RNDr. Jan Prokleška Ph.D.
prokles@mag.mff.cuni.cz
(95155) 2772
`kfes.troja.mff.cuni.cz/fyzikaIV`

cvičení FIV 21.4.2022

10.1 *Mějme jednoduchou, jednoatomovou, dvourozměrnou čtvercovou mřížku. Mřížková konstanta je a, hmotnost atomů m. Interakci mezi atomy modelujme pomocí pružinky, tuhosti pružinek mezi nejbližšími sousedy (hrana čtverce) označme k_1, mezi druhými nejbližšími sousedy (úhlopříčka čtverce) k_2. Veškeré ostatní interakce zanedbejte.*

Jaké jsou frekvence oscilací módu s $k = (\frac{\pi}{a}, 0)$?

Uvažme, že mřížka má rozměry $N \times M$. Povšimneme si, že pro daný mód platí, že dvě sousední řady (kolmé na směr šíření) atomů jsou vždy v protifázi, tj. jejich výchylka a rychlost jsou v absolutní hodnotě stejné, ale mají opačnou velikost (resp. směr). Dalším poznatkem je, že zadání vyhovují dvě možná řešení — podélné (výchylky atomů ve směru šíření) a příčné (výchylky kolmé) vlny.

Problém můžeme buď řešit přes pohybové rovnice, nebo (vzhledem k očekávanému tvaru výsledku) přes energetickou bilanci systému, zvolíme druhý způsob.

Uvažme nejprve podélné kmity. Pro kinetickou energii systému platí

$$E_{\mathrm{k}} = MN\frac{1}{2}m\dot{u}^2 \ ,$$

kde $\dot{u}$ je rychlost atomu (její velikost je pro všechny atomy v mřížce v daném okamžiku stejná).

Potenciální energie bude dána součtem dvou příspěvků, sumou 'přes hrany čtverců'[1] a sumou 'přes úhlopříčky čtverců'[2], tedy

$$E_{\mathrm{p}} = MN\frac{1}{2}k_1(2u)^2 + 2MN\frac{1}{2}k_2\left(\sqrt{2}u\right)^2 \ ,$$

kde u je výchylka atomu (její velikost je opět pro všechny atomy v mřížce v daném okamžiku opět stejná).

V součtu $E = E_{\mathrm{k}} + E_{\mathrm{p}}$ poznáváme $E = \frac{1}{2}\tilde{M}\dot{x}^2 + \frac{1}{2}\tilde{K}(x)^2$ což je což je energetická bilance oscilátoru s frekvencí $\omega = \sqrt{\frac{\tilde{K}}{\tilde{M}}}$. Pro frekvenci podélných kmitů našeho systému tedy platí

$$\omega_{\mathrm{L}} = 2\sqrt{\frac{k_1 + k_2}{m}} \ .$$

[1] Délky hran se mění jen ve směru šíření (a to o $\pm 2u$), tj. jedna na základní buňku.

[2] Dvě na každý čtverec, změna je rovna změně uhlopříčky čtverce při změně jedné ze stran, tj. (pro malé u)

$$\sqrt{2}a + \Delta = \sqrt{(a+2u)^2 + a^2} = \sqrt{2a^2 + 4au + 4u^2} \approx \sqrt{2}a\sqrt{1 + \frac{2u}{a}} \approx \sqrt{2}a + \sqrt{2}u \Rightarrow \Delta = \sqrt{2}u$$

Zcela anologicky budeme postupovat v případě příčných kmitů, kinetická energie je stejná, potenciální obsahuje pouze příspěvek od 'úhlopříček' (příspěvek od 'hran' je úměrný u^2 a proto jej zanedbáme)

$$E = MN\frac{1}{2}m\dot{u}^2 + 2MN\frac{1}{2}k_2\left(\sqrt{2}u\right)^2$$

a tedy

$$\omega_{\mathrm{T}} = 2\sqrt{\frac{k_2}{m}}\ .$$

10.2 *Lineární řetízek polarizovatelných molekul má mřížkovou konstantu a. Molekuly jsou fixovány na svých pozicích, ale mají vnitřní stupeň volnosti popsaný pohybovou rovnicí*

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = -\omega_0^2 p + E\alpha\omega_0^2\ ,$$

kde p je elektrický dipólový moment molekuly (paralelně k řetízku), α je polarizovatelnost a E je lokální elektrické pole. Systém je na nulové teplotě, kvantověmechanické efekty zanedbáváme, každá molekula "cítí"pole od ostatní. Určete a načrtněte disperzní křivku $\omega(k)$ pro malé amplitudy polarizační vlny (optické fonony). Diskutujte chování $\omega(0)$ pro různá α.

Řešení budeme hledat ve tvaru rovinné vlny $p_n = p^\star \mathrm{e}^{\mathrm{i}kan}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$, ze zadání víme, že el. pole[3] působící na danou molekulu je superpozicí příspěvků od ostatních molekul, tj.

$$\begin{aligned} E_n = \sum_{n\neq m} E_{nm} &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{n\neq m}\frac{2p_m}{d_{nm}^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{n\neq m}\frac{2p^\star \mathrm{e}^{\mathrm{i}kam}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{a^3|n-m|^3} \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2p^\star \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{a^3}\sum_{n\neq m}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kam}}{|n-m|^3}\ . \end{aligned}$$

Ze sumy si pro větším přehlednost vytkneme $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kan}$, budeme sčítat přes páry $m = n \pm 1$; $m = n \pm 2$ atd. a využijeme zápisu komplexní exponenciely pomoci trigonometrických fcí

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2p^\star \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{a^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kan}\sum_{m>0}^{N/2}\left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kam}}{|m|^3} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka(-m)}}{|-m|^3}\right] \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2p^\star \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{a^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kan}\sum_{m>0}^{N/2}\frac{2\cos kam}{m^3} \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2p^\star \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{a^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kan}S(k) \end{aligned}$$

Takto vyjádřenou el. intenzitu v místě n-té molekuly dosadíme do naší pohybové rovnice spolu s hledaným tvarem p_n a po úpravách získáme vztah

$$\begin{aligned} \omega &= \omega_0\sqrt{1 - \frac{2}{a^3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\alpha S(k)} \\ \omega_{\alpha\to 0} &= \omega_0\left(1 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{\alpha}{a^3}S(k)\right)\ . \end{aligned}$$

[3] el. pole od m-té molekuly (pro tuto geometrii) na n-tou je $E_{nm} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2p_m}{d_{nm}^3}$, kde $d_{nm} = a|n-m|$

Diskuse (měknutí optických modů):

Pro $k \to 0$ lze psát $S(k)$ ve tvaru $S(k) = \sum \frac{1}{m^3}$, což je konstanta.[4] Je tedy zřejmé, že s rostoucím α klesá frekvence kmitů ($k = 0$), až se pro určité $\alpha_{\text{krit.}}$ stane imaginární. Za těchto podmínek (parameterů) se stane systém feroelektrickým, na řetízku se objeví spontání polarizace.[5]

---

[4] Apéryho konstanta, či fční hodnota Riemannovy zeta fce $\zeta(3) \approx 1.2$.

[5] Naše řešení předpokládá polarizaci oscilující kolem 0, při $\alpha > \alpha_{\text{krit.}}$ se berou v úvahu anharmonické členy a p se případně rozvíjí kolem nové rovnovážné hodnoty.