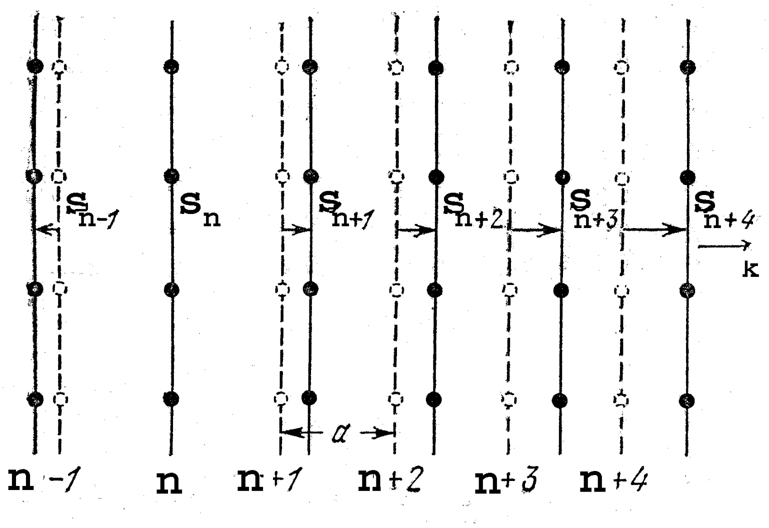
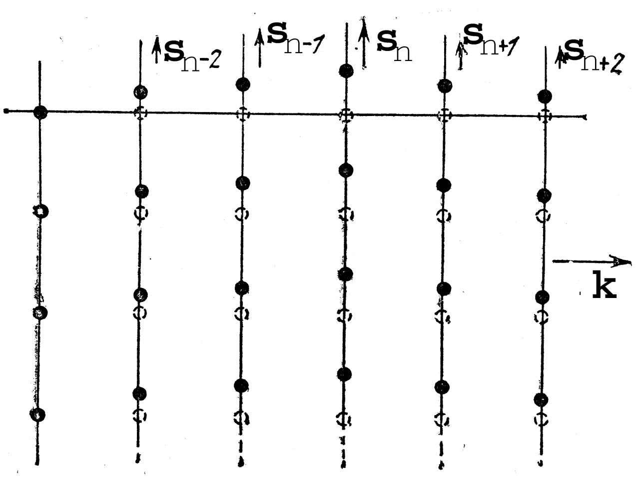
Atomų grandinėlės svyravimai

Šiuo skyriumi pradėsime kristalo gardelės dinamikos studijas, t.y. gardelės tampriųjų svyravimų nagrinėjimą. Parodysime, kad atomų (molekulių) periodiškumas esminiai atsispindi svyravimų pobūdyje.



Paprastumo dėlei nagrinėsime tik išilginius ar tik skersinius svyravimus. Bendru atveju svyravimai nebūna tik išilginiai arba tik skersiniai, bet tam tikromis kryptimis tam tikros simetrijos kristaluose (pvz. kubiniuose) svyravimai gali būti išimtinai skersiniai arba išilginiai (kubiniame kristale tai kryptys [100], [111], [110]). Kai banga sklinda išilgai šių ašių, tai visos plokštumos juda sinfaziškai. Ir judėjimą galima atvaizduoti gana paprastai – kaip vienmatėje grandinėlėje.

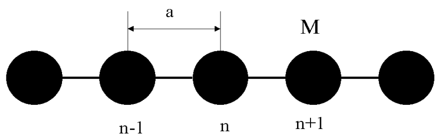


Todėl toliau mes nagrinėsime svyravimus vienmatėje atomų grandinėlėje. Pastaroji patogi dar ir dėl to, kad vienmačiai modeliai modeliai dažnai yra analiziškai sprendžiami iki galo, ko nepasakysi apie aukštesnių dimensijų modelius. Be to vienmačiai modeliai, iš pažiūros atrodantys ne visai realistiškais, kartai visai neblogai aprašo tiriamą objektą arba bent jau perteikia dėsningumą ko reikia tikėtis didesnių dimensijų modeliuose, kuriuos tenka spresti skaitmeniškai. Mūsų atveju vienmatė grandinėlė visiškai tiksliai aprašo tam tikrų kristalų (pvz. kūbinių) tam tikrus svyravimus (pvz. aukščiau nurodytomis kryptimis). Taigi mūsų pasirinktas modelis yra ne tik pateisinamas, bet gali būti netgi ir geras.

