Решения задач:

Неделя 1. Колебания решётки, фононы.

Задача 2.1 (на семинар)

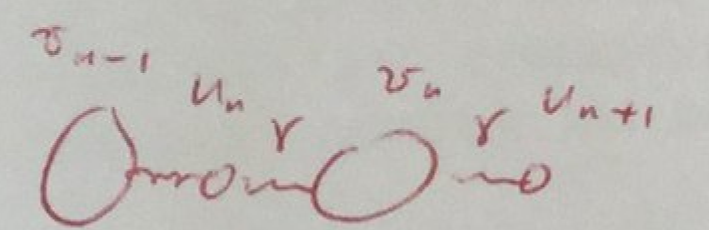
Рассматривая атомы, из которых построены кристаллические решётки, как твёрдые шары, найти плотность упаковки для простой, гранецентрированной и объёмноцентрированной кубических решёток.

Объём элементарного куба $V_{cell}=a^3$, в простой решётке один атом на ячейку, в ГЦК — четыре атома на куб, в ОЦК — два атома на куб.

Максимальные радиусы шаров «до соприкосновения»: $r=\frac{a}{2};\frac{a}{2\sqrt{2}};\frac{\sqrt{3}a}{4}$ для простой, ГЦК и ОЦК решёток.

Далее тривиально для фактора заполнения

$$\xi=\frac{N\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}=\begin{cases}\frac{\pi}{6}\approx 0.524 \text{ для простой}\\ \frac{\pi}{3\sqrt{2}}\approx 0.740 \text{ для ГЦК}\\ \frac{\sqrt{3}\pi}{8}\approx 0.680 \text{ для ОЦК}\end{cases}$$



__*Дополнительно:*__

1.Такой же фактор заполнения 0.740 получается для гексагональной плотной упаковки (слои плотно прижатых слоёв располагают так, чтобы следующий слой попадал в «ямки» между слоями предыдущего).

2.Для структуры алмаза (ГЦК с базисом из двух атомов (0;0;0) и (1/4;1/4;1/4)) $r=\frac{\sqrt{3}a}{8}$ и $\xi=\frac{\sqrt{3}\pi}{16}\approx 0.340$. То есть «с точки зрения упаковки» алмаз оказывается очень «рыхлым», и его твёрдость обусловлена не плотной упаковкой атомов, а очень эффективно сформированными межатомными связями.

$-m\omega^2 u_n = -\gamma(2u_n - v_n - v_{n-1}) + eE_0$

$-M\omega^2 v_n = -\gamma(2v_n - u_{n+1} - u_n) - eE_0$

$(m\omega^2-2\gamma)u+\gamma v(1+e^{-iqa})=0 \quad -eE_0$

$\gamma u(e^{iqa}+1)+(M\omega^2-2\gamma)v=0 \quad +eE_0$

$(m\omega^2-2\gamma)(M\omega^2-2\gamma)-\gamma^2 4\cos^2\frac{qa}{2}=0$

$Mm\omega^4-2\gamma\omega^2(M+m)+\frac{4\gamma^2}{Mm}\sin^2\frac{qa}{2}=0$

$\omega_{1,2}^2=\frac{\gamma}{\mu}\left(1\pm\sqrt{1-\alpha\sin^2\frac{qa}{2}}\right)$ $\quad \alpha=\frac{4Mm}{M+m}=\frac{4\mu}{M+m}$ $\quad \frac{\alpha}{\mu}=\frac{4}{M+m}$

$\omega_2^2=\frac{\gamma}{\mu}\cdot\frac{\alpha}{2}\left(\frac{qa}{2}\right)^2=\frac{\gamma}{2}\cdot\frac{1}{M+m}(qa)^2$ $\quad s^2=\frac{\gamma}{2}\cdot\frac{1}{M+m}a^2$

$\omega_0^2=\frac{2\gamma}{\mu}$ $\quad e(u-v)=2eE_0\frac{M+m}{(\omega^2Mm-2\gamma(M+m))}=2E_0\frac{e^2/\mu}{\omega^2-\omega_0^2}$

$(m\omega^2-2\gamma)u+2\gamma v=-eE_0$

$2\gamma u+(M\omega^2-2\gamma)v=eE_0$

$v=\frac{1}{2\gamma}\left(-eE_0+(2\gamma-m\omega^2)u\right)$

$u+\frac{M\omega^2-2\gamma}{2\gamma}\cdot\frac{1}{2\gamma}\left(-eE_0+(2\gamma-m\omega^2)u\right)=$

