<u>Лекция 10</u>.

Температурное поведение среднего квадрата смещения любого атома в кристалле. Неустойчивость 1- и 2-х мерных кристаллов.

Рассмотрим теперь величину среднего квадрата смещения атома.

$$\overline{u^2_{j\vec{n}}} = \left\langle \{n\} \middle| u^2_{j\vec{n}} \middle| \{n\} \right\rangle$$

$$\left\langle u^2_{j\vec{n}} \right\rangle \equiv \overline{u^2_{jn}} = \sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM_{j\omega_\xi}} \left| \overrightarrow{l_{j\xi}} \right|^2 (2\overline{n_\xi} + 1)$$

$$\sum l^{\alpha}_{jS}(f) l^{\alpha}_{jS_1} = \delta_{SS_1} \rightarrow \sum_j \left| \overrightarrow{l_{j\xi}} \right|^2 = 1$$

Может оказаться, что для некоторых частот $l \rightarrow 0$ (т.е. данная частота присутствует в спектре, но атомы с ней практически не колеблются)

$$j=1 \quad \left\langle u_{j\vec{n}}^2 \right\rangle = \sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}} 1(2\overline{n_{\xi}}+1) = \frac{d\hbar}{2M} \int_0^{\omega_{\max}} \underbrace{\left[\frac{1}{dN} \sum_{\xi} \delta(\omega-\omega_{\xi}) \right]}_{g^{(d)}(\omega)} \frac{2\overline{n}(\omega)+1}{\omega}$$

т.е.

$$\left\langle u_{\vec{n}}^2 \right\rangle = \frac{\hbar d}{2M} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega) \frac{2\overline{n}(\omega)+1}{\omega}$$

все атомы колеблются в среднем одинаково.

1)

$$T=0 \quad \to \quad \overline{n}(\omega, T=0)=0$$

$$\left\langle u_{\vec{n}}^2 \right\rangle_{T=0} = \frac{\hbar d}{2M} \underbrace{\int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega) \frac{1}{\omega}}_{\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle^{(d)}} = \frac{\hbar d}{2M} \left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle^{(d)}$$

Для вычисления $\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle^{(d)}$ воспользуемся дебаевским приближением

$$\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle^{(d)} \to$$

$$\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle_D^{(d)} \equiv \int_0^{\omega_D} d\omega g_D^{(d)}(\omega) \frac{1}{\omega} = \int_0^{\omega_d} d\omega \underbrace{\frac{d}{\omega_D^d} \omega^{d-1}}_{g^{(d)}(\omega)} \frac{1}{\omega} = \frac{d}{\omega_D^d} \underbrace{\int_0^{\omega_D} d\omega \omega^{d-2}}_{\frac{\omega_D^{d-1}}{d-1}} = \frac{1}{\omega} \frac{d}{d-1}$$

при $d=1$ получим ∞ ? Рассмотрим аккуратнее:

$$\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle^{(1)} = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \frac{g^{(1)}(\omega)}{\omega} = \int_0^{\omega'} d\omega \frac{g^{(1)}(\omega \sim 0)}{\omega} + \int_{\omega'}^{\omega_{\max}} d\omega \frac{g^{(1)}(\omega)}{\omega} \sim \underline{\ln L}$$

вклад малых ω аномально велик,

вклад малых ω аномально велик,

$$\int_0^{\omega'} d\omega \frac{g^{(1)}(\omega\sim 0)}{\omega} \simeq \int_0^{\omega'} d\omega \frac{const}{\omega} \cong const\cdot \ln|\omega|\Big|_0^{\omega'} = const\cdot \lim_{\omega\to 0}\left|\frac{\omega'}{\omega}\right| \simeq$$

$$\uparrow$$

$$g^{(d)}(\omega\sim 0)\sim g^{(d)}(c_s|f|)\sim \omega^{d-1}\sim const$$

$$d=1$$

Вклад точки $\omega = 0$ непонятен, т.к. по сути $\omega = 0$ - это не колебания, поэтому

$$\simeq const\cdot \ln\left|\frac{\omega'}{\omega_{\min}}\right| \sim \ln L \;; \qquad \omega_{\min} = c_{зв} f_{\min} = c_{зв}\frac{2\pi}{L}.$$

Т.о. макроскопическая величина L при $d=1$ связана с аномальным вкладом длинных волн $(\omega\to 0)\to$ истинно одномерный кристалл является неустойчивым.