Remdamiesi praeito skyriaus rezultatais, laikysime atomų atsilenkimus nuo pusiausvyros padėčių mažais ir taikysime harmoninį artėjimą. Jėgos išraišką n-tajam atomui galime užrašyti taip

$$F_n = -C_1(s_n - s_{n+1}) - C_1(s_n - s_{n-1}) - C_2(s_n - s_{n+2}) - C_2(s_n - s_{n-1}) - ... = \\ = -\sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_m(s_n - s_{n+m}) = -\sum_{m>0} C_m(2s_n - s_{n+m} - s_{n-m}) \quad (5.\mathbf{1})$$

kur dydžiai C_n vadinami jėgos konstantomis, $s_n = R_n - R_{0n}$ yra n-tojo atomo atsilenkimas nuo pusiausvyros padėties. Ši išraiška gerai tinka tiek išilginiams tiek skersiniams svyravimams. Dar reikėtų pastebėti, kad jėgos konstantos C_n artėja į nulį indeksui n didėjant absoliutine verte. Taigi esant reikalui ar norui šią formulę galima dar supaprastinti, paliekant sumoje jėgos konstantas tik artimiausiems kaimynams, t.y. C_1 ir C_{-1}, o kitas prilyginant nuliui. Mes tuo gana dažnai naudosimės.



Jėgos išraiška šiuo atveju bus

$$F_n \approx -C(2s_n - s_{n+1} - s_{n-1}) \quad (5.\mathbf{2})$$

kur $C = C_1 = C_{-1}$.

Nagrinėsime klasikinį vienmatės grandinėlės svyravimą, todėl toliau rašysime klasikinę Niutono (I. Newton) judėjimo lygtį n-tajam atomui

$$M\frac{d^2 s_n}{dt^2} = -\sum_m C_m(s_n - s_{n+m}) = -\sum_{m>0} C_m(2s_n - s_{n+m} - s_{n-m}) \approx -C(2s_n - s_{n+1} - s_{n-1}) \quad (5.\mathbf{3})$$

Matome, kad ši išraiška panaši į harmoninio osciliatoriaus lygtį, o tiksliau į daugelio surištų osciliatorių lygčių sistemą. Taigi sprendinio bandysime ieškoti harmoninės bangos pavidale

$$s_n = Ae^{-i(\omega t - kx_n)} = Ae^{-i(\omega t - kna)} \quad (5.\mathbf{4})$$

kur n-tojo mazgo koordinatė $x_n = na$ išreiškiama per mazgo numerį n padaugintą iš gardelės konstantos a, k ir ω yra bangos "vektorius" ir dažnis atitinkamai. Statykime šią išraišką į mūsų gautą lygtį

$$-\omega^2 MAe^{-i(\omega t - kna)} = -\sum_{m>0} C_m\left(2 - e^{ikma} - e^{-ikma}\right)Ae^{-i(\omega t - kna)} \quad (5.\mathbf{5})$$

Šią išraišką šiek tiek pertvarkysime

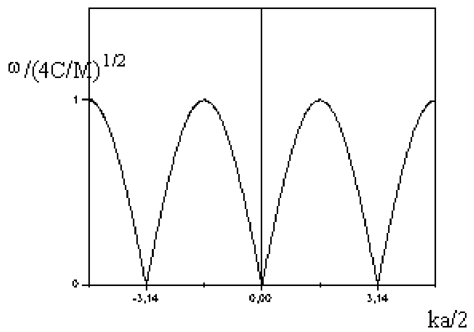
$$\omega^2 M = -\sum_{m>0} 4C_m\left(\frac{e^{\frac{ikma}{2}} - e^{\frac{-ikma}{2}}}{2}\right)^2 \quad (5.\mathbf{6})$$

Minusas čia atsirado dėl to, kad iškėlėme -1 iš skliaustelių dešinėje lygybės pusėje. Dar dešiniąją pusę padauginkime ir padalinkime iš i^2 tam, kad gautume sinuso išraišką skliaustuose, tada

$$\omega^2 = \frac{4}{M}\sum_{m>0} C_m \sin^2\left(\frac{kma}{2}\right) \qquad (5.7)$$

arba, jei išraiškoje paliksime tik vieną jėgos konstantą $C_1 = C$, gausime

$$\omega = 2\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right| \qquad (5.8)$$



Gavome du sąryšius, kurie susieja dažnį su bangos vektoriumi. Pirmasis bendresnis, o antras yra pirmojo atskiras atvejis kai atsižvelgiama tik į vieną jėgos konstantą. Tokie sąryšiai kieto kūno fizikoje vadinami dispersiniais sąryšiais arba dažnio priklausomybe nuo bangos vektoriaus. Kaip matome ω yra periodinė k funkcija. Ir dar – ištisinės aplinkos (t.y. neturinčios molekulinės struktūros) svyravimams $\omega = Vk$ ir auga neribotai, augant k; čia V svyravimų sklidimo greitis. O mūsų grandinėlės atveju ω yra ribotas ir neviršija maksimalios vertės $\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{C}{M}}$. Periodiškumas ir maksimalios vertės egzistavimas yra molekulinės struktūros (gardelės) pasekmė.

