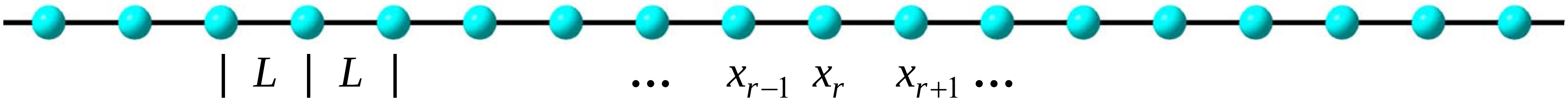
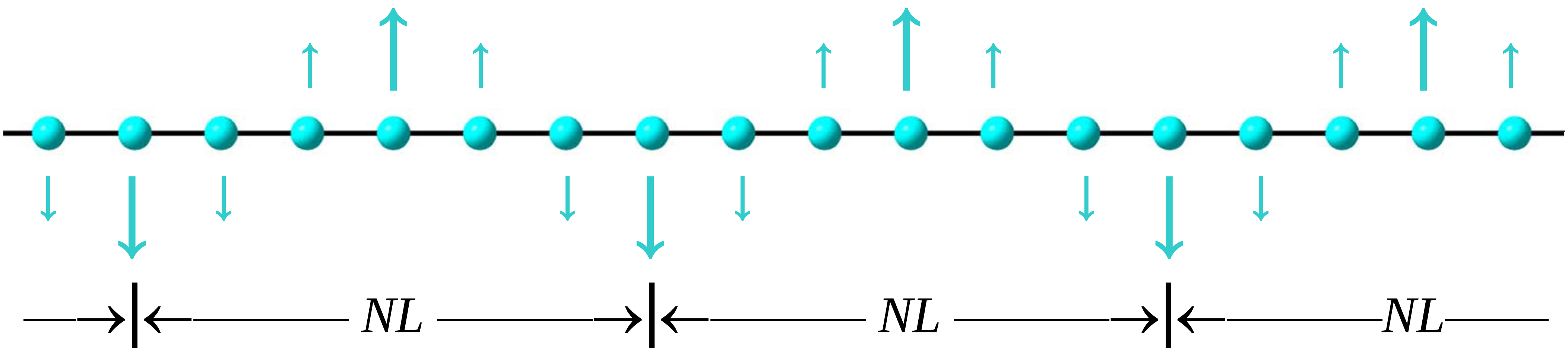
Колебания цепочки с периодическим граничным условием

Рассмотрим бесконечную одноатомную цепочку с периодом L:



Будем искать только такие нормальные моды цепочки, фазы смещений атомов в которых повторяются через фиксированное число звеньев (N):

$$u\left(x_r - NL, t\right) = u\left(x_r, t\right)$$ – *периодическое граничное условие* :



Это – ***модель суперъячейки*** *из* N *элементарных звеньев* ($N = 6$)

Замечание: Периодические граничные условия в задаче о колебаниях решеток были введены **Борном** и **фон Карманом** (*M. Born, Th. von Kármán*, 1912)

- Интересующие нас формы колебаний следует искать среди континуума решений, полученных для бесконечной цепочки без граничных условий:

$$\xi_k(x_r) = A\exp(ikx_r), \quad k \in \mathbb{R}$$

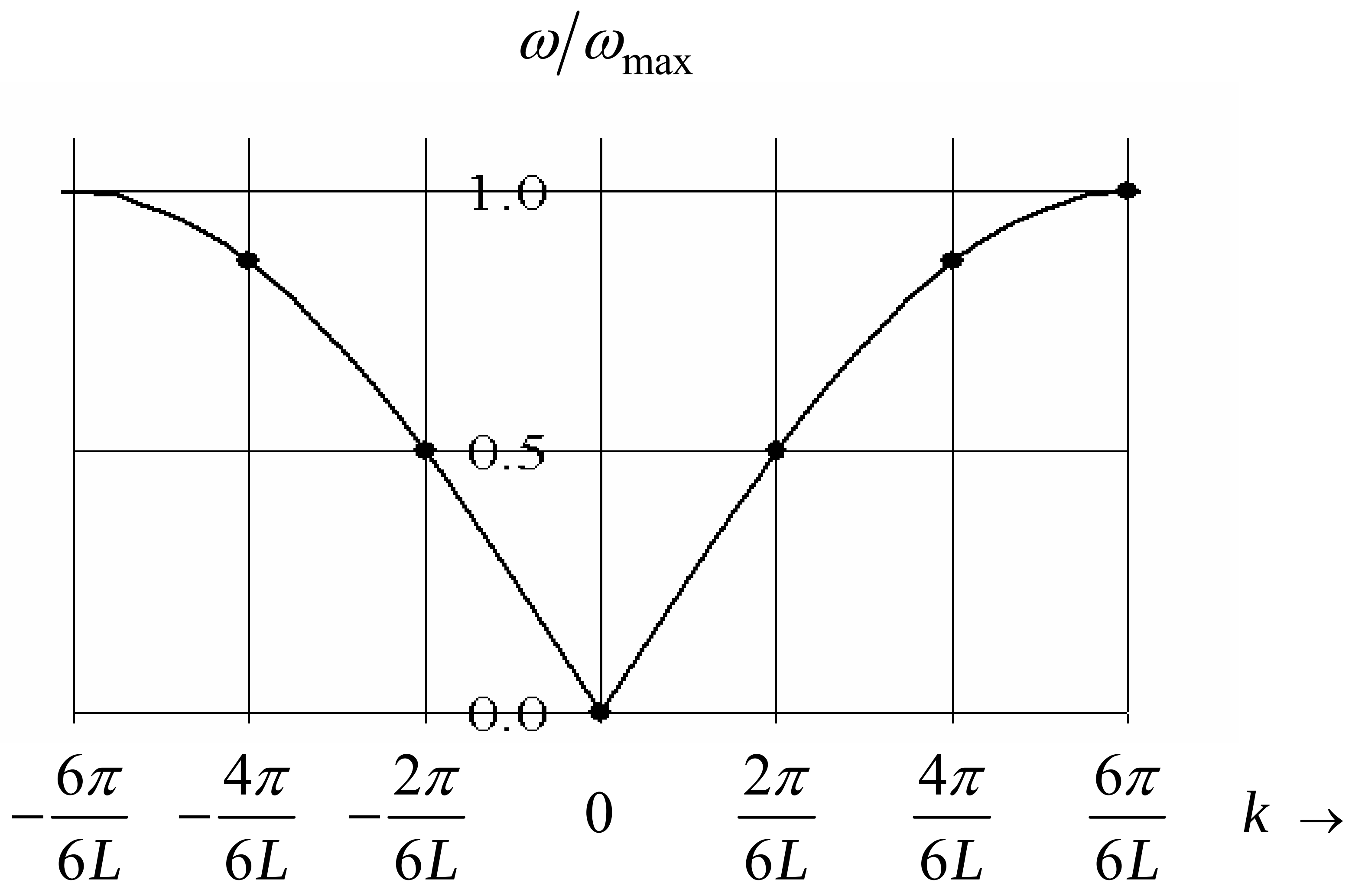
Подставляя сюда периодическое граничное условие, получим:

$$\xi_k(x_r - NL) = A\exp\left[ik(x_r - NL)\right] = e^{-ikNL}\,\xi_k(x_r) \quad \Rightarrow$$

$$\boxed{e^{-ikNL} = 1} \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} & k = k_m = \frac{2\pi m}{NL}, \\ & m = 0, \pm 1, \ldots, \pm(N-1)/2 \quad (N = 2p+1) \\ & m = 0, \ \pm 1, \ldots, \pm(N/2-1), N/2 \quad (N = 2p) \end{aligned}}$$

$\Rightarrow$ *Дисперсия частоты:* $\omega_m = \omega(k_m) = \omega_{\max}\left|\sin(k_m L/2)\right|, \quad m = 1, \ldots, N$

$N = 6$



«Семплирование» (sampling) зоны Бриллюэна; число k-точек: $N = 6$:

$$k_m = \frac{2\pi m}{6L}, \quad m = 0; \quad \pm 1; \quad \pm 2; \quad 3.$$

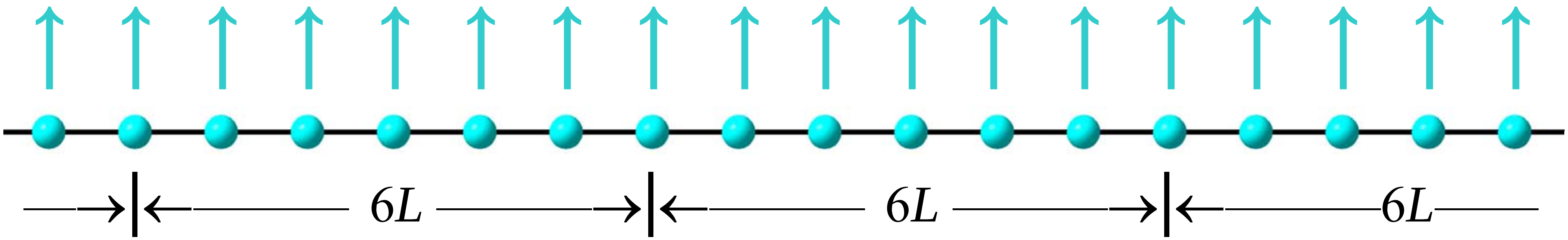
$N = 6$

Формы колебаний

$m = 0 \quad \Leftrightarrow \quad k_0 = 0$ **(Гамма-точка З.Б.):** $\quad \xi_0(x_r) \equiv A$

