Домашняя работа по общей физике
Неделя 1

Драчов Ярослав
Факультет общей и прикладной физики МФТИ

4 марта 2021 г.

0-1-1.

Решение. Закон дисперсии упругих волн может быть записан через скорость звука

$$\omega = \frac{2s}{a}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|.$$

Откуда

$$\omega_{\max} \sim \frac{s}{a} \sim 10^{13}\ \text{с}^{-1}.$$

0-1-2.

Решение. Величины базисных векторов обратной решётки задаются выражением

$$2\pi\left|\frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]}\right|,$$

записанным с точность до циклической перестановки **a**, **b** и **c**. Т. к. решётка — кубическая, то её базисные векторы взаимно-перпендикулярны, а значит последнее выражение в точности равно 2π, а в обратной решётке сохранится взаимная перпендикулярность базисных векторов. Нетрудно заметить, что наименьшие длины векторов обратной решётки из геометрических соображений будут равны

$$|\mathbf{a}| = 2\pi, \quad |\mathbf{a}+\mathbf{b}| = 2\sqrt{2}\pi, \quad |\mathbf{a}+2\mathbf{b}| = 2\sqrt{5}\pi.$$

2.1.

Решение. В простой кубической решётке на объём куба a^3 приходится один шар, радиус которого $r = a/2$, а объём куба $(4/3)\pi r^3$. Откуда плотность упаковки

$$\frac{4}{3}\pi\frac{r^3}{(2r)^3} = \frac{\pi}{6} = 0{,}523.$$

В случае гранецентрированной решётки шары соприкасаются по диагонали грани, поэтому $a\cdot\sqrt{2} = 4r$. В результате, так как на куб приходится 4 шара, получаем

$$4\cdot\frac{4}{3}\pi\frac{r^3}{a^3} = \pi\cdot\sqrt{2}/6 = 0{,}740.$$

В случае объёмно-центрированной решётки шары соприкасаются по диагонали куба. Следовательно, $a \cdot \sqrt{3} = 4r$. На куб приходится 2 шара, поэтому

$$2 \cdot \frac{4}{3}\pi \frac{r^3}{a^3} = \pi \cdot \sqrt{3}/8 = 0{,}681.$$

T1-1.

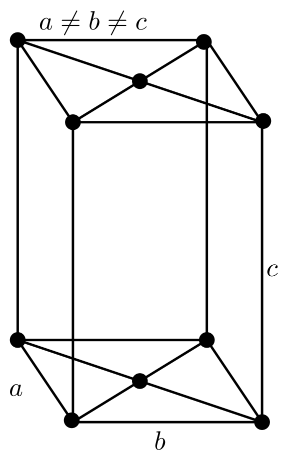

Рис. 1

Решение. Элементарная ячейка исходной решётки представляет собой прямоугольную призму с отношением сторон основания 1 : 2 и с центрированными основаниями. Объём элементарной ячейки исходной ромбической решётки в обычном пространстве: $V_r = 2a^2c$.

Вводим базис $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$, $\mathbf{z}$ вдоль a, b, c осей, соответственно.

Базоцентрированная решётка непримитивная — для построения первой зоны Бриллюэна по определению необходимо перейти к примитивной решётке.

Переход к примитивной решётке неоднозначен, но это нее влияет на конечный результат. Это можно сделать, например, заменив одну из трансляций в плоскости основания на вектор в центр основания: $\mathbf{b}' = (\mathbf{a} + \mathbf{b})/2$. Объём примитивной ячейки $V_{r,\text{ прим}} = V_r/2 = a^2c$ (вдвое меньше исходной).

Вектора обратной решётки, построенные для примитивной ячейки:

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{V_{r,\text{ прим}}}\mathbf{b}' \times \mathbf{c} = \frac{\pi}{a}(2\mathbf{x} - \mathbf{y})$$
$$\mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{a}\mathbf{y}$$
$$\mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{c}\mathbf{z}.$$

Отсюда сразу объём элементарной ячейки для обратной решётки, по определению равный объёму первой зоны Бриллюэна, равен

$$V_k = V_{1\text{з.Бр.}} = \mathbf{a}^* \cdot [\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}] = \frac{(2\pi)^3}{a^2c} = \frac{(2\pi)^3}{V_{r,\text{ прим}}} = 2\frac{(2\pi)^3}{V_r}.$$

Множитель 2 здесь связан с тем, что объём базоцентрированной ромбической элементарной ячейки вдвое больше объёма примитивной ячейки, для примитивной ячейки всегда верно соотношение $V_{\text{1з.Бр.}} = (2\pi)^3/V_{\text{прим}}$.

Так как $\mathbf{c}^* \perp \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*$, то элементарная ячейка обратной решётки, построенная на векторах трансляции обратной решётки, будет иметь вид прямоугольной призмы.

