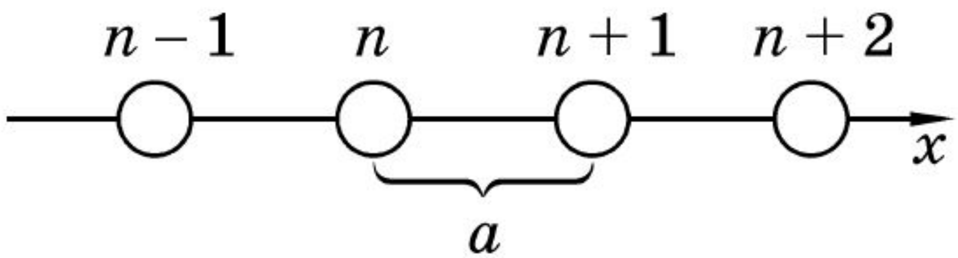
Колебания кристаллической решетки и ее тепловые свойства.
§5 Динамика решетки.

План:

1. *Колебания атомов в одномерной моноатомной цепочке.*
2. *Колебания одномерной цепочки, состоящей из атомов двух сортов.*
3. *Спектральная плотность решеточных колебаний линейной цепочки атомов.*
4. *Основы квантовой статистики.*
5. *Фононы.*

1 Колебания атомов в одномерной моноатомной цепочке.



Линейная модель кристалла

$$æ \qquad x_n \qquad u_n$$

$$m\frac{d^2u_n}{dt^2} \equiv m\ddot{u}_{nn} = F_n \qquad (1)$$

$$æ(u_{n+1} - u_n) \qquad æ\,(u_{n-1} - u_n)$$

$$m\ddot{u}_n = æ(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \qquad (2)$$

$$u_k(x,\, t) = A_k \exp i(kx - \omega t) \qquad (3)$$

$$u_k(n,\, t) = A_k \exp i(kan - \omega t) \qquad (4)$$

1 Колебания атомов в одномерной моноатомной цепочке.

$$A_k m(-\omega^2)\exp(ikan - i\omega t) = æA_k\exp(-i\omega t)$$
$$[\exp(ika(n+1)) - 2\exp(ikan) + \exp(ika(n-1))] \qquad (5)$$

$$A_k\exp(ikan - i\omega t)$$

$$-m\omega^2 = æ[\exp(ika) - 2 + \exp(-ika)] \qquad (6)$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{æ}{m}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right| \qquad (7)$$

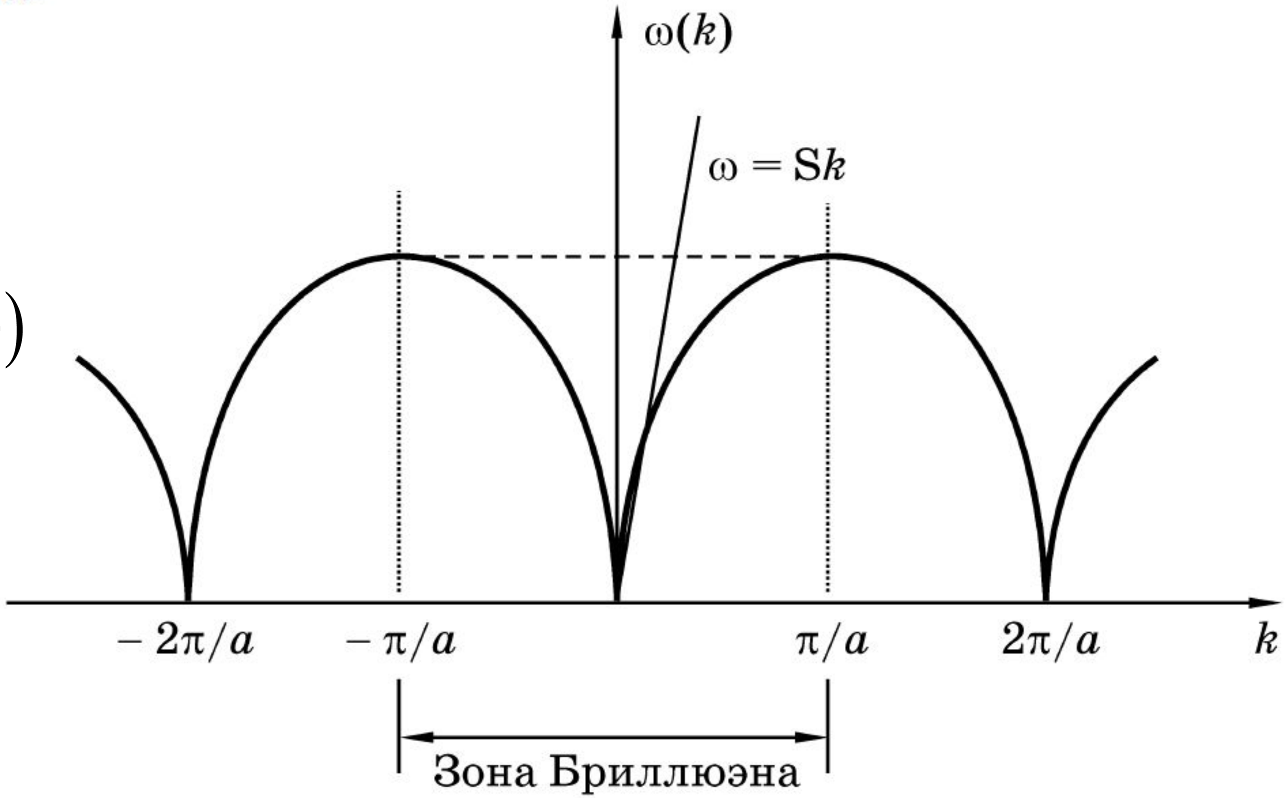
$$u(n,t) = \int A(k)\exp(inak - i\omega t)dk \qquad (8)$$

