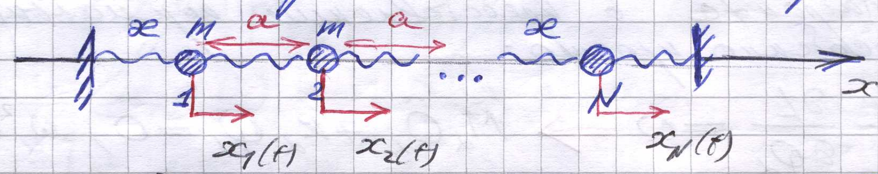
Лекция 9. Колебания линейных цепочек. Одномерная модель упругой кристаллической решётки.

§1. Модель одномерной моноатомной решётки.

Очень полезными для физики твердого тела являются одномерные модели упругой кристаллической решётки, используемые при объяснении тепловых свойств кристаллов. В качестве модели одномерной моноатомной кристаллической решётки рассмотрим цепочку одинаковых атомов массы m, связанных одинаковыми пружинками жёсткости $\varkappa$, могущих двигаться по прямой вдоль оси.



Концы цепочки будем считать закреплёнными. Пусть $x_1(t), \dots, x_N(t)$ — смещения атомов из положений равновесия. Лагранжиан такой цепочки, очевидно, имеет вид:

$$L = \sum_{k=1}^{N} \frac{m\dot{x}_k^2}{2} - \frac{\varkappa}{2}\left(x_1^2 + (x_2 - x_1)^2 + (x_3 - x_2)^2 + \dots + (x_N - x_{N-1})^2 + x_N^2\right)$$

Пользуясь лагранжианом, выпишем уравнения движения для „атомов" цепочки:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_k} - \frac{\partial L}{\partial x_k} = 0, \quad 1 \le k \le N \quad \Longrightarrow$$

$$m\ddot{x}_1 + \varkappa(2x_1 - x_2) = 0,$$
$$m\ddot{x}_2 + \varkappa(2x_2 - x_1 - x_3) = 0,$$
$$\dots\dots\dots$$
$$m\ddot{x}_n + \varkappa(2x_n - x_{n-1} - x_{n+1}) = 0,$$
$$\dots\dots\dots$$
$$m\ddot{x}_{N-1} + \varkappa(2x_{N-1} - x_{N-2} - x_N) = 0,$$
$$m\ddot{x}_N + \varkappa(2x_N - x_{N-1}) = 0$$

Лишь первое и последнее уравнения приведённой системы отличаются от остальных. Для единообразия введём дополнительные координаты $x_0 \equiv 0$ и $x_{N+1} \equiv 0$ закрепления концов цепочки, тогда уравнения системы перепишутся одинаково:

$$\begin{cases} m\ddot{x}_n + \varkappa(2x_n - x_{n-1} - x_{n+1}) = 0, & 1 \le n \le N \\ x_0 = x_{N+1} = 0 & \text{— дополнительное, граничное условие.} \end{cases}$$

Не обращая пока внимания на дополнит. условие, будем искать решение приведённых уравнений в виде бегущих вдоль оси x волн

$$x_n = A e^{i(\pm kna - \omega t)}$$

Здесь a — расстояние между атомами покоящейся цепочки, k — так называемое волновое число.

Подставляя $x_n(t)$ в уравнение движения, получим

$$0 = -m\omega^2 e^{i(\pm kna-\omega t)} + \varkappa\left(2e^{i(\pm kna-\omega t)} - e^{i(\pm k(n-1)a-\omega t)} - e^{i(\pm k(n+1)a-\omega t)}\right) = 0$$

Сокращая на экспоненту при $m\omega^2$, получим

$$-m\omega^2(k) + \varkappa(2-2\cos ka) = 0 \Rightarrow \omega(k) = 2\sqrt{\frac{\varkappa}{m}}\sin\left|\frac{ka}{2}\right|$$

$$\boxed{\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\varkappa}{m}}\sin\frac{ka}{2}}$$

Дисперсионное ур-е — устанавливает связь между частотой $\omega=\omega(k)$ и волновым числом.

