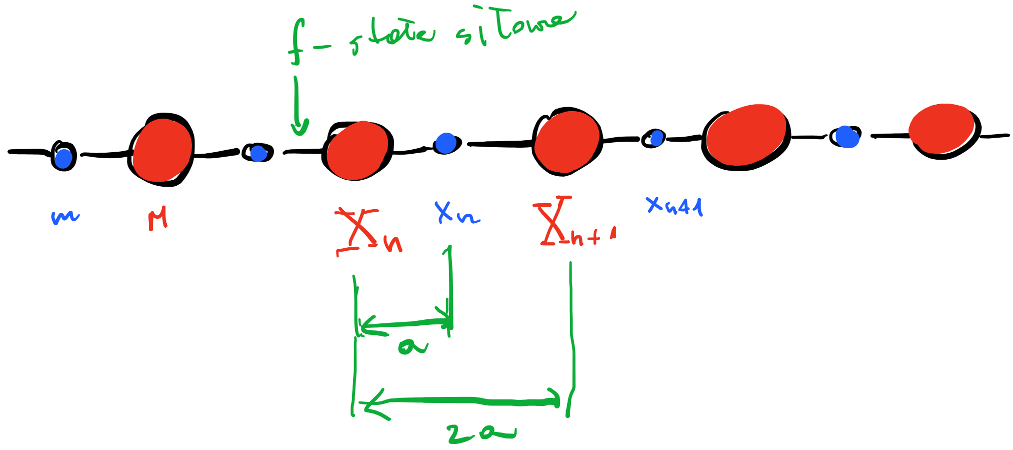
Zad. 2 (ćwiczenia 12)

czwartek, 26 stycznia 2017 13:48

3. Znaleźć widmo drgań jednowymiarowego łańcucha złożonego z atomów o masach m i M ułożonych naprzemiennie i sprzężonych siłą harmoniczną z najbliższymi sąsiadami. Zapisać hamiltonian za pomocą operatorów kreacji i anihilacji fononów. Zbadać widmo tego układu.



$$
\begin{cases}
m\ddot{x}_n = f\left(X_{n+1} + X_{n-1} - 2x_i\right) \\
M\ddot{X}_n = f\left(x_n + x_{2n} - 2X_{n+1}\right)
\end{cases}
$$

Zakładamy rozwiązania w postaci

$$
\begin{pmatrix} x_n \\ X_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} e^{i\left[k\begin{pmatrix} x_n \\ X_n \end{pmatrix} - \omega t\right]}
$$

Po podstawieniu

$$
\begin{cases}
-\omega^2 m A = f\left[1 + e^{-ika}\right] B - 2fA \\
-\omega^2 M B = f\left[e^{ika} - 1\right] A - 2fB
\end{cases}
$$

Warunek istnienia nietrywialnych rozwiązań

$$\begin{vmatrix} 2f - m\omega^2 & -f\left(1+e^{-ika}\right) \\ -f\left(1+e^{ika}\right) & 2f - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$mM\omega^4 - 2f(m+M)\omega^2 + 2f(1-\cos ka) = 0$$

$\frac{2\pi}{a}$ - okres cos

$$\omega_\pm^2 = f\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm \frac{\sqrt{m^2+M^2+2mM\cos ka}}{mM}\right]$$

Rozważamy granicę długofalową, tj. $ka \ll 1$

$$\cos(ka) \simeq 1 - \frac{(ka)^2}{2}, \text{ wtedy}$$

$$\omega_\pm^2 \simeq f\left[\frac{1}{\mu} \pm \frac{1}{\mu}\left(1 - \frac{\mu}{m+M}(ka)^2\right)^{1/2}\right]$$

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \text{ - masa zredukowana}$$

$$\omega_+^2 \simeq \frac{2f}{\mu}\left[1 - \frac{\mu}{2(m+M)}(ka)^2\right] = \Delta - \alpha(ka)^2$$

W granicy $ka \to 0$, mamy niezerową energię wzbudzeń Δ.
Jest to tak zwany **mod optyczny**.