$u=\frac{\frac{eE_0}{2\gamma}\left(\cancel{1}+\frac{M\omega^2-\cancel{2\gamma}}{2\gamma}\right)}{1+\frac{(M\omega^2-2\gamma)(-m\omega^2+2\gamma)}{(2\gamma)^2}}=\frac{eE_0}{2\gamma}\ldots=\frac{eE_0 M}{(\omega^2Mm-2\gamma(M+m))}$

$v=\frac{-\frac{eE_0}{2\gamma}\left(1+\frac{m\omega^2-2\gamma}{2\gamma}\right)}{1+\frac{(m\omega^2-2\gamma)(-M\omega^2+2\gamma)}{(2\gamma)^2}}=\frac{-eE_0 m}{(\omega^2Mm-2\gamma(M+m))}$

Задача Т.1.1 (на семинар)

Для базоцентрированной ромбической решётки с параметрами решётки a, b=2a, c построить обратную решётку, выделить первую зону Бриллюэна, найти объём первой зоны Бриллюэна и сравнить с объёмом элементарной ячейки исходной ромбической решётки.

Комментарий: цель задачи — показать, что геометрия первой зоны Бриллюэна даже в казалось бы геометрически простых решётках может оказаться нетривиальной.

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

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

Базоцентрированная решётка непримитивная — для построения первой зоны Бриллюэна необходимо перейти к примитивной решётке. Обратную решётку можно строить и для примитивной решётки и для исходной ромбической. Далее рассуждения идут для построения обратной решётки примитивной решётки, необходимой для нахождения первой зоны Бриллюэна. К обратной решётке исходной ромбической решётки мы вернёмся в конце решения.

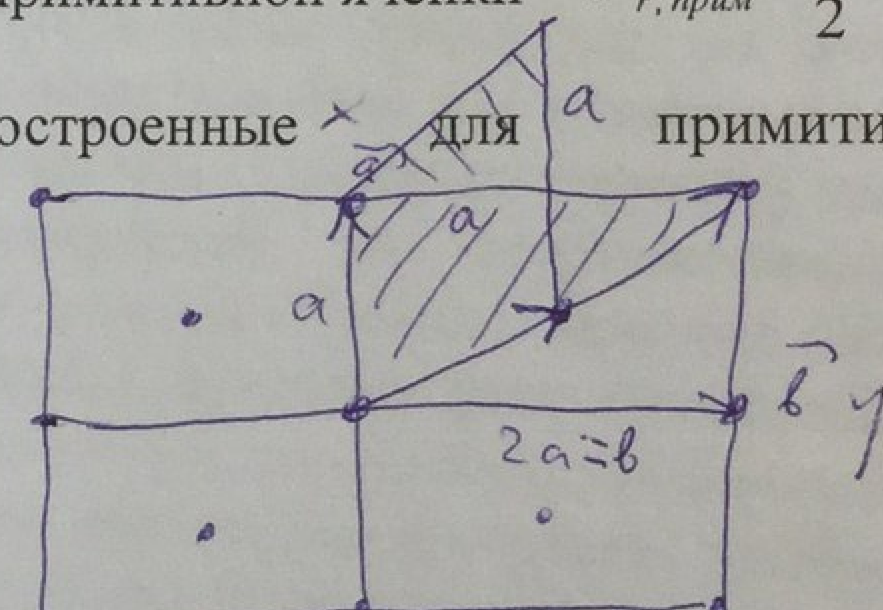
Переход к примитивной решётке неоднозначен, но это не влияет на конечный результат. Это можно сделать, например, заменив одну из трансляций в плоскости основания на вектор в центр основания: $\vec{b}\,' = \frac{1}{2}(\vec{a}+\vec{b})$. Объём примитивной ячейки $V_{r,\,прим} = \frac{1}{2} V_r = a^2 c$

Вектора обратной решётки, построенные для примитивной ячейки:

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V_{r,\,прим}}[\vec{b}\,'\times\vec{c}] = \frac{\pi}{a}(2\vec{x}-\vec{y})$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\vec{y}$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{c}\vec{z}$$



Отсюда сразу объём элементарной ячейки для обратной решётки, по определению равный объёму первой зоны Бриллюэна: $V_k = V_{1\,з.Бр.} = \frac{(2\pi)^3}{a^2 c} = \frac{(2\pi)^3}{V_{r,\,прим}} = 2\frac{(2\pi)^3}{V_r}$.