1 Колебания атомов в одномерной моноатомной цепочке.

k на $k + \dfrac{2\pi}{a}$ $\qquad \dfrac{2\pi}{a}$

$$\frac{\omega}{k} = a\sqrt{\frac{æ}{m}} \qquad (9)$$

$$\upsilon_{ф} = \frac{\omega}{k} = a\sqrt{\frac{æ}{m}} \qquad (10)$$



Зависимость частоты от волнового числа в одномерной модели кристалла

1 Колебания атомов в одномерной моноатомной цепочке.

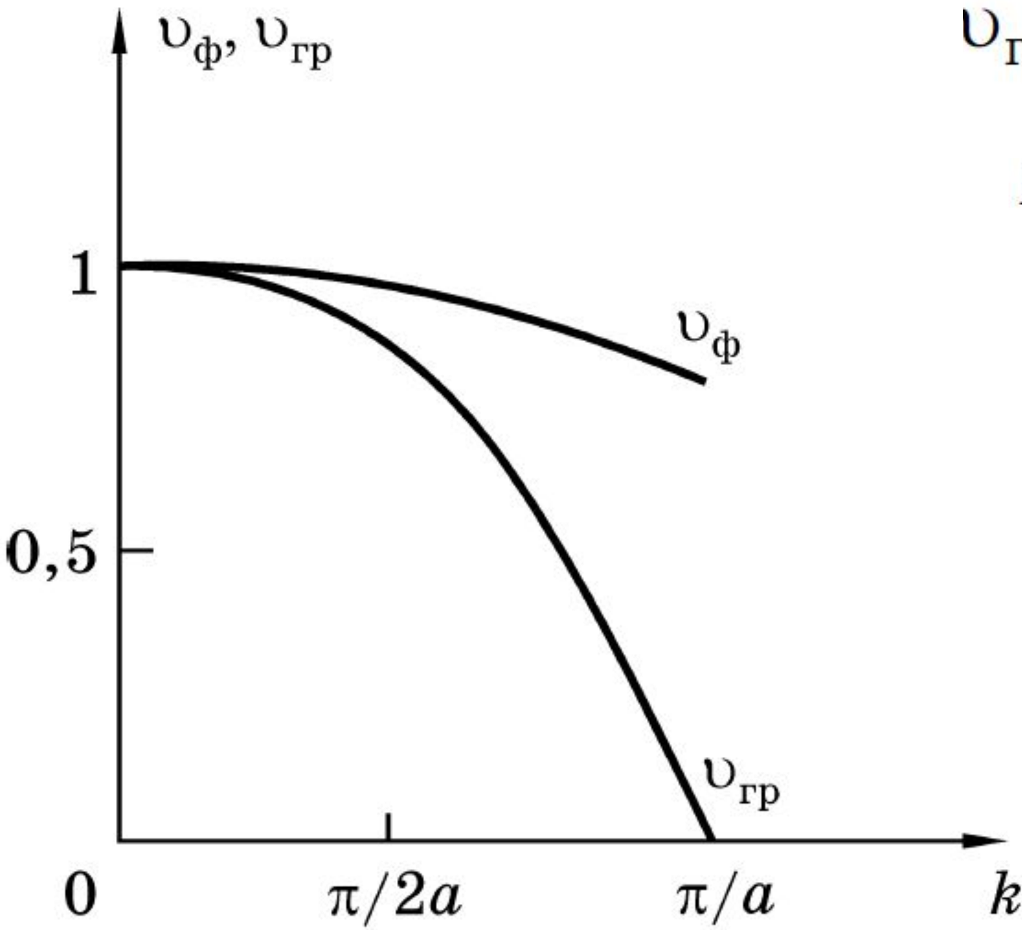
$$s = \upsilon_{гр} = \upsilon_{ф} = a\sqrt{\frac{æ}{m}} \qquad (11)$$

