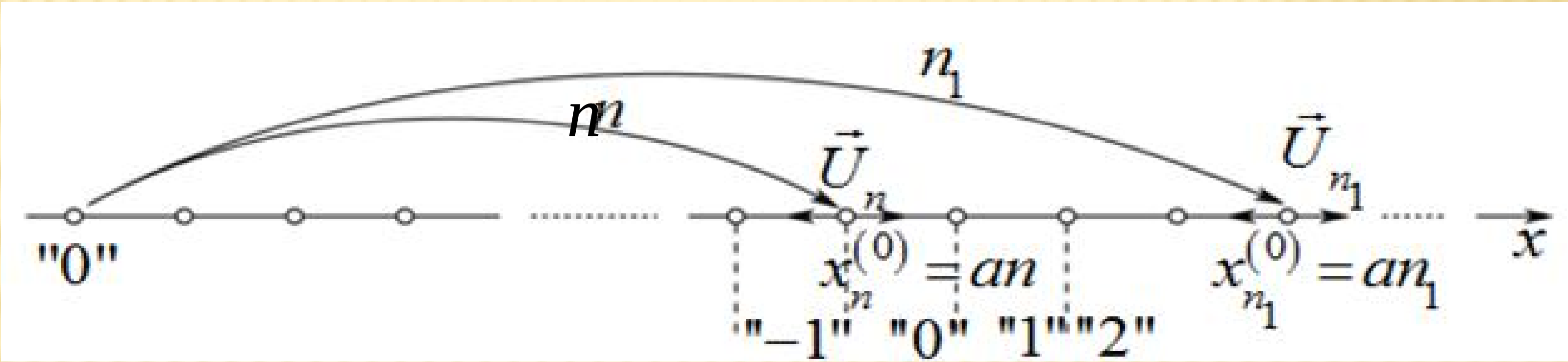
<u>Лекция 4.</u>
Колебания атомов линейного одноатомного кристалла. Акустический спектр. Отношение смещений соседних атомов, групповая и фазовая скорости распространения волн смещений.

Линейный одноатомный кристалл.

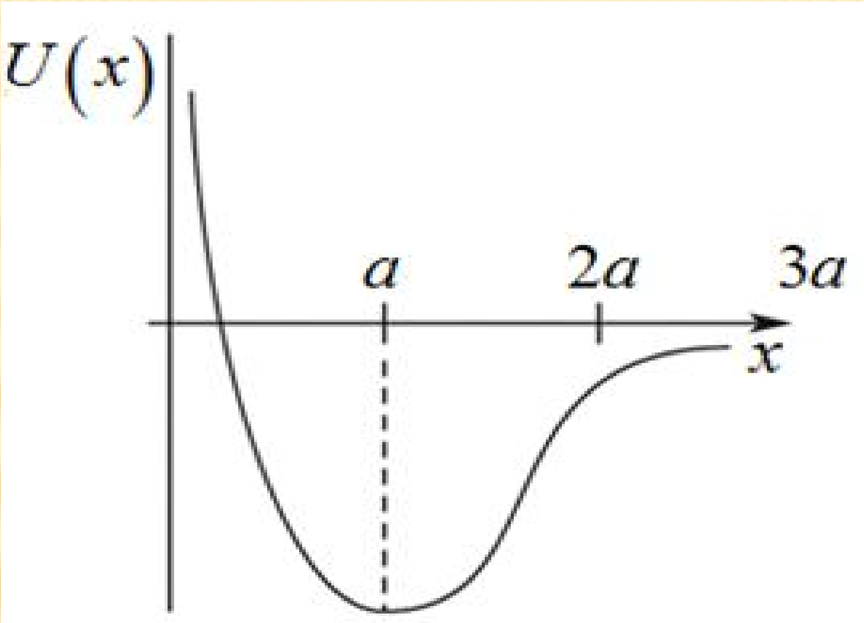


$\alpha, \beta = 1$
$j, j_1 = 1$ dg=1 (!!!), таким образом уравнение одно : $\left\{\omega^2(f)\cdot 1\cdot 1 - C(f)\right\} l(f) = 0$,

$C(f) = \frac{1}{M}\sum_{n_1} A(a(n-n_1))e^{-ifa(n-n_1)} \equiv \frac{1}{M}\sum_{n} A(an)e^{-ifan}$ (здесь суммируем с“0” в точке $x_n^{(o)}$).

$$C(f)=\frac{1}{M}\left\{A(0)\cdot 1+A(+a)e^{-ifa}+A(-a)e^{-if(-a)}+.......\right\}$$

Требование нетривиальности $\left(l(f)\neq 0\right)\to\omega^2(f)=C(f)$; $A(a\cdot n)=\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_0\partial x_n}\right)_0$ - в равновесном положении.