Так как $\vec{c}^* \perp \vec{a}^*, \vec{b}^*$, то элементарная ячейка 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 лежат на $\pm c^*/2$, никаких «срезанных» углов в этом направлении не будет. В этом можно убедиться простыми геометрическими соображениями: объём первой зоны Бриллюэна (найденный ранее) равен (из ортогональности) произведению высоты призмы $|\vec{c}^*|$ на площадь основания $\left\|\vec{a}^*\times\vec{b}^*\right\|$, это равенство указывает на то, что никаких углов этой призмы в направлении вектора $\vec{c}^*$ «срезать» не надо.

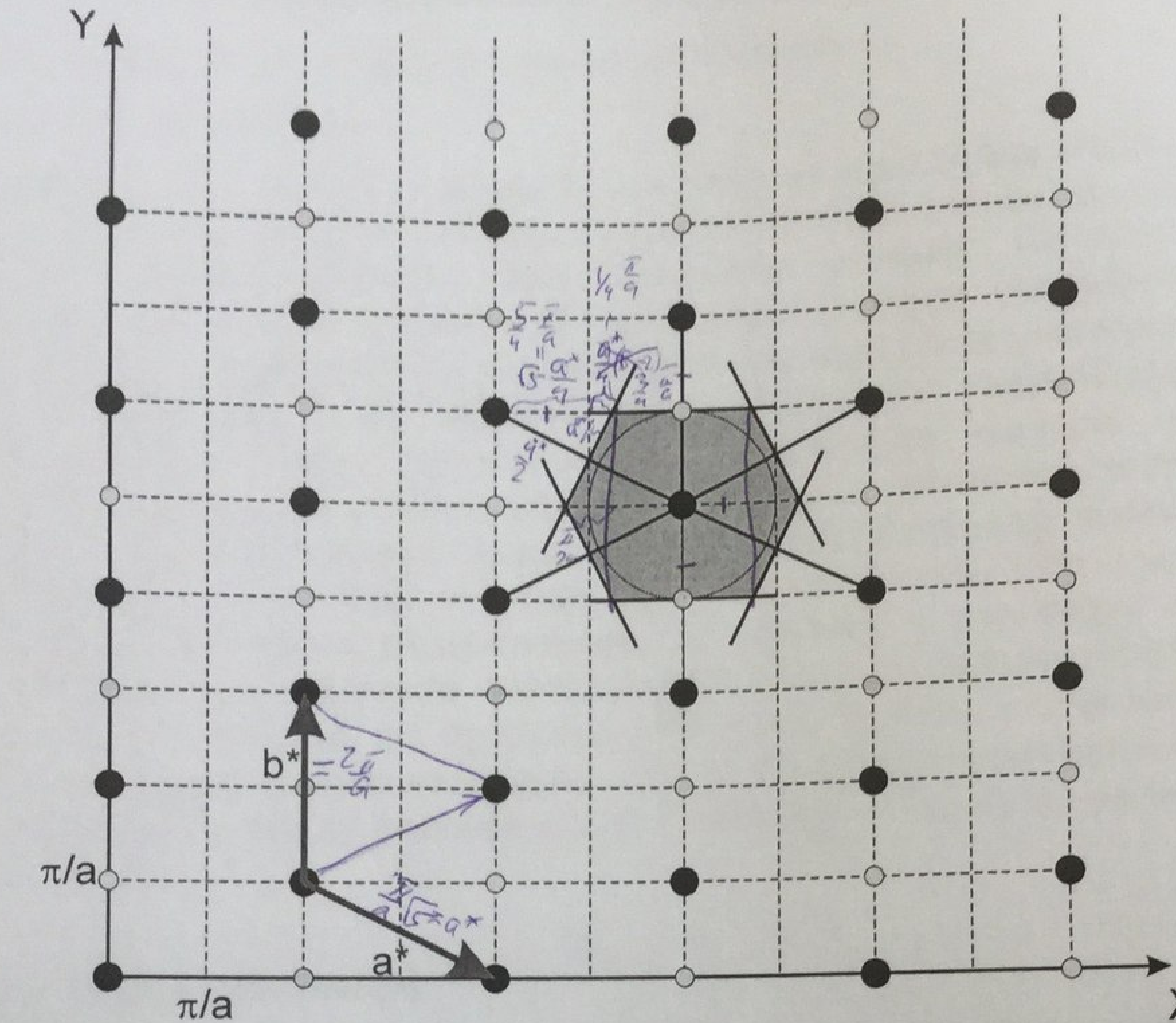


Рисунок 5: К решению задачи Т.1.1. Обратная решётка в плоскости XY и проекция первой зоны Бриллюэна на эту плоскость. Синие кружки - обратная решётка для примитивной элементарной ячейки. Серые кружки - дополнительные узлы обратной решётки при построении по непримитивной элементарной ячейки. Показаны вектора обратной решётки для построения по примитивной ячейке. Красным фоном показана первая зона Бриллюэна, построенная как ячейка Вигнера-Зейтца. Пунктирный круг в первой зоне Бриллюэна построен, чтобы подчеркнуть неправильность получающегося шестиугольника.

Интерес представляет построение сечения первой зоны Бриллюэна в плоскости XY. Построение представлено на рисунке 5. Первая зона Бриллюэна для исходно «прямоугольной» структуры имеет вид прямоугольной призмы с основанием в форме неправильного шестиугольника.

Дополнительно интересно построить обратную решётку по исходной непримитивной решётке. В этой обратной решётке окажется вдвое больше узлов. Формально для изменения волнового вектора падающей волны с такими значениями будет выполнено условие дифракции — однако интенсивность такой дифракции окажется нулевой (т.н. запрещённые отражения).

$\Delta = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$

$\square = \frac{3}{2} \frac{\pi}{a} \cdot \frac{2\pi}{a} = 3\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$

$S = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$

$V = \frac{(2\pi)^3}{a^2 c}$

Задача 2.16 (на семинар)(!решена в задачнике!)

