Būsenų tankis

Dažnai vedžiojant kieto kūno fizikos formules tenka susidurti su kažkokios funkcijos $f(\mathbf{k})$ integralais pirmoje Briliueno zonoje

$$I = \iiint_{1Bz} f(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} \qquad \textbf{(8.1)}$$

arba tokiomis sumomis

$$S = \sum_{\mathbf{k}}^{1Bz} f(\mathbf{k}) \qquad \textbf{(8.2)}$$

Pirma, skaičiuoti tokius integralus sudėtinga, nes trimatėje gardelėje integralas yra trilypis, o norėtusi paprasto vienalypio integralo. Antra, jei turime gardelę su baigtiniu mazgų skaičiumi (su Borno ir Karmano sąlygomis) **k** kinta diskretiškai ir vietoje integralo I dažniausiai turime kartotiną sumą S, todėl norisi pereiti nuo sumavimo prie integravimo, nes integralus skaičiuoti lengviau. Šias abi problemas padeda spresti būsenų tankis.

Pradžioje nagrinėkime vienmatį atvejį. Tegul mūsų kristalas turi N būsenų. Kaip žinia **k** vertės išsidėstę tolygiai, nes

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = \frac{2\pi}{N_i} l_i \qquad \textbf{(8.3)}$$

Vienmačiam kristalui šioje formulėje vektorių nereikia. Pradžioje suskaičiuokime vieneto sumą ir integralą pirmoje Briliueno zonoje

$$\sum_k 1 = N$$
$$\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} 1dk = \frac{2\pi}{a} \qquad \textbf{(8.4)}$$

Gavome nevienodą rezultatą. Bet tai natūralu, nes mes pamiršome, kad funkcijos $f(k)$ integralas tai ne paprasta suma, bet integralinė suma

$$\int_a^b f(k)dk = \lim_{\Delta k \to 0} \sum_i f(k_i)\Delta k_i \qquad \textbf{(8.5)}$$

Atstumai tarp būsenų Δk kristaluose visi yra vienodi ir labai maži

$$\Delta k = \frac{2\pi}{Na} \qquad \textbf{(8.6)}$$

Taigi gausime tokį sąryšį

$$\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} f(k)dk \approx \frac{2\pi}{Na}\sum_{i}^{1Bz} f(k_i) \quad \textbf{(8.7)}$$

Kadangi tarpai tarp gretimų k verčių iš tikro labai maži, šią apytikslią sumą galime laikyti net labai tikslia ir tuo būdu sumavimą keisti integravimu arba atvirkščiai

$$\sum_{1Bz} f(k_i) \leftrightarrow \frac{Na}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} f(k)dk \quad \textbf{(8.8)}$$

Pažiūrėkime ką mes čia gavome. Kadangi $\frac{2\pi}{Na}$ yra k erdvės ilgis tenkantis vienai būsenai, tai $\frac{Na}{2\pi}$ bus būsenų skaičius k erdvės ilgio vienete arba tai yra būsenų tankis G. Šiuo atveju būsenų tankis nuo k nepriklauso, bet visumoje jis gali priklausyti nuo to kurioje k vietoje skaičiuojamas, t.y. lygmenys gali išsidėstyti tankiau ar rečiau

$$G(k) = \frac{Na}{2\pi} \quad \textbf{(8.9)}$$

Parodysime tai suskaičiuodami būsenų tankį dažnių (energijų) erdvėje. Kadangi $\omega = \omega(k)$ tai galime surasti ir atvirkštinę funkciją $k = k(\omega)$. Tada mūsų sumos ir integralai užsirašys taip

$$\sum_k f(k) = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} f(k)G(k)dk = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} f[k(\omega)]G(k)dk \quad \textbf{(8.10)}$$

Pasinaudokime tuo, kad $dk = \frac{dk}{d\omega}d\omega = \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}}d\omega$ ir perašykime šią formulę taip

$$\sum_k f(k) = \int_k f(k)G(k)dk = \int_\omega f[k(\omega)]\frac{G(k)}{\frac{d\omega}{dk}}d\omega = \int_\omega f'(\omega)G(\omega)d\omega\,, \quad \textbf{(8.11)}$$

čia $f'(\omega) = f[k(\omega)]$, o dydis $G(\omega)$ vadinamas būsenų tankiu priklausančiu nuo dažnio (arba dažnių erdvėje)

$$G(\omega) = \frac{Na}{2\pi}\cdot\frac{1}{\frac{d\omega}{dk}} = \frac{Na}{2\pi}\cdot\frac{dk}{d\omega} \quad \textbf{(8.12)}$$

Ir iš tikro galime pastebėti, kad dydis $G(\omega)$ tai yra būsenų tankis k erdvėje padaugintas iš $\frac{dk}{d\omega}$ – dydžio nusakančio kiek k būsenų telpa vienetiniame dažnių intervale. Arba tai iš tikro yra būsenų tankis dažnių erdvėje. Kaip taisyklė $G(\omega)$ nėra konstanta, t.y. jis priklauso nuo dažnio.