$\Leftrightarrow$ в Г-точке ЗБ имеем только одно решение !

$\mathrm{Re}\,\xi_0(x_r):$

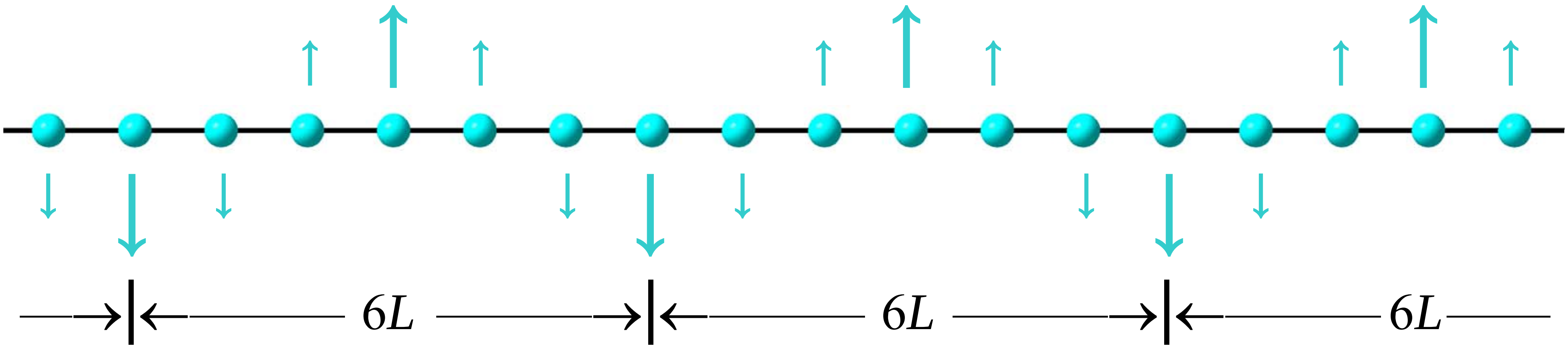


$N = 6$

Формы колебаний

$$m = \pm 1 \quad \Leftrightarrow \quad k_{\pm 1} = \pm \frac{2\pi}{6L} : \qquad \xi_{\pm 1}(x_r) = A \exp\left(\pm \frac{i\pi}{3L} x_r \right)$$

$\mathrm{Re}\, \xi_{\pm 1}(x_r)$:

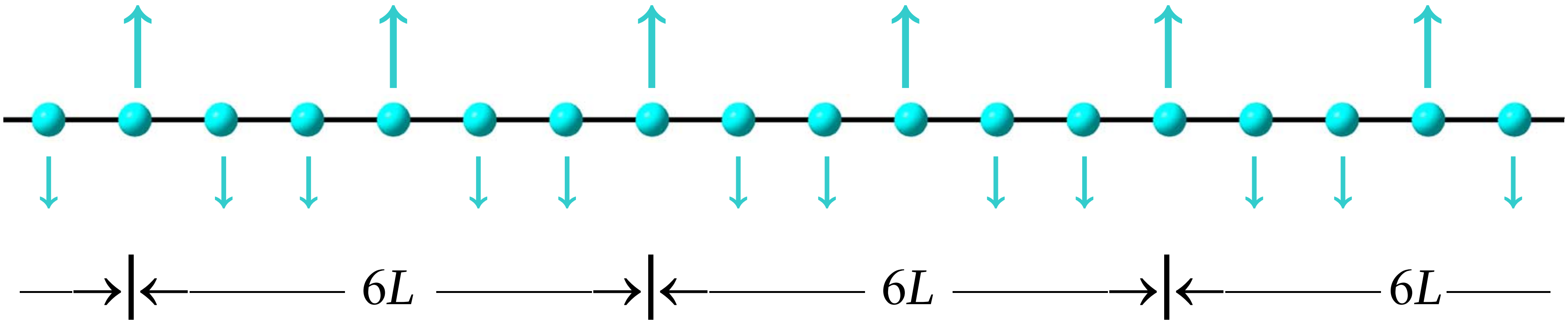


$N = 6$

Формы колебаний

$$m = \pm 2 \quad \Leftrightarrow \quad k_{\pm 2} = \pm \frac{4\pi}{6L} \quad : \qquad \xi_{\pm 2}(x_r) = A \exp\left(\pm i \, \frac{2\pi}{3L} x_r \right)$$

