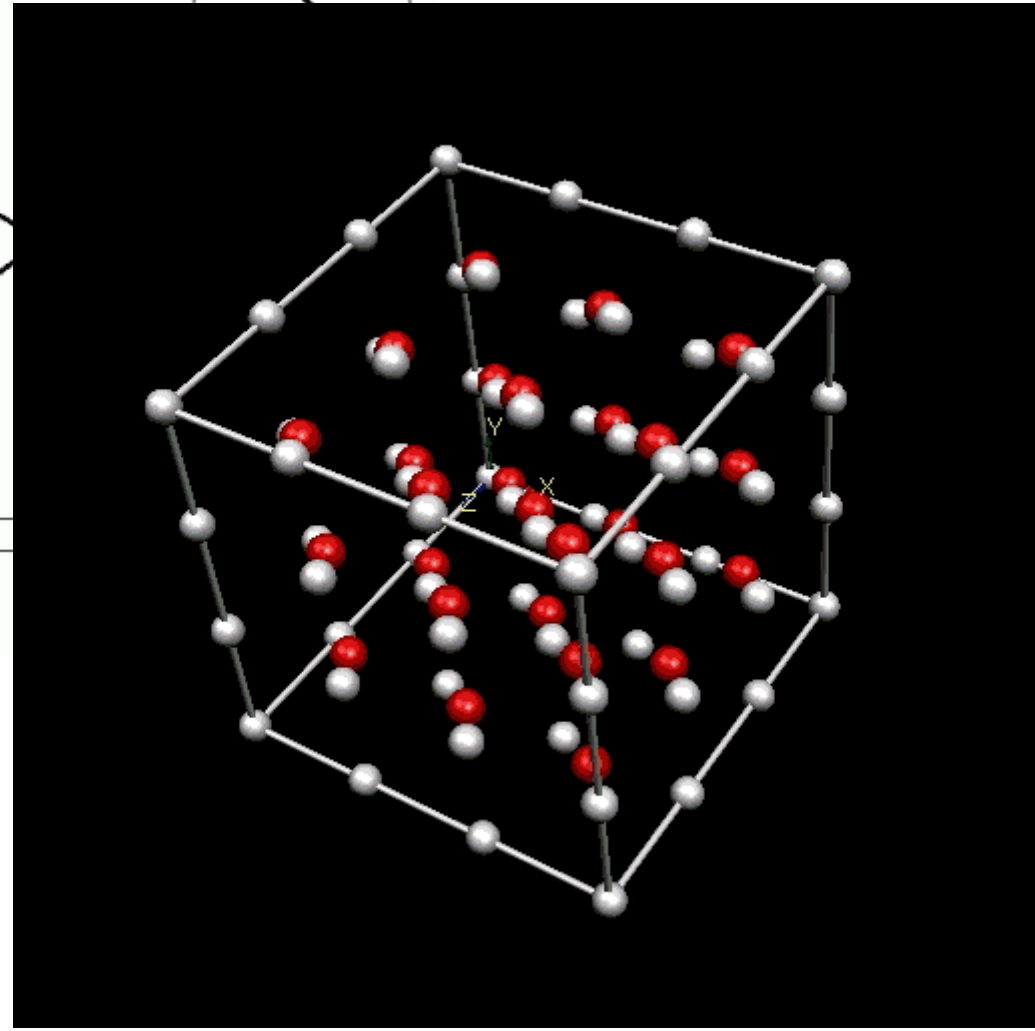
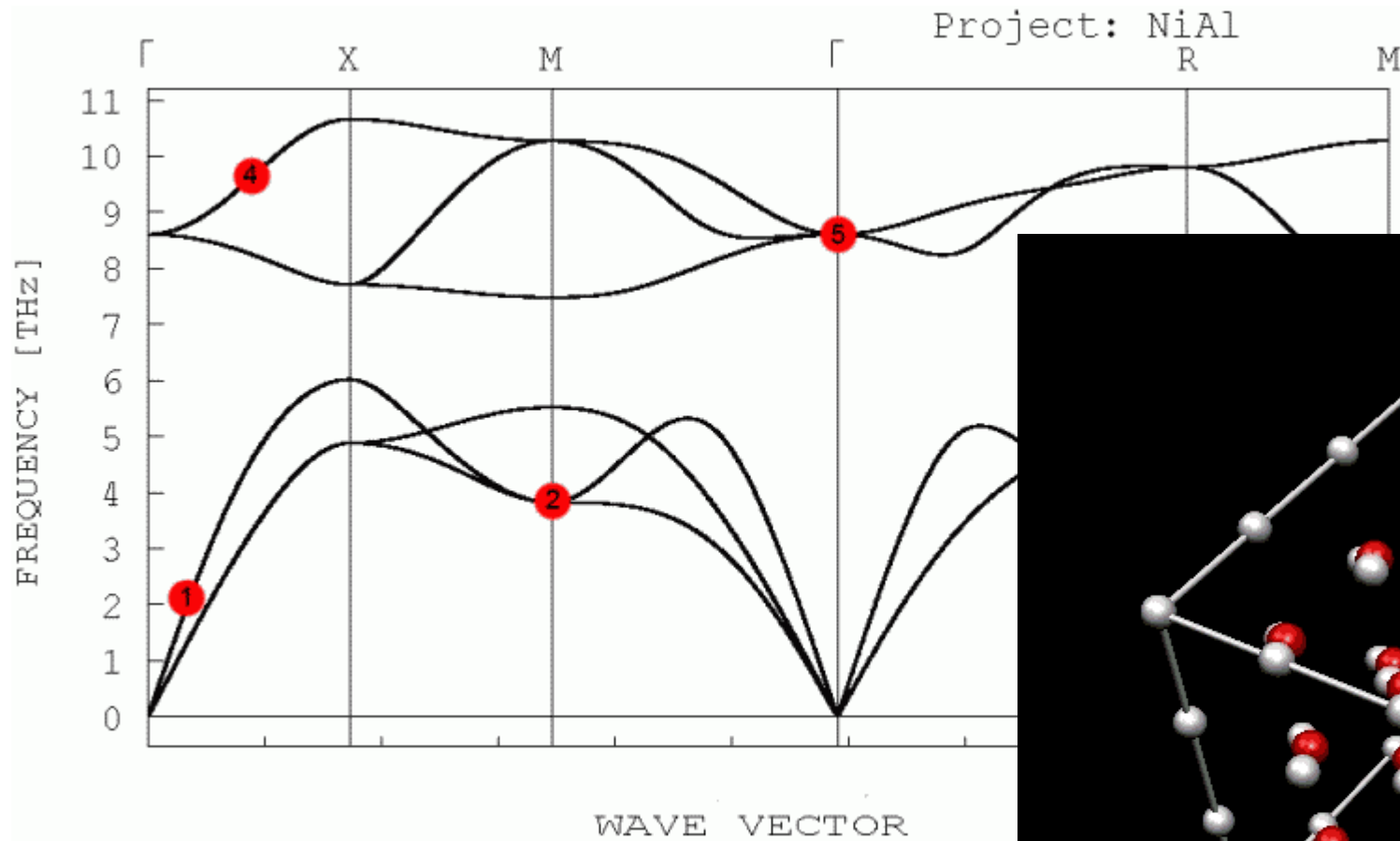
<http://www.phonon.fc.pl/>



Point 3 (O)



<http://www.phonon.fc.pl/>



Point 5 (O)

# Το μοντέλο Einstein

Όλα τα άτομα  
ταλαντώνονται με την  
ίδια συχνότητα,  $\omega_E$ .

Περιγράφει τις οξείες  
κορυφές που  
παρατηρούνται στην  
 $\rho(\epsilon)$  κοντά στην  
μέγιστη συχνότητα.