Brilueno zona. Atvirkštinė gardelė. Dėl ω periodiškumo kyla natūralus klausimas kokios k vertės turi fizikinę prasmę. Kad tai išsiaiškintume, nagrinėkime gretimų atomų (plokštumų) judėjimą

$$\frac{s_{n+1}}{s_n} = \frac{Ae^{-i(\omega t - k(n+1)a)}}{Ae^{-i(\omega t - kna)}} = e^{ika} \qquad (5.9)$$

ka kitimo sritis nuo $-\pi$ iki $+\pi$ prabėga visas nepriklausomas vertes. Gretimų atomų fazės gali skirtis ir daugiau negu per π, bet jos ekvivalentiškos fazėms iš intervalo $(-\pi, +\pi)$. Taigi

$$-\pi < ka \le +\pi \text{ arba } -\frac{\pi}{a} < k \le \frac{\pi}{a} \qquad (5.10)$$

Ši k sritis vadinama pirma Brilueno (L. Brillouin) zona, kurios ribinės vertės $k_{\max} = \pm\frac{\pi}{a}$. Jei k išeina iš pirmos Brilueno zonos ribų, tai galima įvesti tokį

$$k' = k + \frac{2\pi}{a}l, \quad l = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots, \qquad (5.11)$$

kad k' tam tikram l bus pirmoje Brilueno zonoje. Ir tada

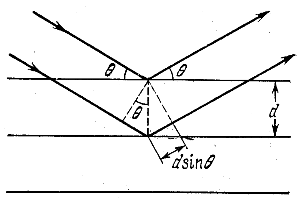
$$\frac{s_{n+1}}{s_n} = e^{ika} = e^{ia\left(k' - \frac{2\pi}{a}l\right)} = e^{ik'a}e^{-2\pi il} = e^{ik'a} \qquad (5.12)$$

Taigi svyravimai su bangos vektoriumi k yra identiški svyravimams su bangos vektoriumi $k^{'}$. Reiškia iš tikro užtenka nagrinėti k vertes tik iš pirmos Briliueno zonos. Dydis $\frac{2\pi}{a}l$, kur l sveikas skaičius, vadinamas atvirkštinės gardelės "vektoriumi". Taigi prie k pridėdami arba atimdami atvirkštinės gardelės vektorių visada galima gauti banginį vektorių priklausantį pirmai Briliueno zonai. Ant jos ribos, kaip minėjome, $k_{\max} = \pm\frac{\pi}{a}$ ir s_n aprašo stovinčią bangą

$$s_n = Ae^{-i(\omega t - k_{\max} na)} = Ae^{\pm i\pi n}e^{-i\omega t} = A(-1)^n e^{-i\omega t} \qquad (5.\mathbf{13})$$

Stovinčios bangos atveju gretimi atomai juda priešingomis fazėmis, nes $e^{\pm in\pi} = \cos n\pi = \pm 1$ priklausomai nuo to n lyginis ar nelyginis. Banga nejuda nei į kairę nei į dešinę. Tai panašu į Brego (Bragg) atspindį

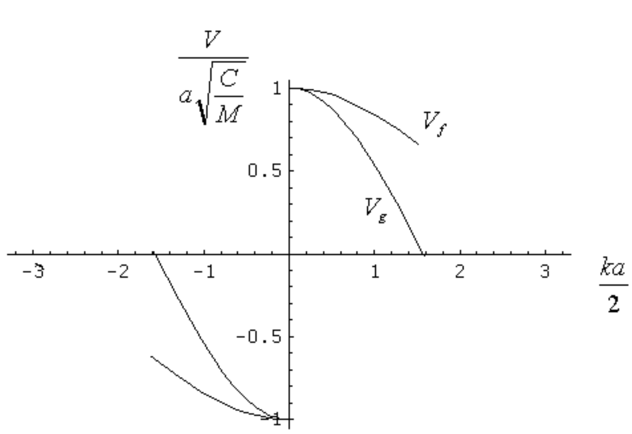
$$2d \sin\Theta = n\lambda, \qquad (5.\mathbf{14})$$