Учитываем взаимодействие только ближайших соседей. $A(a)\equiv A(-a)\equiv-\gamma$ -- это силовые константы взаимодействия ближайших соседей.

$A(0)=\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_0\partial x_0}\right)_0$ – самодействие, на первый взгляд - нечто непонятное.

$M_n\ddot{U}_n^{\alpha} = -\sum_{n_1} A_{nn_1}^{\alpha\beta} U_{n_1}^{\beta}$, просуммируем по всем n : $\sum_n M_n\ddot{U}_n^{\alpha} = -\sum_{n_1}(\sum_n A_{nn_1}^{\alpha\beta})U_{n_1}^{\beta}$

$\Updownarrow F^{\alpha} \equiv 0$

$$\Rightarrow \sum_n A_{nn_1}^{\alpha\beta} \equiv 0 \Leftrightarrow \sum_{n_1} A_{nn_1}^{\alpha\beta} = 0$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j\vec{n}} A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) \equiv 0$$

$$\sum_{j_1\vec{n}} A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) \equiv 0 \Leftrightarrow \sum_{j_1\vec{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n}) = 0.$$

Спроецируем это условие на наш одномерный (линейный) кристалл. $f \to \pm\dfrac{\pi}{2a}$

$$\sum_n A(an) = 0$$ - это сумма полная! $A(0) + A(a) + A(-a) \simeq 0$;

$$A(0) = -A(a) - A(-a) = 2\gamma > 0, \quad A(0) = -\sum_{n\neq 0} A(an)$$

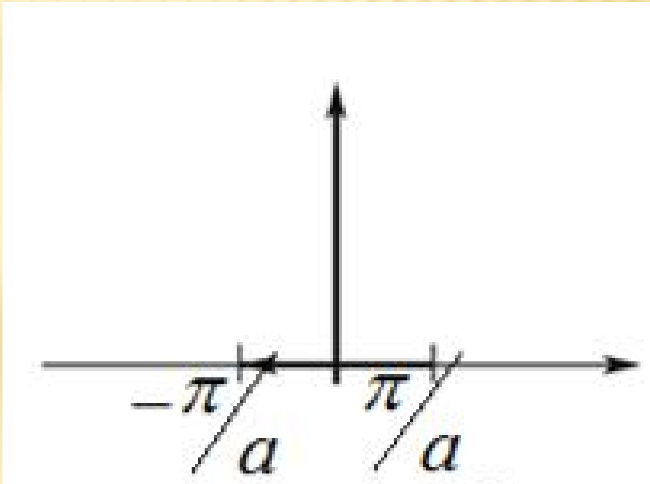
$$A(0) = A(an)\Big|_0 = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_0^2}\right)_0 > 0!!!$$ Вторая производная в точке минимума.

$$\omega^2(f) \simeq \frac{1}{M}\left\{2\gamma - \gamma e^{ifa} - \gamma e^{-ifa}\right\} = \frac{2\gamma}{M}\left\{1 - \underbrace{\frac{e^{ifa} + e^{ifa}}{2}}_{\cos fa = \cos^2\frac{fa}{2} - \sin^2\frac{fa}{2}}\right\} = \frac{4\gamma}{M}\sin^2\frac{fa}{2}$$

$$\omega^2(f) \simeq \frac{4\gamma}{M}\sin^2\frac{fa}{2} > 0$$

$$\frac{fa}{2} \to \frac{fa}{2} + \pi l$$

$$\omega^2(f + \frac{2\pi}{a} l) \equiv \omega^2(f)$$



Выбирают $-\frac{\pi}{a} < f \leq \frac{\pi}{a}$ (первый период)

