

ПЕРВОЕ ЗАДАНИЕ

Автор: Маллаев Руслан

От: 4 мая 2023 г.

Содержание

1	Задание	2
2	Методы	2
3	Результаты	2

1 Задание

Определить силовые постоянные между плоскостями вдоль направления $[100]$ для алюминия, меди, железа, свинца и т.д., и построить спектр фононов вдоль этого направления

2 Методы

Пусть волна распространяется вдоль направления $[100]$. Если смещение плоскости s равно u_s , а $s+p$ равно u_{s+p} . Тогда предположим сила действующая на плоскость s со стороны u_{s+p} равна $C_p(u_{s+p} - u_s)$. Если пройти по всему кристаллу то

$$F_s = \sum_p C_p(u_{s+p} - u_s)$$

Если двигать всего 1 плоскость то $(u_{s+p} - u_s)$ будут одинаковыми для всех плоскостей кроме той, которую подвинули. Из этого можно найти

$$C_p = \frac{f_{sp}}{(u_{s+p} - u_s)N^2}$$

где N это линейное количество частиц.

Далее для фононного спектра берем формулу из Киттеля

$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p (1 - \cos pKa)$$

3 Результаты

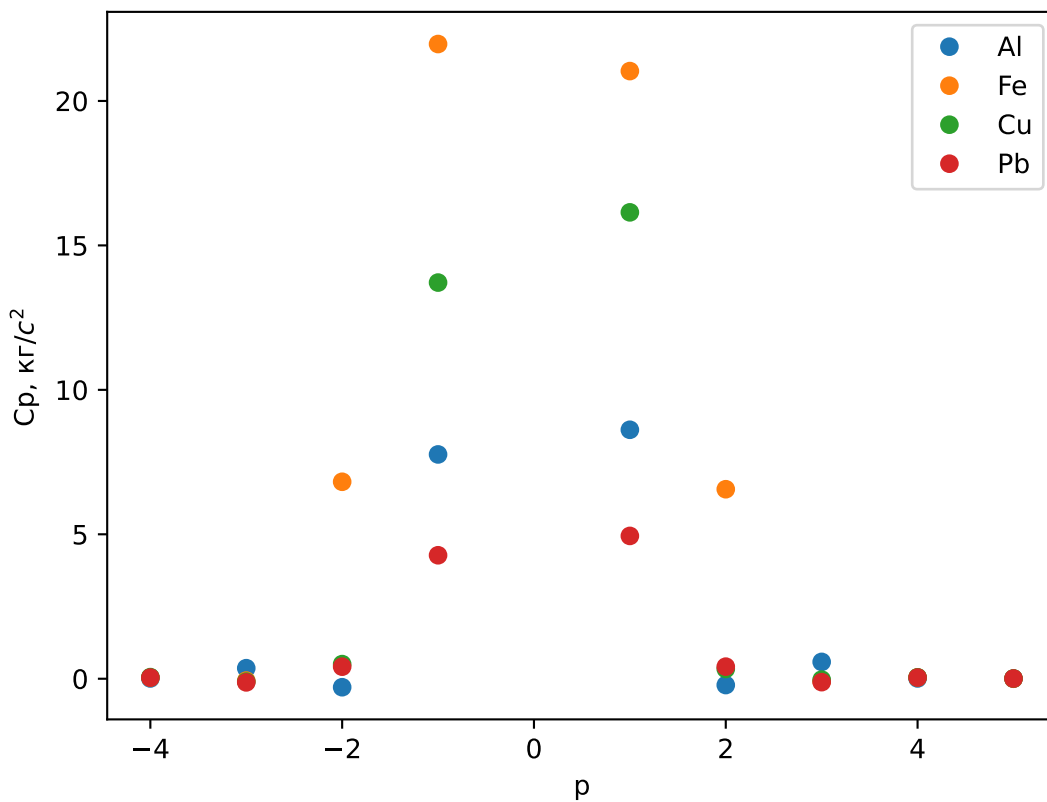


Рис. 1: C_p от p

