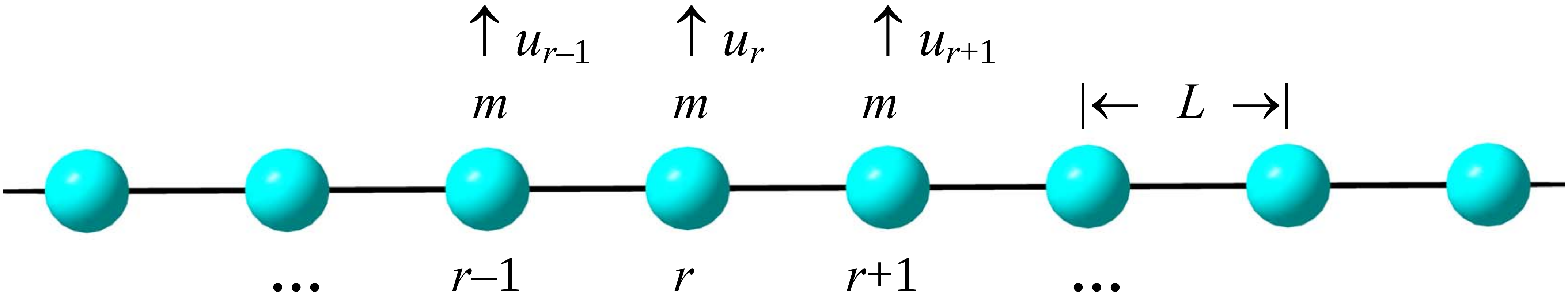
Поперечные колебания бесконечной одноатомной цепочки



В приближении закона Гука сила, действующая на r-й атом:

$$F_r = f_\perp (u_{r+1} - u_r) - f_\perp (u_r - u_{r-1}) = f_\perp (u_{r+1} + u_{r-1} - 2u_r)$$

Здесь $f_\perp$ – поперечная силовая постоянная (только соседние связи).

Уравнение Ньютона для r-го атома:

$$m\left(d^2u_r/dt^2\right) = f_\perp (u_{r+1} + u_{r-1} - 2u_r),\ \ r = \ldots -2, -1, 0, 1, 2 \ldots$$

Как и при рассмотрении продольных смещений, ищем решение в виде монохроматической волны (*нормальное колебание*):

$$u_r(t) = A\,e^{i(krL-\omega t)}$$

(ω – *частота волны*, k – *волновое число*: $k = 2\pi/\lambda$, λ – *длина волны*)

Подставляем в уравнение Ньютона и сокращаем $u_r \neq 0$ и получаем *закон дисперсии частоты* $\omega = \omega(k)$ (с учетом $\omega > 0$):

