Temat 10. Model drgań normalnych. Fonony.

Rozważmy ponownie łańcuch N jednakowych cząstek oddziaływujących z najbliższymi sąsiadami poprzez wiązania o jednakowych współczynnikach sprężystości. Fale, które rozważaliśmy wcześniej w temacie 8

$$\rho_n = A\exp[\mathrm{i}(kna - \omega t)] \tag{10.1}$$

są tylko szczególnym przypadkiem drgań harmonicznych o jednej wartości częstotliwości i wektora falowego. W rzeczywistości drgania mogą być dowolną superpozycją fal o wszelkich dozwolonych wektorach falowych. Wychylenie n-tego atomu z położenia równowagi przedstawimy teraz w postaci szeregu

$$\rho_n = \sum_k A_k \exp[i(kna - \omega_k t)]\,. \tag{10.2}$$

gdzie i oznacza jedność urojoną, A_k – amplitudy drgań, k – liczba falowa, ω_k – częstość kołową wynikającą ze związku dyspersyjnego dla danej wartości k.

Rozważmy *dyskretną transformację Fouriera* wychyleń atomów ρ_n:

$$Q_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}\rho_n \exp(-ikna)\,, \tag{10.3}$$

gdzie sumowanie odbywa się po numerach atomów n. Transformacja odwrotna ma postać

$$\rho_n = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k Q_k \exp(+ikna)\,. \tag{10.4}$$

Rozwińmy wychylenia ρ_n we wzorze (10.3) zgodnie z szeregiem (10.2)

$$Q_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k'} A_{k'}\exp\{\mathrm{i}\,[(k'-k)na - \omega_k t]\}. \tag{10.5}$$

Rozważmy najpierw sumowanie po atomach (n). Wykorzystamy wyprowadzony wcześniej wzór (8.19), według którego liczba falowa k jest zawsze krotnością wartości $2\pi/(Na)$. Wówczas

$$\sum_{n=1}^{N}\exp[\mathrm{i}\,(k'-k)an] = \begin{cases} 0 & \text{dla} \quad k \neq k', \\ N & \text{dla} \quad k = k'. \end{cases} \tag{10.6}$$

Sumowanie po n we wzorze (10.5) sprowadza się więc do opuszczenia wyrazów $\exp[\mathrm{i}(k' - k)]$ z jednoczesną redukcją sumowania po k', które wnosi niezerowy wkład tylko dla $k' = k$

$$Q_k = \sqrt{N} A_k \exp(-\mathrm{i}\,\omega_k t)\,. \tag{10.7}$$

Widzimy więc, że dokonana transformacja przeprowadza współrzędne atomów ρ_n na współrzędne Q_k opisujące ich zbiorowe oscylacje zwane **współrzędnymi fononowymi**. Należy podkreślić, że żaden z oscylatorów o danej liczbie falowej k nie odpowiada pojedynczemu atomowi, lecz ich kolektywnemu drganiu.

Zauważmy, że ze wzoru (10.7) wynika związek:

$$\frac{d^2 Q_k}{dt^2} = \omega_k^2 Q_k\,, \tag{10.8}$$

który jest równaniem oscylatora harmonicznego o częstości ω_k. Oscylacje opisane we współrzędnych fononowych Q_k możemy więc uznać za **ortogonalne**, a drgania cieplne będące złożeniem takich drgań o różnych wartościach liczby falowej k są **drganiami normalnymi**. Wychylenia pojedynczych atomów ρ_1, ρ_2, ρ_3, … dane szeregiem (10.2) nie spełniają warunku ortogonalności. Zauważmy że drgania cieplne są ortogonalne w przybliżeniu harmonicznym, natomiast uwzględnienie w opisie sił międzyatomowych także mniejszych nieliniowych składowych prowadzi do wniosku o możliwości wzajemnego oddziaływania fononów.

Definicja 10.1

Drgania nazywane są normalnymi jeżeli każde drganie własne układu o wielu stopniach swobody można wyrazić jako sumę **drgań ortogonalnych**. Wzbudzenie dowolnego z drań nie prowadzi do wzbudzenia któregokolwiek z pozostałych drgań ortogonalnych.

Energia układu jest sumą energii poszczególnych niezależnych oscylatorów kwantowych

$$E = \sum_k E_k \ . \tag{10.9}$$

Zgodnie z zasadami mechaniki kwantowej energia oscylatora harmonicznego podlega kwantowaniu i wynosi

$$E_k = \hbar\omega_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right). \tag{10.10}$$

gdzie $n_k = 0, 1, 2, \ldots$ jest liczbą fononów o wektorze falowym k. Wyrażenie $\hbar\omega_k$ opisuje energię pojedynczego fononu. Dowodów na kwantowanie energii drgań cieplnych sieci krystalicznej dostarczają badania niesprężystego rozpraszania neutronów.

Definicja 10.2

Fonon – kwant energii drgań sieci krystalicznej o właściwościach cząstki należący do grupy *bozonów* (cząstek o całkowitym spinie).