jei imtume $\Theta = \frac{\pi}{2}$, $d = a$, ir $n = 1$. Tai $\lambda = 2a$ ir naudojantis $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, gautume $k = \frac{\pi}{a}$, t.y. atspindžio sąlygą tenkina k reikšmė esanti ant Briliueno zonos krašto. Čia buvo d atstumas tarp atspindinčių plokštumų, λ bangos ilgis, Θ kritimo kampas ir n sveikas skaičius charakterizuojantis interferencinį maksimumą.

<u>**Grupinis greitis.**</u> Prisiminkime šiek tiek optikos kursą. Kaip žinia jame yra apibrėžiami dviejų rūšių bangos greičiai: fazinis V_f ir grupinis V_g

$$V_f = \frac{\omega}{k}$$
$$\mathbf{V}_g = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = grad_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k}) \qquad (5.\mathbf{15})$$



Fazinis greitis yra bangos fazės judėjimo greitis, o grupinis greitis tai bangų paketo su artimais $\mathbf{k}$ ir ω judėjimo greitis. Grupiniu greičiu yra pernešama bangos energija.

Pritaikykime tai mūsų vienmatės grandinėlės atvejui

$$V_f(k) = \frac{\omega(k)}{k} = a\sqrt{\frac{C}{M}} \cdot \frac{\left|\sin\frac{ka}{2}\right|}{\frac{ka}{2}}$$
$$V_g(k) = \frac{d\omega(k)}{dk} = a\sqrt{\frac{C}{M}}\,\mathrm{sgn}(k)\cos\frac{ka}{2} \qquad (5.\mathbf{16})$$

Naudinga šias priklausomybes nusipiešti.

Įdomu pastebėti, kad mažiems *k*, t.y. $k \to 0$ abi šios priklausomybės sutampa ir lygios konstantai

$$V_f(0) = V_g(0) = a\sqrt{\frac{C}{M}} \qquad (5.\mathbf{17})$$

Tokie ilgabangiai svyravimai iš tikro yra garso bangos medžiagoje. Pasinaudoję jo eksperimentine verte $V \approx 10^3\,\frac{m}{s}$ ir tipine gardelės konstantos verte $a \approx 3\cdot 10^{-10}m$, galime gauti $\sqrt{\frac{C}{M}} \approx 3\cdot 10^{12}s^{-1}$ ir tuo būdu įvertinti maksimalų dažnį $\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \approx 10^{13}s^{-1}$. Jei žadintume tokius svyravimus šviesa tai būtų infraraudonoji spektro dalis (Prisiminkime: šviesos greitis $c \approx 3\cdot 10^8\frac{m}{s}$, šviesai galioja $\lambda\nu = c$ arba $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2\pi c}{\omega}$ ir suskaičiavus $\lambda \approx \frac{6\cdot 3\cdot 10^8}{10^{13}} \approx \frac{10^9}{10^{13}} = 10^{-4}m = 100\mu m$).

Įdomios ir maksimalios *k* vertės. Jei $k = k_{\max} = \pm\frac{\pi}{a}$, tai gausime $V_g(k_{\max}) = 0$, t.y. banga yra stovinti, ką buvome minėję anksčiau.

Borno ir Karmano (ciklinės) sąlygos. Iki šiol, nagrinėdami grandinėlės svyravimus, visiškai nekalbėjome apie jos galus. Ir iš tiesu, jei kristalas begalinis, jis galų neturi. Visi realūs kristalai yra baigtiniai, nors lyginant su atomo ar molekulės matmenimis labai dideli. Kažką norisi padaryti, kad galėtume įskaityti baigtinį atomų skaičių kristale ir labai nesirūpinti galų egzistavimu. Tokį metodą pasiūlė Bornas (M. Born) ir Karmanas (T. Karman). Anot jų grandinėlės galus reikia sujungti arba taip sakant pritaikyti ciklines sąlygas. Mes savo ištiestą grandinėlę paverčiame žiedu. Nežiūrint to šis žiedas gali būti isivaizduojamas kaip tiesinė struktūra, t.y. mūsų baigtinė grandinėlė iš abiejų galų papildoma identiška tiesine grandinėle su griežtai užduotomis sąlygomis (ciklinėmis) galuose ir t.t. Gauname begalinę tiesinę struktūrą, kuri suskaldyta į baigtinės grandinėles ilgio blokus. Pritaikysime tai mūsų atvejui. Tegul grandinėlė turi *N* mazgų, tada pagal ciklines sąlygas bet kuriam mazgui *n* galime rašyti

