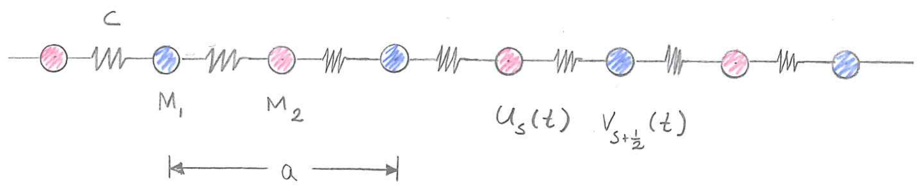
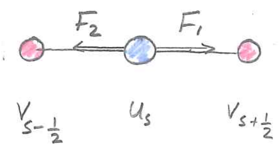
V1 Tvåatomig, linjär kedja!



- Antag växelverkan mellan närmaste grannar! u_s och $v_{s+\frac{1}{2}}$ beskriver lägen för atom s resp. s+½ i förhållande till jämv.

- För att ställa upp rörelseekvationer för M_1 och M_2 studeras krafterna som verkar på massorna:

M_1

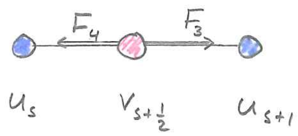


$$F_1 = C\left(v_{s+\frac{1}{2}} - u_s\right), \quad F_2 = C\left(u_s - v_{s-\frac{1}{2}}\right)$$

Newtons andra lag, $m \cdot a = \sum F$ ger rörelseekvationen:

$$\Rightarrow M_1 \cdot \ddot{u}_s = C\left(v_{s+\frac{1}{2}} - u_s\right) - C\left(u_s - v_{s-\frac{1}{2}}\right) = C\left(v_{s+\frac{1}{2}} + v_{s-\frac{1}{2}} - 2u_s\right) \quad (1)$$

M_2



$$F_3 = C\left(u_{s+1} - v_{s+\frac{1}{2}}\right), \quad F_4 = C\left(v_{s+\frac{1}{2}} - u_s\right)$$

$$\Rightarrow M_2 \ddot{v}_{s+\frac{1}{2}} = C\left(u_{s+1} - v_{s+\frac{1}{2}}\right) - C\left(v_{s+\frac{1}{2}} - u_s\right) = C\left(u_{s+1} + u_s - 2v_{s+\frac{1}{2}}\right) \quad (2)$$

- Ansätt våglösningar för atomernas rörelser:

$$\begin{cases} u_s = u \cdot e^{i(ksa - \omega t)} \\ v_{s+\frac{1}{2}} = v \cdot e^{i(k(s+\frac{1}{2})a - \omega t)} \end{cases} \quad (3)$$

(Detta görs efter antagande om harmoniska lösningar)

▶ Insättning av ansättningen (3) i rörelse ekvationerna (2) och (1) ger:

(1) $(-i\omega)(-i\omega) M_1 u e^{i(ksa-\omega t)} =$

$$= c\left(v e^{i(k(s+\frac{1}{2})a-\omega t)} + v e^{i(k(s-\frac{1}{2})a-\omega t)} - 2u e^{i(ksa-\omega t)}\right)$$

$$\Rightarrow \quad -\omega^2 M_1 u = c\left(v e^{i\cdot\frac{1}{2}\cdot ka} + v e^{-i\cdot\frac{1}{2}ka} - 2u\right)$$

(2) $(-i\omega)(-i\omega) M_2 v e^{i(k(s+\frac{1}{2})a-\omega t)} =$

$$= c\left(u e^{i(k(s+1)a-\omega t)} + u e^{i(ksa-\omega t)} - 2v e^{i(k(s+\frac{1}{2})a-\omega t)}\right)$$

$$\Rightarrow \quad -\omega^2 M_2 v = c\left(u e^{i\cdot\frac{1}{2}ka} + u e^{-i\cdot\frac{1}{2}ka} - 2v\right)$$

