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

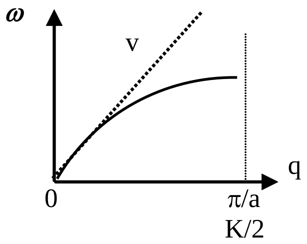
Rácsrezgések, diszperziós relációk, fonon spektrum

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

Az egyszerű diszperziós reláció:

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

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



Hosszúhullámú limit (kontinuum modell):

$\rho(\partial^2 u/\partial t^2) = c\,(\partial^2 u/\partial x^2)$ *a hullámegyenlet*

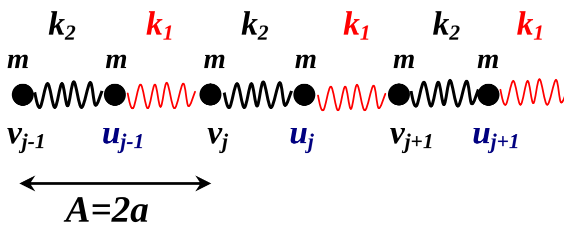
$$v = \sqrt{c/\rho} \quad ,$$

ahol $c = k\,a$ – *rugalmassági(Young) modulus;* $\rho = m/a$ - *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:

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

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

$$mC_1\,\omega^2 = C_1\,(k_1 + k_2) - C_2\,(k_2\,e^{iqa} + k_1\,e^{-iqa})$$
$$mC_2\,\omega^2 = C_2\,(k_1 + k_2) - C_1\,(k_1\,e^{iqa} + k_2\,e^{-iqa})$$

$$\begin{matrix} (m\omega^2 - (k_1 + k_2))C_1 & (k_2\,e^{iqa} + k_1\,e^{-iqa})\,C_2 \\ (k_1\,e^{iqa} + k_2\,e^{-iqa})\,C_1 & (m\omega^2 - (k_1 + k_2))C_2 \end{matrix}$$

$$\det = 0$$

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

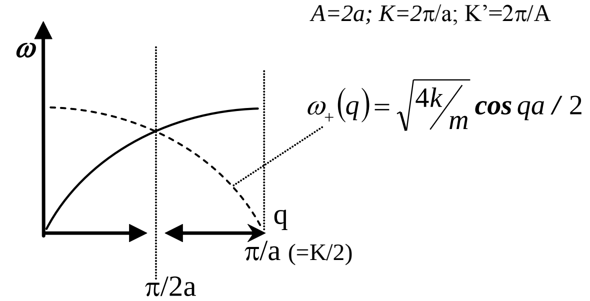
Ekkor

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

a) $\Delta k \to 0$ ***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) $k \to \Delta k$ ***esetén*** $\omega^2 = (2\,k/m)(1 \pm 1)$; $\omega = 2\sqrt{k/m}$, ;illetve 0

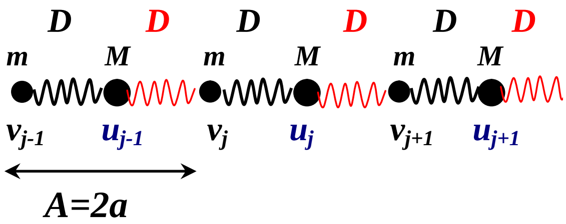
A=2a; K=2π/a; K'=2π/A

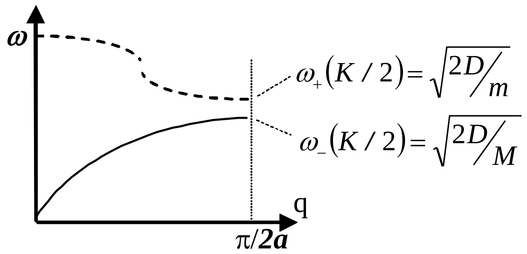


$\Delta k \to 0$

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

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





K/2 (= π/***A***)

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:

$$\sum_{\omega < \omega_i < \omega + \Delta\omega} D(\omega)\, \Delta\omega$$

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

Rácsrezgések állapotsűrűsége, fonon spektrum

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

***1D** -ben*

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

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

***3D** -ben*

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

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

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

/Z(q): q-térbeli állapotsűrűség /

$\mathbf{D(\omega) = Z(q) / \{\partial\omega/\partial q\}}$ */D(ω): ω-térbeli állapotsűrűség/*

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

ω(q) /skalár/ diszperziós reláció esetén:

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

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

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

Fonon spektrum :

1D *–ben*

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

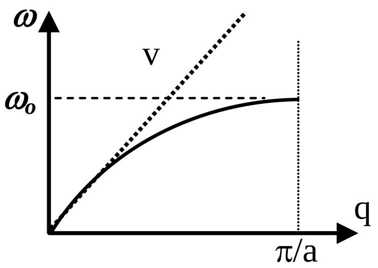
$$\omega = (2\sqrt{k/m})\ \sin(qa/2)$$
$$\{\partial\omega/\partial q\} = (a\sqrt{k/m})\ \cos(qa/2)$$

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

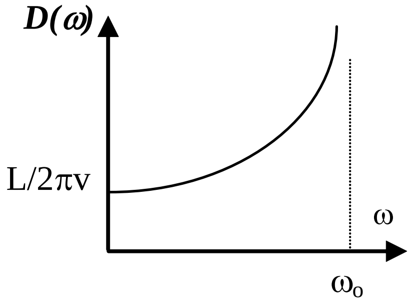
1 D*-ben* $D(\omega)$ *szinguláris / végtelen/*

3 D*-ben már nem okvetlenül (van Hove szingularitások)*
$\{\partial\omega/\partial q\} = 0$ *a nevezőben,/ pl. a Brillouin zóna határon/*

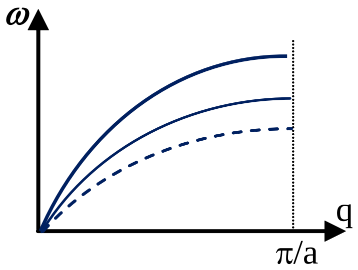
1D-lánc



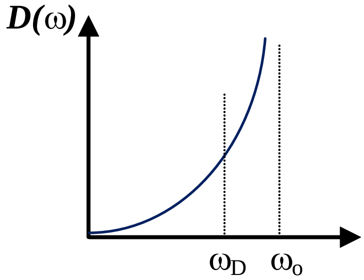
1D-lánc



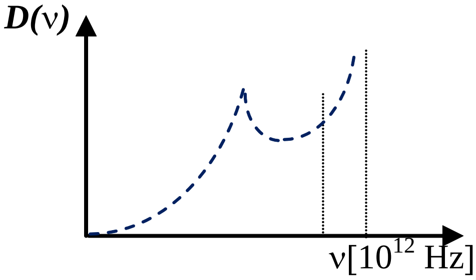
3D Debye



3D Debye



3D Dixon Na



Diszperziós reláció ***Állapotsűrűség***