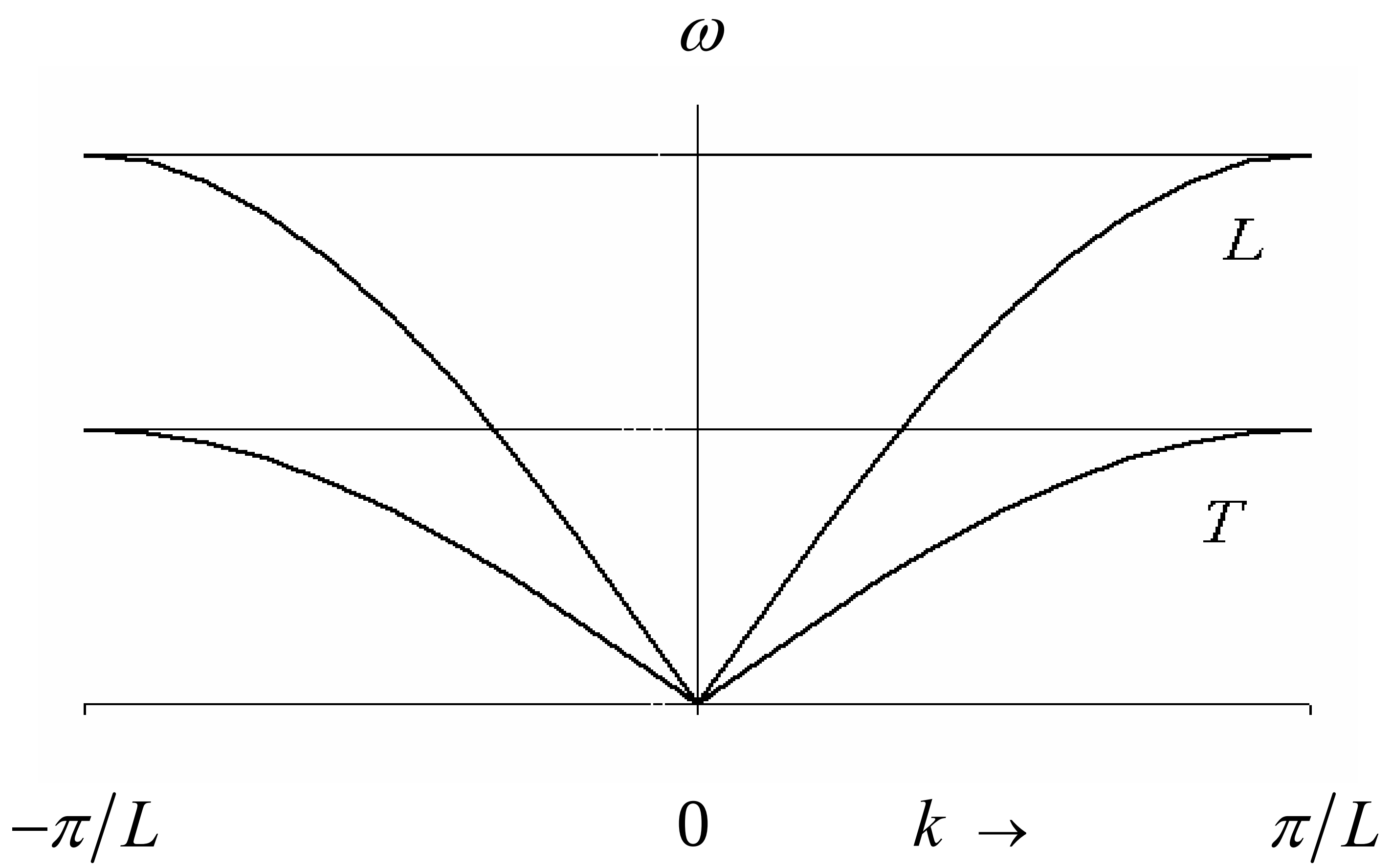
$$\omega^{\perp}(k) = \omega^{\perp}_{\max}\left|\sin(kL/2)\right|, \quad \omega^{\perp}_{\max} = 2\sqrt{f_{\perp}/m}$$

Снова имеем *непрерывный спектр колебаний (зону)* $\forall\omega \in \left[0,\ \omega^{\perp}_{\max}\right]$

- При малых k ($kL \ll 1$): $\omega^{\perp}(k) = \omega^{\perp}_{\max}\left|\sin(kL/2)\right| \approx c^{\perp}_s|k|$,