1) $f \sim 0 \sim fa \ll 1, f \to e^{ifan}$, f играет роль волнового вектора (к в e^{ikx})

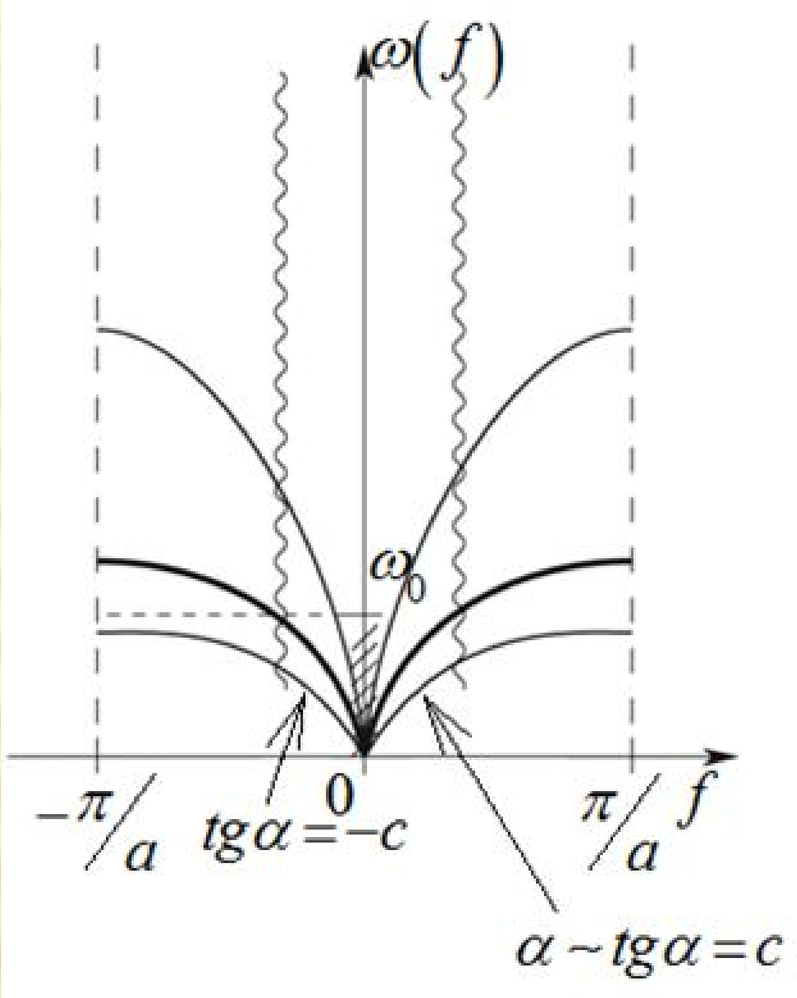
f - квазиволновой вектор (т.к. an – дискретная переменная)

$f = \dfrac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow f \to 0 \sim \lambda \to \infty$, $fa \ll 1$ $\quad \dfrac{a}{\lambda} \ll 1$ - длинноволновое приближение.

$$\omega(f) = \omega_0 \left|\sin\frac{fa}{2}\right|, \omega_0 \equiv \sqrt{\frac{4\gamma}{M}}$$

$$\left|\sin\frac{fa}{2}\right|_{fa \ll 1} \approx \frac{a}{2}|f|$$

$$\omega(f \to 0) \simeq \omega_0 \frac{a}{2}|f| \equiv C|f|, C = \sqrt{\frac{\gamma a^2}{M}} > 0$$



Это есть ни что иное, как звуковая волна в нашей среде ; C – скорость звука.

2) $$f \sim \pm\frac{\pi}{a}$$ $$\omega(f \to \pm\frac{\pi}{a}) \to \omega_0$$, и это экстремум (истинный максимум)

$0 \le \omega(t) \le \omega_0$, и все значения этого отрезка разрешены.