Для построения первой зоны Бриллюэна пользуемся (по определению) построением ячейки Вигнера-Зейтца. Построение в направлении оси Z тривиально: границы первой зоны Бриллюэна лежат на расстоянии $\pm c^*/2$ от плоскости XY: это положеия серединных перпендикуляров к соседним вдоль направления Z узлам. В рассматриваемом случае из-за ортогональности $\mathbf{c}^* \perp \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*$ серединные перпендикуляры к другим узлам вне плоскости XY (смещённым на трансляции типа $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$) не будут «срезать» углы ячейки Вигнера-Зейтца. В этом можно убедиться либо геометрическим анализом, либо если заметить, что объём первой зоны Бриллюэна (найденный ранее) равен (из ортогональности) произведению высоты призмы $|\mathbf{c}^*|$ на площадь основания $|\mathbf{a}^* \times \mathbf{b}^*|$, так как площадь этого основания будет равно по построению площади сечения ячейки Вигнера-Зейтца плоскостью XY, то никаких углов этой призмы в направлении вектора $\mathbf{c}^*$ «срезать» не надо. Интерес представляет построение сечения первой зоны Бриллюэна в плос-

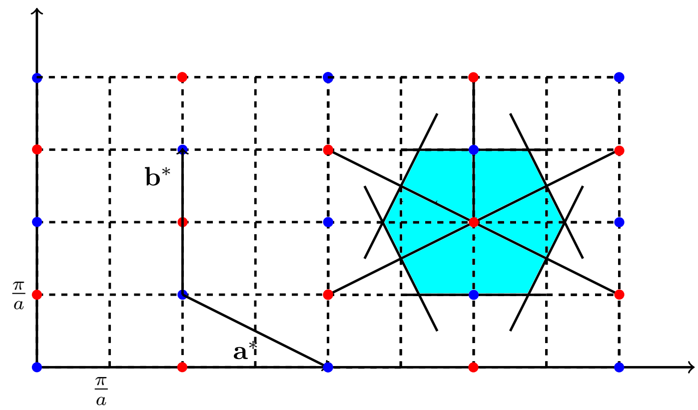

Рис. 2: К решению задачи Т1-1. Обратная решётка в плоскости XY и проекция первой зоны Бриллюэна на эту плоскость. Красные кружки — обратная решётка для примитивной элементарной ячейки. Синие кружки — дополнительные узлы обратной решётки при построении непримитивной элементарной ячейки. Показаны вектора обратной решётки для построения по примитивной ячейке. Выделена первая зона Бриллюэна, построенная как ячейка Вигнера-Зейтца.

кости XY. Построение представлено на рис. 2. Первая зона Бриллюэна для исходно «прямоугольной» структуры имеет вид прямоугольной призмы с основанием в форме неправильного шестиугольника.

2.16.

Решение. Периодическое граничное условие означает, что, если дополнить нашу цепочку атомов «нулевым атомом», то смещение атомов с $i = 0$ и $i = N$ одинаково. Фактически, это означает «сворачивание» цепочки в кольцо, так что N-ный атом взаимодействует теперь с первым.

Предполагая, что смещения атомов в такой волне $u_n = Ae^{i(Kan-\omega t)}$, получаем из граничного условия $u_0 = u_N$. Это даёт условие $KaN = 2\pi p$, где p — целое и a — расстояние между атомами в цепочке, которое выделяет N разрешённых значений вида

$$K = 0;\ \frac{2\pi}{Na};\ 2\cdot\frac{2\pi}{Na};\ 3\cdot\frac{2\pi}{Na};\ldots;\ K = \frac{2\pi(N-1)}{Na}$$

(в этой задаче удобно не сводить все волновые векторы в первую зону Бриллюэна).

Смещения атомов в такой волне $u_n = Ae^{i(Kan-\omega t)}$, мгновенные скорости $v_n = -i\omega Ae^{i(Kan-\omega t)}$. Полный импульс такой цепочки

$$P = \sum_{n=1}^{N} p_n = -i\omega MAe^{i\omega t}\sum_{n=1}^{N} e^{iKan} = -i\omega MAe^{i(Ka-\omega t)}\frac{1-e^{iKaN}}{1-e^{iKa}}$$

(выполнено суммирование геометрической прогрессии). С учётом граничных условий числитель дроби всегда нулевой. Отдельным оказывается случай $K = 0$. В этом случае в дроби получается неопределённость типа $\frac{0}{0}$, $\lim_{K\to 0}\frac{1-e^{iKaN}}{1-e^{iKa}} = N$. Однако и частота акустических фононов с $K = 0$ оказывается нулевой. Но можно заметить, что однородное ($K = 0$) и постоянное ($\omega = 0$) колебание по своему смыслу есть движение всех атомов цепочки с постоянной скоростью $u_n = Vt$. Другими словами, нулевая частота означает отсутствие возвращающей силы при таких колебаниях и уравнения динамики в модели «шариков и пружинок» принимают вид $\frac{d^2u_n}{dt^2} = 0$ с решением типа $u_n = Vt$. В этом случае полный импульс цепочки получается $P = MNV$.