$$\upsilon_{ф} = \frac{\omega}{k} = a\sqrt{\frac{æ}{m}}\frac{\sin\left(\frac{ka}{2}\right)}{\frac{ka}{2}} \qquad (12)$$

$$\upsilon_{ф\,\min} = \frac{2a}{\pi}\sqrt{\frac{æ}{m}} \qquad \upsilon_{гр} = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\upsilon_{гр} = a\sqrt{\frac{æ}{m}}\left|\cos\frac{ka}{2}\right|$$

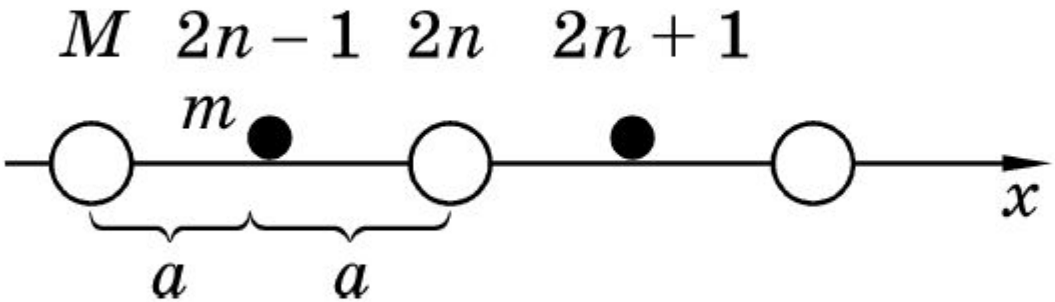
1 Колебания атомов в одномерной моноатомной цепочке.



$\upsilon_Г$

Изменение фазовой и групповой скорости звуковой волны с волновым числом

2. Колебания одномерной цепочки, состоящей из атомов двух сортов



Линейная цепочка, состоящая из атомов двух видов

$M > m$ $\quad$ $2n$ и $2n+1$

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_{2n} &= æ(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n}), \\ m\ddot{u}_{2n+1} &= æ(u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1}), \end{aligned} \qquad (1)$$

ξ и η

$$\begin{aligned} u_{2n} &= \xi\exp(i(\omega t - 2nka)), \\ u_{2n+1} &= \eta\exp(i(\omega t - (2n+1)ka)) \end{aligned} \qquad (2)$$

2. Колебания одномерной цепочки, состоящей из атомов двух сортов

$$-\omega^2 M\xi = æ\eta(\exp(ika) + \exp(-ika)) - 2æ\xi$$
$$-\omega^2 m\eta = æ\xi(\exp(ika) + \exp(-ika)) - 2æ\eta \qquad (3)$$

$$\begin{vmatrix} 2æ - \omega^2 M, & -2æ\cos ka \\ -2æ\cos ka, & 2æ - \omega^2 m \end{vmatrix} = 0 \qquad (4)$$