Задача об импульсе фонона, разобрана в задачнике и в Киттеле.

Разбор в задачнике корректный.

Комментарий (В.Н.Глазков, личное мнение): хотя решение в задачнике и Киттеле корректно, у задачи есть некоторое коварство. Её ответ (нулевой импульс фонона) является следствием наложенных по условию периодических граничных условий. По ходу курса будут обсуждаться разные методы исследования фононных спектров (например, возбуждение фонона при рассеянии нейтрона) при которых кристаллу передаётся некоторый «настоящий» импульс, интерпретируемый как квазиимпульс возбуждаемой квазичастицы. При ударе молотком по концу длинного стержня импульс деформации, бегущий по стержню со скоростью звука, можно представить, как пакет фононов: и добежав до второго конца этот пакет может отдать свой импульс прислонённому к концу стержня шарику. Отличие от задачи, очевидно, в граничных условиях. Во многих случаях эта «экзистенциальная проблема» снимается учётом ангармонизмов, приводящих к конечному времени жизни фонона. Например, при рассеянии нейтрона с излучением фонона испущенный фонон уносит «настоящий» импульс, но, пробежав свою длину пробега, он рассеивается, и после нескольких процессов рассеяния мы получим никуда не летящий равновесный газ фононов и опять можем говорить, что «у фононов нулевой импульс», а «импульс рассеяния передался кристаллу в целом».

Задача Т.1.2 (на семинар)

K_{39} Br_{80}

Распространение продольных фононов вдоль главной диагонали элементарного куба в кристалле KBr (структура хлористого натрия) хорошо описывается моделью двухатомной одномерной цепочки. Найти скорость продольного звука, если минимальная частота оптических фононов в этом направлении составляет $\Omega_{min}=2.73\cdot 10^{13}c^{-1}$. *Ребро элементарного куба (расстояние между ионами одноимённого знака) составляет* $2a=6.6\,\mathring{A}$. *В качестве периода цепочки следует брать расстояние между плоскостями одинаковых ионов, перпендикулярных главной диагонали куба.*

<u>*Комментарий:*</u> задача из текстовых задач 2013-2014 уч.года, добавлено в текст уточнение о структуре кристалла.

