

Masni defekt ali nečistoča v linearini verigi.

Primož Burger

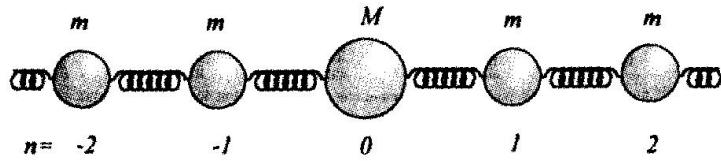
12. 3. 2008

1 Naloga

Izračunaj lastno frekvenco linearne verige z masnim defektom (izotop) na mestu $n=0$, privzemi nastavek

$$s_n = s_0 e^{-k(\omega)|n|a - i\omega t}$$

konstanta vzmeti je κ, a pa je razdalja med atomi.



Slika 1: Linearna veriga sklopljenih atomov z nečistočo na mestu n.

2 Rešitev

Če je premik n. atoma s_n , sta enačbi gibanja za masi $n=-1$ in $n=0$:

$$m\ddot{s}_{-1} = \kappa(s_{-2} - 2s_{-1} + s_0)$$

$$M\ddot{s}_0 = \kappa(s_{-1} - 2s_0 + s_1)$$

ali bolj splošno

$$m\ddot{s}_n = \kappa(s_{n-1} - 2s_n + s_{n+1}) \quad za \quad n \neq 0$$

Ko v gornji enačbi damo naš nastavek

$$s_n = s_0 e^{-kan - i\omega t} \quad za \quad n > 0$$

$$s_n = s_0 e^{-i\omega t} \quad za \quad n = 0$$

$$s_n = s_0 e^{+kan - i\omega t} \quad za \quad n < 0$$

dobimo dve enačbi

$$m\omega^2 = \kappa(2 - e^{ka} - e^{-ka})$$

$$M\omega^2 = 2\kappa(1 - e^{-ka})$$

katerih rešitev je:

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sqrt{\frac{m/M}{2 - M/m}}$$

in

$$ka = \ln\left(1 - \frac{2m}{M}\right)$$

3 Diskusija

1. Za $M > 2m$ je ω imaginarna in k negativen in realen. To pomeni, da naš nastavek ne deluje. Rešitev s časom pada in z naraščajočim n divergira.

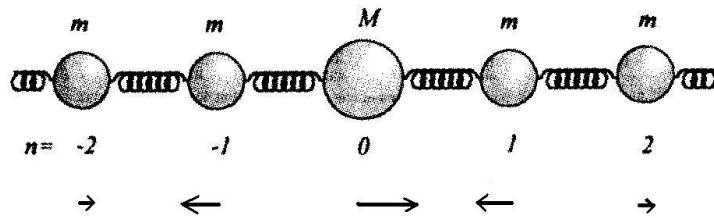
2. Za $M < m$ je ω realna k pa je kompleksen. To je oscilirajoča rešitev. Z uporabo zvezne $\ln(-A) = i\pi + \ln A$ kjer je $A > 0$ dobimo:

$$ka = i\pi + \ln\left(\frac{2m}{M} - 1\right)$$

a) Za $m < M < 2m$ je $\text{Re}(k)$ negativen in rešitev s_n divergira za velike n . Naš nastavek ni dober.

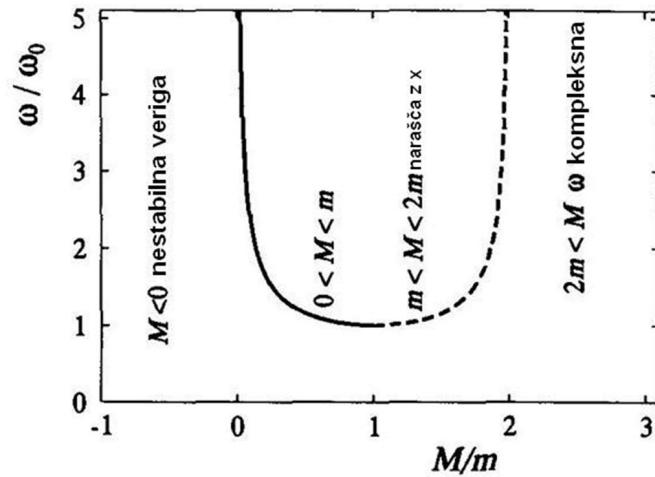
b) Za $M < m$ je $\text{Re}(k)$ pozitiven. V tem primeru je naš nastavek uporaben. Rešitev opisuje nihajoče delece. Amplituda nihanja pada z naraščajočim n .

$$s_n = s_0 e^{-k(\omega)|n|a-i\omega t} = s_0 (-1)^n \left(\frac{2m}{M} - 1\right)^{-|n|} e^{-i\omega t}$$



Slika 2: Smeri odmikov alternirajo, amplituda pada z razdaljo od $n=0$

Za zaključek lahko rečemo, da je naš nastavek uporaben le za $0 < M < m$. (Za negativne mase M bi bila veriga nestabilna.) Časovna odvisnost rešitve je nihanje. Amplituda z razdaljo od defekta pada. Opazimo lahko, da je frekvenca nihanja $\omega \geq 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$, medtem ko je za verigo brez nečistoč (M=m) $\omega_0 = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$. Frekvenca nihanja verige z nečistoč je nad najvišjo frkvenco fononov čiste verige. To je razumljivo, saj manjša masa pomeni večjo frkvenco nihanja. Ta rezultat prikazuje slika 3.



Slika 3: Frekvenca kot funkcija mase izotopa. Nihajoča rešitev je nedivergentna le za $0 < M < m$.