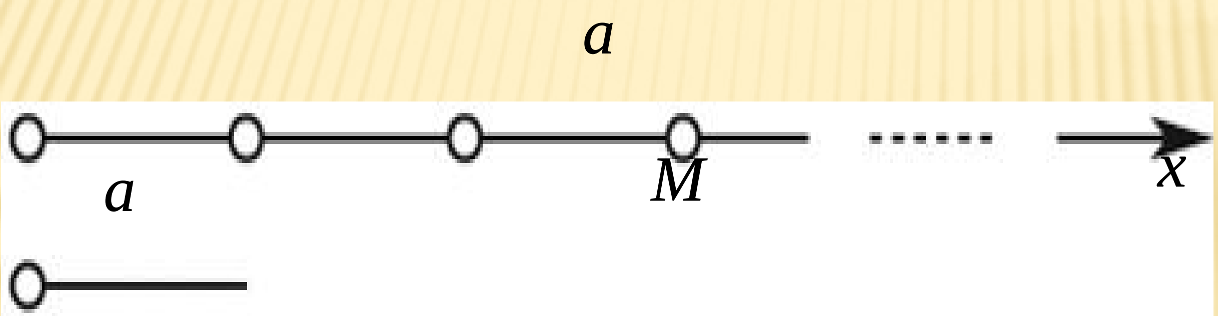
Возможно явления резонанса.

Если через систему пропускать сигналы с частотой до ω_0 , то атомы будут реагировать (поглощение сигнала); если частота сигнала $2\omega_0$, то сигнал отразится жестко (вся цепочка отреагирует как целое).

Для разных кристаллов ω_0 - разное. Чем больше ω_0 , тем сильнее взаимодействие между соседями (в зависимости от этого кристаллы могут быть жесткими или рыхлыми). Любой волновой процесс характеризуется $V_{волн}$ и $V_{фаз}$.

$$\omega^2(\vec{f})e_j^{\alpha}(\vec{f}) = \sum_{j_1} C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f})l_{j_1}^{\beta}(\vec{f})$$

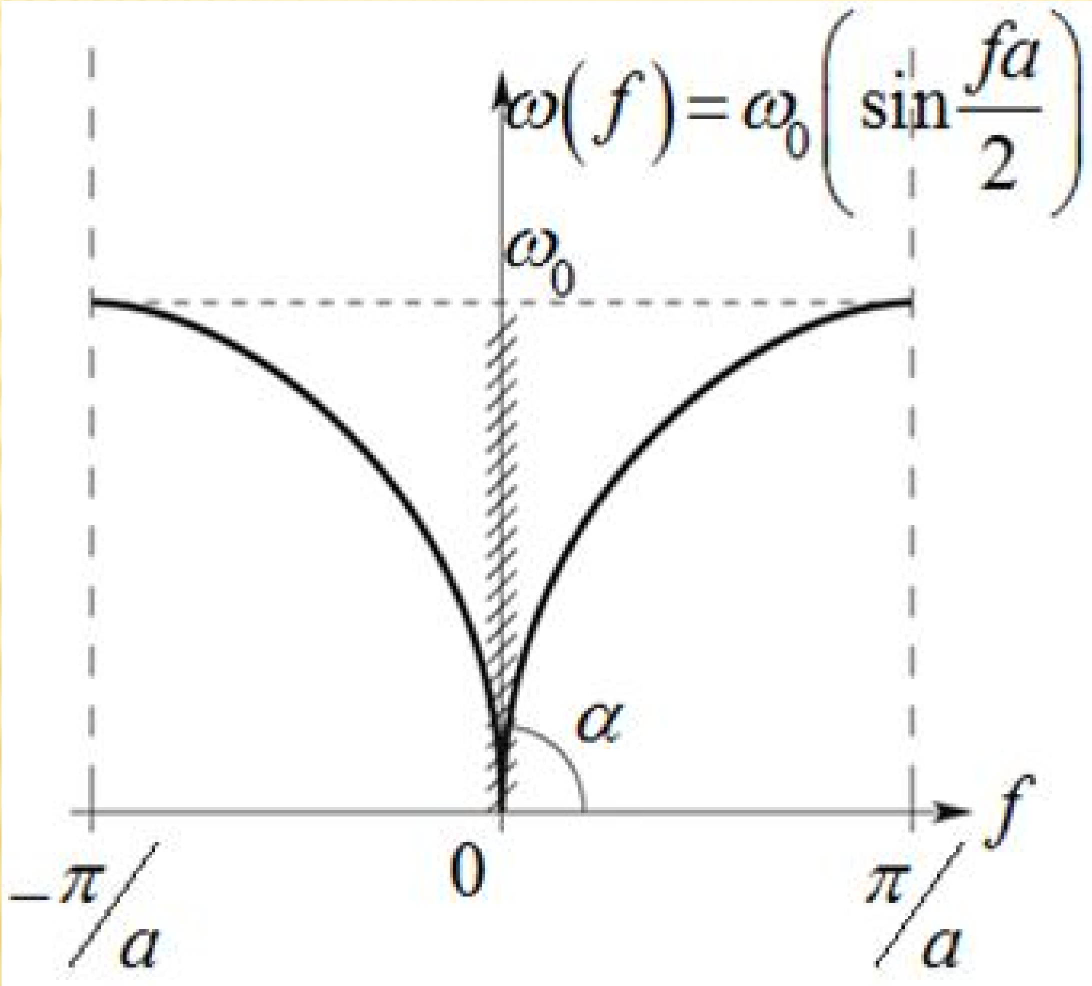
$$\left.\begin{array}{l} \alpha, \beta = 1,\ldots\ldots, d \\ j, j_1 = 1,\ldots\ldots, g \end{array}\right\} dg$$