$$\omega_{1,2}^2=\frac{\gamma}{\mu}\left(1\pm\sqrt{1-\alpha\sin^2\frac{ka}{2}}\right)\quad \alpha=\frac{4Mm}{(M+m)^2}=\frac{4\mu}{M+m}$$

$$\omega_2^2=\frac{\gamma}{\mu}\left(\frac{\alpha}{2}\sin^2\frac{ka}{2}\right)=\frac{\gamma\alpha}{2\mu}\left(\frac{ka}{2}\right)^2=s^2k^2,\quad s^2=\frac{\gamma}{2(M+m)}a^2$$

В структуре NaCl (ГЦК, базис состоит из атома Na и атома Cl) вдоль главной диагонали элементарную ячейку рассекают шесть чередующихся плоскостей атомов разных сортов. Расстояние между плоскостями отличается от расстояния между атомами в этом направлении, соседние плоскости сдвинуты относительно друг друга.

Тогда период «цепочки плоскостей» равен расстоянию между двумя плоскостями атомов одного типа, т.е. $d=\sqrt{3}(2a)/3=\frac{2a}{\sqrt{3}}$

$$\alpha=\frac{4Mm}{(M+m)^2}$$

Минимальная частота оптических фононов в используемой модели достигается на границе зоны Бриллюэна и равна $\omega_{опт}(k=\pi/a)=\sqrt{\frac{2C}{M_K}}$ (используется масса более лёгкого атома).

$$\omega_{2\,min}^2=\frac{\gamma}{\mu}\left(1+\sqrt{1-\alpha}\right)=\frac{2\gamma}{m}$$

$$\sqrt{1-\alpha}=\frac{M-m}{M+m}$$

$$1+\frac{M-m}{M+m}=\frac{2M}{M+m}$$

$$\frac{2M}{M+m}\cdot\frac{1}{\frac{Mm}{M+m}}=\frac{2}{m}$$

Для скорости звука из длинноволнового предела для акустической ветви известно

$$s=d\sqrt{\frac{C}{2(M_K+M_{Br})}}$$

$s = d\sqrt{\frac{\gamma/2}{M+m}}$ $d=\frac{2a}{\sqrt{3}}$

Окончательно:

$$s=\frac{2a}{\sqrt{3}}\Omega_{min}\sqrt{\frac{M_K}{M_K+M_{Br}}}\approx 2.98\cdot 10^5\,см/сек$$

$s=\frac{d}{2}\Omega_{min}\sqrt{\frac{m}{M+m}}=$
$=\frac{3,6}{\sqrt{3}}\cdot 2,73\cdot 10^{13}\cdot 10^{-8}\sqrt{\frac{1}{3}}=1,7\cdot 2,73\cdot 10^5=3\cdot 10^5$ см/с

Задача Т.1.3 (на дом)

При изучении структуры кристаллов широко используется метод Дебая-Шерера: на порошковый образец, состоящий из маленьких случайно ориентированных кристаллов, падает монохроматическое рентгеновское излучение. Наблюдаемая на расположенном за образцом перпендикулярно к падающему лучу плоском детекторе картина дифракции состоит из семейства концентрических окружностей. Определить радиусы первой из этих окружностей для кристаллов с простой кубической и ГЦК решётками. В обоих случаях ребро кубической элементарной ячейки a=3.14Å, длина волны падающего излучения λ=0.7Å (K-α линия молибдена), расстояние до детектора L=10 см.

<u>Комментарий:</u> новая задача, на вычисление векторов обратной решётки и использование условия дифракции $\Delta\vec{k}=\vec{G}$.

Задача в принципе может быть решена с использованием условия Брэгга-Вульфа, но подразумевается использование вводимого на лекции условия дифракции $\Delta\vec{k}=\vec{G}$. Так как в порошке кристаллиты ориентированы случайно, то первый дифракционный максимум будет наблюдаться, когда найдётся кристаллит, для которого в этом направлении выполнено условие дифракции. Симметрия вокруг направления падающего луча приводит к формированию целого конуса расходящихся лучей, для которых выполнено условие дифракции, что даст окружность на детекторе.