$\mathrm{Re}\, \xi_{\pm 2}(x_r)$:



$N = 6$

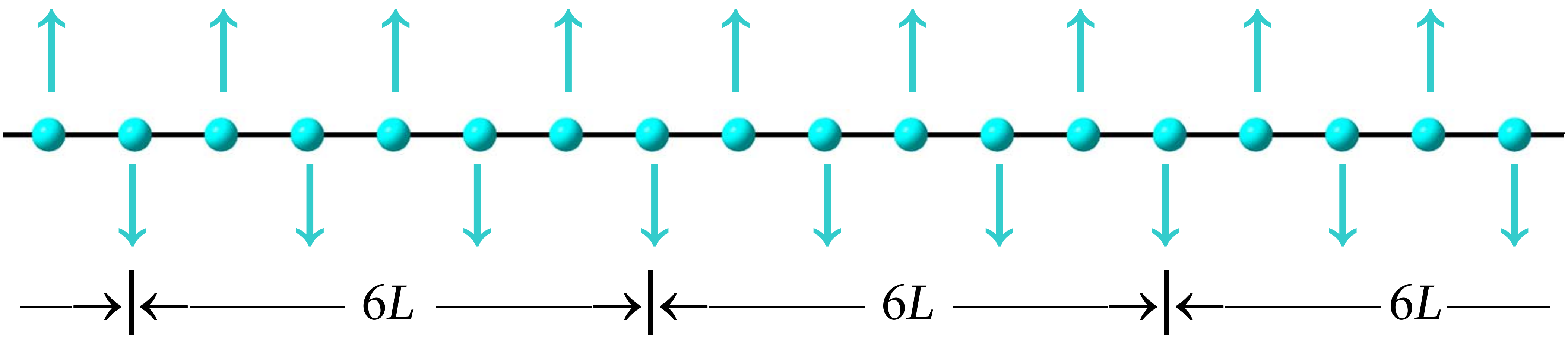
Формы колебаний

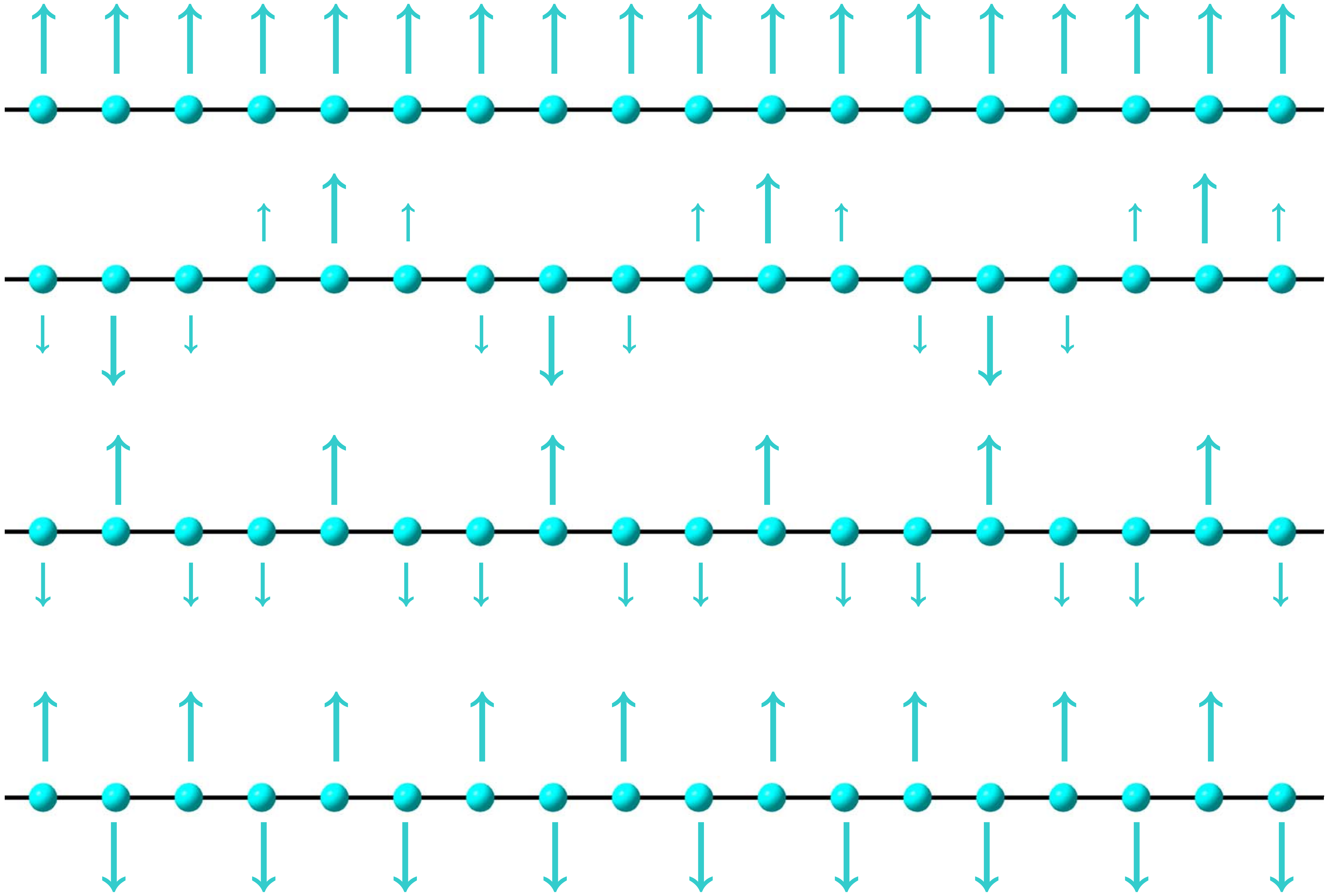
$$m = 3 \quad \Leftrightarrow \quad k_3 = \frac{6\pi}{6L} \quad : \qquad \xi_3(x_r) = A\exp\left(\frac{i\,\pi}{L}x_r\right) =$$