Pažiūrėję į paskutinę būsenų tankio išraišką matome, kad vardiklyje stovi grupinio greičio išraiška. Grupinis greitis tam tikruose taškuose gali virsti nuliu ir tada vienmačio kristalo būsenų tankis tampa begaliniu. Tokie būsenų tankio taškai kuriuose grupinis bangos greitis lygus nuliui vadinami van Hovo (L. van Hove) singuliarumais.

Gautus rezultatus apibendrinkime trimačiams kristalams. Tam verskime bet kokios funkcijos *f* integralą pirmoje Briliueno zonoje integraline suma

$$\iiint_{1Bz} f(\mathbf{k})d^3\mathbf{k} \approx \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})\frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3 N} \qquad \mathbf{(8.13)}$$

Čia tūrio elementas $d^3\mathbf{k}$ buvo užrašytas remiantis praeito skyriaus formulėmis (7.22) ir (7.32). Mišri vektorių $\mathbf{a}_i$ sandauga yra kristalo gardelės elementaraus narvelio tūris, N – mazgų skaičius gardelėje. Kadangi N didelis skaičius šioje formulėje apytikslė lygybė iš tikro yra labai tiksli. Taigi

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{VN}{(2\pi)^3}\iiint_{1Bz} f(\mathbf{k})d^3\mathbf{k} \qquad \mathbf{(8.14)}$$

Vėlgi mes galime pastebėti, kad $\frac{(2\pi)^3}{VN}$ yra vienos būsenos užimamas tūris $\mathbf{k}$ erdvėje, tai atvirkštinis dydis $\frac{VN}{(2\pi)^3}$ bus būsenų skaičius $\mathbf{k}$ erdvės tūrio vienete arba kitaip tariant tai būsenų tankis $\mathbf{k}$ erdvėje $G(\mathbf{k})$. Jis yra pastovus visuose taškuose ir nuo $\mathbf{k}$ nepriklauso, nes dažniai išsidėstę tolygiai (netankėja ir neretėja).

Ši mūsų formulė ir yra sumos vertimas integralu arba atvirkščiai. Toliau bandysime trilypį integralą supaprastinti iki paprasto vienalypio. Tam pereisime nuo kintamųjų $\mathbf{k}$ prie dažnio $\omega = \omega(\mathbf{k})$ ir pakeisime funkcijos *f* pažymėjimus $f(\mathbf{k}) = f'(\omega(\mathbf{k}))$. Taigi

$$S = \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{VN}{(2\pi)^3}\iiint_{1Bz} f(\mathbf{k})d^3\mathbf{k} = \frac{VN}{(2\pi)^3}\iiint_{1Bz} f'(\omega(\mathbf{k}))d^3\mathbf{k} \qquad \mathbf{(8.15)}$$

Toliau tūrio elementą $d^3\mathbf{k}$ suskaldysime į dvi dalis: į ds – izodažninio (izoenerginio) paviršiaus elementą (t.y. surandame tokį paviršių kuriame dažnis pastovus) ir į $dk_\perp$ – ilgio elementą normaline izodažninio paviršiaus kryptimi (t.y. kryptimi, kuria dažnis kinta labiausiai)

$$d^3\mathbf{k} = ds\,dk_\perp \qquad \mathbf{(8.16)}$$

Iš kitos pusės dažnio diferencialą (pokytį) galime užrašyti taip

$$d\omega = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}\cdot d\mathbf{k} = (\nabla_{\mathbf{k}}\omega)\cdot d\mathbf{k} = (grad_{\mathbf{k}}\omega)\cdot d\mathbf{k} = |\nabla_{\mathbf{k}}\omega|dk_\perp, \qquad \mathbf{(8.17)}$$

nes gradientas kaip tik ir nukreiptas dažnio didžiausio kitimo kryptimi.

Iš abiejų paskutinių formulių galime užrašyti

$$d^3\mathbf{k} = \frac{ds d\omega}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega|} \quad \mathbf{(8.18)}$$

Ir tuo būdu mūsų integralas taps tokiu

$$S = \frac{VN}{(2\pi)^3}\iiint f'(\omega)\frac{ds d\omega}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega|} = \int_{\omega} f'(\omega)\left(\frac{VN}{(2\pi)^3}\iint_{\omega=const}\frac{ds}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega|}\right)d\omega = \int_{\omega} f'(\omega)G(\omega)d\omega\,. \quad \mathbf{(8.19)}$$

Čia vėlgi

$$G(\omega) = \frac{VN}{(2\pi)^3}\iint_{\omega=const}\frac{ds}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega|} \quad \mathbf{(8.20)}$$

vadinamas būsenų tankiu priklausančiu nuo dažnio. Matome, kad po integralu vardiklyje stovi grupinis greitis. Reiškia būsenų tankis turės van Hovo singuliarumus tuose taškuose, kuriuose grupinis greitis taps nuliu.