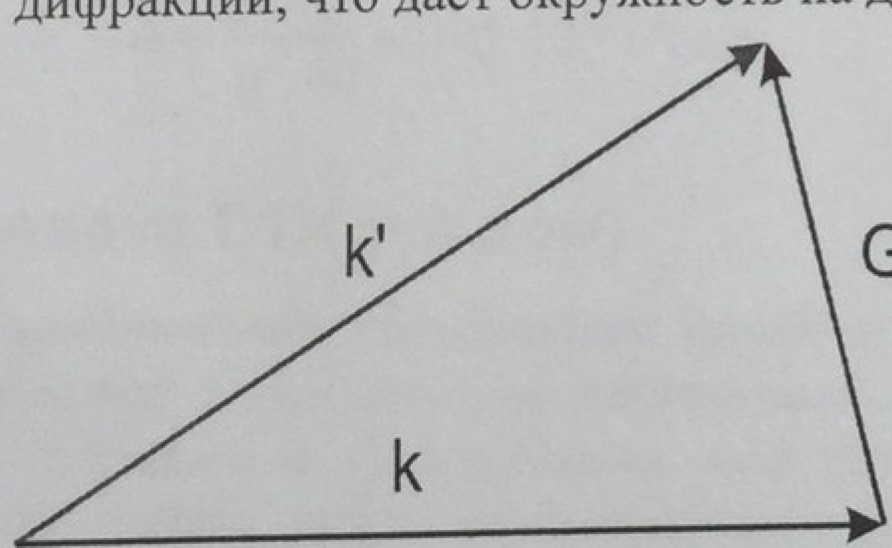
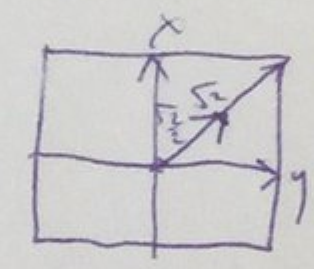


Рисунок 6 К применению условия дифракции.

Необходимое условие дифракции $\Delta\vec{k}=\vec{G}$, минимальное отклонение луча соответствует вектору обратной решётки минимальной длины. При упругом рассеянии (дифракции) длина волнового вектора излучения не меняется. Для угла отклонения Θ из тривиальной тригонометрии получим $tg\frac{\Theta}{2}=\frac{G_{min}/2}{k}$, а для радиуса окружности на детекторе $R=L\,tg\,\Theta$. В условиях задачи с разумной точностью можно пользоваться приближением малого угла.

Для простой кубической решётки вектора обратной решётки равны $\frac{2\pi}{a}$. Тогда $tg\frac{\Theta}{2}=\frac{\lambda}{2a}=0.111$ и $R\approx L\frac{\lambda}{a}=2.2$ см (точное вычисление тригонометрических функций даёт отличие в следующем знаке).

Для ГЦК решётки необходимо иметь в виду, что ГЦК решётка не примитивная. Вектора трансляции для примитивной решётки направлены в центр граней $\vec{a}_1=\frac{a}{2}(\vec{x}+\vec{y})$ и т. д. (здесь $\vec{x}$, $\vec{y}$ и $\vec{z}$ — единичные вектора вдоль рёбер куба). Объём примитивной ячейки равен $\frac{a^3}{4}$ (по семинарской задаче 2.1 или прямым вычислением), векторное произведение $\vec{a}_2\times\vec{a}_3=\frac{a^2}{4}(\vec{y}+\vec{z})\times(\vec{z}+\vec{x})=\frac{a^2}{4}(\vec{x}+\vec{y}-\vec{z})$, так что для векторов обратной решётки $\vec{a}_1^{\,*}=\frac{2\pi}{a}(\vec{x}+\vec{y}-\vec{z})$ и т.д. Длина вектора обратной решётки равна $\frac{2\pi\sqrt{3}}{a}$. В принципе, так как вектора обратной решётки не ортогональны, нужно проверить не окажется ли короче вектор $\vec{a}_1^{\,*}+\vec{a}_2^{\,*}+\vec{a}_3^{\,*}$, но в данном случае он имеет в точности такую же длину. Отсюда ответ: $tg\frac{\Theta}{2}=\frac{\sqrt{3}\lambda}{2a}=0.192$, $R\approx\sqrt{3}\,L\frac{\lambda}{a}=3.8\,\text{см}$ (точное вычисление тригонометрических функций здесь даёт 4.0 см)



Ответ: для куб.решётки $R\approx L\frac{\lambda}{a}=2.2\,\text{см}$, для ГЦК $R\approx\sqrt{3}\,L\frac{\lambda}{a}=3.8\,\text{см}$.