$$= A\left[\cos\left(\frac{\pi}{L}x_r\right) + i\sin\left(\frac{\pi}{L}x_r\right)\right] \equiv$$

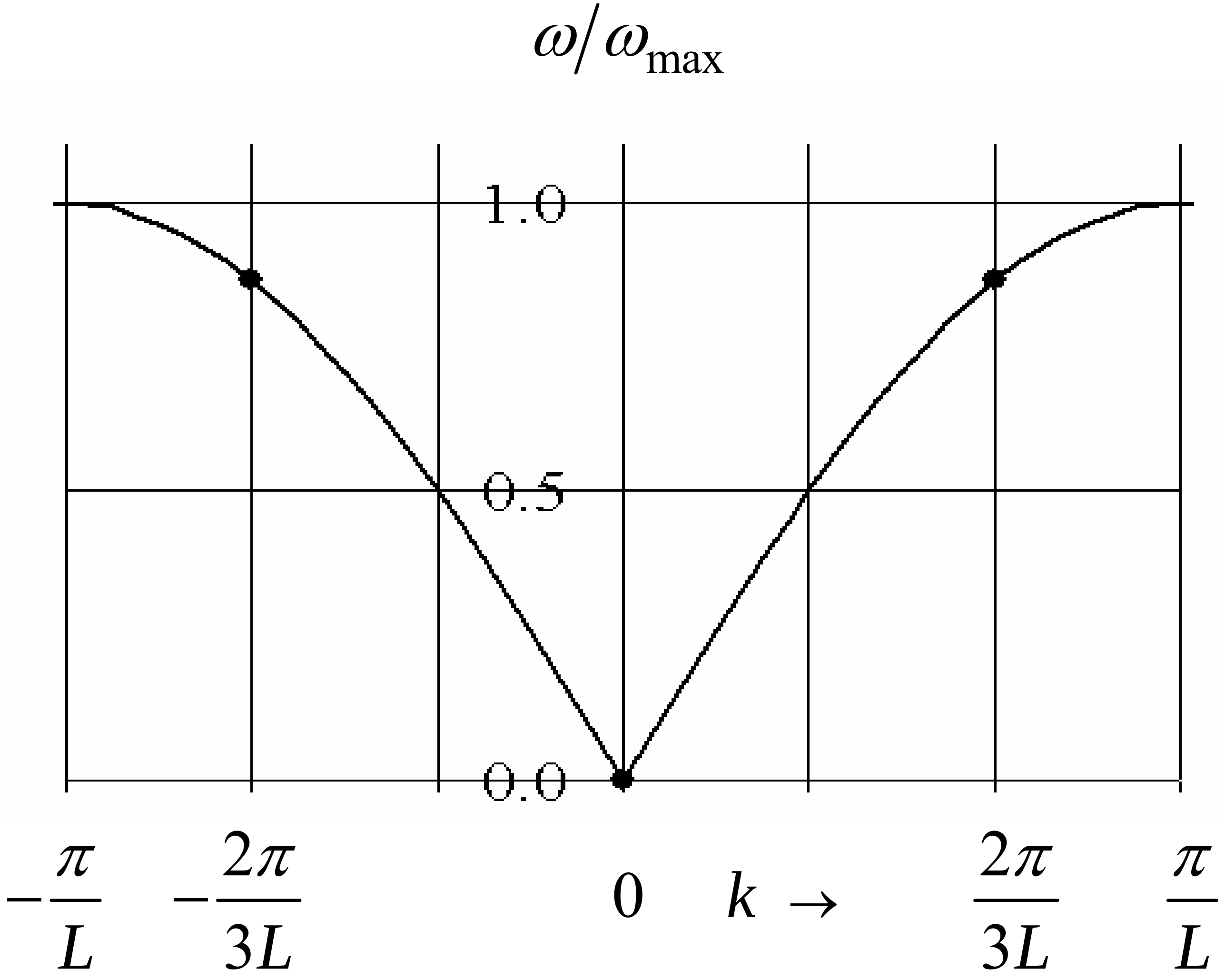
$$\equiv A\cos\left(\frac{\pi}{L}x_r\right), \quad \forall x_r = rL, \quad r \in \mathbb{Z}$$