где $c^{\perp}_s = L\sqrt{f_{\perp}/m}$ – *поперечная скорость звука*

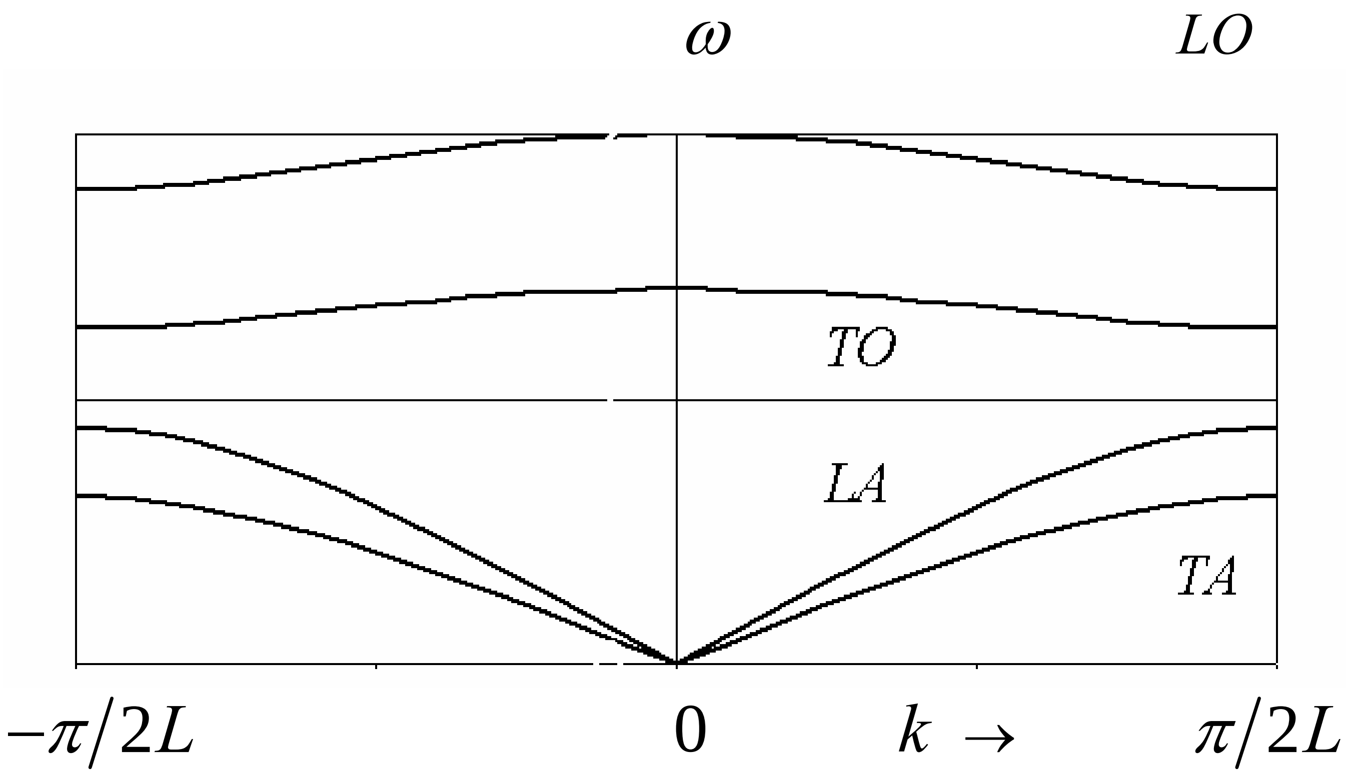
Полная дисперсионная диаграмма одноатомной цепочки с учетом продольных и поперечных колебаний ($f_{\|} = 4 f_{\perp}$):



L – продольная ветвь (*longitudinal*), T – поперечная (*transversal*)

$\left[-\pi/L;\ \pi/L\right]$ – *первая зона Бриллюэна (ЗБ)*.

В случае двухатомной цепочки аналогично можно выделить *четыре* ветви дисперсии: *продольную и поперечную акустические ветви (LA, TA)*, а также *продольную и поперечную оптические ветви (LO, TO):*



- первая ЗБ: $\left[-\pi/2L;\ \pi/2L\right]$ (т.к. период цепочки равен $2L$).
- спектр частот состоит из *трех* зон (*TA+LA, TO, LO*), которые при определенных соотношениях параметров могут перекрываться.

Плотность состояний (*density of states, DOS*)

Рассмотрим число колебаний (нормальных мод), приходящихся на интервал значений волнового числа $\left(k, k+dk\right)$ в одноатомной цепочке:

$$dN(k) = \tilde{g}\left(k\right)dk$$

Здесь $g\left(k\right)$ – *плотность состояний*.

