# НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ

Факультет физики

## Домашние работы по первой части курса

Работу выполнил студент 3 курса Захаров Сергей Дмитриевич



Москва 2021

## Содержание

1.	Неделя 1
	1.1. Для ОЦК и ГЦК решеток найти вектора примитивных трансляций и ячейку
	Вигнера-Зейтца. Найти обратные решетки.
	1.1.1. Вектора примитивных трансляций ОЦК
	1.1.2. Вектора примитивных трансляций ГЦК
	1.1.3. Ячейка Вигнера-Зейтца ОЦК
	1.1.4. Ячейка Вигнера-Зейтца ГЦК
	1.1.5. Обратная решетка ОЦК
	1.1.6. Обратная решетка ГЦК
2.	Неделя 2
	2.1. Показать, что амплитуда колебаний тела на пружинке (горизонтальное дви-
	жение) в пределе $\omega\gg\omega_0=\sqrt{k/m}$ не зависит от частоты и совпадает $c$ ам-
	плитудой свободного тела без пружинки
3.	Неделя 3
	3.1. Посчитать $\langle \Delta x^2 \rangle$ для гармонического осциллятора
	3.2. Определить структурный фактор ГЦК решетки
	3.3. Определить структурный фактор ОЦК решетки
4.	Неделя 4
	4.1. Рассчитать вклад оптической ветви колебаний в теплоемкость $c_V$
	4.1.1. $T \ll \theta \ll \omega_0$ :
	4.1.2. $T \gg \theta, T \sim \omega_0$ :
	4.1.3. $T \gg \theta, T \sim \omega_0$ :
	4.2. Выразить $\mu_B$ через фундаментальные константы, рассмотрев магнитный мо-
	мент, возникающий за счет орбитального движения электрона
	4.3. Найти теплоемкость системы осцилляторов с частотой $\omega_0$ при температуре $T$
	4.3.1. Одномерье
	4.3.2. Трехмерье
5.	Неделя 7
	5.1. Haŭmu $M=M_1+M_2=f(T)$
	5.2. Показать, что $\hat{S}_1 \hat{S}_2 = S_1^z S_2^z + (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+)/2$
	5.3. Изучается рассеянный под углом 90° луч оптического диапазона. Измеряется
	смещение частоты $\Delta \omega,$ возникающее из-за поглощения или излучения квантов
	упругих колебаний. Найти скорость звука $v_{s6}$ по измеренной величине $\Delta\omega/\omega$ $1$

- 1.1. Для ОЦК и ГЦК решеток найти вектора примитивных трансляций и ячейку Вигнера-Зейтца. Найти обратные решетки.
- 1.1.1. Вектора примитивных трансляций ОЦК

$$v_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a \end{pmatrix} + \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} a \\ a \\ a \end{pmatrix} = \frac{a}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2\sqrt{3} + 1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

$$v_2 = \frac{a}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} + 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$v_3 = \frac{a}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} + 1\\ 1\\ 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

#### 1.1.2. Вектора примитивных трансляций ГЦК

$$v_1 = \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\1\\0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$v_2 = \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\0\\1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$v_3 = \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0\\1\\1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

#### 1.1.3. Ячейка Вигнера-Зейтца ОЦК

Для произвольного узла (взял центральный) строим отрезки до ближайших узлов. Через их середины, перпендикулярно им, проводим плоскости. Пересечение всех этих плоскостей даст искомую ячейку. Опустив расчеты точек приведем только красивую картинку:

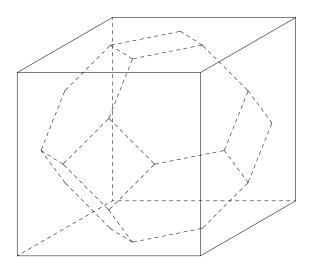


Рис. 1. Ячейка Вигнера-Зейтца для ОЦК решетки

#### 1.1.4. Ячейка Вигнера-Зейтца ГЦК

Все то же самое, но для ГЦК.