$\Leftrightarrow$ на границе ЗБ имеем *одно* колебание (при четном N !)





$N = 3$



«Семплирование» (sampling) зоны Бриллюэна; число k-точек: $N = 3$:

$$k_m = \frac{2\pi m}{3L}, \quad m = 0; \quad \pm 1.$$

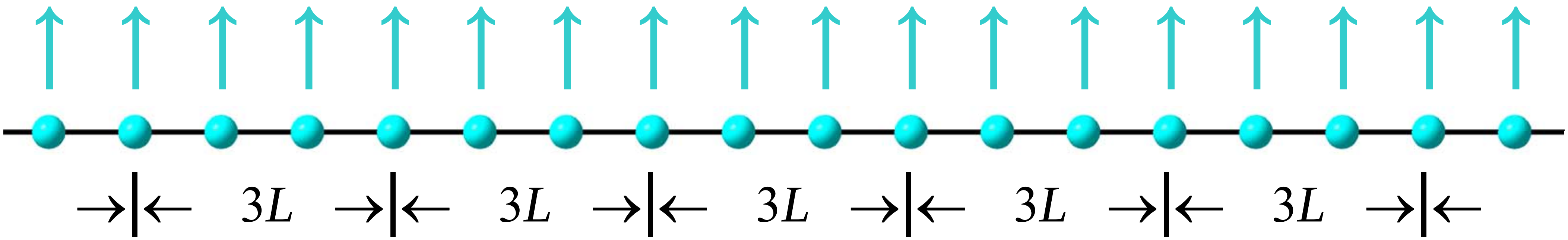
$N = 3$

Формы колебаний

$m = 0 \quad \Leftrightarrow \quad k_0 = 0$ **(Гамма-точка З.Б.):** $\quad \xi_0\left(x_r\right) \equiv A$

$\Leftrightarrow$ в Г-точке ЗБ имеем только одно решение !

$\operatorname{Re} \xi_0\left(x_r\right):$

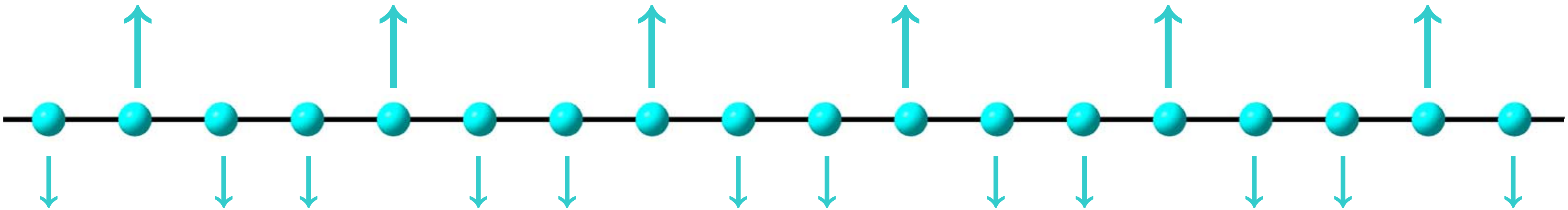


$N = 3$

Формы колебаний

$$m = \pm 1 \quad \Leftrightarrow \quad k_{\pm 1} = \pm \frac{2\pi}{3L}: \qquad \xi_{\pm 1}(x_r) = A \exp\left(\pm i \frac{2\pi}{3L} x_r \right)$$