Удовлетворим теперь дополнительным граничным условиям $x_0 = x_{N+1} = 0$. Для этого образуем суперпозицию двух бегущих в разные стороны по цепочке волн сжатия-разрежения:

$$x_n(t) = Ae^{i(kna-\omega t)} + Be^{i(-kna-\omega t)}$$

$$x_0 \equiv 0 \Rightarrow A = -B \Rightarrow x_n(t) = 2iA\sin kna\, e^{-i\omega t}$$

$$x_{N+1} \equiv 0 \Rightarrow \sin k(N+1)a = 0 \rightarrow k^{(s)} = \frac{s\pi}{(N+1)a}$$

Различные значения частот нормальных колебаний получаются при $1 \le s \le N$:

$$\omega_s(k) = 2\sqrt{\frac{\varkappa}{m}}\left|\sin\frac{s\pi}{(N+1)a}\right|, \quad 1 \le s \le N$$

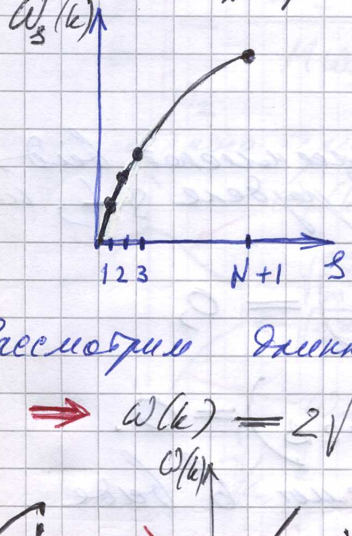
— частоты N различных нормальных колебаний

$$x_n^{(s)}(t) = \mathrm{Re}\left\{2iA\sin(k^{(s)}na)e^{-i\omega_s(k)t}\right\} =$$

$$= \sin\left(\frac{ns\pi}{N+1}\right)c_s\cos(\omega_s(k)t+\alpha_s) = \sin(n\varphi_s)\,q_s(t)$$

Вектор $s^{\text{го}}$ нормального колебания:

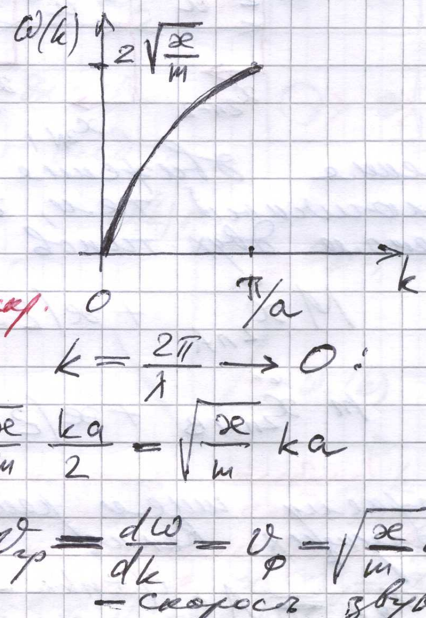
$$x(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_N(t) \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2}{N+1}}\begin{pmatrix} \sin\varphi_s \\ \sin 2\varphi_s \\ \dots \\ \sin N\varphi_s \end{pmatrix} q_s(t), \quad q_s(t) = c_s\cos(\omega_s(k)t+\alpha_s)$$



Обычно $N \gg 1$ $\Rightarrow$

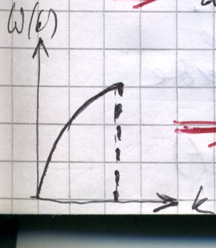
$$k_s = \frac{s\pi}{(N+1)a}$$

— принимает квазинепр. значения.

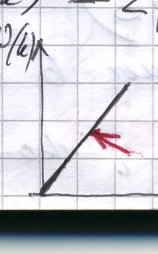


Рассмотрим длинноволновый предел $k = \frac{2\pi}{\lambda} \to 0$:

$$\Rightarrow \omega(k) = 2\sqrt{\frac{\varkappa}{m}}\sin\frac{ka}{2}\Big|_{\substack{\lambda\to\infty \text{ т.е.}\\ k\to 0}} \simeq 2\sqrt{\frac{\varkappa}{m}}\frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{\varkappa}{m}}ka$$



$\Rightarrow$



$$\lambda/a \gg 1, \quad ka \ll 1 \Rightarrow v_{гр} = \frac{d\omega}{dk} = v_\varphi = \sqrt{\frac{\varkappa}{m}}a = \frac{\omega}{k}$$

— скорость звука.