Задача 2.20 (на дом)

В одномерной цепочке из одинаковых атомов скорость звука равна $s=2\cdot10^5\,см/сек$, а постоянная решётки $a=0.3\,нм$, при какой частоте колебаний ω сдвиг фаз между двумя атомами, находящимися на расстоянии 10a составит $\pi/2$

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

$$\Delta\phi=k\Delta x=10ka=\pi/2\rightarrow ka=\frac{\pi}{20}\ll1$$

$$\omega\approx\frac{2s}{a}\frac{\pi}{40}\approx1.05\cdot10^{12}\,1/сек$$

Задача Т.1.4 (на дом)

В приближении «ближайших соседей» закон дисперсии фононов $\omega(k)$ в зоне Бриллюэна является монотонно возрастающей функцией. При учёте взаимодействия с соседями, следующими за ближайшими, это уже не всегда так. Например, в свинце, в направлении [100] (вдоль ребра элементарного куба) частота фононов достигает максимума при $k_0=0.8\,k_{Бр}$, где $k_{Бр}$ – волновое число, соответствующее границе зоны Бриллюэна в этом направлении. Скорость продольного звука в этом направлении составляет $s=2.2\cdot10^5\,см/с$. Используя модель одномерной цепочки, найти силовые постоянные для первых и вторых соседей. Свинец кристаллизуется в ГЦК-решетку с $d=4.95\,\mathring{A}$. Периодом одномерной цепочки считать расстояние между соседними параллельными плоскостями, перпендикулярными направлению [100] .

Комментарий: задача из текстовых задач 2013-2014 уч.года, добавлен вопрос об отношении силовых констант первых и вторых соседей

В качестве периода цепочки берём половину ребра куба $a=d/2$

Записываем уравнение динамики для цепочки

$$m\frac{d^2x_n}{dt^2}=C_1(x_{n+1}+x_{n-1}-2x_n)+C_2(x_{n+2}+x_{n-2}-2x_n)$$

подставляем решение в форме бегущей волны $x_n=A\,e^{i(kan-\omega t)}$

$$-m\omega^2=C_1(e^{ika}+e^{-ika}-2)+C_2(e^{2ika}+e^{-2ika}-2)=-4C_1\sin^2\frac{ka}{2}-4C_2\sin^2 ka$$

Для сравнения со скоростью звука берём длинноволновый предел

$$m s^2 k^2=(C_1+4C_2)k^2a^2$$

$$C_1+4C_2=m\frac{s^2}{a^2}$$

Для условия максимума

$$\frac{d(m\omega^2)}{d(ka)}=0=2C_1\sin ka+4C_2\sin(2ka)$$

$$C_1+4C_2\cos ka=0 \quad \text{или} \quad \sin ka=0$$

второе условие даёт положение границы зоны Бриллюэна в нашей модели $k_{Бр}=\frac{\pi}{a}$ (В условии уже фактически сказано, что эта модель работает, поэтому честно искать первую зону Бриллюэна для ГЦК решётки необходимости нет. Однако вопрос «почему не $\frac{\pi}{d}$?» будет весьма уместен на сдаче.)

Итого, имеем пару уравнений из которых

$$C_2=\frac{ms^2}{4a^2}\frac{1}{1-\cos k_0 a}=\frac{ms^2}{d^2}\frac{1}{1-\cos 0.8\pi}\approx 3.75\cdot 10^3\ дин/см$$

$$C_1=-4C_2\cos k_{0a}\approx 12.1\cdot 10^3\ дин/см$$

$$C_1/C_2=3.24$$

Задача 2.62 (на дом)

Спектрометром анализируется свет от лазера с длиной волны $\lambda=6328$ *Å, рассеянный под углом* $\phi=90^0$ *в воде* $(n=1.33)$ *. Какова должна быть разрешающая способность спектрометра, чтобы различить линию, соответствующую неупругому рассеянию света с испусканием фонона? Скорость звука в воде* $s=1.5\cdot 10^5\ см/сек$.

Закон сохранения энергии: $\omega=\omega'+\Omega$ (здесь и далее прописные буквы для фононов, простые — для фотонов, штрихованные для рассеянного фотона).

Закон сохранения импульса:

$\vec{k}=\vec{k}'+\vec{K}$.

Так как фонон рождается в жидкости, периодичности нет и вектор обратной решётки в закон сохранения квазиимпульса в принципе вводить не надо. Впрочем, можно показать, что и в кристалле при рассеянии видимого света могут рождаться только фононы с малыми волновыми векторами.