При каждом $\left|k\right| \neq 0$ имеются две волны ($+k$ и $-k$) $\Rightarrow$ $\tilde{g}\left(k\right) = \mathrm{const}$

Удобно нормировать ее на длину звена цепочки и на «единицу длины» зоны Бриллюэна (*аналог нормировки на фазовый объем в статистике*):

$$dN(k) = \frac{2\,dk}{L\left(2\pi / L\right)} = \frac{dk}{\pi} \quad \Rightarrow \quad \tilde{g}\left(k\right) = \frac{1}{\pi}$$

Тогда : $$\int dN(k) = \int_{-\pi/L}^{\pi/L} \tilde{g}(k)\,dk = \frac{1}{\pi}\frac{2\pi}{L} = \frac{2}{L}$$

Можно выразить плотность состояний через частоту:

$$dN = g(\omega)\,d\omega = \tilde{g}(k)\,dk \quad \Rightarrow \quad g(\omega) = \tilde{g}(k)\frac{dk}{d\omega} = \frac{1}{\pi}\frac{dk}{d\omega}$$

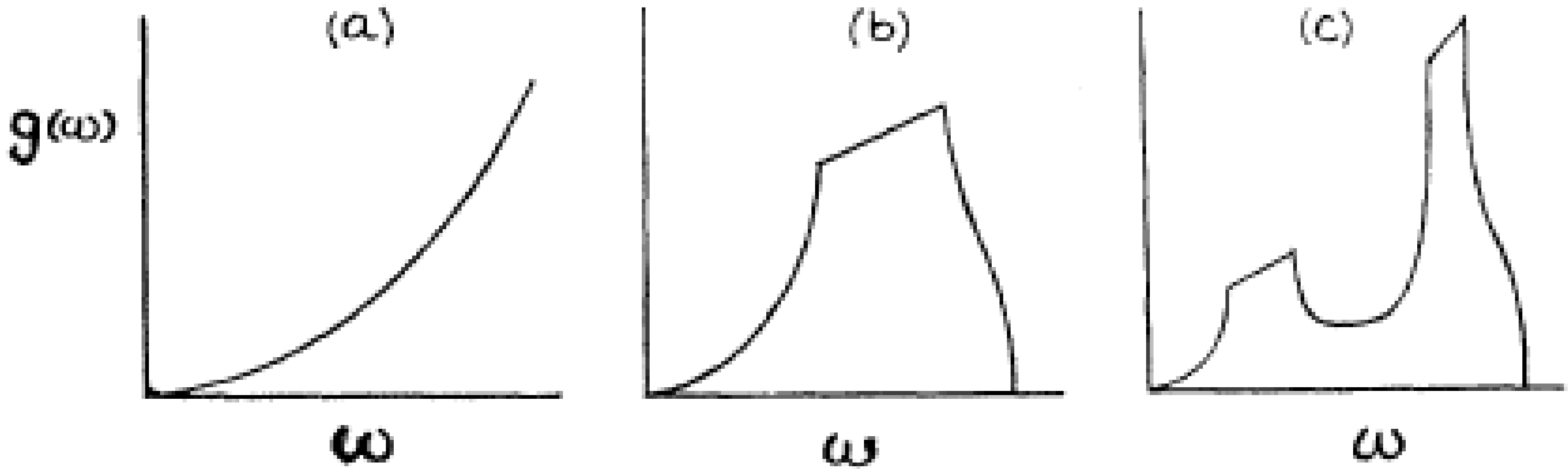
Подставляя закон дисперсии для одноатомной цепочки ($k > 0$):

$$\omega(k) = \omega_{\max}\sin(kL/2) \quad \Rightarrow \quad k(\omega) = \frac{2}{L}\arcsin(\omega/\omega_{\max}) \quad \Rightarrow$$

$$\frac{dk}{d\omega} = \frac{2}{L\omega_{\max}\sqrt{1-(\omega/\omega_{\max})^2}} \quad \Rightarrow \quad g(\omega) = \frac{2}{\pi L\omega_{\max}\sqrt{1-(\omega/\omega_{\max})^2}}$$

Видно, что плотность состояний имеет *особенность* на верхнем пределе частоты (на границе зоны Бриллюэна) – обращается в бесконечность.

Типичные примеры особенностей плотности состояния для простой трехмерной кубической решетки с различными параметрами.



Montroll E.W., Potts R.B., *Phys. Rev*. **100**, 525 (1955)