Formulė (8.19) ir yra trilypio integralo keitimas paprastu. Žinoma ja galima naudotis tik tuo atveju, jei mokame rasti būsenų tankį (8.20) ir funkciją $f(\mathbf{k})$ pakeisti funkcija $f'(\omega)$. Būsenų tankis kieto kūno fizikoje skaičiuojamas dažnai, tad jam rasti yra sugalvota nemažai metodų, bet mes jų nenagrinėsime.

Kaip būsenų tankis siejasi su būsenų skaičiumi? Tegul turime dydį $\sigma(x)$ – būsenų skaičių nuo $-\infty$ iki x, kur *x* kažkoks fizikinis dydis, pvz. dažnis ω kvaziimpulsas *k* arba dar koks kitas. Tada būsenų tankis $G(x)$ yra σ išvestinė

$$G(x) = \frac{d\sigma(x)}{dx}, \quad \mathbf{(8.21)}$$

nes $\sigma(x_2) - \sigma(x_1)$ bus būsenų skaičius tarp x_2 ir x_1, o jį padalinus iš $\Delta x = x_2 - x_1$, gausime busenų tankį. Jei būsenos išsidėstę netolygiai, tai būsenų tankis priklausys nuo argumento *x*. Taigi būsenų skaičių intervale *dx* taško *x* aplinkoje galime užrašyti taip

$$d\sigma(x) = G(x)dx\,, \quad \mathbf{(8.22)}$$

o būsenų skaičių tarp tarp x_2 ir x_1 galime suskaičiuoti taip

$$\sigma(x_2) - \sigma(x_1) = \int_{x_1}^{x_2} G(x)dx\,. \quad \mathbf{(8.23)}$$

Tad dydį $\sigma(x)$ galime rasti pasinaudojus tuo, kad $\sigma(-\infty) = 0$

$$\sigma(x) = \int_{-\infty}^{x} G(x)dx\,, \quad \mathbf{(8.24)}$$

o pilną būsenų skaičių gausime integruodami nuo $-\infty$ iki $+\infty$. Būsenų tankis gali būti normuotas į vienetą, jį padalinant iš pilno būsenų skaičiaus. Būsenų skaičius ir tankis gali priklausyti nuo kelių kintamųjų, pvz. *x*,*y*,*z*, tada tai bus būsenų skaičius tūrio vienete

$$G(x,y,z) = \frac{d^3\sigma(x,y,z)}{dxdydz}, \quad \textbf{(8.25)}$$

kur x,y ir z kinta bendru atveju nuo $-\infty$ iki $+\infty$. Integruodami G pagal vieną arba du kintamuosius, gausime kitą būsenų tankį, pvz.:

$$G'(x) = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} G(x,y,z)dydz \quad \textbf{(8.26)}$$

bus būsenų tankis priklausantis nuo x kai y ir z yra bet kokie. Taigi darome išvadą, kad formulė (8.20) iš tikro yra būsenų tankis priklausantis nuo ω, o ne koks kitas dydis.

Izotropiniame kristale galime įsivesti dar ir kitokį būsenų tankį, pvz. priklausantį nuo k modulio. Nors šis būsenų tankis neatitinka jokios Briliueno zonos, jis vis tik kartais naudojamas. Mažoms ir vidutinėms k vertėms jis yra tikslus (tiksliau iki tos vertės, kai k ima siekti Briliueno zonos kraštą).

$$G(k)dk = \iint G(\mathbf{k})d^3\mathbf{k} = \iint G(\mathbf{k})dk_x dk_y dk_z = \frac{VN}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi} dk_\varphi \int_0^{\pi} dk_\Theta \sin k_\Theta k^2 dk = \frac{VN}{2\pi^2}k^2 dk \quad \textbf{(8.27)}$$

Ir šiuo atveju G jau priklauso nuo k

$$G(k) = \frac{VN}{2\pi^2}k^2. \quad \textbf{(8.28)}$$

Naudojantis šiuo būsenų tankiu galima skaičiuoti funkcijų priklausančių nuo k modulio integralus.

Pabaigai suskaičiuosime vienmatės grandinėlės svyravimų būsenų tankį $G(\omega)$ pagal formulę (8.12). Tam išreikšime $k = k(\omega)$ iš ankščiau gauto dispersijos dėsnio

$$k = \frac{2}{a}\arcsin\frac{\omega}{2\sqrt{\frac{C}{M}}} = \frac{2}{a}\arcsin\frac{\omega}{\omega_{\max}} \quad \textbf{(8.29)}$$

ir surasime išvestinę

$$\frac{dk}{d\omega} = \frac{2}{a}\cdot\frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} \quad \textbf{(8.30)}$$

Ir galutinai

$$G(\omega) = \frac{Na}{2\pi}\cdot\frac{dk}{d\omega} = \frac{N}{\pi}\cdot\frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} \quad \textbf{(8.31)}$$

Nupiešus tai atrodytų taip