מבוא לתורת המצב המוצק

פתרון תרגיל מס׳ 3

.1

א. נסמן ב- u_l את הסטיה ממיקום שיווי המשקל של האטום השמאלי במולקולה מס׳ l, וב-
v_l את הסטיה ממיקום שיווי המשקל של האטום הימני במולקולה מס׳ l. משוואות
התנועה הן :

$$\begin{cases} M\dfrac{\mathrm{d}^2u_l}{\mathrm{d}t^2}=\alpha_1\left(v_l-u_l\right)+\alpha_2\left(v_{l-1}-u_l\right) \\ M\dfrac{\mathrm{d}^2v_l}{\mathrm{d}t^2}=\alpha_1\left(u_l-v_l\right)+\alpha_2\left(u_{l+1}-v_l\right) \end{cases}$$

נציב פתרון גלי, $u_l=ue^{i(kal-\omega t)},\ \ v_l=ve^{i(kal-\omega t)}$, ונקבל :

$$\begin{cases} [M\omega^2-(\alpha_1+\alpha_2)]u+(\alpha_1+\alpha_2e^{-ika})v=0 \\ (\alpha_1+\alpha_2e^{ika})u+[M\omega^2-(\alpha_1+\alpha_2)]v=0 \end{cases}$$

כדי לקבל פתרונות שאינם אפס עבור האמפליטודות u ו- v הדטרמיננטה של מערכת
המשוואות חייבת להתאפס :

$$0=M^2\omega^4-2(\alpha_1+\alpha_2)M\omega^2+2\alpha_1\alpha_2(1-\cos ka)$$

שני הפתרונות (ענפי הנפיצה) הם :

$$\omega_\pm=\sqrt{\frac{1}{M}\left(\alpha_1+\alpha_2\pm\sqrt{\alpha_1^2+\alpha_2^2+2\alpha_1\alpha_2\cos ka}\right)}$$

ב. עבור אורכי גל גדולים, $ka<<1$:

$$\omega_\pm^2\approx\frac{1}{M}\left[\alpha_1+\alpha_2\pm\sqrt{\alpha_1^2+\alpha_2^2+2\alpha_1\alpha_2(1-a^2k^2/2)}\right]=\frac{\alpha_1+\alpha_2}{M}\left[1\pm\sqrt{1-\frac{a^2\alpha_1\alpha_2}{(\alpha_1+\alpha_2)^2}k^2}\right]$$

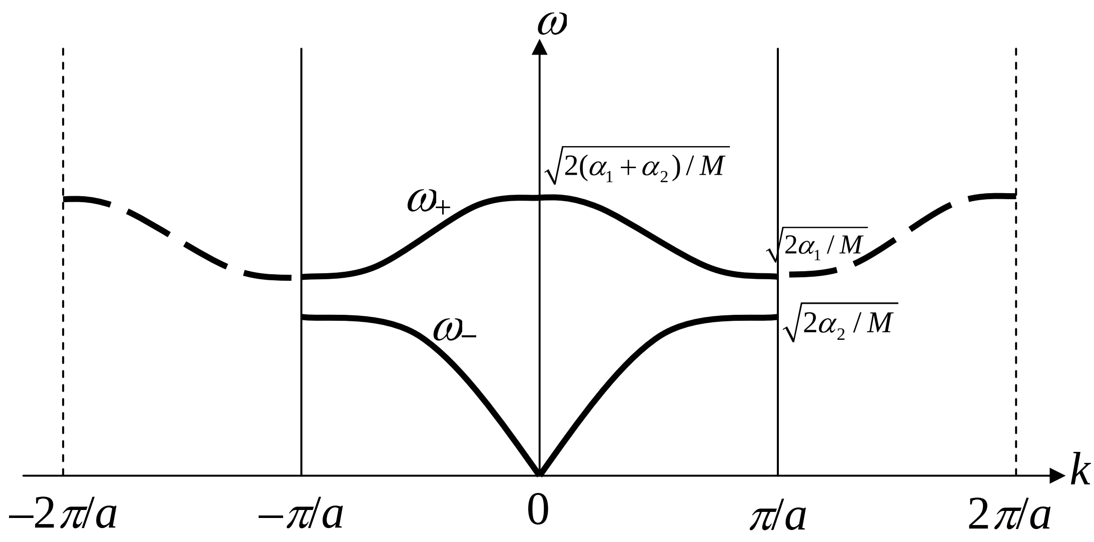
$$\approx\frac{\alpha_1+\alpha_2}{M}\left[1\pm\left(1-\frac{a^2\alpha_1\alpha_2}{2(\alpha_1+\alpha_2)^2}k^2\right)\right]$$

