

Projekt nr C.6.1

Wyznaczanie częstotliwości drgań fononowych grupy atomów połączonych siłami typu harmonicznego

Wprowadzenie

Rozważany będzie łańcuch atomów połączonych za sobą oddziaływaniem, którego potencjał zależy tylko od wzajemnej odległości atomów oraz posiada wyraźne minimum dla odległości równej stałej sieci a . Potencjał taki można lokalnie przybliżyć parabolą, poprzez zastosowanie rozwinięcia Taylora wokół punktu równowagi. Przybliżenie to ma postać:

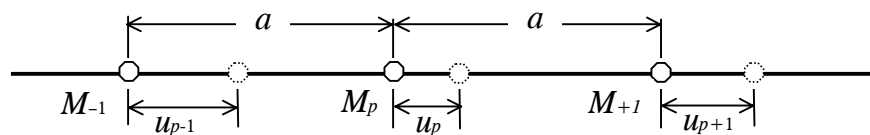
$$V(x) = V(a) + V''(a)(x-a)^2/2! + O((x-a)^3)$$

Wynikająca z tej postaci potencjału siła oddziaływania to:

$$F(x) = -\frac{\partial}{\partial x}V(x) = -V''(a)(x-a) = -K(x-a)$$

W powyższych wzorach x jest odległością atomów, K – stałą siłową.

W stanie podstawowym atomy będą spoczywały w położeniach równowagi, odległych o a od siebie. W stanie wzbudzonym obserwowane będą drgania atomów wokół tych położań. Wychylenie z położenia równowagi atomu nr p oznaczane będzie przez u_p . Masa atomu p -tego oznaczana jest przez M_p . Poniższy rysunek wyjaśnia geometrię układu:



Siła działająca na p -ty atom ma postać:

$$F(u_p) = K(u_{p+1} - u_p) - K(u_p - u_{p-1})$$

Równanie ruchu p -tego atomu ma postać:

$$M_p \frac{d^2 u_p}{dt^2} = K(u_{p+1} + u_{p-1} - 2u_p) \quad (1)$$

Od tego punktu możliwe są dwie wersje potraktowania problemu, oznaczone dalej jako część A i część B. W pierwszej wersji zakłada się, że drgania są harmoniczne w czasie ale nic nie da się powiedzieć o rozkładzie amplitudy drgań wzdłuż łańcucha. Takie potraktowanie problemu

pozwała na stosowanie go do układów nieperiodycznych jak np. łańcuchów zawierających dwa, przypadkowo rozłożone rodzaje atomów o różnych masach czy też łańcuchów zawierających pojedyncze atomy domieszkowe. Drugie podejście zakłada, że rozpatrywany łańcuch atomów jest periodyczny, co oznacza, że zaburzenia związane z drganiami podlegają twierdzeniu Blocha i mają postać fal płaskich o dobrze zdefiniowanym wektorze falowym k . Rozpatrywany w takim przypadku łańcuch może zawierać period równy kilku odległościom międzyatomowym jak dla kryształów z nadstrukturą, w których jednakowe atomy występują co m -ty węzeł, czy kryształów modulowanych.

A.

Zakładamy, że zależność wychylenia p -tego atomu od czasu ma postać:

$$u_p(t) = A_p \exp(i\omega t), \quad \text{gdzie: } A_p - \text{amplituda drgań } p\text{-tego atomu}$$

Podstawienie tego rozwiązania do równania ruchu wypisanego powyżej daje po podzieleniu przez $\exp(i\omega t)$:

$$-\omega^2 M_p A_p = K(A_{p+1} + A_{p-1} - 2A_p)$$

Równaniu temu można nadać postać:

$$\tilde{D} \cdot \vec{A} = -\omega^2 \vec{I} \cdot \vec{A} = \lambda \vec{I} \cdot \vec{A} \quad (2)$$

gdzie \vec{A} jest wektorem amplitud A_p , \vec{I} jest macierzą jednostkową, zaś \tilde{D} jest macierzą $N \times N$ postaci:

$$\tilde{D}_{pq} = \frac{K}{M_p} - \frac{3K}{M_p} \cdot \delta_{pq}, \quad |p-q| \leq 1, \quad \tilde{D}_{11} = -K/M_1, \quad \tilde{D}_{NN} = -K/M_N, \quad (3)$$

gdzie δ_{pq} jest tzw. deltą Kroneckera równą 1 dla $p = q$ i zero poza tym.

Równanie (2) ma postać równania własnego, gdzie $\lambda = -\omega^2$ jest wartością własną. Występująca w nim macierz dynamiczna \tilde{D} jest jednak macierzą niesymetryczną, co powoduje znaczną komplikację problemu własnego. Dla uniknięcia tych komplikacji dokonuje się następującej zamiany zmiennych:

$$B_p = A_p \sqrt{M_p} \quad D_{pq} = \tilde{D}_{pq} \cdot \sqrt{\frac{M_p}{M_q}} \quad (4)$$

Po tej zamianie otrzymujemy problem własny dla symetrycznej macierzy \bar{D} :

$$D_{pq} = \frac{K}{\sqrt{M_p M_q}} - \frac{3K}{M_p} \cdot \delta_{pq} \quad |p - q| \leq 1 \quad (5)$$

Dla otrzymania wartości własnych ω_p , gdzie $p = 1, \dots, N$, konieczna jest diagonalizacja symetrycznej macierzy \bar{D} . W zależności od założonych warunków brzegowych macierz ta może zawierać tylko elementy różne od zera dla $|p - q| \leq 1$ (macierz trójdiagonalna), jak ma to miejsce przy założeniu luźnych końców łańcucha, bądź zawierać dwa dodatkowe niezerowe elementy macierzy dla $p = 1, q = N$ oraz dla $p = N, q = 1$, jak w przypadku tzw. okresowych warunków brzegowych, tzn. połączenia końców łańcucha. W zależności od tego, z którym przypadkiem mamy do czynienia należy wyszukać odpowiednią procedurę diagonalizującą z wybranej biblioteki procedur lub napisać własną, co jest sensowne w przypadku macierzy trójdiagonalnej [2].