$$s_n = s_{n+N} \qquad (5.\mathbf{18})$$

Įstatykime s_n

$$Ae^{-i(\omega t-kna)} = Ae^{-i(\omega t-kna-kNa)} \tag{5.19}$$

Viską ką galima nuprastinę gausime

$$e^{ikNa} = 1 \tag{5.20}$$

Kadangi dydžiai N ir a yra gardelės charakteristikos ir jų keisti negalime, tai reiškia turime sąlygą dėl k. Ši sąlyga bus tenkinama, kai

$$kNa = 2\pi m \tag{5.21}$$

kur m – sveikas skaičius. Tai galima užrašyti taip

$$k = \frac{2\pi}{Na}m \tag{5.22}$$

Kadangi k ir m susieti, o k kinta pirmoje Briliueno zonoje, tai galime gauti verčių intervalą, kuriose kinta m

$$\begin{aligned} -\frac{\pi}{a} &= \frac{2\pi}{Na}m_{\min} \\ +\frac{\pi}{a} &= \frac{2\pi}{Na}m_{\max} \end{aligned} \tag{5.23}$$

arba

$$\begin{aligned} m_{\min} &= -\frac{N}{2} \\ m_{\max} &= +\frac{N}{2} \end{aligned} \tag{5.24}$$

Iš tikro automatiškai rašinėdami formules mes šį tą pamiršome. Pirma, dėl k periodiškumo vertės $k_{\min}$ ir $k_{\max}$ sutampa ir mes įskaitėme viena m verte per daug, tad vieną kraštinę m vertę išmesime, tarkime $m_{\min}$. Antra, N gali būti tiek lyginis tiek nelyginis skaičius, o m būtinai turi būti sveikas. Jei N lyginis, tai viskas gerai ir turėsime

$$-\frac{N}{2} < m \le +\frac{N}{2} \tag{5.25}$$

Jei N nelyginis, tai galime pastebėti, kad bus gerai jei užrašysime taip

$$-\frac{N-1}{2} \le m \le +\frac{N-1}{2} \tag{5.26}$$

Abiem atvejais m, o taip pat ir k įgyja lygiai N verčių, t.y. tiek kiek mazgų yra mūsų grandinėlėje.

Taigi, grandinėlės baigtinumas mums davė, kad k kinta diskretiškai, o ne tolydiškai, t.y. žingsneliais arba kvantuotai. Kadangi dažnis priklauso nuo k, tai jis irgi įgyja diskretines vertes. Atstumas tarp dviejų k verčių bus

$$\Delta k = \frac{2\pi}{Na}. \qquad (5.\mathbf{27})$$

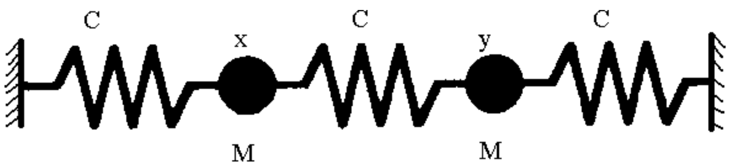
Jei N labai didelis skaičius, tai atstumas Δk bus labai mažas ir mes nei bangos vektoriaus, nei dažnio diskretiškumo eksperimente nepastebėsime. Toks spektras vadinamas *kvazitolydiniu*.

Borno ir Karmano sąlygos masiškai taikomos kieto kūno fizikoje. Mes irgi naudosimės ten kur to reikės. Dvimačio kristalo atveju dėl ciklinių sąlygų, kristalas tampa toru. Trimačiam kristalui su ciklinėmis sąlygomis pavaizduoti reikėtų 4-matės erdvės. Bet žymiai patogiau įsivaizduoti, kad erdvė užpildyta blokais, esančiais šalia vienas kito. Vienas blokas yra mūsų kristalas, turintis baigtinį mazgų skaičių. Gretimų blokų kraštai "susiūti" ciklinėmis sąlygomis.

Nežiūrint ciklinių sąlygų patogumo, jas kartai reikia taikyti su tam tikru atsargumu, nes makroskopiniai dydžiai kaip išorinio elektrinio homogeninio lauko potencialas ar pan. kristalo kraštuose turi trūkį, o jų išvesinės trūkio taškuose bus proporcingos Dirako (P. A. M. Dirac) delta funkcijai. Tai kartais gali įnešti tam tikros painiavos, tad vedžiojant formules šią vietą reikia pakontroliuoti.