כלומר : $\omega_+\approx\sqrt{\dfrac{2(\alpha_1+\alpha_2)}{M}},\quad \omega_-\approx\sqrt{\dfrac{\alpha_1\alpha_2a^2}{2M(\alpha_1+\alpha_2)}}k$

מכאן גם מהירות הקול : $v_s=\sqrt{\dfrac{\alpha_1\alpha_2a^2}{2M(\alpha_1+\alpha_2)}}$

בקצות איזור ברילואין הראשון, $ka=\pm\pi$:

$$\omega_\pm^2=\frac{1}{M}\left[(\alpha_1+\alpha_2)\pm(\alpha_1-\alpha_2)\right]\Rightarrow\omega_-=\sqrt{\frac{2\alpha_2}{M}}<\omega_+=\sqrt{\frac{2\alpha_1}{M}}$$



ג. כש- $\alpha_1=\alpha_2=\alpha$ ו- $\delta=a/2$, קבוע השריג משתנה ל- $a'=a/2$, ואיזור ברילואין הראשון מוכפל אפוא ל- $\left(-\frac{2\pi}{a},\frac{2\pi}{a}\right)=\left(-\frac{\pi}{a'},\frac{\pi}{a'}\right)$. יחס הנפיצה הופך ל-

$$\omega^2=\frac{\alpha}{M}\left[2\pm\sqrt{2(1+\cos 2ka')}\right]=\frac{2\alpha}{M}\left(1\pm|\cos ka'|\right)$$

אם נבחר את ענף ה-($-$) עבור $ka'<\pi/2$ ואת ענף ה-(+) עבור $ka'>\pi/2$, נקבל את יחס הנפיצה שמצאנו עבור שריג מונואטומי:

$$\omega^2=\frac{2\alpha}{M}\left(1-\cos ka'\right)=\frac{4\alpha}{M}\sin^2\frac{ka'}{2}$$

בגרף שלמעלה, החלקים המקווקווים בענף האופטי בדיוק ממשיכים את הענף האקוסטי הקודם אל תוך האיזור החדש כדי ליצור ענף אקוסטי חדש אחד.

2.

א. משוואות התנועה:

$$M\frac{d^2u_l}{dt^2}=C\left[\left(u_{l+1}-u_l\right)+\left(u_{l-1}-u_l\right)\right]$$

מציבים פתרון גלי:

$$u_l=\tilde{u}e^{i(kal-\omega t)}$$

ומקבלים:

$$-M\omega^2=C\left(e^{ika}-1+e^{-ika}-1\right)$$

ומכאן:

$$\omega^2=\frac{2C}{M}\left(1-\cos ka\right)=\frac{4C}{M}\sin^2\frac{ka}{2}\ \Rightarrow\ \omega(k)=\sqrt{\frac{4C}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$$

ב. האנרגיה הכוללת ניתנת ע"י סכום האנרגיות הקינטיות של כל האטומים והאנרגיות הפוטנציאליות של כל זוגות השכנים הקרובים:

$$E=\sum_l\left[\frac{1}{2}M\left(\frac{du_l}{dt}\right)^2+\frac{1}{2}C\left(u_l-u_{l-1}\right)^2\right]$$

נציב $u_l(t)=\tilde{u}\cos\left(lka-\omega t\right)$

ונקבל:

$$E=\sum_l\left\{\frac{1}{2}M\omega^2\tilde{u}^2\sin^2\left(lka-\omega t\right)+\frac{1}{2}C\tilde{u}^2\left[\cos\left(lka-\omega t\right)-\cos\left((l-1)ka-\omega t\right)\right]^2\right\}$$

$$=\sum_l\left\{\frac{1}{2}M\omega^2\tilde{u}^2\sin^2\left(lka-\omega t\right)+\frac{1}{2}C\tilde{u}^2 4\sin^2\frac{ka}{2}\sin^2\left((l-1/2)ka-\omega t\right)\right\}$$

כעת נשתמש ביחס הנפיצה מסעיף א', $4C\sin^2\frac{ka}{2}=M\omega^2$, ונקבל:

$$E=\frac{1}{2}M\omega^2\tilde{u}^2\sum\left[\sin^2\left(lka-\omega t\right)+\sin^2\left((l-1/2)ka-\omega t\right)\right]$$

הממוצע של כל אחד מה- $\sin^2(\ )$ על פני זמן מחזור נותן ½, ולכן:

$$\left\langle E\right\rangle=\frac{1}{2}M\omega^2\tilde{u}^2\sum_l 1=\frac{1}{2}NM\omega^2\tilde{u}^2$$

כלומר האנרגיה הממוצעת פר אטום היא אכן $\frac{1}{2}M\omega^2\tilde{u}^2$.