Для понимания характера такой неустойчивости рассмотрим

$$\left\langle (u_{n+1}-u_n)^2 \right\rangle = \left\langle (\sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}} \left[(l_{\xi} e^{ifa(n+1)-i\omega_{\xi}} \widehat{b_{\xi}} + l_{\xi}^{*} e^{-ifa(n+1)+i\omega_{\xi}} \widehat{b_{\xi}^{+}}) - (l_{\xi} e^{ifan-i\omega_{\xi}t} \widehat{b_{\xi}} + l_{\xi}^{*} e^{-ifa+i\omega_{\xi}t} b_{\xi}^{+}) \right.\right.$$

$$= \left\langle (\sum_{\xi} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}}} (l_{\xi} e^{ifan} (e^{ifa}-1) e^{-i\omega_{\xi}t} \widehat{b_{\xi}} + \text{эрм.сопр.}))^2 \right\rangle = \frac{\hbar 1}{2M} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega d^{(1)} \omega \left| e^{ifa} - 1 \right|^2 \Big|_{f=f(\omega)} \frac{2}{}$$

$$\left| e^{ifa} - 1 \right|^2 = (\cos fa - 1)^2 + (\sin fa)^2 = \cos^2 fa + \sin^2 fa - 2\cos fa + 1 =$$

$$2(1-\cos fa) = 4\sin^2 \frac{fa}{2} = \left(\frac{\omega_{\xi}}{\omega_0} \right)^2$$

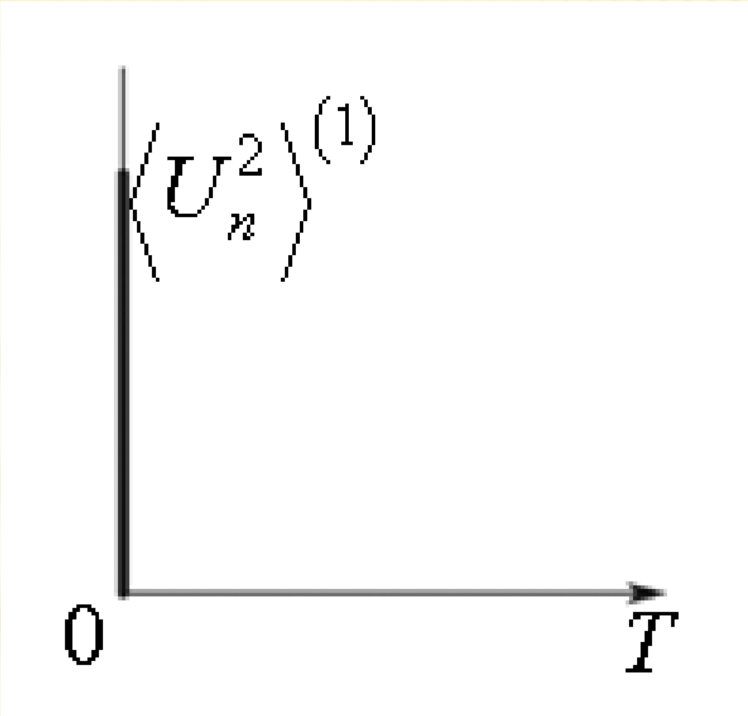
Здесь $\omega_0^2 = \dfrac{4\gamma}{M}$. В результате получаем

$$\boxed{\left\langle \left(u_{n+1}-u_n\right)^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{2M\omega_0^2} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(1)}(\omega) \omega^{\cancel{2}} \frac{2\overline{n}(\omega)+1}{\cancel{\omega}} \xrightarrow[T=0]{} \frac{\hbar}{2M\omega_0^2} \underbrace{\int_0^{\omega_{\max}} d\omega \omega g^{(1)}(\omega)}_{\langle \omega \rangle \not\to \infty}}$$

для $d = 1$ $\langle \omega \rangle = \underline{2\omega_0}$

Т.о. разность смещений двух любых соседних атомов остается всегда конечной, а квадрат смещения каждого атома аномально велик.

