Fizika trdne snovi

Mrežna nihanja dvoatomne verige

Matjaž Ivančič

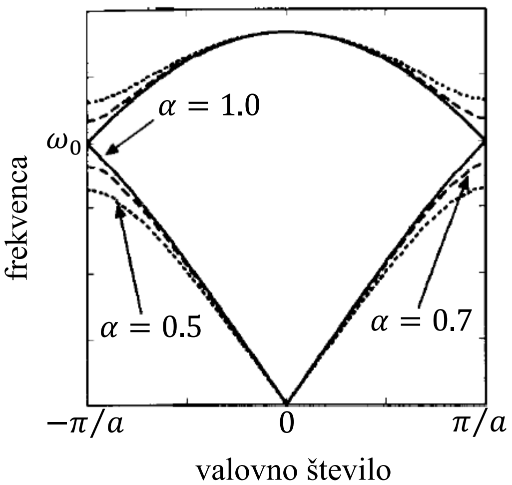
September, 2009

Naloga:

Za linearno dvoatomno verigo je disperzija fononov $\omega(k)$ definirana kot

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm f\left[\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2\frac{qa}{2}\right]^{1/2}, \qquad 1)$$

kjer predznak + pomeni optični del, $-$ pa akustični. V osnovni celici imamo tako dva gradnika z masama M_1 in M_2, med katerima deluje interakcija f. Na sliki 1 lahko vidimo odvisnost frekvence od valovnega števila pri konstantnih vrednostih $\alpha = M_1/M_2$, s konstantno efektivno maso $\mu = M_1 M_2/(M_1 + M_2)$.



Slika 1) Disperzija fononov za dvoatomno verigo za $\alpha = 1.0$ (polna črta), $\alpha = 0.7$ (črtkana črta), $\alpha = 0.5$ (pikčasta črta) in $\omega_0{}^2 = f/\mu$.

a) Izračunaj hitrost zvoka.
b) Pokaži, da je rezultat za $M_1 = M_2$ enak disperzijski krivulji enoatomne verige.

Rešitev:

a) Hitrost zvoka je definirana kot

$$c = \frac{\omega}{q}, \qquad 2)$$

pri čemer upoštevamo, da $q \to 0$.

Ker računamo hitrost zvoka, lahko v enačbi (1) upoštevamo le predznak $-$, saj tako upoštevamo le akustični del disperzije.

Pri upoštevanju, da $q \to 0$, lahko izvedemo tudi sledeča približka, in sicer

$$\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) \cong \left(\frac{qa}{2}\right)^2 \qquad 3)$$

in

$$\sqrt{a+x} = \sqrt{a}\sqrt{1+\frac{x}{a}} \cong \sqrt{a}\left(1+\frac{1}{2}\frac{x}{a}\right). \qquad 4)$$

Od tod dobimo, da je disperzija fononov enaka

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) - f\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)\left[1-\frac{1}{2}\frac{\frac{q^2a^2}{4M_1M_2}}{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2}\right] = f\frac{1}{8}\frac{q^2a^2}{M_1+M_2}. \qquad 5)$$

Dobljeno enačbo (5) tako vstavimo v (2) in dobimo, da je hitrost zvoka v dvoatomni verigi

$$c = \frac{\omega}{q} = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{f}{2(M_1+M_2)}}. \qquad 6)$$

b) Za primer, ko imamo $M_1 = M_2 = M$ se nam disperzija poenostavi na

$$\omega^2 = f\frac{2}{M}\left[1 \pm \cos\left(\frac{qa}{2}\right)\right], \qquad 7)$$

kjer ob substituciji $\sqrt{1-\sin^2(qa/2)} = \cos(qa/2)$ smo upoštevali, da je funkcija definirana le na intervalu $-\pi/2 < q < \pi/2$. Sedaj lahko uporabimo novi trigonometrični relaciji

$$\sin^2\left(\frac{qa}{4}\right) = \frac{1}{2}\left(1-\cos\left(\frac{qa}{2}\right)\right) \qquad 8)$$

in

$$\cos^2\left(\frac{qa}{4}\right) = \frac{1}{2}\left(1+\sin\left(\frac{qa}{2}\right)\right). \qquad 9)$$

Z upoštevanjem (8) in (9) se nam tako enačba (7) spremeni v

$${\omega_1}^2 = f\frac{4}{M}\sin^2\left(\frac{qa}{4}\right) \qquad 10)$$

in

$${\omega_2}^2 = f\frac{4}{M}\cos^2\left(\frac{qa}{4}\right). \qquad 11)$$

Ker sedaj imamo le en tip gradnika, lahko osnovno celico prepolovimo tako, da dobimo novo velikost $a' = a/2$. Ob korenjenju enačb (10) in (11) lahko upoštevamo le pozitivno rešitev in tako dobimo

$$\omega_1 = \sqrt{f\frac{4}{M}\sin\left(\frac{qa'}{2}\right)} \qquad 12)$$

in

$$\omega_2 = \sqrt{f\frac{4}{M}\cos\left(\frac{qa'}{2}\right)}. \qquad 13)$$

Trenutna disperzija je definirana na intervalu $-\pi/2a' < q < \pi/2a'$ mi pa bi želeli imeti disperzijo na intervalu $-\pi/a' < q < \pi/a'$. V ta namen lahko zgornji del disperzije premaknemo za $\pi/2$ in tako cos spremenimo v sin in tako dobimo disperzijsko krivuljo enoatomne verige

$$\omega_1 = 2\sqrt{\frac{f}{M}\sin\left(\frac{qa'}{2}\right)}. \qquad 14)$$