▶ Rörelseekvationerna kan nu skrivas:

$$\begin{cases} (\omega^2 M_1 - 2c)u + c\cdot v\left(e^{i\frac{ka}{2}} + e^{-i\frac{ka}{2}}\right) = 0 \\ (\omega^2 M_2 - 2c)v + c\cdot u\left(e^{i\frac{ka}{2}} + e^{-i\frac{ka}{2}}\right) = 0 \end{cases}$$

Likheten $\cos a = \frac{1}{2}\left(e^{i\cdot a} + e^{-i\cdot a}\right)$ ger

$$\Rightarrow \begin{cases} (\omega^2 M_1 - 2c)u + 2cv\cos\frac{ka}{2} = 0 & (4) \\ (\omega^2 M_2 - 2c)v + 2cu\cos\frac{ka}{2} = 0 & (5) \end{cases}$$

▶ För att lösningen ska vara icketrivial måste determinanten för koefficienterna framför u och v vara noll:

$$\begin{array}{cc} u & v \end{array}$$
$$\begin{vmatrix} \omega^2 M_1 - 2c & 2c\cos\frac{ka}{2} \\ 2c\cos\frac{ka}{2} & \omega^2 M_2 - 2c \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \quad (\omega^2 M_1 - 2c)(\omega^2 M_2 - 2c) - 4c^2\cos^2\frac{ka}{2} = 0$$

$$\Rightarrow \quad M_1 M_2 \omega^4 - 2c(M_1 + M_2)\omega^2 + 4c^2 \underbrace{\left(1 - \cos^2\frac{ka}{2}\right)}_{= \sin^2\frac{ka}{2} \ \text{(Trigon. ettan)}} = 0$$

pq-formeln ger:

$$\omega^2 = c\,\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \pm \sqrt{c^2\left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\right)^2 - \frac{4c^2}{M_1 M_2}\sin^2\frac{ka}{2}}$$

▶ Studera vinkelfrekvensen då $k \to 0$ (Långvågsgränsen)

Optiska moden, $\omega_+ \xrightarrow{k \to 0} \sqrt{2c\,\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}}$

$$(4) \Rightarrow \quad u(2c - \omega_+^2 M_1) = 2cv\cos 0$$

$$\Rightarrow \quad \frac{u}{v} = \frac{2c}{2c - \omega_+^2 M_1} = \frac{2c}{2c - 2c\,\frac{M_1 + M_2}{M_2}} = -\frac{M_2}{M_1}$$ – Atomerna rör sig åt olika håll

Akustiska moden, $\omega_- \xrightarrow{k \to 0} 0$

$$(4) \Rightarrow \quad 2c \cdot u = 2c \cdot v \quad \Rightarrow \quad \frac{u}{v} = 1$$ – Atomerna rör sig åt samma håll

▶ Studera vinkelfrekvensen då $k = \frac{\pi}{a}$ $\left(\lambda_{min} = 2a \Rightarrow k_{max} = \frac{\pi}{a} \right)$

Optiska moden

$$(4) \Rightarrow u\left(2C - M_1 \omega_+^2\right) = 2C \cdot v \cos\frac{\pi}{2} = 0$$

$$\omega_+^2 \left(k = \frac{\pi}{a}\right) = C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} + \sqrt{C^2 \left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\right)^2 - \frac{4C^2}{M_1 M_2}} =$$

$$= C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} + C \sqrt{\frac{M_1^2 + 2M_1M_2 + M_2^2 - 4M_1M_2}{(M_1M_2)^2}} =$$

$$= C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} + C \frac{M_1 - M_2}{M_1 M_2} = \frac{2C}{M_2}$$

$$\Rightarrow u \cdot 2C \left(1 - \frac{M_1}{M_2}\right) = 0 \Rightarrow u = 0$$