Неустойчивость одномерного кристалла – это его стремление начать совершать макроскопическое движение, оставляя при этом примерно постоянным расстояние между соседними атомами.



Рассмотрим случай малых, но конечных темпратур.

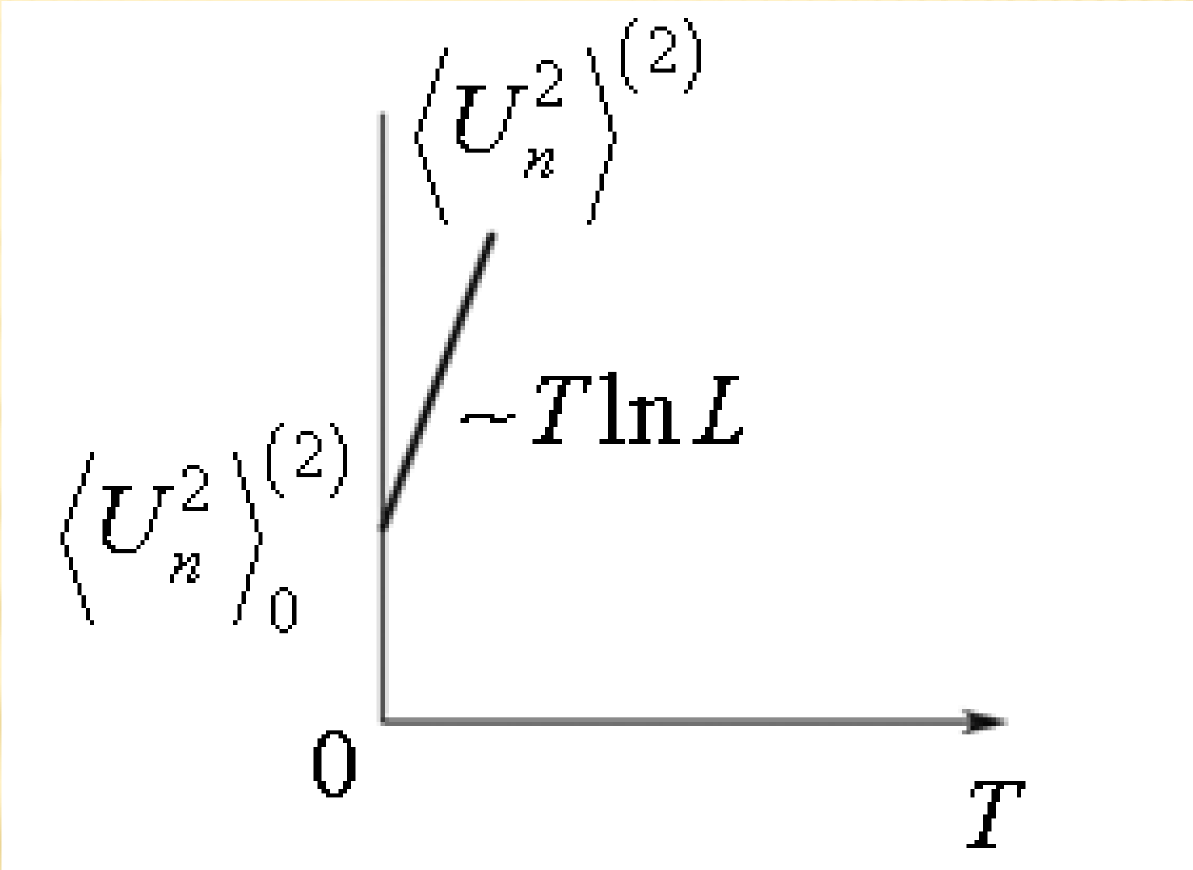
$$\left\langle u_n^2 \right\rangle_{T\sim 0}^{(d=1,2,3)} = \frac{\hbar d}{2M} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega) \frac{1}{\omega}\left(2\frac{kT}{\hbar\omega}\right) \approx \frac{\hbar d}{2M}\frac{2kT}{\hbar} \underbrace{\int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega)\frac{1}{\omega^2}}_{\left\langle \frac{1}{\omega^2}\right\rangle^{(d=2,3)}}$$