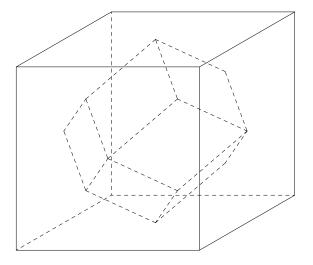


Рис. 2. Ячейка Вигнера-Зейтца для ГЦК решетки

#### 1.1.5. Обратная решетка ОЦК

Возьмем в качестве базиса, например:

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad a_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad a_3 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$
 (7)

Для обратной решетки сперва посчитаем:

$$a_1 \cdot [a_2 \times a_3] = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{vmatrix} = \frac{1}{2}$$
 (8)

Тогда для векторов:

$$b_1 = 2\pi \frac{[a_2 \times a_3]}{1/2} = 2\pi \cdot \begin{pmatrix} 1\\0\\-1 \end{pmatrix}$$
 (9)

$$b_2 = 2\pi \frac{[a_3 \times a_1]}{1/2} = 2\pi \cdot \begin{pmatrix} 0\\1\\-1 \end{pmatrix}$$
 (10)

$$b_3 = 2\pi \frac{[a_1 \times a_2]}{1/2} = 2\pi \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} \tag{11}$$

#### 1.1.6. Обратная решетка ГЦК

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad a_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}, \quad a_3 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$
 (12)

Для обратной решетки посчитаем:

$$a_1 \cdot [a_2 \times a_3] = \frac{1}{4} \tag{13}$$

$$b_1 = 2\pi \frac{[a_2 \times a_3]}{1/4} = 2\pi \cdot \begin{pmatrix} 1\\1\\-1 \end{pmatrix}$$
 (14)

$$b_2 = 2\pi \frac{[a_3 \times a_1]}{1/4} = 2\pi \cdot \begin{pmatrix} -1\\1\\1 \end{pmatrix}$$
 (15)

$$b_3 = 2\pi \frac{[a_1 \times a_2]}{1/4} = 2\pi \cdot \begin{pmatrix} 1\\ -1\\ 1 \end{pmatrix} \tag{16}$$

2.1. Показать, что амплитуда колебаний тела на пружинке (горизонтальное движение) в пределе  $\omega \gg \omega_0 = \sqrt{k/m}$  не зависит от частоты и совпадает с амплитудой свободного тела без пружинки

Запишем второй закон Ньютона для осциллятора на пружинке (пружина = наличие внешней силы):

$$ma = -kx + F_0 \cos(\omega t) \tag{17}$$

Введем следующие обозначения:

$$\omega_0^2 = \frac{k}{m}, \quad \Phi_0 = \frac{F_0}{m}$$
 (18)

Заменим ускорение на законную вторую производную координаты по времени, получим дифур:

$$\ddot{x} + \omega^2 x = \Phi_0 \cos(\omega t) \tag{19}$$

Решение будем искать как сумму общего решения однородного уравнения и частного решения неоднородное. Общее решение мы уже знаем, оно имеет вид:

$$x(t) = A\sin(\omega_0 t + \varphi_0) \tag{20}$$

Чтобы найти частное решение подставим в уравнение решение вида  $x(t) = B\cos(\omega t)$  и найдем константу:

$$B = \frac{\Phi_0}{\omega_0^2 - \omega^2} \tag{21}$$

В таком случае окончательное решение имеет вид:

$$x(t) = A\sin(\omega_0 + \varphi_0) + \frac{\Phi_0}{\omega_0^2 - \omega^2}\cos(\omega t)$$
(22)

В интересующем нас случае мы можем вторым членом пренебречь: частота колебаний косинуса будет очень высокой (по сравнению с частотой изменения синуса). Поэтому мы можем формально усреднить по небольшому периоду колебаний косинуса, не трогая при этом усреднении синус, и получить, что  $x(t) = A\sin(\omega + \varphi_0)$  не зависит от  $\omega$ , а амплитуда совпадает с амплитудой без пружинки.

#### 3.1. Посчитать $\langle \Delta x^2 \rangle$ для гармонического осциллятора

Запишем равенство энергий:

$$\frac{k\langle \Delta x^2 \rangle}{2} = \frac{k_B T}{2} \quad \Rightarrow \quad \left[ k = m\omega^2 \right] \quad \Rightarrow \quad \left\langle \Delta x^2 \right\rangle = \frac{k_B T}{m\omega^2} \approx 4.14 \cdot 10^{-21} \text{ M} \tag{23}$$

#### 3.2. Определить структурный фактор ГЦК решетки

Базис выберем следующий:

$$(0 \ 0 \ 0), \ (1/2 \ 1/2 \ 0), \ (0 \ 1/2 \ 1/2), \ (1/2 \ 0 \ 1/2)$$
 (24)

$$S(h, k, l) = \sum_{i} f_{i}e^{-2i\pi(x_{i}h + y_{i}k + z_{i}l)} = f\left(1 + e^{-2i\pi(h/2 + k/2)} + e^{-2i\pi(h/2 + l/2)} + e^{-2i\pi(k/2 + l/2)}\right) = f\left(1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)}\right)$$

Положим, что все индексы имеют одинаковую четность. Тогда попарные суммы, стоящие в экспонентах, тоже все четные, из-за чего экспоненты оказываются равными единице, а S=4f.