– M_1-atomerna är stilla
ω_+ bestäms av M_2-atomer

Akustiska moden

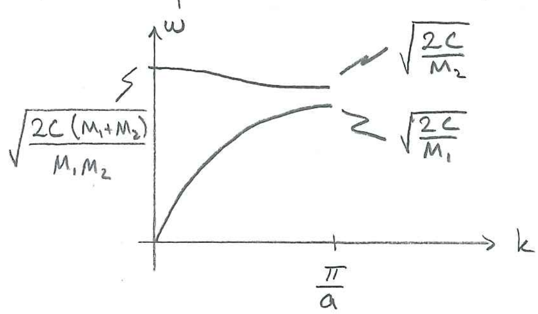
$$(5) \Rightarrow v\left(2C - M_2 \omega_-^2\right) = 0$$

$$\omega_-^2 \left(k = \frac{\pi}{a}\right) = \{\text{se ovan}\} = C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} - C \frac{M_1 - M_2}{M_1 M_2} = \frac{2C}{M_1}$$

$$\Rightarrow v \cdot 2C \left(1 - \frac{M_2}{M_1}\right) = 0 \Rightarrow v = 0$$

– M_2-atomerna stilla
ω_- bestäms av M_1-atomer

▶ Dispersionrelationen ser ut enligt följande figur:

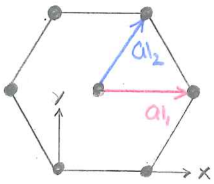


$(M_1 > M_2)$

▶ Om $M_1 \to M_2$ kommer $\omega_+ = \omega_-$ vid $k = \frac{\pi}{a}$

Atomkedjan blir då enatomig, gitterparametern halveras till $a/2$ $\Rightarrow$ Vågtalet tillåts vara $\frac{\pi}{a/2} = \frac{2\pi}{a}$

V2 Ett tätpackat lager av atomer är hexagonalt för effektivaste tätpackning.



$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = a\,(\hat{\mathbf{x}}) \\ \mathbf{a}_2 = a\left(\cos 60^\circ \hat{\mathbf{x}} + \sin 60^\circ \hat{\mathbf{y}}\right) = a\left(\frac{1}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{\mathbf{y}}\right) \end{cases}$$

- Hitta reciproka gittervektorer, ansätt $\begin{cases} \mathbf{b}_1 = b_{1x}\hat{\mathbf{x}} + b_{1y}\hat{\mathbf{y}} \\ \mathbf{b}_2 = b_{2x}\hat{\mathbf{x}} + b_{2y}\hat{\mathbf{y}} \end{cases}$

$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_1 = 2\pi$ (1) $\qquad \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_1 = 0$ (3)

$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_2 = 0$ (2) $\qquad \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_2 = 2\pi$ (4)

(1) : $a \cdot b_{1x} = 2\pi \implies b_{1x} = \frac{2\pi}{a}$

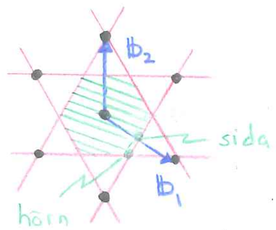
(1)+(3) : $\cancel{2\pi} + \frac{\cancel{a}}{\cancel{2}} \cdot \frac{2\pi}{\cancel{a}} + \frac{a\sqrt{3}}{\cancel{2}} b_{1y} = \cancel{2\pi} \implies b_{1y} = -\frac{2\pi}{a} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}}$

(2) : $a \cdot b_{2x} = 0 \implies b_{2x} = 0$

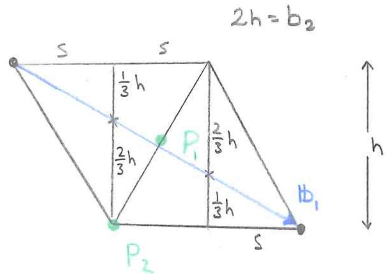
(4) : $a \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} b_{2y} = 2\pi \implies b_{2y} = \frac{4\pi}{a} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}}$

$\therefore \quad \mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{\mathbf{x}} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{\mathbf{y}}\right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\hat{\mathbf{y}}\right)$

- Rita 1:a BZ :