ω_+ и ω_-

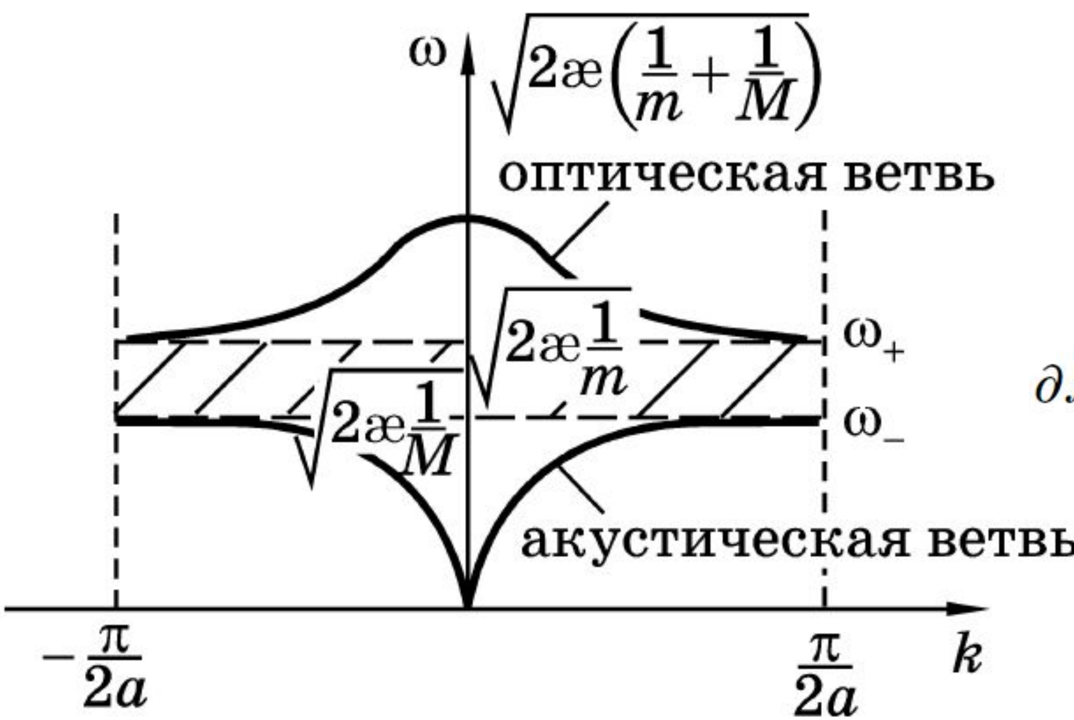
$$\omega_\pm^2 = æ\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \pm æ\sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2 ka}{Mm}} \qquad (5)$$

$ka \ll 1$ и $\sin^2 ka \sim (ka)^2$

2. Колебания одномерной цепочки, состоящей из атомов двух сортов

$$\omega_+^2 = 2æ(m^{-1} + M^{-1}) \text{— оптическая ветвь,} \qquad (6a)$$

$$\omega_-^2 = \frac{1}{2}æ(ka)^2(m + M)^{-1} \text{ — акустическая ветвь.} \qquad (6б)$$



Зависимость $\omega(k)$ для двухатомной одномерной цепочки

2. Колебания одномерной цепочки, состоящей из атомов двух сортов

$$\frac{\xi}{\eta} \qquad \left(\frac{\xi}{\eta}\right) \sim 1 \qquad \left(\frac{\eta}{\xi}\right)_{+} = -\frac{M}{m} \qquad (7)$$

$$\mu \qquad \omega(k) \qquad 3\mu \qquad \omega(k) = 0 \quad k = 0$$

$3\mu - 3$ $\quad \omega(k)$ при $k \to 0$

3. *Спектральная плотность решеточных колебаний линейной цепочки атомов*

$$L = Na \qquad u_n = u_{n+N}$$

$$\exp ikan = \exp ika(n \pm N) \qquad (8)$$

$$\exp(\pm ikaN) = 1 \;\; \text{и} \;\; \pm kaN = 2\pi q$$

$$k = \pm\frac{2\pi}{aN}q = \frac{2\pi}{L}q, \qquad (9)$$

$$q = \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm\frac{N}{2}$$

$$\Delta k_0 = \frac{2\pi}{Na} = \frac{2\pi}{L} \qquad -\frac{\pi}{a} < k \le \frac{\pi}{a} \qquad -\frac{N}{2} < q \le \frac{N}{2}$$

$$\Delta N(k) = \frac{\Delta k}{\Delta k_0} = \frac{\Delta k}{2\pi}L \qquad dN(k) = \frac{L}{2\pi}dk$$

3. Спектральная плотность решеточных колебаний линейной цепочки атомов

$$dN(\omega) = 2\frac{L}{2\pi}\frac{dk}{d\omega}d\omega = \frac{L}{\pi}\frac{1}{\upsilon_{гр}}d\omega \qquad (10)$$

$D(\omega)$

$$D(\omega) = \frac{dN(\omega)}{d\omega} = \frac{L}{\pi}\frac{1}{\upsilon_{гр}} \qquad (11)$$