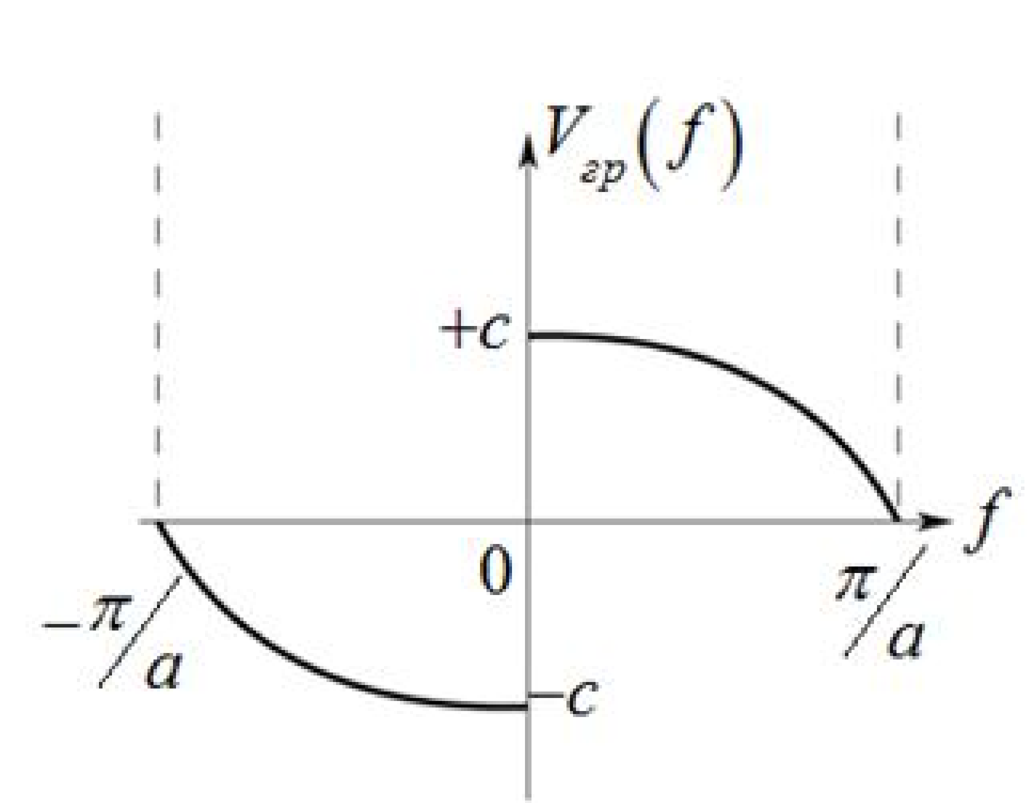


$$\left(\omega^2(f) - C(f)\right)l(f) = 0$$

$$l(f) \neq 0 \sim w^2(f) = C(f) = \frac{1}{M}\sum_n A(an)e^{-ifan} \simeq \frac{1}{M}\left\{2\gamma - \gamma e^{-ifa} - \gamma e^{ifa} + \ldots\right\}, 2\gamma \sim \sum_n A(a,n) = 0$$

