מבוא למצב מוצק תשפ"ג: תרגיל בית 8

1. נתונה שרשרת חד-מימדית מונואטומית עם מרחק בין אטומי a, כאשר כל אטום מקיים אינטראקציה עם השכנים עד סדר M. נסמן בתור K_j את קבוע הקפיץ האפקטיבי של האינטראקציה עם השכן מסדר j.

   (א) מצאו את יחס הנפיצה של הפונונים בשרשרת, ואת מהירות הקול במרכז אזור ברילואן הראשון.

   (ב) נניח כעת שכל אטום בשרשרת מקיים אינטראקציה עם כל יתר האטומים, כלומר נתבונן בגבול $M \to \infty$. נניח בנוסף $K_j = K_0/j^p$ כאשר $1 < p < 3$. הראו שבמרכז אזור ברילואן הראשון מתקיים $\omega(k) \propto |k|^{(p-1)/2}$.

   הדרכה: בביטוי עבור יחס הנפיצה אמור להופיע הסכום האינסופי

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^p} \sin^2\left(\frac{jka}{2}\right)$$

   עבור $|ka| \ll 1$ ניתן לקרב את הסכום באמצעות אינטגרל כשמשתנה האינטגרציה x מחליף את jka, וגבולות האינטגרציה הם 0 ו-∞. את האינטגרל חסר המימדים שתקבלו אין צורך לפתור – הוא רק משפיע על הערך של קבוע הפרופורציה בקשר $\omega(k) \propto |k|^{(p-1)/2}$.

2. עבור שרשרת חד-מימדית מונואטומית עם אינטראקציית שכנים קרובים-ביותר בלבד, יחס הנפיצה שקיבלנו בכיתה הוא מהצורה $\omega(k) = \omega_0 \left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$, כאשר a המרחק בין אטומים ו-ω_0 היא התדירות המקסימלית (המתקבלת בקצות אזור ברילואן).

   (א) הראו שצפיפות המצבים (ליחידת תדירות וליחידת אורך) המתאימה ליחס הנפיצה הזה היא

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a \sqrt{{\omega_0}^2 - \omega^2}}$$

   בתחום $0 \le \omega \le \omega_0$.

   (ב) בהתאם לשאלה 4(ג) בתרגיל בית 1, התיקון הקוונטי המוביל בטמפרטורה גבוהה עבור התוצאה הקלאסית לקיבול החום הסגולי שנובע מהפונונים הוא

$$c_v \sim \frac{1}{a} k_B - \frac{\hbar^2}{12 L k_B T^2} \sum_k \left(\omega(k)\right)^2$$

כאשר L אורך השרשרת (בהשוואה לביטוי בתרגיל בית 1, הצפיפות n שווה כאן ל-$1/a$, ופקטור 3 לא מופיע באיבר הראשון מכיוון שאנחנו דנים בבעיה חד-מימדית). הציבו את יחס הנפיצה שהתקבל עבור הפונונים בשרשרת וחשבו במפורש את הביטוי הנ"ל לקיבול החום.

3. היזכרו במודל השרשרת הדו-אטומית בו דנו בתרגול, שבו גודל תא היחידה הוא a, מסת כל אטום היא m וקבועי הצימוד מתחלפים לסירוגין בין K_1 ו-K_2. בחנו את המודל בגבול $K_2 \gg K_1$: מצאו בגבול זה את יחס הנפיצה של הענף האקוסטי $\omega_-^2(k)$ ושל הענף האופטי $\omega_+^2(k)$, והראו שאופני התנודה הקלאסיים המתאימים לכל k בענפים אלה נתונים בקירוב (עד כדי קבוע שכופל את הווקטור כולו) על ידי

$$\begin{pmatrix} A_\pm(k) \\ B_\pm(k) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ \mp 1 \end{pmatrix}$$

כאשר, כמו בכיתה, A ו-B הם הקבועים הפותרים את המשוואה המטריצית

$$\begin{pmatrix} K_1 + K_2 - m\omega^2(k) & -\left(K_1 e^{-ika} + K_2\right) \\ -\left(K_1 e^{ika} + K_2\right) & K_1 + K_2 - m\omega^2(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(k) \\ B(k) \end{pmatrix} = 0$$