

ELTE III.Fizika BSC
2014/2015 I.félév
Kondenzált anyag fizika
 10. GYAKORLAT
 (2014. November 18.)

Rácsrezgések, diszperziós relációk, fonon spektrum

1) *Lineáris lánc (egyszerű) /k rugóállandó, a távolságban, m tömeg/*

Az egyszerű diszperziós reláció:

$$\omega = (2 \sqrt{k/m}) \sin(qa/2) \quad ; \quad \text{ha } q \ll (\pi/2a) : \omega \approx (\sqrt{k/m}) (qa)$$

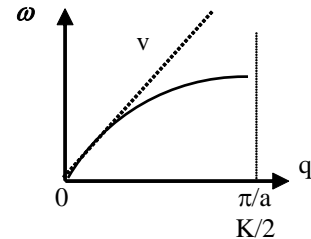
$$(\omega/q) \approx (\sqrt{k/m}) a = v_f \approx (\partial\omega/\partial q) (= v_{csop})$$

Hosszúhullámú limit (kontinuum modell):

$$\rho(\partial^2 u / \partial t^2) = c (\partial^2 u / \partial x^2) \quad \text{a hullámegyenlet}$$

$$v = \sqrt{c/\rho} \quad ,$$

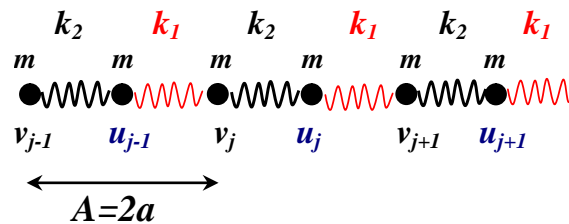
ahol c = k a – rugalmassági(Young) modulus; ρ = m/a - tömegsűrűség



2) *Lineáris lánc (összetett) /rácsállandó: a, rács periodicitás A=2a !/*

$$m \ddot{u}_j = k_2 (v_j - u_j) + k_1 (v_{j+1} - u_j)$$

$$m \ddot{v}_j = k_1 (u_{j-1} - v_j) + k_2 (u_j - v_j)$$



Az összetett rendszer diszperziós relációja:

A megoldás keresése:

$$u_j = C_1 e^{i(\omega t - q(2aj))} \quad ; \quad v_j = C_2 e^{i(\omega t - q(2aj-a))}$$

$$q = [2\pi/(2aN)]n \quad \text{ahol } n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm (N/2)-1$$

$$mC_1 \omega^2 = C_1 (k_1 + k_2) - C_2 (k_2 e^{iqa} + k_1 e^{-iqa})$$

$$mC_2 \omega^2 = C_2 (k_1 + k_2) - C_1 (k_1 e^{iqa} + k_2 e^{-iqa})$$

$$\begin{pmatrix} (m\omega^2 - (k_1 + k_2))C_1 \\ (k_1 e^{iqa} + k_2 e^{-iqa}) C_1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} (k_2 e^{iqa} + k_1 e^{-iqa}) C_2 \\ (m\omega^2 - (k_1 + k_2))C_2 \end{pmatrix}$$

$$\det = 0$$

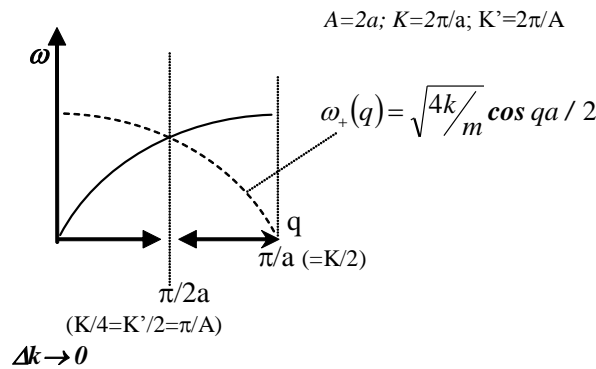
$$! k^+ = (k_1 + k_2)/2 \text{ és } \Delta k = (k_1 - k_2)/2$$

Ekkor

$$\omega^2 = (2 k^+/m) \pm \sqrt{(2 k^+/m)^2 \cos^2(qa) + (2 \Delta k/m)^2 \sin^2(qa)}$$

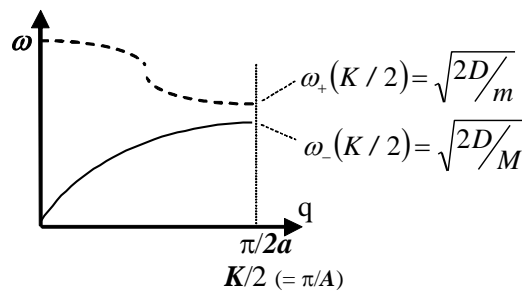
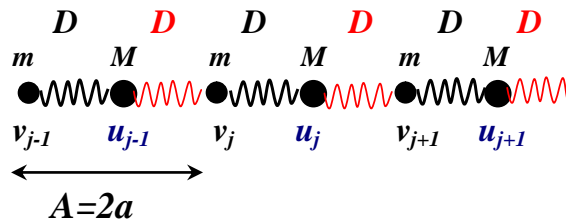
a) $\Delta k \rightarrow 0$ esetén $\omega^2 = (2 k/m) (1 \pm \cos(qa)) = (4k/m) \begin{cases} \cos^2(qa/2) \\ \sin^2(qa/2) \end{cases}$

b) $k \rightarrow \Delta k$ esetén $\omega^2 = (2 k/m) (1 \pm 1) ; \quad \omega = \begin{matrix} 2\sqrt{k/m}, \\ \text{illetve} \\ 0 \end{matrix}$



$$\omega^2 = (2 k/m) (1 \pm \cos(qa)) = (4k/m) \begin{matrix} \cos^2(qa/2) \\ \sin^2(qa/2) \end{matrix}$$