$\mathrm{Re}\, \xi_{\pm 1}(x_r)$:



$\rightarrow\Big|\leftarrow \quad 3L \quad \rightarrow\Big|\leftarrow \quad 3L \quad \rightarrow\Big|\leftarrow \quad 3L \quad \rightarrow\Big|\leftarrow \quad 3L \quad \rightarrow\Big|\leftarrow \quad 3L \quad \rightarrow\Big|\leftarrow$

Какие выводы можно сделать из этого рассмотрения?

- Увеличение длины суперъячейки приводит к более густой сетке k-точек: учет N звеньев цепочки $\Leftrightarrow$ N точек в первой зоне Бриллюэна.

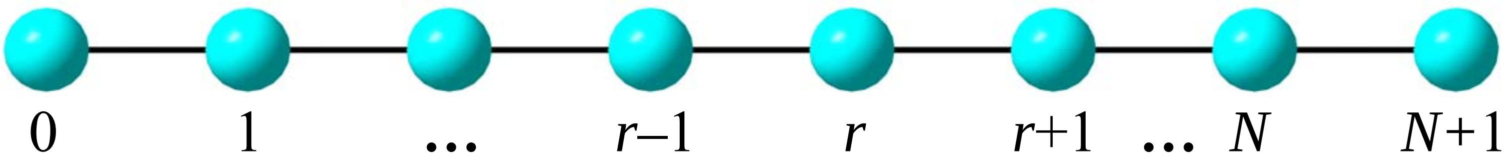
Причина:

$$k_m = \frac{2\pi m}{NL} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta k \sim \frac{2\pi}{NL} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta k \cdot \Delta x \sim 2\pi \quad \Leftrightarrow \quad \Delta p \cdot \Delta x \sim 2\pi\hbar$$

(«*соотношение неопределенностей*» !)

- Сетка k-точек – *равномерная* (постоянный шаг Δk) и $\Delta k \to 0, \quad N \to \infty$
- Во всех точках ЗБ, кроме двух, есть пара вырожденных колебаний: $\pm k$
- В Гамма-точке ЗБ всегда имеем невырожденное «колебание» с формой вида: $\xi_0(x_r) \equiv A$ (поступательное движение цепочки: $\omega = 0$)
- При четном количестве звеньев N имеется невырожденное колебание на границе ЗБ: $k_3 = \pi/L, \quad \omega = \omega_{\max}$ – соседние атомы в противофазе.

Для сравнения: ранее мы рассматривали задачу о колебаниях ***конечной*** одноатомной цепочки с периодическими условиями:

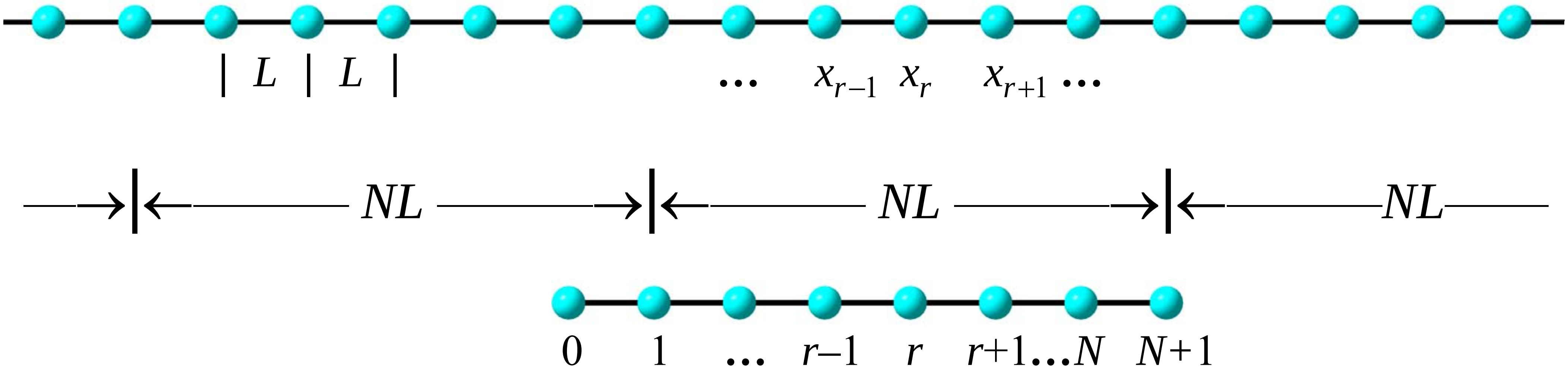


$$u_0 = u_N$$

$$\begin{bmatrix} m\ddot{u}_1 \\ m\ddot{u}_2 \\ m\ddot{u}_3 \\ m\ddot{u}_4 \\ m\ddot{u}_5 \\ m\ddot{u}_6 \end{bmatrix} = \begin{array}{c} f \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{pmatrix} -2f & f & & & & f \\ f & -2f & f & & & \\ & f & -2f & f & & \\ & & f & -2f & f & \\ & & & f & -2f & f \\ f & & & & f & -2f \end{pmatrix} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ f \end{array} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{bmatrix}$$

$$u_1 = u_{N+1}$$

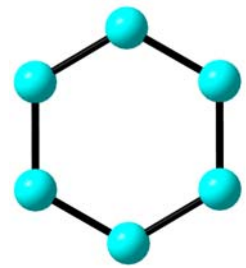
Замечание: ответ получился такой же, как и в только что рассмотренной задаче о ***бесконечной*** цепочке с периодическими граничными условиями:



$$k = k_m = \frac{2\pi m}{NL} \quad ,$$

$$m = 0, \pm 1, \ldots, \pm (N-1)/2 \quad (N = 2p+1)$$

$$m = 0, \ \pm 1, \ldots, \pm (N/2-1), N/2 \quad (N = 2p)$$



$$\omega_m = \omega(k_m) = \omega_{\max} \left| \sin(k_m L/2) \right|$$

Вопрос: почему ???

Циклическая симметрия задачи о цепочке с периодическим условием

Если смещения рассматривать как функцию дискретной переменной:

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

то действие оператора трансляции цепочки на одно звено:

$$\hat{T}_L \, u(x_r, t) = u(x_r - L, t) = u(x_{r-1}, t)$$

и на любое целое число звеньев:

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

Вопрос: как он действует на нормальные моды бесконечной цепочки с периодическим условием:

$$\xi_k(x_r) = A \exp(ikx_r), \quad k = k_m = \frac{2\pi m}{NL} \ ?$$

Ответ: $$\hat{T}_{nL}\ \xi_{k_m}(x_r)=\exp(-ik_m nL)\,\xi_k(x_r)=\exp\left(-\frac{2\pi i\ mn}{N}\right)\xi_{k_m}(x_r)$$

При этом, очевидно:

$$\hat{T}_{NL}\ \xi_{k_m}(x_r)=\exp\left(-\frac{2\pi i\ mN}{N}\right)\xi_{k_m}(x_r)=1\cdot\xi_{k_m}(x_r)$$

(Это и есть наше периодическое граничное условие). Таким образом, имеем соответствие:

$$\hat{T}_{nL}\quad\mapsto\chi_m(n)=\exp\left(-\frac{2\pi i\ mn}{N}\right),$$

которое определяет одномерное представление группы трансляций цепочки с характером $\chi_m(n)$. Это представление – *не точное*, т.е. *не изоморфное*, поскольку: $\hat{T}_{NL}\neq\hat{E}\quad\mapsto\chi_m(N)=\exp\left(-\frac{2\pi i\ mN}{N}\right)=1$

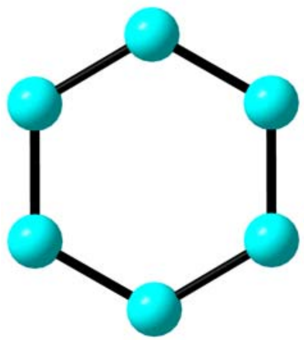
Вопрос: какой известной группе симметрии было бы изоморфно такое представление?

Вопрос: какой известной группе симметрии было бы изоморфно такое представление?

Ответ: циклической группе порядка N:

$$\mathbb{C}_N = \left\{ \hat{E}, \quad \hat{C}_N, \quad \hat{C}_N^2, \quad \ldots, \quad \hat{C}_N^{N-1} \right\}$$

Как известно, она может быть реализована как группа поворотов правильного N-угольника:



С учетом предыдущего обсуждения конечной цепочки с периодическим условием, это вполне закономерно. В случае же бесконечной цепочки –

замечание: *мы отождествляем не атомы, а их смещения!*