$$2\bar{n}(\omega, T\sim 0)+1\Big|_{\hbar\omega<kT} \simeq 2\frac{kT}{\hbar\omega}$$

$$\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle_D^{(d=2,3)} = \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{d\omega^{d-1}}{\omega_D^d}\frac{1}{\omega^2} = \frac{d}{\omega_D^d}\underbrace{\int_0^{\omega_D} d\omega\omega^{d-3}}_{\frac{\omega_D^{d-2}}{d-2}} = \frac{d}{\omega_D^d}\omega_D^{d-2}\frac{1}{d-2}$$

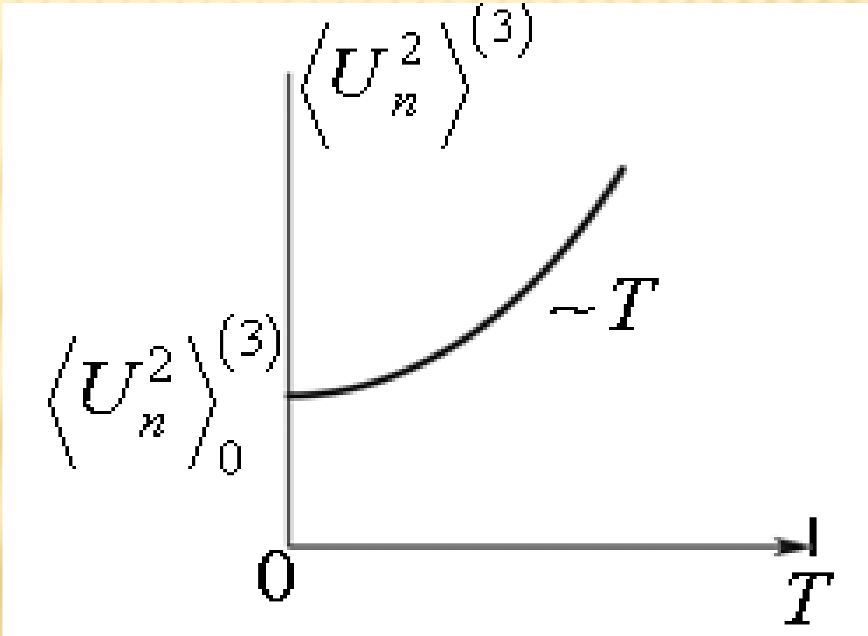
$$\boxed{\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle_D^{(d=2,3)} = \frac{d}{d-2}\frac{1}{\omega_D^2}}$$

$\leftarrow$ теперь для $d=2$ возникает аномально большое значение


$\left\langle U_n^2 \right\rangle^{(2)}$
$\sim T \ln L$
$\left\langle U_n^2 \right\rangle_0^{(2)}$
0
T

$$\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle^{(2)} \simeq \int_0^{\omega'} d\omega \underbrace{g^{(2)}(\omega \sim 0)}_{const\cdot\omega} \frac{1}{\omega^2} \approx \int_0^{\omega'} d\omega \frac{const}{\omega} \sim const \cdot \ln\left|\frac{\omega'}{\omega_{\min}}\right| \sim \underline{\ln L}$$

$$\left\langle u_n^2 \right\rangle_{T\sim 0}^{(d=2,3)} \sim \begin{cases} T \ln L, & d = 2 \\ \sim T(\ldots), & d = 3 \end{cases}$$



Следовательно, при конечных температурах в двумерном кристалле также возникает аномально большое слагаемое, и только для трехмерного случая все устойчиво.