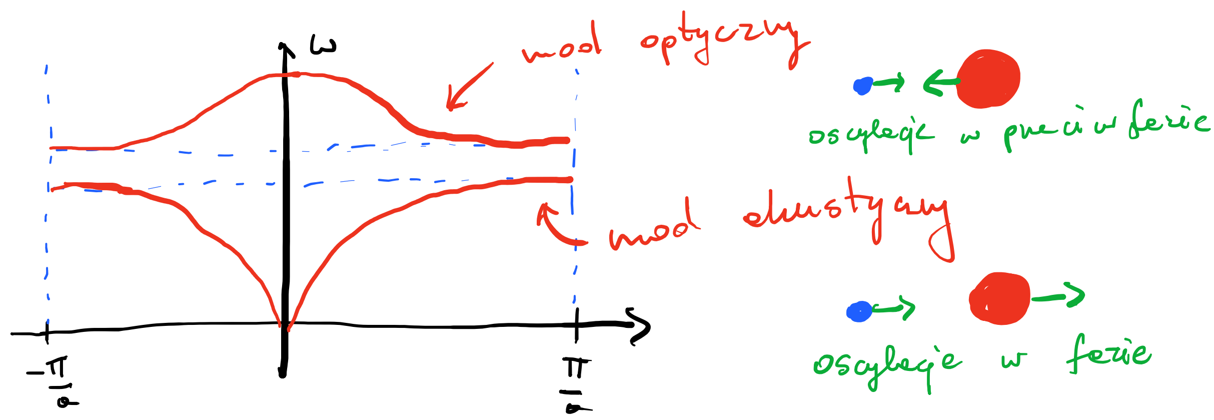
$$\omega_-^2 \simeq f\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{m+M}(ka)^2 = (ck)^2$$

prędkość dźwięku

Jest to tak zwany **mod akustyczny**.

Możemy naszkicować relację dyspersji do pierwszej strefy Brillouina:

$$-\frac{\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$$



Hamiltonian oscylatora harmonicznego:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, r} \left(\Pi_r^+(\vec{k}) \Pi_r(\vec{k}) + \omega_r^2(\vec{k}) Q_r^+(\vec{k}) Q_r(\vec{k}) \right)$$

Nakładamy warunki komutacji na $\Pi_r(\vec{k})$ i $Q_r(\vec{k})$:

$$[Q_r(\vec{k}), Q_{r'}(\vec{k}')]_- = [\Pi_r(\vec{k}), \Pi_{r'}(\vec{k}')]_- = 0$$

$$[\Pi_r(\vec{k}), Q_{r'}(\vec{k}')]_- = \frac{\hbar}{i} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{rr'}$$

Wprowadzamy operatory $b_{\vec{k} r}$ i $b^+_{\vec{k}, r}$:

$$Q_r(\vec{k}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_r(\vec{k})}} \left\{ b_{\vec{k} r} + b^+_{-\vec{k}, r} \right\}$$

$$\Pi_r(\vec{k}) = i \sqrt{\frac{1}{2} \hbar \omega_r(\vec{k})} \left\{ b^+_{-\vec{k} r} - b_{\vec{k} r} \right\}$$

$$Q_r^+(-\vec{q}) = Q_r(\vec{q}) \qquad \Pi_r^+(-\vec{q}) = \Pi_r(\vec{q})$$

$$[b_{\vec{k} r}, b_{\vec{k}', r'}] = \left(4\hbar^2 \omega_r(\vec{k}) \omega_{r'}(\vec{k}')\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot$$

$$\cdot\left\{ i\omega_r(\vec{k})\left[Q_r(\vec{k}), \Pi_r^+(\vec{k})\right] + i\omega_{r'}(\vec{k}')\left[\Pi_r^+(\vec{k}), Q_{r'}(\vec{k}')\right]\right\} = 0$$

$$\left[b_{\vec{k}r}, b^+_{\vec{k}',r'}\right] = \left(4\hbar^2\omega_r(\vec{k})\omega_{r'}(\vec{k}')\right)^{-1/2}.$$

$$\left\{ -i\omega_r(\vec{k})\left[Q_r(\vec{k}), \Pi_{r'}(\vec{k}')\right] + i\omega_{r'}(\vec{k}')\left[\Pi_r^+(\vec{k}), Q_{r'}^+(\vec{k}')\right]\right\} =$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\,\delta_{rr'}$$

$$\hat{H} = \sum_{\vec{q}r} \frac{1}{2}\left(\Pi_r^+(\vec{q})\,\Pi_r(\vec{q}) + \omega_r^2 Q_r^+(\vec{q})\,Q_r(\vec{q})\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}r} \hbar\omega_r(\vec{q})\left[b^+_{\vec{q}r}b_{\vec{q}r} + b^+_{-\vec{q},r}b_{-\vec{q},r} + 1\right] \underset{\uparrow}{=}$$

$$\text{bo } \omega_r(-\vec{q}) = \omega_r(\vec{q})$$

$$= \sum_{\vec{q},r} \hbar\omega_r(\vec{q})\left[b^+_{\vec{q},r}b_{\vec{q},r} + \frac{1}{2}\right]$$