Поучительно получить в длинноволновом пределе уравнение движения атомов цепочки. Физически рассматриваемый предел означает выполнение следующих условий:

$$\frac{\lambda}{a} \gg 1,\quad ka \ll 1;\qquad a\to 0,\ m\to 0,\ \varkappa\to\infty,\ \text{но}\ \frac{m}{a}=\rho=\text{const},\quad F=\varkappa a=\text{const}$$

$$x_n(t)\to \xi(na,t)=\xi(x,t);\quad x_{n\pm1}(t)\to\xi(x\pm a,t)$$

$$m\ddot{x}_n+\varkappa(2x_n-x_{n-1}-x_{n+1})=0 \Rightarrow m\frac{\partial^2\xi(x,t)}{\partial t^2}=-\varkappa(2\xi(x,t)-\xi(x-a,t)-\xi(x+a,t))$$

т.е.

$$m\frac{\partial^2\xi}{\partial t^2}\simeq-\varkappa\left(\cancel{2\xi(x,t)}-\cancel{\xi(x,t)}+\cancel{\frac{a}{1!}\frac{\partial\xi}{\partial x}}-\frac{a^2}{2!}\frac{\partial^2\xi}{\partial x^2}-\cancel{\xi(x,t)}-\cancel{\frac{a}{1!}\frac{\partial\xi}{\partial x}}-\frac{a^2}{2!}\frac{\partial^2\xi}{\partial x^2}\right)$$

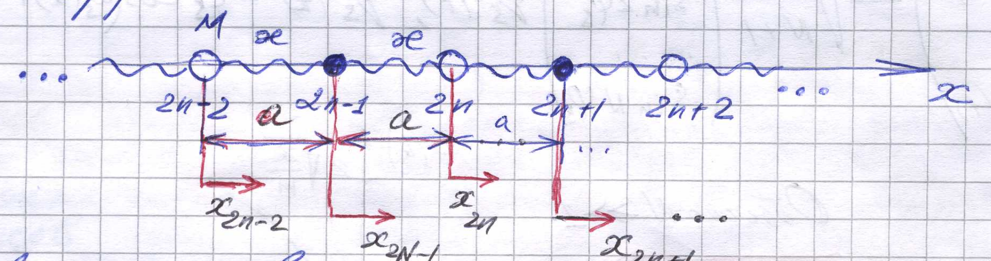
$$\Rightarrow \frac{\partial^2\xi}{\partial t^2}-\frac{\varkappa a\,a}{m}\frac{\partial^2\xi(x,t)}{\partial x^2}=\frac{\partial^2\xi}{\partial t^2}-\frac{F}{\rho}\frac{\partial^2\xi}{\partial x^2}=0$$

$$v=\sqrt{\frac{F}{\rho}},\qquad \boxed{\frac{\partial^2\xi(x,t)}{\partial t^2}-v^2\frac{\partial^2\xi(x,t)}{\partial x^2}=0}$$

Одномерное волновое уравнение.

§2. Модель одномерной кристаллической решётки с элементарной ячейкой из двух различных атомов.

Рассмотрим кратко модель одномерного бесконечного кристалла с элементарной ячейкой, состоящей из двух типов атомов. В отличие от предыдущего раздела поработаем с бесконечной цепочкой чередующихся атомов двух типов, с массами m и M, расположенными на одинаковых равновесных расстояниях a друг от друга:



Уравнения движения атомов цепочки имеют вид, аналогичный тем, что выписаны в разделе §1, но с учётом двух типов атомов:

$$M\ddot{x}_{2nA}+\varkappa(2x_{2nA}-x_{2n-1B}-x_{2n+1A})=0,$$

$$m\ddot{x}_{2n+1B}+\varkappa(2x_{2n+1B}-x_{2nA}-x_{2n+2B})=0.$$

По-прежнему ищем решения этой системы в виде бегущих волн:

$$x_{nA}=Ae^{i(\pm nka-\omega t)},\qquad x_{nB}=Be^{i(\pm nka-\omega t)}$$

Подставляя x_{nA} и x_{nB} в уравнения системы, получим:

$$\begin{cases} -\omega^2(k)MA + \varkappa(2A-2B\cos ka) = 0, \\ -\omega^2(k)mB + \varkappa(2B-2A\cos ka) = 0. \end{cases}$$ — однородная сист. ур-ний

Чтобы такая система имела нетривиальное решение, её определитель должен равняться нулю:

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2+2\varkappa, & -2\varkappa\cos ka \\ -2\varkappa\cos ka, & -m\omega^2+2\varkappa \end{vmatrix} = 0,$$ то есть получаем следующее дисперсионное уравнение:

$$\Rightarrow Mm\omega^4 - 2\varkappa(m+M)\omega^2 + 4\varkappa^2(1-\cos^2 ka) = 0,$$

корни которого даются формулой:

$$\omega_\pm^2 = \frac{2\varkappa(m+M) \pm \sqrt{4\varkappa^2(m+M)^2 - 16\varkappa^2(1-\cos^2 ka)mM}}{2mM}.$$

