

Kmity reťky 1

1. Harmonická aproximácia

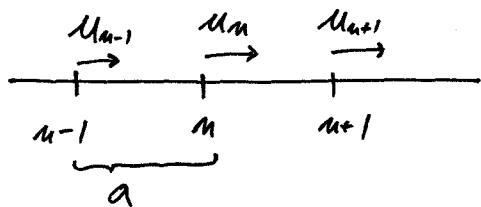
nech $\vec{R}_n$ sú rovnovážne polohy atómov a nech $\vec{u}_n$ sú malé výchylky
Potenciálna energia krúžku:

$$U = U(\{\vec{R}_n\}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial R_i^\alpha \partial R_j^\beta} u_i^\alpha u_j^\beta + \dots$$

minimum $\Rightarrow$ lineárny člen = 0

✓ Harmonickej aproximácii zodpovedá členy úmerné u^3 a menšie

2. Klasické kmity 1D krúžku



$$L = \frac{1}{2} M \sum_n \dot{u}_n^2 - \frac{K}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2$$

poloh. rovnica $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{u}_n} \right) = \frac{\partial L}{\partial u_n}$

$$M \ddot{u}_n = -K(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

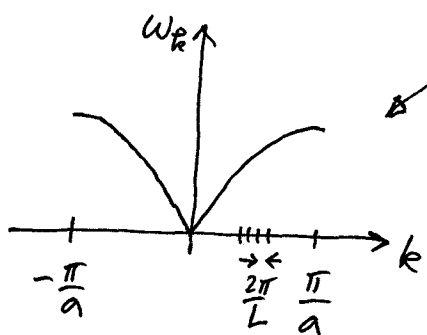
ansatz $u_n \propto e^{ikna - i\omega t} \rightarrow \boxed{\omega_k = \Omega \sqrt{2(1 - \cos ka)}} \quad \Omega = \sqrt{\frac{K}{M}}$

uvážime krúžok dĺžky $L = Na$

3 period. okraj. podm. $u_{m+N} = u_m \rightarrow k = \frac{2\pi}{L} \cdot n$

Naviac, vln. vektor k a $k + \frac{2\pi}{a}$ popisujú ten istý kmitajúci stav:

$$e^{i(k + \frac{2\pi}{a})na} = e^{ikna}$$



graf funkcie ω_k ; pre $k \rightarrow 0$: $\omega_k = v k$

✓ 1BZ je $\frac{2\pi/a}{2\pi/L} = \frac{L}{a} = N$ k- bodov

3) 1D křivá - kvantová teorie

nové řádky:
$$Q_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n u_n e^{ikna}$$

N řádků naměřeno pomocí u_n

~~Q_k~~
$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k Q_k e^{-ikna}$$
 inverzní transformace.

$u_n = u_n^\dagger$ (hermitický operátor)

$$Q_k^\dagger = Q_{-k}$$

Lagrangian v nových proměnných:

$$\sum_n \dot{u}_n^2 = \frac{1}{N} \sum_{kk'} \dot{Q}_k \dot{Q}_{k'} \sum_n e^{i(k+k')na} = \sum_k \dot{Q}_k \dot{Q}_{-k}$$

$$\begin{aligned} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 &= \sum_{kk'} Q_k Q_{k'} (e^{ik} - 1)(e^{ik'} - 1) \frac{1}{N} \sum_n e^{i(k+k')na} \\ &= 2 \sum_k (1 - \cos k) Q_k Q_{-k} \end{aligned}$$

$$L(Q, \dot{Q}) = \frac{M}{2} \sum_k \dot{Q}_k \dot{Q}_{-k} - K \sum_k (1 - \cos k) Q_k Q_{-k}$$

zobecněná rovnice pohybu: $P_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} = M \dot{Q}_{-k} \rightarrow P_k^\dagger = P_{-k}$

hamiltonián

$$H = \sum_k P_k \dot{Q}_k - L \rightarrow H = \frac{1}{2M} \sum_k P_k P_{-k} + \frac{M}{2} \sum_k \omega_k^2 Q_k Q_{-k}$$

kanonické komutace: $[Q_k, P_{k'}] = i\hbar \delta_{kk'}$

energetická reprezentace:

$$\left. \begin{aligned} Q_k &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_k}} (a_k + a_{-k}^\dagger) \\ P_k &= i\sqrt{\frac{\hbar M\omega_k}{2}} (-a_{-k} + a_k^\dagger) \end{aligned} \right\} \rightarrow \begin{aligned} [a_k, a_{k'}^\dagger] &= \delta_{kk'} \\ [a_k, a_{k'}] &= [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0 \end{aligned}$$

hamiltonián v energetickéj reprezentácii: $H = \sum_k \hbar \omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right)$