Если же теперь предположить, что одинаковую четность имеют только два из трех (не важно, каких) индекса, то только одна экспонента окажется равно 1, а две другие — -1. В таком случае S=0.

#### 3.3. Определить структурный фактор ОЦК решетки

Базис выберем следующий:

$$(0 \ 0 \ 0), \ (1/2 \ 1/2 \ 1/2)$$
 (25)

Запишем структурный фактор:

$$S(h,k,l) = \sum_{i} f_i e^{-2i\pi(x_i h + y_i k + z_i l)} = f(1 + e^{-i\pi(h + k + l)})$$
(26)

Вновь, как в прошлой задаче, возможно два случая. Сперва предположим, что сумма трех индексов есть число четное, то экспонента даст 1, и, следовательно, S=2f.

В противном случае экспонента даст -1, и S=0.

#### 4.1. $Paccчитать вклад оптической ветви колебаний в теплоемкость <math>c_V$

Положим  $\omega = \omega_0 + \omega_1 \cos(ka)$ , при условии  $\omega_0 \gg \omega_1$ , а  $\omega_0 \gg \theta$ .

Тогда  $E=3\sum_k E(k)N(k),\ \varepsilon=\hbar\omega_k(n(\varepsilon)+1/2).\ \hbar$  в дальнейшем будем опускать, а  $n(\varepsilon)$  соответствует  $f_B(\varepsilon)$ .

Если  $\omega \approx \omega_0$ , то:

$$f_B = \frac{1}{e^{\omega/T} - 1} \approx \frac{1}{e^{\omega_0/T} - 1}$$
 — заменим на константу (27)

Тогда:

$$E = 3N(V)\omega_0 \left(\frac{1}{e^{\omega_0/T} - 1} + \frac{1}{2}\right) \quad \Rightarrow \quad c_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{3N\omega_0^2}{T^2} \cdot \frac{e^{\omega_0/T}}{(e^{\omega_0/T} - 1)^2} \tag{28}$$

Рассмотрим различные случаи.

#### **4.1.1.** $T \ll \theta \ll \omega_0$ :

$$c_V^{\text{akk}} \propto \left(\frac{T}{\theta}\right)^3, \quad c_V^{\text{ont}} \propto \left(\frac{\omega_0}{T}\right)^2 e^{-2\omega_0/T} \quad \Rightarrow \quad \frac{c_V^{\text{ont}}}{c_V^{\text{akk}}} \propto e^{-2\omega_0/T}$$
 (29)

**4.1.2.**  $T \gg \theta, T \sim \omega_0$ :

$$c_V^{\text{akk}} \approx 3N, \quad c_V^{\text{ont}} \approx 3N \quad \Rightarrow \quad \frac{c_V^{\text{ont}}}{c_V^{\text{akk}}} \sim 1$$
 (30)

**4.1.3.**  $T \gg \theta, T \sim \omega_0$ :

$$c_V^{\text{akk}} = 3N, \quad c_V^{\text{offt}} = 3N \frac{\omega_0^2}{T^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{c_V^{\text{offt}}}{c_V^{\text{akk}}} \sim \left(\frac{\omega_0}{T}\right)^2$$
 (31)

# 4.2. Выразить $\mu_B$ через фундаментальные константы, рассмотрев магнитный момент, возникающий за счет орбитального движения электрона

Если рассмотреть электрон как некоторый заряд, который движется по круговой орбите, то его магнитный момент:

$$\mu = \frac{IS}{c} = \frac{ev}{2\pi R} \cdot \frac{\pi R^2}{c} = \frac{emvR}{2mc} = \frac{eM}{2mc}$$
(32)

Механический момент квантуется как  $M=l\hbar$ . Тогда из 32 получим:

$$\mu = \frac{e\hbar l}{2m_e c} = \mu_B l \quad \Rightarrow \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \tag{33}$$

# 4.3. Найти теплоемкость системы осцилляторов с частотой $\omega_0$ при температуре T

Для удобства (чтобы как в прошлой задаче не таскать T в знаменателе) перебросим T в  $\beta=1/T.$ 

#### 4.3.1. Одномерье

Путь у нас есть N невозмущенных осцилляторов, тогда:

$$Z_1 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\hbar\beta\omega_0(n+1/2)} = e^{-\hbar\beta\omega_0/2} \frac{1}{1 - e^{-\hbar\beta\omega_0}} = \frac{1}{2\sinh(\hbar\beta\omega_0/2)}$$
(34)