3) Lineáris lánc (összetett) /rácsállandó: a , rácsperiodicitás $A=2a$!/



az $A=2a$ periodicitású B.z. határa!

$$\omega_{\pm}(q) = \sqrt{D} \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{mM}}}$$

4) Állapotsűrűség

$$D(\omega) = \sum_i \delta(\omega - \omega_i)$$

Integrálisan:

$$\sum D(\omega) \Delta\omega$$

$$\omega < \omega_i < \omega + \Delta\omega$$

$$\int_0^{\infty} D(\omega) d\omega = 3Ns = N_{\text{módus}}$$

Rácsrezgések állapotosság, fonon spektrum

(Bosonok, $N_{\text{módus}}$ száma tetszőleges.)

1D -ben

$$dN^{\omega, \omega+d\omega} = D(\omega) d\omega = (L/2\pi) dq \quad \leftarrow q_x L = n_x 2\pi; (L/2\pi) dq_x = dn_x$$

$$D(\omega) = (L/2\pi) / \{ \partial \omega / \partial q \}$$

3D -ben

$$dN^{\omega, \omega+d\omega} = D(\omega) d\omega = (L_x/2\pi) dq_x (L_y/2\pi) dq_y (L_z/2\pi) dq_z =$$

$$dN^{\omega, \omega+d\omega} = D(\omega) d\omega = [V/(2\pi)^3] dq^3 = Z(q) \{ \partial q / \partial \omega \} d\omega =$$

$$= Z(q) d\omega / \{ \partial \omega / \partial q \}$$

$/Z(q)$: q -térbeli állapotosság /

$$D(\omega) = Z(q) / \{ \partial \omega / \partial q \} \quad /D(\omega)$$
: ω -térbeli állapotosság/

$$D(\omega) = \{ \partial N / \partial \omega \}$$

$\omega(q)$ /skalár/ diszperziós reláció esetén:

$$Z(q) = \partial N / \partial q = V/(2\pi)^3 [\partial / \partial q \{ 4\pi/3 q^3 \}]_{\text{gömb térf.}}$$

$$Z(q) = V/(2\pi)^3 [4\pi q^2]_{\text{gömb felsz.}}$$

$$D(\omega) = V/(2\pi)^3 [4\pi q^2] / \{ \partial \omega / \partial q \}$$

Fonon spektrum :

1D-ben

$$D(\omega) = (L/2\pi) / \{ \partial \omega / \partial q \}$$

$$\omega = (2 \sqrt{k/m}) \sin(qa/2)$$

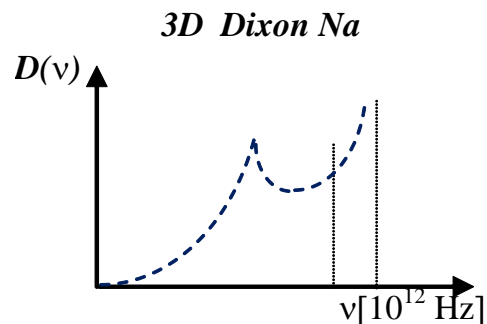
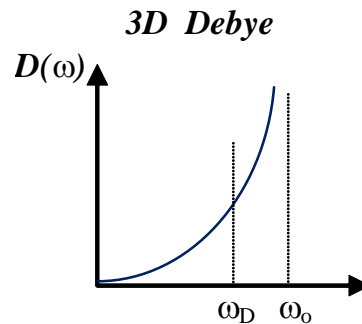
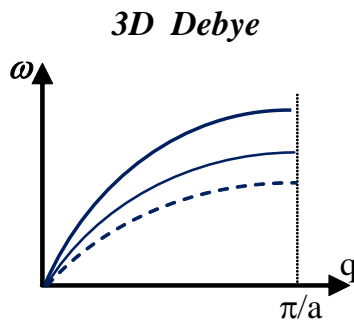
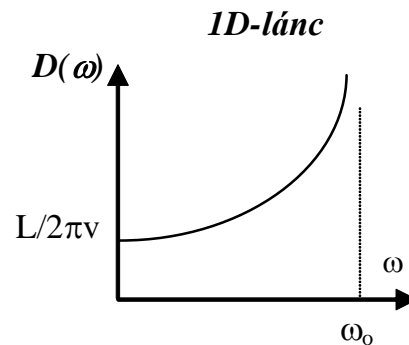
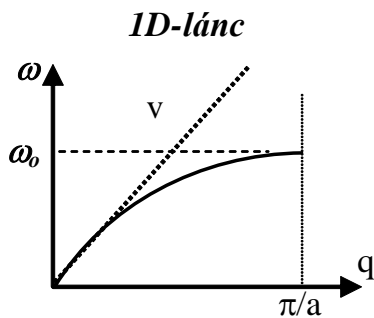
$$\{ \partial \omega / \partial q \} = (a \sqrt{k/m}) \cos(qa/2)$$

$$\begin{aligned} D(\omega) &= (L/2\pi) / \{ (a \sqrt{k/m}) \cos(qa/2) \} = \\ &= (L/2\pi) / \{ (a \sqrt{k/m}) \sqrt{1 - \sin^2(qa/2)} \} = \\ &= (L/2\pi a) / \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2} \quad ; \quad \text{ahol } \omega_0^2 = 4k/m \end{aligned}$$

1 D-ben $D(\omega)$ szinguláris / végtelen/

3 D-ben már nem okvetlenül (van Hove szingularitások)

$\{ \partial \omega / \partial q \} = 0$ a nevezőben, / pl. a Brillouin zóna határon/



Diszperziós reláció

Állapotsűrűség