מצב מוצק - תרגיל מס' 3

1. וקטורי קיטוב ומודים עצמיים בשריג FCC

השתמש בעובדה כי ה'מטריצה הדינמית' של FCC מהצורה:

$$\mathbf{D} = \sum_{\mathbf{R}} \sin\left(\frac{1}{2}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}\right)[A\mathbf{1} + B\mathbf{RR}]$$

כאשר הסכום הוא על 12 השכנים הקרובים של FCC, **RR** דיאדה והמקדמים:
$A = 2\phi'(d)/d, B = 2[\phi''(d) - \phi'(d)/d]$

א.הראו כי עבור $\mathbf{k}$=(k,0,0) מקבלים:

$$\omega_L = \sqrt{\frac{8A+4B}{M}}\sin\tfrac{1}{4}ka$$

$$\omega_T = \sqrt{\frac{8A+2B}{M}}\sin\tfrac{1}{4}ka$$

שימו לב: לא כל הRים משתתפים.

ב. מהם התדירויות והמודים הנורמלם עבור $\mathbf{k}$ בכיוון (1,1,1). השתמשו בסימטריה של הגביש.

ג. (רשות) הראו כי עבור $\mathbf{k}=(k,k,0)/\sqrt{2}$ מקבלים מוד אחד אורכי:

$$\omega_L = \sqrt{\frac{8A+4B}{M}\sin^2\left(\tfrac{1}{4}\tfrac{ka}{\sqrt{2}}\right) + \frac{2A+2B}{M}\sin^2\left(\tfrac{1}{2}\tfrac{ka}{\sqrt{2}}\right)}$$

אחד רוחבי בכיוון z עם תדירות

$$\omega_T^{(1)} = \sqrt{\frac{8A+4B}{M}\sin^2\left(\tfrac{1}{4}\tfrac{ka}{\sqrt{2}}\right) + \frac{2A}{M}\sin^2\left(\tfrac{1}{2}\tfrac{ka}{\sqrt{2}}\right)}$$

ושלישי ניצב לכיוון z עם תדירות

$$\omega_T^{(1)} = \sqrt{\frac{8A+2B}{M}\sin^2\left(\tfrac{1}{4}\tfrac{ka}{\sqrt{2}}\right) + \frac{2A}{M}\sin^2\left(\tfrac{1}{2}\tfrac{ka}{\sqrt{2}}\right)}$$

2. אופרטורי יצירה וחיסול של אוסצילטור הרמוני.

בכיתה הגדרתם אופרטורי יצירה וחיסול של פונונים:

$$a_{k,s} = \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{2\hbar}}[\sqrt{\rho\omega_{k,s}}\vec{\varepsilon}_s \cdot \vec{u}_k + i\sqrt{\frac{1}{\rho\omega_{k,s}}}\vec{\varepsilon}_s \cdot \vec{\Pi}_k$$

$$a^+{}_{k,s} = \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{2\hbar}}[\sqrt{\rho\omega_{k,s}}\vec{\varepsilon}_s \cdot \vec{u}_{-k} - i\sqrt{\frac{1}{\rho\omega_{k,s}}}\vec{\varepsilon}_s \cdot \vec{\Pi}_{-k}$$

א. מצאו את יחסי החילוף של האופרטורים a_k ו a_k^+.

ב. הוכיחו את היחס הבא עבור איבר התזוזה משיווי משקל u:

$$\vec{u}(\vec{r}) = \sum_{k,s}\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V\omega_{k,s}}}\vec{\varepsilon}(a_{k,s} + a^+{}_{-k,s})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

חלצו את u_k מתוך האופרטורים ובצעו טרנספורם פוריה לתוצאה.

ג. מצאו את הביטוי עבור $\dot{\vec{u}}(\vec{r})$. השתמשו בקשר בין $\dot{\vec{u}}(\vec{r})$ לבין התנע.

ד. הוכיחו את המשוואה הבאה:

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{u}(\vec{r}) = i\sum_{k,s}\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V\omega_{k,s}}}\vec{k}\cdot\vec{\varepsilon}(a_{k,s} + a^+{}_{-k,s})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

ה. מצאו את הביטוי עבור $\nabla^2\vec{u}$.

ו. הראו כי את ההמילטוניאן של המודל האלסטי

$$H = \int d^3r\left(\tfrac{1}{2\rho}\vec{\Pi}^2 + \tfrac{1}{2}(\mu+\lambda)(\vec{\nabla}\cdot\vec{u})^2 - \tfrac{1}{2}\mu\vec{u}\cdot\nabla^2\vec{u}\right)$$

ניתן לכתיבה באופן הבא:

$$H = \sum_{k,s}\hbar\omega_{k,s}(a^+{}_{-k,s}a_{k,s} + \frac{1}{2})$$

3. התרחבות גביש בקירוב דבאי

השתמשו בקירוב דבאי ($\omega(k)=c\mathbf{k}$) והתוצאות מהסעיפים הקודמים וחשבו

א. $\langle\vec{u}(r)\rangle$ בטמפרטורה כלשהיא.

ב. $\langle|\vec{u}(r)|^2\rangle$ בטמפרטורה $T=0$.

ג. $\langle|\vec{u}(r)|^2\rangle, k_BT << \hbar\omega_D$ כאשר ω_D הנה תדירות דבאי.

ד. $\langle|\vec{u}(r)|^2\rangle, k_BT >> \hbar\omega_D$ באיזו טמפרטורה גודל זה מקבל סדר גודל של רבוע המרחק בין נקודות שריג (a^2), ביחס לאנרגיית דבאי.