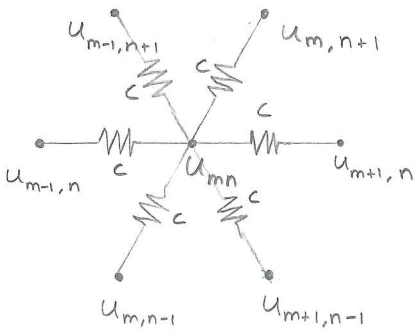


$\longrightarrow$



$$\implies \begin{cases} \mathbf{P}_1 = \frac{1}{2}\mathbf{b}_1 \\ \mathbf{P}_2 = \frac{1}{3}\mathbf{b}_1 - \frac{1}{3}\mathbf{b}_2 \end{cases}$$

- Studera förskjutningar av atomerna vinkelrätt mot planet (transversella vågor)



Antag växelverkan mellan närmaste grannar

- Ställ upp rörelseekvationer för atom m, n

$$M\cdot\ddot{u}_{mn} = c\left(u_{m+1,n}-u_{m,n}\right) - c\left(u_{mn}-u_{m-1,n}\right) +$$

$$+ c\left(u_{m,n+1}-u_{m,n}\right) - c\left(u_{m,n}-u_{m,n-1}\right) +$$

$$+ c\left(u_{m-1,n+1}-u_{m,n}\right) - c\left(u_{m,n}-u_{m+1,n-1}\right) =$$

$$= c\left(u_{m+1,n}+u_{m-1,n}-2u_{m,n}\right) +$$

$$+ c\left(u_{m,n+1}+u_{m,n-1}-2u_{m,n}\right) +$$

$$+ c\left(u_{m-1,n+1}+u_{m+1,n-1}-2u_{m,n}\right)$$

- Ansätt våglösning för atomernas rörelser:

$$u_{mn} = u\cdot e^{i(m\cdot k\cdot a_1 + n\cdot k\cdot a_2 - \omega t)}$$

- Insattning ger:

$$-\omega^2 M u = c\cdot u\left(\left(e^{ika_1}+e^{-ika_1}-2\right)+\left(e^{ika_2}+e^{-ika_2}-2\right)+\left(e^{i(-ka_1+ka_2)}+e^{i(ka_1-ka_2)}-2\right)\right)$$

$$\cos a = \frac{1}{2}\left(e^{ia}+e^{-ia}\right)$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \frac{c}{M}\left(6-2\cos ka_1 - 2\cos ka_2 - 2\cos k(a_1-a_2)\right) =$$

$$= \frac{2c}{M}\left(3-\cos ka_1-\cos ka_2-\cos k(a_1-a_2)\right)$$

- 1 Brillouin zonen!

På sidan

$$k = \frac{1}{2}b_1 = \frac{\pi}{a}\left(\hat{x}-\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}\right), \quad \begin{cases} ka_1 = \frac{\pi}{a}\cdot a = \pi \\ ka_2 = \frac{\pi}{a}\cdot\frac{a}{2} - \frac{\pi}{\sqrt{3}a}\cdot\frac{\sqrt{3}a}{2} = 0 \end{cases}$$

$$\omega_1^2 = \frac{2c}{M}\left(3-\cos\pi-\cos 0-\cos(\pi-0)\right) = \frac{2c}{M}(3+1-1+1) \Rightarrow \underline{\omega_1 = \sqrt{\frac{8c}{M}}}$$

I hörnet

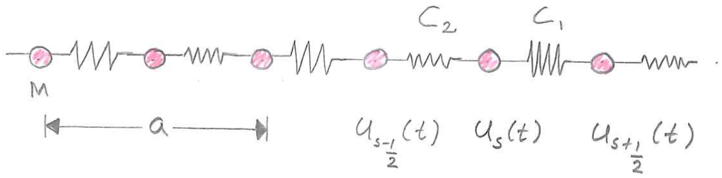
$$k = \frac{1}{3}b_1 - \frac{1}{3}b_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{3}\hat{x}-\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}\right), \quad \begin{cases} ka_1 = \frac{2\pi}{a}\,\frac{1}{3}\cdot a = \frac{2\pi}{3} \\ k\cdot a_2 = 2\pi\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{2}\right) = -\frac{2\pi}{3} \end{cases}$$

$$\omega_1^2 = \frac{2c}{M}\left(3-\cos\frac{2\pi}{3}-\cos\frac{-2\pi}{3}-\cos\left(\frac{2\pi}{3}+\frac{2\pi}{3}\right)\right) = \frac{2c}{M}\left(3+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right) \Rightarrow \underline{\omega_1 = \sqrt{\frac{9c}{M}}}$$