Normaliosios koordinatės. Svyravimų moksle dažnai naudojamos tokios sąvokos: normalieji svyravimai, normalieji dažniai, normaliosios koordinatės. Paaiškinsime kas tai yra.

Pradžioje išspreskime paprastesnį dviejų vienodos masės rutuliukų svyravimą taip kaip parodyta piešinuke. Tegul rutuliukai svyruoja išilgai spyruoklių, kurių tamprumas C. Abiejų rutuliukų masės vienodos ir lygios M. Vieno jų nukrypimas nuo pusiausvyros padėties x, o kito – y. Užrašykime jų judėjimo lygtis.



$$M\frac{d^2x}{dt^2} = -Cx - C(x-y)$$
$$M\frac{d^2y}{dt^2} = -Cy - C(y-x) \qquad (5.\mathbf{28})$$

Uždavinį labai paprasta išspręsti įvedant naujas koordinates

$$X = x + y$$
$$Y = x - y \qquad (5.\mathbf{29})$$

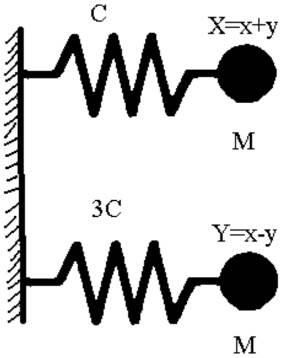
kuriose judėjimo lygtys persirašo taip

$$M\frac{d^2X}{dt^2} = -CX$$
$$M\frac{d^2Y}{dt^2} = -3CY \qquad (5.\mathbf{30})$$

Arba padalinus iš masių ir įvedus tokius dažnių pažymėjimus $\omega_1^2 = C/M$ ir $\omega_2^2 = 3C/M$, galime lygtis užrašyti ytin paprastai

$$\frac{d^2X}{dt^2} = -\omega_1^2 X$$
$$\frac{d^2Y}{dt^2} = -\omega_2^2 Y \qquad (5.\mathbf{31})$$

Gavome dviejų nesurištų osciliatorių, svyruojačių dviem nevienodais dažniais ω_1 ir ω_2 lygtis, t.y. mūsų uždavinys susivedė į kitą uždavinį, parodytą piešinuke. Šie nauji nuosavi sistemos dažniai vadinami normaliaisiais (arba savaisiais) dažniais, o naujos koordinatės X ir Y vadinamos normaliosiomis (arba vyriausiomis) koordinatėmis. Nesunku pastebėti, kad sistemai svyruojant dažniu ω_1, abu rutuliukai svyruos ta pačia faze ir vienoda amplitude, t.y. lyg nebūtų viduriniosios spyruoklės. Antrasis dažnis atitinka vienodos amplitudės, bet priešingos fazės svyravimus. Ir iš tikro bendrą sprendinį galime užrašyti taip



$$X = X_0 e^{i\omega_1 t} + X_1 e^{-i\omega_1 t}$$
$$Y = Y_0 e^{i\omega_2 t} + Y_1 e^{-i\omega_2 t} \qquad (5.\mathbf{32})$$

arba grįžus prie pradinių koordinačių

$$x = (X + Y)/2$$
$$y = (X - Y)/2 \qquad (5.\mathbf{33})$$

gausime

$$x = (X_0 e^{i\omega_1 t} + X_1 e^{-i\omega_1 t} + Y_0 e^{i\omega_2 t} + Y_1 e^{-i\omega_2 t})/2$$
$$y = (X_0 e^{i\omega_1 t} + X_1 e^{-i\omega_1 t} - Y_0 e^{i\omega_2 t} - Y_1 e^{-i\omega_2 t})/2 \qquad (5.\mathbf{34})$$

Taigi kai turėsime svyravimus tik X tipo (t.y. $Y_0 = Y_1 = 0$), tai x ir y svyruos ta pačia faze ir amplitude, o kai bus svyravimai tik Y (arba $X_0 = X_1 = 0$), tai x ir y svyruos priešingomis fazėmis, bet amplitudės sutaps.

Nesudėtinga nagrinėti tokioje sistemoje ir priverstinius svyravimus (pvz., judinant pirmąjį rutuliuką) įvedant išorinę nuo laiko priklausančią jėgą.