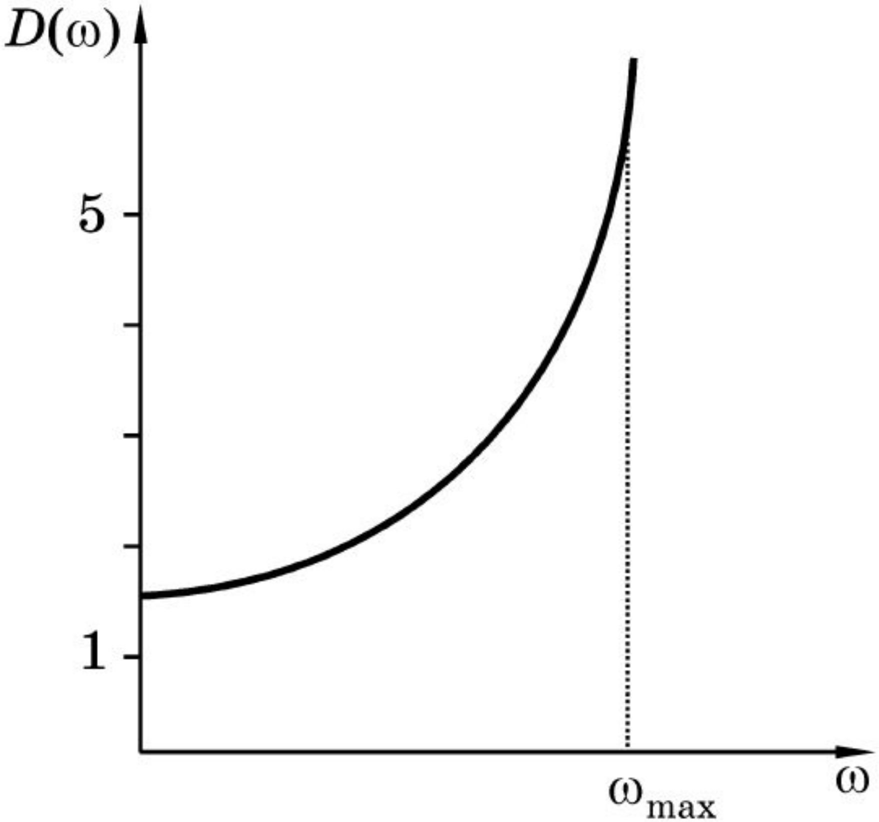
$$\upsilon_{гр} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\left(\omega_{max}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|\right) = \frac{a\omega_{max}}{2}\left|\cos\frac{ka}{2}\right| =$$

$$= \frac{a\omega_{max}}{2}\left(1-\sin^2\frac{ka}{2}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{a}{2}(\omega_{max}^2 - \omega^2)^{\frac{1}{2}}. \qquad (12)$$

$$D(\omega) = \frac{2L}{\pi a}(\omega_{max}^2 - \omega^2)^{-\frac{1}{2}} \qquad (13)$$

$$\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{æ}{m}}$$

3. *Спектральная плотность решеточных колебаний линейной цепочки атомов*



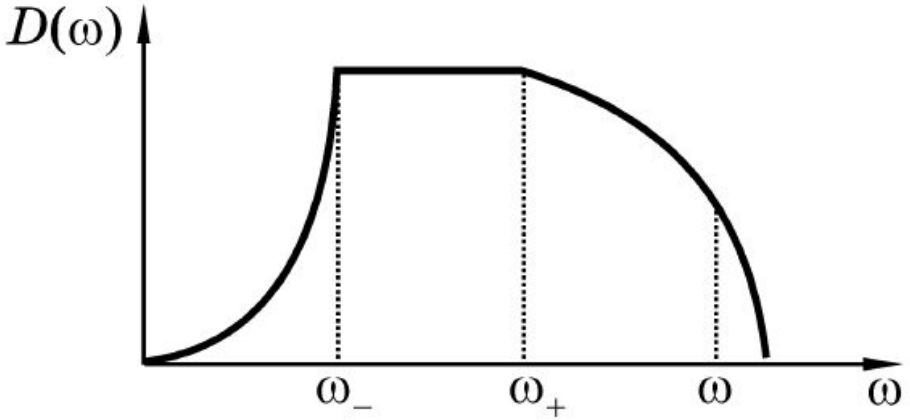
Спектральная плотность колебаний $D(\omega)$ в модели цепочки одинаковых атомов