При рассеянии на 90 градусов

$$k=K_x,\ k'=-K_y$$

$$\frac{\Omega^2}{s^2}=K^2=k^2+k'^2=\left(\frac{n}{c}\right)^2\left(\omega^2+(\omega')^2\right)\approx 2\omega^2\left(\frac{n}{c}\right)^2$$

$$\frac{1}{R}=\frac{\omega-\omega'}{\omega}=\frac{\Omega}{\omega}\approx\frac{\sqrt{2}ns}{c}\approx 0.94\cdot 10^{-5}$$

Комментарий: дополнительным вопросом по этой задаче может быть обсуждение варианта с поглощением фонона (сдвиг частоты фотона имеет ту же абсолютную величину, но другой знак), а также обсуждение связи интенсивности этих двух процессов.

Задача 2.77 (на дом)

Нерадиационные переходы для подуровней электронного 1s-состояния атомов парамагнетика в магнитном поле могут происходить за счёт передачи энергии фонону, а момента импульса — всему кристаллу в целом. Оценить минимальные размеры кристалла, при котором такое снятие возбуждения возможно. Усреднённая скорость звука $s=3.2\,км/сек$ *, индукция поля 0.1 Тл, смещение атомов на границе считать равным нулю.*

Предлагается считать граничные условия для фононов закреплёнными, при этом условие формирования стоячих волн в кристалле в форме прямоугольного параллелепипеда $\sin(k_x L_x)\sin(k_y L_y)\sin(k_z L_z)=0$. Минимальное значение волнового вектора для возбуждаемой стоячей волны $k_{min}\simeq\frac{\pi}{L}$, где L — характерный линейный размер (считаем форму кристалла кубиком).

Частота такого фонона (который оказывается длинноволновым)

$$\omega=k_{min}s$$

Её надо приравнять по закону сохранения разнице энергии спиновых подуровней. Так как по условию парамагнетик в s-состоянии, то g=2.

$$L\simeq\frac{\pi}{k_{min}}=\frac{\pi s\hbar}{\hbar\omega}=\frac{\pi s\hbar}{g\mu_B B}\approx 0.57\,мкм$$

Задача 2.72 (на дом)(!опечатка в решении в задачнике!)

В очень длинной цепочке на один из атомов, расположенный далеко от концов, воздействуют внешним источником с частотой $f=1.001 f_0$, где f_0 - максимальная частота собственных колебаний цепочки. Найти отношения смещения данного атома и атома, отстоящего от него на 100 межатомных расстояний.

Задача разобрана в решениях с опечаткой и недоговорённостями о том, как выбираются затухающее или растущее решения.

Мы знаем, что решения для колебания в кристалле имеют вид (для цепочки)

$$\omega^2=\omega_{max}^2 \sin^2\frac{ka}{2}$$

для заданной частоты получается синус больше единицы, что соответствует комплексному волновому вектору — то есть волне, амплитуда которой зависит от координаты.

$$\sin\frac{ka}{2}=1.001$$

$$e^{ika/2}-e^{-ika/2}=2.002\,i$$

$$\left(e^{ika/2}\right)^2-2.002\,i\,e^{ika/2}-1=0$$

$$e^{ika/2}=1.001\,i\pm\sqrt{-(1.001)^2+1}=(1.001\pm0.045)\,i=\begin{cases}1.046\,i\\0.956\,i\end{cases}$$

Подставляем $ka=\pi+i\delta$

$$e^{-\delta a/2}=\begin{cases}1.046\\0.956\end{cases}$$

$$\delta_1 a=-0.090$$

$$\delta_2 a=0.090$$

получается два решения, одно соответствует волне растущей с ростом X, другое — убывающей с ростом X. Решения отличаются только знаком, они равны по модулю (это опечатка в решении).

Выбор решения зависит от того слева или справа от иона, на который идёт воздействие, находится интересующий нас ион. В одном случае надо выбирать решение, затухающее налево, в другом — затухающее направо. Очевидно, что так и должно быть — затухающие колебания симметрично распространяются в обе стороны.

Соответственно, для искомого отношения амплитуд

$$\frac{u_{100}}{u_0}=e^{-100*0.090}=e^{-9}=1.23\cdot10^{-4}$$

(и, кстати, здесь ещё одна опечатка в решениях — потеряно число 100 в формуле)