V4

— CH — CH = CH — CH = CH — CH = ·

$\Downarrow$



- Rörelseekvationen blir:

$$\begin{cases} M\ddot{u}_s = C_1\left(u_{s+\frac{1}{2}} - u_s\right) - C_2\left(u_s - u_{s-\frac{1}{2}}\right) \\ M\ddot{u}_{s+\frac{1}{2}} = C_2\left(u_{s+1} - u_{s+\frac{1}{2}}\right) - C_1\left(u_{s+\frac{1}{2}} - u_s\right) \end{cases}$$

- Ansätt våglösning:

$$\begin{cases} u_s = u_1 e^{i(ksa-\omega t)} \\ u_{s+\frac{1}{2}} = u_2 e^{i(k(s+\frac{1}{2})a-\omega t)} \end{cases}$$

- Insättning ger:

$$\begin{cases} -\omega^2 M u_1 e^{i(ksa-\omega t)} = C_1\left(u_2 e^{i(k(s+\frac{1}{2})a-\omega t)} - u_1 e^{i(ksa-\omega t)}\right) - C_2\left(u_1 e^{i(ksa-\omega t)} - u_2 e^{i(k(s-\frac{1}{2})a-\omega t)}\right) \\ -\omega^2 M u_2 e^{i(k(s+\frac{1}{2})a-\omega t)} = C_2\left(u_1 e^{i(k(s+1)a-\omega t} - u_2 e^{i(k(s+\frac{1}{2})a-\omega t)}\right) - C_1\left(u_2 e^{i(k(s+\frac{1}{2})a-\omega t} - u_1 e^{i(ksa-\omega t)}\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -\omega^2 M u_1 = C_1\left(u_2 e^{i\frac{ka}{2}} - u_1\right) - C_2\left(u_1 - u_2 e^{-i\frac{ka}{2}}\right) \\ -\omega^2 M u_2 = C_2\left(u_1 e^{i\frac{ka}{2}} - u_2\right) - C_1\left(u_2 - u_1 e^{-i\frac{ka}{2}}\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \left(\omega^2 M - (C_1+C_2)\right)u_1 + u_2\left(C_1 e^{i\frac{ka}{2}} + C_2 e^{-i\frac{ka}{2}}\right) = 0 \\ \left(\omega^2 M - (C_1+C_2)\right)u_2 + u_1\left(C_2 e^{i\frac{ka}{2}} + C_1 e^{-i\frac{ka}{2}}\right) = 0 \end{cases}$$

▸ För att lösningen ska vara icke-trivial måste determinanten för koefficienterna framför u och v vara noll :

$$\begin{vmatrix} \omega^2 M - (C_1 + C_2) & C_1 e^{i\frac{ka}{2}} + C_2 e^{-i\frac{ka}{2}} \\ C_2 e^{i\frac{ka}{2}} + C_1 e^{-i\frac{ka}{2}} & \omega^2 M - (C_1 + C_2) \end{vmatrix} = 0 =$$

$$= (\omega^2 M - (C_1 + C_2))^2 - \left(C_1 e^{i\frac{ka}{2}} + C_2 e^{-i\frac{ka}{2}}\right)\left(C_2 e^{i\frac{ka}{2}} + C_1 e^{-i\frac{ka}{2}}\right) =$$

$$= \omega^4 M^2 - 2\omega^2 M (C_1 + C_2) + (C_1 + C_2)^2 - \left(C_1 C_2 e^{ika} + C_1^2 + C_2^2 + C_1 C_2 e^{-ika}\right) =$$