Zadanie do wykonania

Napisanie programu realizującego obliczenia dla sformułowanego powyżej modelu łańcucha atomów, stosownie do następujących ustaleń:

Założenia programu: $K = 1.0, M = 1.0$ jako startowe wartości.

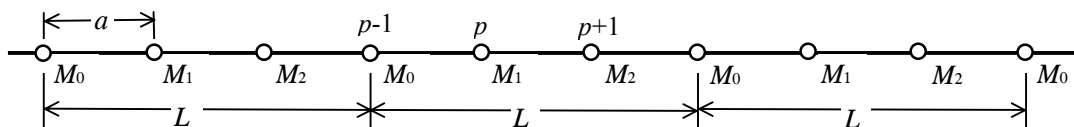
Wejście: procedura określająca masy atomów, uwzględniająca trzy opcje:

1. pojedyncza domieszka o masie różnej od pozostałych atomów
2. modulacja przestrzenna masy atomów o danej długości fali
3. łańcuch z przypadkowym rozkładem dwu mas

Wyjście: Diagram wartości własnych ω_p oraz wyrysowanie na żądanie wektora własnego amplitud drgań atomów dla podanej wartości własnej.

B.

Geometria dla przypadku łańcucha okresowego pokazana jest na rysunku poniżej:



W tym przypadku atomy będą indeksowane dwoma liczbami: n – numer komórki elementarnej (o długości równej L), w której znajduje się atom, oraz μ – numer atomu w komórce elementarnej ($\mu = 0, \dots, m-1$), gdzie m jest ilością atomów w komórce. Na powyższym rysunku użyta została wartość $m = 3$.

Współrzędna $x_{n,\mu}$ atomu opisywanego liczbami n, μ ma postać:

$$x_{n,\mu} = nL + \mu a \quad L = ma$$

Zakładamy, że rozwiązanie na zależność wychylenia p -tego atomu od czasu ma postać fali o danym wektorze falowym k , tzn.:

$$u_{n,\mu}(t) = A_\mu \exp(i\omega t) \exp(-ikx_{n,\mu})$$

Podstawienie takiego rozwiązania do równania ruchu (2) prowadzi do następujących równań (po podzieleniu przez $\exp(i\omega t)$):

$$-M_\mu \omega^2 A_\mu e^{-ik(nL+\mu a)} = K \left[A_{\mu+1} e^{-ik[(\mu+1)a+nL]} + A_{\mu-1} e^{-ik[(\mu-1)a+nL]} - 2A_\mu e^{-ik(\mu a+nL)} \right] \quad (6)$$

Po podzieleniu przez $\exp(-iknL)$ i $\exp(-ik\mu a)$ otrzymujemy:

$$-M_\mu \omega^2 A_\mu = K \left[A_{\mu+1} e^{-ika} + A_{\mu-1} e^{ika} - 2A_\mu \right] \quad (7)$$

gdzie A_{-1} uznaje się za tożsame z A_{m-1} , zaś A_m za tożsame z A_0 .

Po podzieleniu przez M_μ powyższe równanie można zapisać w postaci:

$$\tilde{D} \cdot \vec{A} = -\omega^2 \vec{I} \cdot \vec{A}$$

Po wykonaniu transformacji takiej jak w części A we wzorze (4) otrzymamy:

$$D_{pq} = \frac{K e^{ika(q-p)}}{\sqrt{M_p M_q}} - \frac{3K}{M_p} \cdot \delta_{pq} \quad |p-q| \leq 1 \quad (8)$$

W tym przypadku niezerowe elementy pojawiają się także dla $p=1, q=m$ oraz $p=m, q=1$, tzn. w narożach macierzy poza przekątną i nie jest możliwe ich uniknięcie poprzez założenie odpowiednich warunków brzegowych jak w części A. Dla łańcucha periodycznego konieczne jest założenie jego nieskończonej długości, co eliminuje możliwość manewru warunkami brzegowymi.

Podobnie jak w części A konieczne jest znalezienie wartości i wektorów własnych macierzy \tilde{D} , w tym przypadku jako funkcji ciągłego parametru k , czyli wektora falowego fononu. Dokonuje się tego za pomocą odpowiedniej procedury diagonalizacyjnej wybranej z dowolnej biblioteki procedur numerycznych.

Zadanie do wykonania

Napisanie programu realizującego obliczenia dla sformułowanego powyżej modelu łańcucha periodycznego, stosownie do następujących ustaleń:

Założenia programu: $K = 1.0, M = 1.0$ jako wartości startowe

Wejście: Wartości mas atomów dla $\mu = 0, m-1$,
Zakres wartości wektora falowego k .

Wyjście: Wykres zależności częstotliwości fononów jako funkcji jego wektora falowego k (wykresy takie nazywane są krzywymi dyspersji) dla dwóch przypadków:

- 1) $m = 2$ dla kilku stosunków mas M_0/M_1
- 2) $m = 10$ z sinusoidalną modulacją masy:

$$M_\mu = M[1 + \Delta M \cdot \sin(2\pi\mu / m)] \quad \text{dla kilku wartości } \Delta M.$$

Literatura

- [1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin – „Fizyka ciała stałego”
- [2] W. Press, B. Flannery, S. Teukolsky, W. Vetterling – “Numerical Recipes”