Трансляционная симметрия и ее применение (продолжение)

В прошлый раз мы показали, что для любых трансляций вида:

$$x \to x + nL, \quad n \in \mathbb{Z},$$

собственные функции операторов $\hat{T}_{nL}\,\psi(x) = \psi(x - nL)$ имеют вид:

$$\varphi_k(x) = u(x)\exp(ikx),$$

где $u(x)$ – периодическая функция с периодом L:

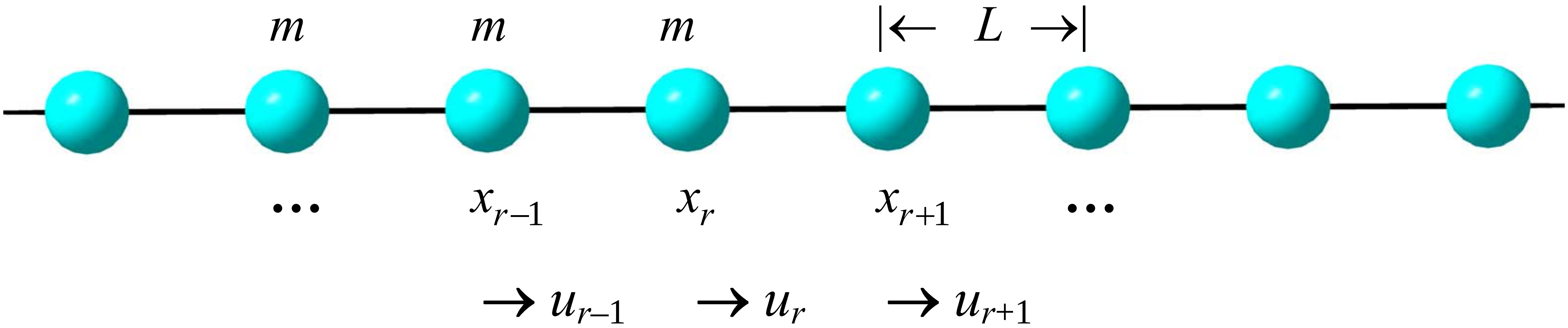
$$\hat{T}_{nL}\,\varphi_k(x) = u(x - nL)\exp\big(ik(x - nL)\big) = u(x)\exp\big(ik(x - nL)\big) = e^{-iknL}\,\varphi_k(x)$$

- Функция $\varphi_k(x) = u(x)\exp(ikx)$ образует ***базис одномерного представления*** Γ_k группы трансляций решетки с ***характером***:

$$\chi_k(n) = \exp(-iknL)$$

- Волновое число $k \in \mathbb{R}$ приобретает теоретико-групповой смысл: оно обозначает одномерные представления группы трансляций решетки.

Трансляционная симметрия колебаний бесконечной цепочки



Аналогия с квантовой механикой: совокупность смещений атомов удобно рассматривать как функцию дискретной переменной:

$$u_r(t) \equiv u(x_r, t), \qquad x_r = rL, \quad r = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \dots$$

Тогда можно определить действие операторов трансляции:

$$\hat{T}_{nL}\, u(x_r, t) = u(x_r - nL, t)$$

Введем ***симметризованные смещения***:

$$\xi_k(x_r) = A \ \exp(ikx_r)$$

- Они преобразуются по одномерным представлениям Γ_k группы трансляций цепочки:

$$\hat{T}_{nL} \ \xi_k(x_r) = A \exp\left[ik(x_r - nL)\right] = \exp\left[-iknL\right] \cdot \xi_k(x_r)$$

- Формы нормальных колебаний $Q_k(x_r, t)$ ***однозначно*** определяются заданием типа трансляционной симметрии Γ_k:

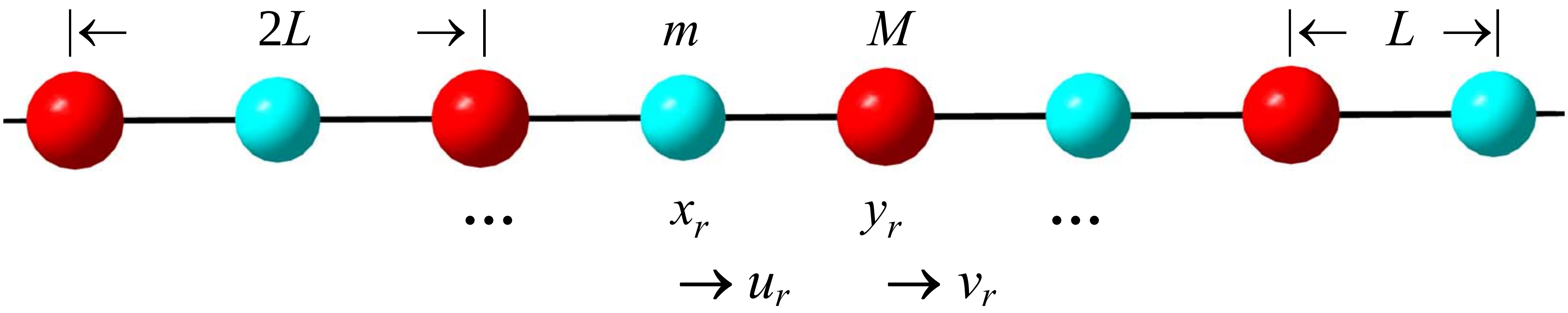
$$Q_k(x_r, t) = \xi_k(x_r) \ \exp(\pm i \omega t) \equiv A \ \exp\left[i(kx_r \pm \omega t)\right]$$

Подставляя в уравнения Ньютона, получаем закон дисперсии:

$$\omega(k) = \omega_{\max} \left|\sin(kL/2)\right|, \qquad \omega_{\max} = 2\sqrt{f/m}$$

(*См. Лекцию № 1*)

Бесконечная двухатомная цепочка



Симметризованные смещения отдельно для атомов двух сортов:

$$\xi_k(x_r) = A\exp(ikx_r), \qquad \eta_k(y_r) = B\exp(iky_r)$$

- Те и другие независимо преобразуются по представлениям Γ_k:

$$\hat{T}_{n\cdot 2L}\,\xi_k(x_r) = A\,\exp\left[ik(x_r - n\cdot 2L)\right] = \exp\left[-ikn\cdot 2L\right]\cdot\xi_k(x_r)$$

$$\hat{T}_{n\cdot 2L}\,\eta_k(y_r) = B\,\exp\left[ik(y_r - n\cdot 2L)\right] = \exp\left[-ikn\cdot 2L\right]\cdot\eta_k(y_r)$$

- **Формы нормальных колебаний отсюда еще не определяются!**

(соотношение амплитуд A и B из трансляционной симметрии *не следует*)

Построение нормальных колебаний из симметризованных смещений:

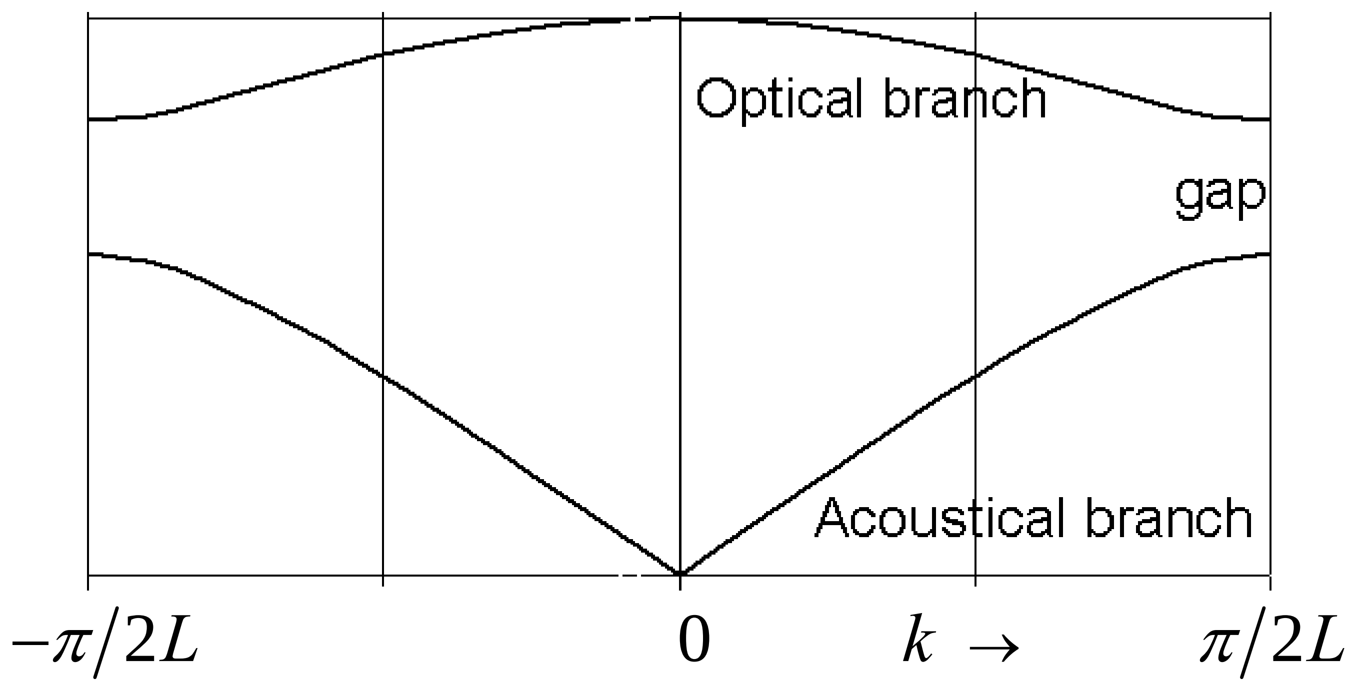
- умножение на частотные множители:

$$\xi_k\left(x_r,t\right)=A\exp\left[i\left(kx_r\pm\omega t\right)\right],\qquad \eta_k\left(y_r,t\right)=B\exp\left[i\left(ky_r\pm\omega t\right)\right]$$

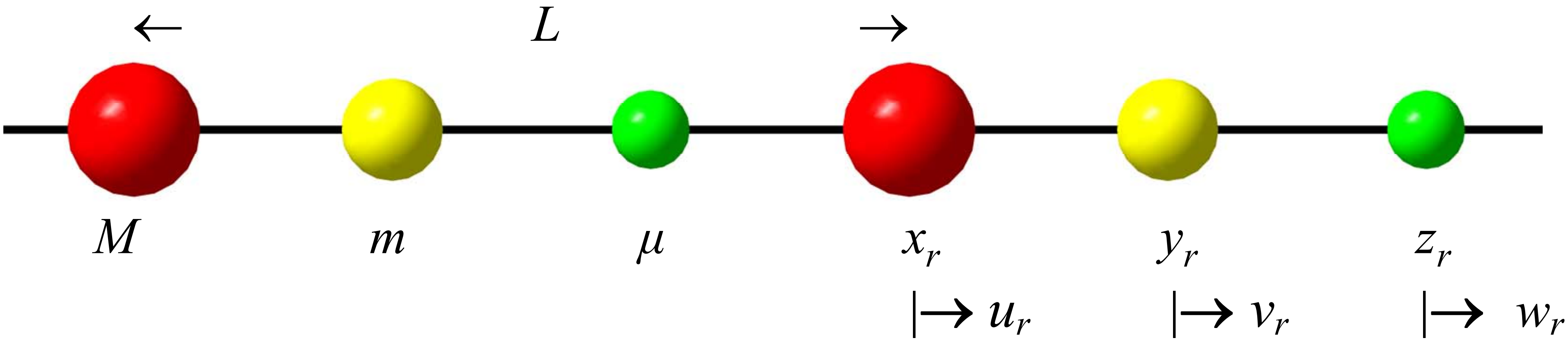
- подстановка в уравнения Ньютона;
- решение системы 2 x 2 $\Rightarrow$ $\omega=\omega_{ac,\,opt}\left(k\right),\ A_{ac,\,opt}\left(k\right),\ B_{ac,\,opt}\left(k\right)$

(См. Лекцию № 1)

ω



Задача: *записать симметризованные продольные смещения для бесконечной трехатомной цепочки:*



Сколько ветвей закона дисперсии будет в этом случае?

Ответ:

$$\xi_k(x_r) = A\exp(ikx_r)$$

$$\eta_k(y_r) = B\exp(iky_r)$$

$$\zeta_k(z_r) = C\exp(ikz_r)$$

$\Rightarrow$ частоты и амплитуды нормальных колебаний определяются из решения линейной системы 3 x 3

$\Rightarrow$ *три ветви закона дисперсии* (*акустическая и две оптические, см. Рисунок*)