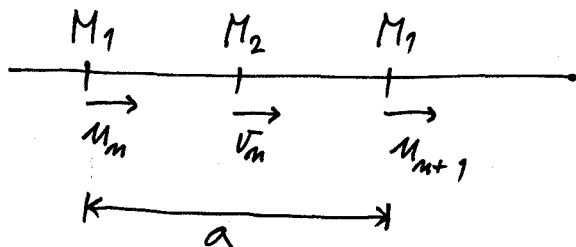
↓
energia kvantovaná v jednotkách $\hbar \omega_k$

kvantum energie: fonón (kvantum vibrácie)

grupová rýchlosť: $\vec{v}_k = \frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}}$.. rýchlosť šírenia kvantov energie

$\hbar \vec{k}$ = "kvantový impulz" fonónu $\approx$ impulz fonónu počítaný modulo $\hbar \vec{K}$
($\vec{K}$ = vektor inv. mriežky)

4) Lineárna mriežka s dvojatómovou báťou



$$L = \frac{1}{2} \sum_n \left[M_1 \dot{u}_m^2 + M_2 \dot{v}_m^2 \right] - \frac{K}{2} \sum_n \left[(v_m - u_m)^2 + (u_{m+1} - v_m)^2 \right]$$

polohové rovnice:

$$\begin{aligned} M_1 \ddot{u}_m &= K(v_m + v_{m-1} - 2u_m) \\ M_2 \ddot{v}_m &= K(u_m + u_{m+1} - 2v_m) \end{aligned}$$

ansatz: $u_m = u e^{i k a m - i \omega_k t}$

$v_m = v e^{i k a m - i \omega_k t}$

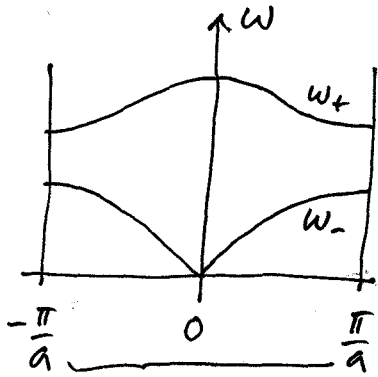
ansatz dosadený
do poloh. rovníc:

$$\begin{pmatrix} 2K - M_1 \omega^2 & -(1 + e^{-i k a})K \\ -(1 + e^{i k a})K & 2K - M_2 \omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0$$

nehtriválne riešenie pre $\text{Det} = 0$:

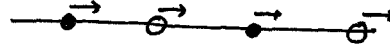
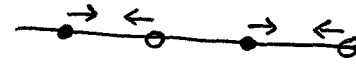
$$M_1 M_2 \omega^4 - 2K(M_1 + M_2) \omega^2 + 2K^2(1 - \cos ka) = 0$$

$$\omega^2 = \frac{K(M_1 + M_2) \pm K \sqrt{(M_1 + M_2)^2 - 2M_1 M_2 (1 - \cos ka)}}{M_1 M_2}$$



optická vlna

akustická vlna



N bodov $\times 2$ vlny = $2N$ stupňov volnosti, ako aj má byť

$k \rightarrow 0$: $\omega_- = v k$, $v = a \sqrt{\frac{K}{2(M_1 + M_2)}}$... zvuková vlna; $u \approx v$

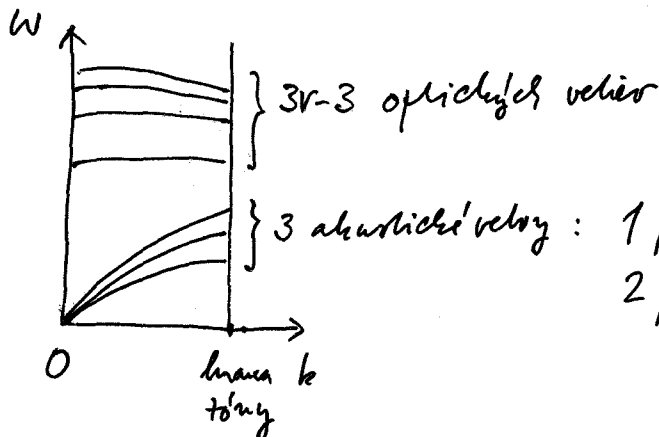
$\omega_+ = \sqrt{2K(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2})}$; $v \approx -\frac{M_1}{M_2} u$ (tamto podmieňuje v proliferácii)

$k \rightarrow \pm \frac{\pi}{a}$: $\omega_+ = \sqrt{\frac{2K}{M_{\min}}}$ } zafixovaný pás rytmu, ak $M_1 = M_2$
 $\omega_- = \sqrt{\frac{2K}{M_{\max}}}$ } (ako aj má byť)

5) 3D mriežka s N atómami v bábke

$3N$ stupňov volnosti - 3 transverálne kmitania alebo celok } zanedbateľné
 - 3 rotačné kmitania alebo celok } keďže $N \gg 1$

$\rightarrow 3$ vlny



1 poddĺžny tón,
 2 priečne tóny $\rightarrow$ vôľa malého tónu
 rýchlosti!