Тогда для Z можно записать:

$$Z = \frac{1}{2^N \sinh^N(\hbar \beta \omega_0/2)} \quad \Rightarrow \quad F = -T \ln Z = -TN \ln \left(\frac{1}{2 \sinh(\hbar \beta \omega_0/2)}\right)$$
(35)

Тогда при  $T \to 0$  для c можно записать:

$$c = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = \frac{N\hbar^2 \omega^2}{\sinh^2[\hbar\omega_0/(2T)]}$$
(36)

#### 4.3.2. Трехмерье

Действуем аналогично. Для  $Z_1$ :

$$Z_1 = e^{-3\hbar\beta\omega_0/2} \sum_{n,k,l} e^{-(n+k+l)\hbar\beta\omega_0} = \frac{1}{8\sinh^3(\hbar\beta\omega_0/2)}$$
(37)

Отсюда в целом сразу следует осознание, что трехмерная  $c_3$  равна трем одномерным  $c_1$ :

$$c_3 = 3c_1 \tag{38}$$

#### 5.1. Haŭmu $M = M_1 + M_2 = f(T)$

$$\begin{cases}
M_1 = \frac{c}{T}(H + \lambda M_2) \\
M_2 = \frac{c}{T}(H + \lambda M_1)
\end{cases} \Rightarrow M = (M_1 + M_2) = \frac{2cH}{T} \frac{1}{1 - \frac{c\lambda}{T}} \Rightarrow \chi = \frac{M}{H} = \frac{2c}{T - c\lambda} \tag{39}$$

### **5.2.** Показать, что $\hat{S}_1\hat{S}_2 = S_1^z S_2^z + (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+)/2$

Запишем для  $\hat{S}_1\hat{S}_2$ :

$$\hat{S}_1 \hat{S}_2 = S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + S_1^z S_2^z \tag{40}$$

Распишем  $S^+, S^-$ :

$$S^+ = S^x + iS^y \tag{41}$$

$$S^{-} = S^x - iS^y \tag{42}$$

Распишем  $S_1^+S_2^-, S_1^-S_2^+$ :

$$S_1^+ S_2^- = (S_1^x + iS_1^y)(S_2^x - iS_2^y) = S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y - iS_1^x S_2^y + iS_1^y S_2^x$$
(43)

$$S_1^- S_2^+ = (S_1^x - iS_1^y)(S_2^x + iS_2^y) = S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y - iS_1^y S_2^x + iS_1^x S_2^y$$

$$\tag{44}$$

Тогда из 40 получаем:

$$\hat{S}_1 \hat{S}_2 = S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + S_1^z S_2^z = S_1^z + S_2^z \frac{1}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+)$$

$$\tag{45}$$

5.3. Изучается рассеянный под углом  $90^{\circ}$  луч оптического диапазона. Измеряется смещение частоты  $\Delta \omega$ , возникающее из-за поглощения или излучения квантов упругих колебаний. Найти скорость звука  $v_{36}$  по измеренной величине  $\Delta \omega/\omega$ 

Запишем сразу разность частот:

$$\omega_{fall} - \omega_{dis} = \Delta\omega \tag{46}$$

Энергия, которая передается одному фонону с импульсом р:

$$\hbar(\omega_{dis} - \omega_{fall}) = up \tag{47}$$

Запишем закон сохранения импульса:

$$\vec{p_1} = \vec{p_2} + \vec{p}, \quad \vec{p} = \vec{p_1} - \vec{p_2} \quad \Rightarrow \quad p_y = -p_2, \quad p_x = p_1$$
 (48)

Для значений импульса  $p_1, p_2$  можем записать:

$$p_1 = \frac{\hbar \omega_{fall}}{c}, \quad p_2 = \frac{\hbar \omega_{dis}}{c} \quad \Rightarrow \quad p_x = \frac{\hbar \omega}{c}, \quad p_y = -\frac{\hbar (\omega - \Delta \omega)}{c}$$
 (49)

Теперь, подставляя в 47:

$$\begin{split} \hbar\Delta\omega &= u\sqrt{p_x^2 + p_y^2} = u\sqrt{\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 + \left[\frac{\hbar}{c}(\omega - \Delta\omega)\right]^2} \quad \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad \Delta\omega &= u\frac{\omega}{c}\sqrt{1 + \left(1 - \frac{\Delta\omega}{\omega}\right)^2} \quad \Rightarrow \quad u = \frac{c \cdot \Delta\omega/\omega}{\sqrt{1 + \left(1 - \frac{\Delta\omega}{\omega}\right)^2}} \end{split}$$

## Список литературы