$$= \omega^4 M^2 - 2\omega^2 M (C_1 + C_2) + \cancel{C_1^2} + 2 C_1 C_2 + \cancel{C_2^2} - \cancel{C_1^2} - \cancel{C_2^2} - C_1 C_2 \left(e^{ika} + e^{-ika}\right) =$$

$$= \left\{ e^{ika} + e^{-ika} = 2 \cos ka \right\} =$$

$$= \omega^4 M^2 - 2\omega^2 M (C_1 + C_2) + 2 C_1 C_2 (1 - \cos ka) =$$

$$= \left\{ 1 - \cos ka = 2 \sin^2 \frac{ka}{2} \right\} =$$

$$= \omega^2 M^2 - 2\omega^2 M (C_1 + C_2) + 2 C_1 C_2 \cdot 2 \sin^2 \frac{ka}{2} = 0$$

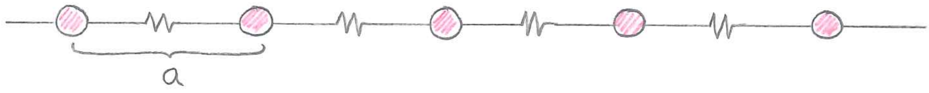
▸ Dispersionrelationen blir :

$$\omega^4 - \frac{2\omega^2 (C_1 + C_2)}{M} + \frac{4 C_1 C_2}{M^2} \sin^2 \frac{ka}{2}$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \frac{C_1 + C_2}{M} \pm \sqrt{\left(\frac{C_1 + C_2}{M}\right)^2 - \frac{4 C_1 C_2}{M^2} \sin^2 \frac{ka}{2}} =$$

$$\boxed{= \frac{C_1 + C_2}{M} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4 C_1 C_2}{(C_1 + C_2)^2} \sin^2 \frac{ka}{2}} \right)}$$

V7



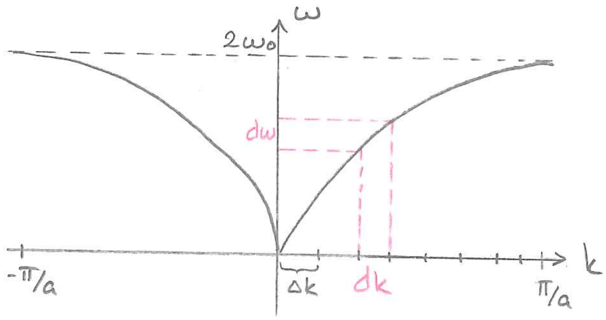
N st atomer

Från uppgift V1 fås för $m_1 = m_2 = m$ sambandet

$$\omega^2 = 4\frac{k}{m}\sin^2\frac{ka}{2} = \left\{\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}\right\} = 4\omega_0^2 \sin^2\frac{ka}{2}$$

Atomkedjans längd är $N \cdot a$ $\Rightarrow$ $\Delta k = \frac{2\pi}{N \cdot a}$

Låt $\rho(k)$ vara tillståndsdensiteten på k-axeln



Eftersom vi tittar på ena halvaxeln i k-led.

$D(\omega)\,d\omega = 2\rho(k)\,dk$, där $D(\omega)$ är tillståndstätheten på ω-axeln.

$$\Rightarrow D(\omega) = 2\rho(k)\cdot\frac{1}{\frac{d\omega}{dk}} = 2\,\frac{N\cdot a}{2\pi}\,\frac{1}{\frac{a}{2}\cos\frac{ka}{2}\cdot 2\omega_0} = \frac{N}{\pi\omega_0}\,\frac{1}{\cos\frac{ka}{2}}$$

$$\cos\frac{ka}{2} = \sqrt{1-\sin^2\frac{ka}{2}} \quad , \; \omega_{max} = 2\omega_0$$

$$\Rightarrow D(\omega) = \frac{N}{\pi\omega_0}\,\frac{1}{\sqrt{1-\frac{\omega^2}{4\omega_0^2}}} = \frac{2N}{\pi}\,\frac{1}{\sqrt{4\omega_0^2-\omega^2}} = \frac{2N}{\pi}\,\frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2-\omega^2}}$$