$$\frac{d\omega}{dk} = 0 \qquad k = \frac{\pi}{a}$$

$$\upsilon_{гр} = 0$$

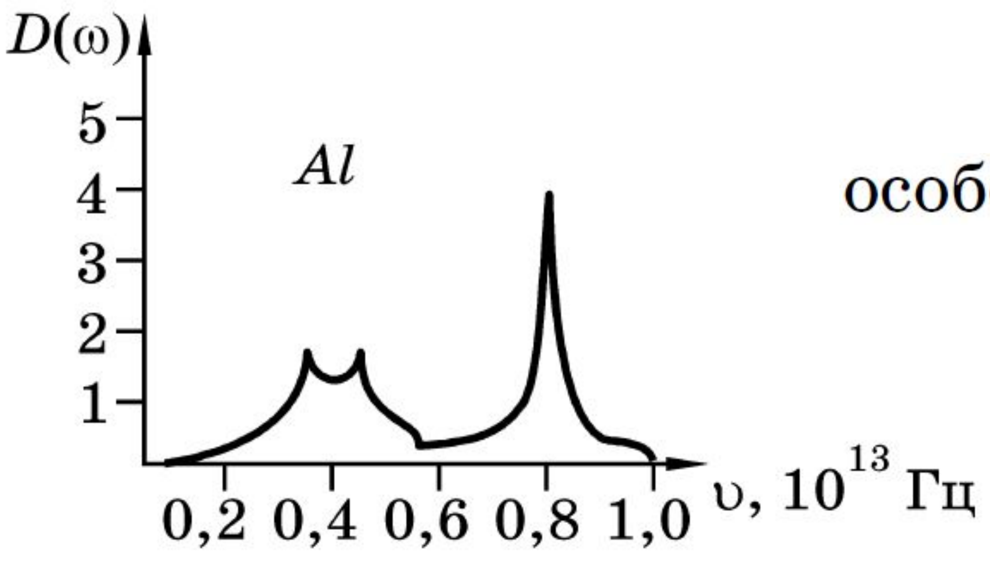
Ван-Хова

3. Спектральная плотность решеточных колебаний линейной цепочки атомов



Плотность состояний $D(\omega)$ для двухатомной линейной цепочки

$\omega_+, \omega_-, \omega$



особенность δ-образного типа

Спектр колебаний в решетке Al

4 Основы квантовой статистики

фермионы — Ферми–Дирака

бозоны — Бозе–Эйнштейна

$x, y, z, \quad p_x, p_y, p_z$

$N \qquad \delta x \cdot \delta p_x \geq h = 2\pi\hbar$

$$\delta x \delta y \delta z \delta p_x \delta p_y \delta p_z \approx h^3 = (2\pi\hbar)^3 \qquad (14)$$

$f(\varepsilon_i)$

$$(15)$$

для фермионов $f(\varepsilon_i) = \dfrac{1}{\exp\left[\dfrac{(\varepsilon_i - \mu)}{kT}\right] + 1};$

$$(16)$$

для бозонов $f(\varepsilon_i) = \dfrac{1}{\exp\left[\dfrac{(\varepsilon_i - \mu)}{kT}\right] - 1}.$

4 Основы квантовой статистики

$f(\varepsilon_i) \rangle 1 \qquad f \geq 0$

$f \ll 1 \qquad f(\varepsilon_i) = \exp\left(\mu - \frac{\varepsilon_i}{kT}\right) = A\exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right)$

$\langle N_i \rangle \ll 1 \qquad \varepsilon_i$

$\mu \qquad \varepsilon_i < \mu \qquad f < 0 \qquad \mu \leq 0$

$dZ \qquad (\varepsilon,\ \varepsilon + d\varepsilon)$

$d\Gamma \quad V \quad p \quad dp \qquad d\Gamma = 4\pi p^2 V dp \quad (18)$

$dZ \quad d\Gamma \quad (2\pi\hbar)^3$

$$dZ = \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} p^2 V dp \qquad (19)$$

4 Основы квантовой статистики

dZ $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ f

$$dN = (2J+1)\cdot f \cdot dZ$$

5 Фононы

$$E = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right) \qquad (21)$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \qquad E - E_0 = \hbar\omega n \quad (22)$$

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k \qquad (23)$$

$$|p| \le \frac{\pi\hbar}{a} \qquad (24)$$

$$\frac{2\pi n\hbar}{a} \qquad \frac{p^2}{2m} \qquad \Delta p = 2\pi\hbar\frac{n}{a}$$

μ_0 и $E = \hbar\omega$