Таким образом мы получили $\omega^2(f) \simeq \frac{4\gamma}{M}\sin^2\left(\frac{fa}{2}\right) > 0$, $-\frac{\pi}{a} < f \leq \frac{\pi}{a}$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}}$, $tg\alpha = C$


$\omega(f) = \omega_0\left(\sin\frac{fa}{2}\right)$
ω_0
α
f
$-\pi/a$
0
π/a



$V_{гр}(f) = \dfrac{\partial\omega(f)}{\partial f}$ - характеризует перенос максимума волны ($\Rightarrow$ энергия).

$V_{фаз}(f) = \dfrac{\omega(f)}{|f|}$ - скорость перемещения поверхности с фиксированной фазой.

$$V_{гр}(f) \simeq \begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial f} C\left| f \right| = \pm C, f \sim 0 \\ \dfrac{\partial}{\partial f} \omega_0 = 0, f \sim \pm \dfrac{\pi}{a} \end{cases}$$

$f < 0$

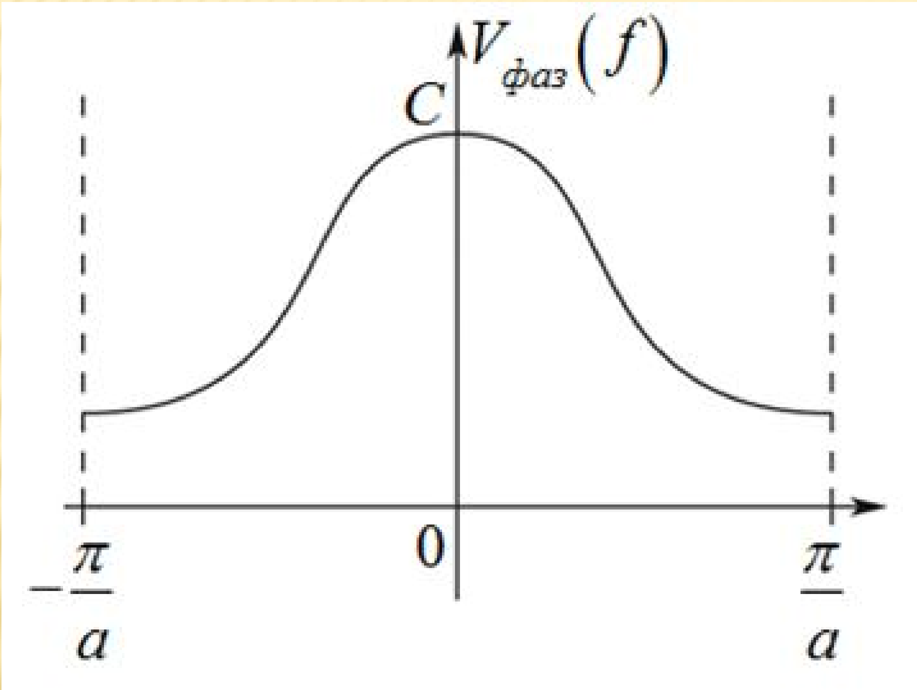
$V < 0$

f указывает направление распространения волны.

Если $V_{гр} = 0$, то передачи энергии нет $\Rightarrow$ стоячая волна.

$$V_{фаз}(f) = \begin{cases} \dfrac{C\left| f \right|}{\left| f \right|} = C, f \sim 0 \\ \dfrac{\omega_0}{\left| \pm \dfrac{\pi}{a} \right|}, f \sim \pm \dfrac{\pi}{a} \end{cases}$$

Для длинных волн:



За счет того, что волна очень длинная , на любом конечном интервале ее можно заменить на прямую, и поэтому фазовая скорость совпадает с групповой.