В длинноволновом пределе, $ka = \frac{2\pi a}{\lambda} \ll 1$, получаются следующие приближенные формулы:

$$\omega_\pm^2(k)\Big|_{ka\ll1} \simeq \frac{2\varkappa(m+M) \pm 2\varkappa(m+M)\left[1 - \frac{4\varkappa^2 mM}{(m+M)^2\varkappa^2}\frac{k^2a^2}{2}\right]}{2mM}$$

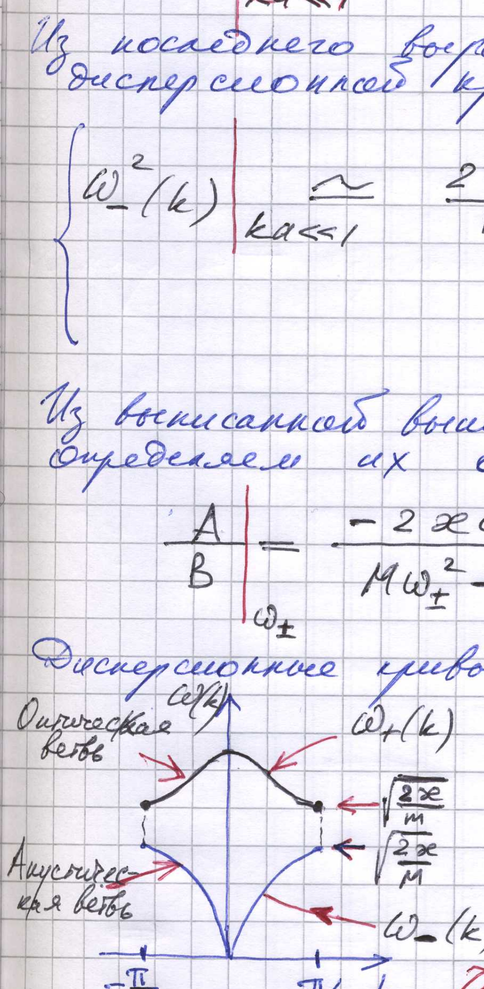
Из последнего выражения определяем две ветви $\omega_\pm^2(k)$ дисперсионной кривой:

$$\left\{\omega_-^2(k)\Big|_{ka\ll1} \simeq \frac{2\varkappa k^2a^2}{m+M},\right. \qquad \left\{\omega_+^2(k)\Big|_{ka\ll1} \simeq \frac{4\varkappa(m+M) - \frac{4\varkappa^2 mMk^2a^2}{m+M}}{2mM}\Big|_{ka\ll1} \rightarrow 2\frac{\varkappa(m+M)}{mM}\right.$$

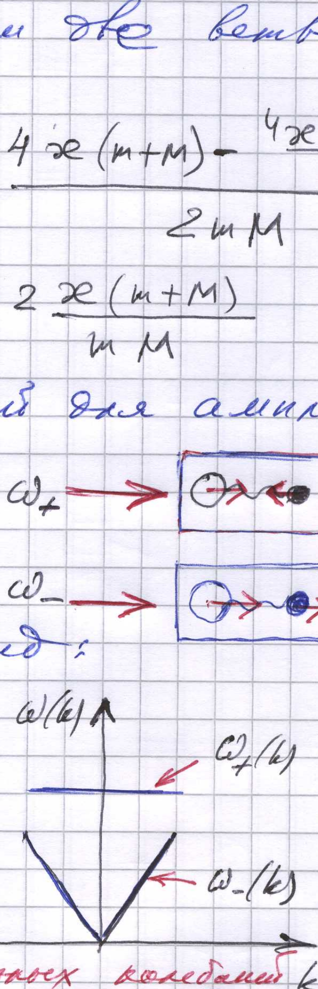
Из выписанной выше системы уравнений для амплитуд A и B определяем их отношения:

$$\frac{A}{B}\Big|_{\omega_\pm} = \frac{-2\varkappa\cos ka}{M\omega_\pm^2 - 2\varkappa}$$ < 0, для ω_+ — атомы в ячейке колебл. в противофазе; > 0, для ω_- — Атомы в ячейке колеблются в фазе.

Дисперсионные кривые $\omega_\pm(k)$ имеют вид:



длинноволновой предел $|ka| \ll 1$



Число различных нормальных колебаний в кристалле с N ячейками опр. следующим образом: Кристалл неогр. продолжают в обе стороны, периодически его повторяя. Затем накладывают периодич. граничные условия $x_{n+2N} = x_n$ $\Rightarrow$

$\Rightarrow e^{ik2Na} = 1 \Rightarrow k^{(s)} = \frac{\pi s}{2Na}$, $-N \le s \le N$, $-\frac{\pi}{2a} \le k^{(s)} \le \frac{\pi}{2a}$