Toliau visą tai pritaikysime savo vienmatės grandinėlės svyravimams. Tam nuo senųjų mazgų poslinkių (judėjimo koordinačių) s_n pereikime prie naujų koordinačių s_k tokiu būdu

$$s_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n s_n e^{-ikna} \qquad (5.\mathbf{35})$$

Čia sumuojama pagal visus mazgus. Užrašykime judėjimo lygtis šioms naujoms koordinatėms

$$M\frac{d^2 s_k}{dt^2}=\frac{M}{\sqrt{N}}\sum_n \frac{d^2 s_n}{dt^2}e^{-ikna}=-\frac{C}{\sqrt{N}}\sum_n e^{-ikna}(2s_n-s_{n+1}-s_{n-1})= \\ =-C(2s_k-e^{ika}s_k-e^{-ika}s_k)=-4Cs_k\sin^2\frac{ka}{2} \qquad (5.\mathbf{36})$$

Nesunku pastebėti, kad gavome lygčių sistemą nesurištų osciliatorių judėjimui

$$\frac{d^2 s_k}{dt^2}=-\omega^2(k)s_k \qquad (5.\mathbf{37})$$

kur nuosavi osciliatorių svyravimo dažniai yra tie patys mums pažistami vienmatės grandinėlės svyravimo dažniai. Taigi šios naujos koordinatės vadinamos normaliosiomis koordinatėmis, o dažniai normaliaisiais dažniais. Normaliosias koordinates numeruoja bangos skaičius k. Vienmatės grandinėlės atveju normaliųjų koordinačių įvedinėti nebūtina, nes uždavinys ir taip paprastai sprendžiamas. Nagrinėjant trimatės gardelės svyravimus normaliosios koordinates paprastai stengiamasi panaudoti, nes tai padeda sudėtingą uždavinį atvaizduoti kaip sistemos nesurištų osciliatorių judėjimą. Sudėtingose gardelėse tokias koordinates įvesti sudėtingiau. Normaliosios koordinatės patogios pereinant nuo klasikinio uždavinio prie kvantinio aprašymo.

Kvantinis vienmatės grandinėlės dinamikos aprašymas. Normaliosios koordinatės labai padeda aprašyti grandinėlės svyravimus kvantiniu būdu. Bet prieš parodydami tai trumpai prisiminkime paprasto harmonio osciliatoriaus kvantinę mechaniką. Kaip žinia klasikinis harmoninis osciliatorius aprašomas Niutono lygtimi

$$m\frac{d^2 x}{dt^2}=-m\omega^2 x \qquad (5.\mathbf{38})$$

Kvantiniam aprašymui reikia Hamiltono funkcijos, kuri yra pilnoji sistemos energija, t.y. kinetinės ir potencinės energijos suma

$$H=T+U=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}x^2=\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2+\frac{m\omega^2}{2}x^2 \qquad (5.\mathbf{39})$$

čia potencinė energija U siejasi su jėgos išraiška $F=-m\omega^2 x$ tokiu būdu $U=-\int F dx$. Pereinant prie kvantinio aprašymo kintamieji keičiami operatoriais ir sprendžiama Šredingerio lygtis

$$(H-\varepsilon_n)\varphi_n=0 \qquad (5.\mathbf{40})$$

Šią lygtį harmoniniam osciliatoriui sprendėte kvantinės mechanikos kurse. Mes sprendimo nekartosime (jis pateiktas bet kuriame kvantinės mechanikos vadovėlyje), o tik užrašysime sprendinį. Osciliatoriaus banginės funkcijos φ_n užrašomos per Ermito (P. Hermite) polinomus, o energijos lygmenys išsireiškia labai paprastai

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \text{kur } n = 0,1,2,... \qquad (5.41)$$

(39) lygtį iš (38) galima gauti tokiu būdu. Dauginkime (38) lygties abi puses iš $\frac{dx}{dt}$

$$m\frac{dx}{dt}\frac{d}{dt}\frac{dx}{dt} = -m\omega^2 x\frac{dx}{dt} \qquad (5.42)$$

perrašius gausime

$$\frac{m}{2}\frac{d}{dt}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = -\frac{m\omega^2}{2}\frac{d(x^2)}{dt} \qquad (5.43)$$

Gautą išraišką galima integruoti pagal laiką

$$\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = C - \frac{m\omega^2}{2}x^2 \qquad (5.44)$$

Čia C – inegravimo konstanta. Atidžiau pasižiūrėję galime pamatyti, kad ji lygi pilnajai energijai, t.y. Hamiltono funkcijai (39).

$$C = \frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \equiv H \qquad (5.45)$$

Pritaikysime tai mūsų grandinėlei. Lygtį (37) dauginkime iš $M\frac{ds_k}{dt}$ ko pasekoje po analogiškų pertvarkymų gausime

$$H_k = \frac{M}{2}\left(\frac{ds_k}{dt}\right)^2 + \frac{M\omega^2(k)}{2}s_k^2 \qquad (5.46)$$

Faktiškai tai yra vieno svyravimo (vieno osciliatoriaus) su bangos skaičiumi k Hamiltono funkcija. Pilna energija bus nepriklausomų osciliatorių Hamiltono funkcijų suma (pagal k)

$$H = \sum_k H_k = \sum_k \left[\frac{M}{2}\left(\frac{ds_k}{dt}\right)^2 + \frac{M\omega^2(k)}{2}s_k^2\right] \qquad (5.47)$$

taigi Šredingerio lygties sprendinys užrašomas taip:

(a) grandinėlės banginė funkcija bus osciliatorių funkcijų sandauga

$$\psi = \prod_k \varphi_{n_k}, \qquad (5.48)$$

(b) energija – osciliatorių energijų suma

$$\varepsilon = \sum_k \varepsilon_{n_k} = \sum_k \hbar\omega(k)\left(n_k + \frac{1}{2}\right), \; n_k = 0,1,2,... \qquad (5.49)$$

Taigi matome, kad naudojant kvantinį kristalo gardelės dinamikos aprašymą, svyravimų energija kinta kvantais panašiai kaip ir fotonų. Tokie svyravimų kvantai kieto kūno fizikoje yra laikomi (kvazi)dalelėmis ir vadinami *fononais.* Tai ir būtų pagrindinis kvantinio uždavinio aprašymo rezultatas, o visa kita lieka galioti iš klasikinio aprašymo. Tad kristalo gardelės svyravimus galima aprašyti klasikiniu būdu, o esant reikalui klasikinę dispersijos išraišką $\omega(k)$ dauginame iš Planko konstantos $\hbar$ ir gausime kvantinę energijos išraišką.

Jėgos konstantų skaičiavimas. Mūsų gautos formulės naudingos ne tik tuo, kad turime svyravimų dažnio priklausomybę nuo bangos vektoriaus, bet ir tuo, kad turėdami eksperimentines dispersijos dėsnio vertes, galime suskaičiuoti jėgos konstantas. Tegul šios eksperimentinės vertės bus ω_k k kintant pirmoje Briliueno zonoje. Tada ω_k^2 dauginkime iš $\cos nka$ ir integruokime pirmoje Briliueno zonoje.

$$M\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk\omega_k^2 \cos nka = 4\sum_{m>0} C_m \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \cos nka \sin^2\frac{kma}{2} =$$

$$= 2\sum_{m>0} C_m \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \cos nka (1-\cos kma) = \tag{5.50}$$

$$= \frac{2}{a}\sum_{m>0} C_m \left\{ \int_{-\pi}^{\pi} dx \cos nx - \int_{-\pi}^{\pi} dx \cos nx \cos mx \right\}$$

Pirmasis integralas lygus nuliui, nes $\sin(\pm\pi n) = 0$. Antrojo intergalo reikšmę galime nusirašyti iš žinyno, arba pasinaudoti kosinusų sandaugos formule $\cos nx \cos mx = \frac{1}{2}[\cos(m-n)x + \cos(m+n)x]$ ir suintegruoti. Taip ir padarysime. Galime iš karto pastebėti, kad integralas, kuriame kosinuso argumente yra $n+m$ bus lygus nuliui. Kito kosinuso integralas taip pat lygus nuliui kai $m \neq n$. Ir tik kai $m=n$ gausime nenulinį rezultatą

$$M\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk\omega_k^2 \cos nka = -\frac{2\pi}{a} C_n \tag{5.51}$$

Arba perrašius turėsime

$$C_n = -\frac{Ma}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk\omega_k^2 \cos nka = -\frac{Ma}{\pi}\int_{0}^{\frac{\pi}{a}} dk\omega_k^2 \cos nka \tag{5.52}$$

Prieš taikant šią formulę, reikia nepamiršti, kad ji buvo išvesta vienmatės grandinėlės svyravimams. Bet ji turėtų tikti ir trimačių kristalų, pvz. kubinių svyravimams tam tikromis kryptimis.