1. Κρυσταλλικα πλεγματα

1.1. **Πλέγμα Bravais.** Απλές παρατηρήσεις μας λένε ότι πολλά υλικά έχουν κρυσταλλική δομή (π.χ., η ζάχαρη, το αλάτι, κλπ). Πειράματα έχουν δείξει ότι τα μέταλλα, όπως και τα περισσότερα στερεά υλικά, έχουν κρυσταλλική δομή. Η κρυσταλλική δομή των μετάλλων έχει αποδειχθεί με κατ΄ ευθείαν παρατηρήσεις σε πρόσφατα πειράματα με τεχονολογίες που παρακολουθούν την περιοδική δομή των υλικών. Ιστορικά, η πρώτη απόδειξη δώθηκε από πειράματα κρυσταλλογραφίας ακτίνων Χ του Bragg.

Η έννοια του πλέγματος είναι θεμελιώδης για την μελέτη των στερεών. Η βασικότερη ίσως έννοια σε αυτήν την περιοχή είναι η έννοια του πλέγματος Bravais. Δίνουμε δύο ισοδύναμους ορισμούς του πλέγματος Bravais:
(α) Μία άπειρη διάταξη σημείων η οποία είναι ακριβώς η ίδια από όποιο σημείο και αν ιδωθεί.
(β) Το πλέγμα το οποίο αποτελείται από όλα τα σημεία με διάνυσμα θέσης

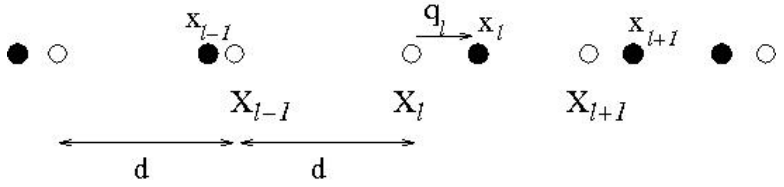
$$\boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3,$$

όπου $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ είναι τρία γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα και n_1, n_2, n_3 παίρνουν όλες τις ακέραιες τιμές.

Παραδείματα πλεγμάτων Bravais μπορείτε να βρείτε σε όλα τα βιβλία φυσικής στερεάς κατάστασης (και αλλού). Στις τρείς διαστάσεις έχουμε το κυβικό πλέγμα bcc (body centered cubic), το πλέγμα fcc (face centered cubic) και άλλα. Στις δύο διαστάσεις έχουμε το τετραγωνικό πλέγμα, κλπ.

Για να περιγράψουμε ένα στερεό θεωρούμε ότι σε κάθε σημείο του πλέγματος έχουμε ένα άτομο, αλλά μπορούμε να έχουμε και πιό σύνθετες περιπτώσεις όπου σε κάθε σημείο του πλέγματος έχουμε δύο ή περισσότερα άτομα.

1.2. **Μονοδιάστατος κρύσταλλος.** Θωρούμε ότι έχουμε ταυτόσημα σωμάτια σε ένα πλέγμα, το οποίο έχει τις ιδιότητες του πλέγματος Bravais, και είναι μονοδιάστατο. Αυτό σημαίνει ότι έχουμε μία αλυσίδα στην οποία οι αποστάσεις μεταξύ γειτονικών σημείων είναι ίσες.



Σχημα 1. Οι θέσεις των ατόμων σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα.

Ορίζουμε τις ακόλουθες μεταβλητές γιά κάθε πλεγματική θέση ℓ:
X_ℓ οι θέσεις ισορροπίας τών ατόμων.
x_ℓ οι θέσεις των ατόμων σε τυχούσα χρονική στιγμή (κατά την οποία μπορεί βέβαια να μην είναι στην θέση ισορροπίας τους).
Θεωρούμε επίσης τις αποκλίσεις από τις θέσεις ισορροπίας $q_\ell = x_\ell - X_\ell$.

Η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατόμων έχει την γενική μορφή

$$V = V(x_1, x_2, \ldots, x_\ell, \ldots),$$

δηλαδή εξαρτάται από τις θέσεις των σωματίων. Η θέση ισορροπίας $\boldsymbol{X}$ του συστήματος ορίζεται από την σχέση

$$\left(\frac{\partial V}{\partial x_\ell}\right)_{\boldsymbol{X}} = 0, \qquad \boldsymbol{X} \equiv (X_1, X_2, \ldots, X_\ell, \ldots). \tag{1}$$

Αναπτύσσουμε το δυναμικό V σε σειρά Taylor μέχρι τον τετραγωνικό όρο

$$V = V(\ldots, X_\ell + q_\ell, \ldots) = V^0 + \sum_\ell V_\ell\, q_\ell + \frac{1}{2}\sum_\ell \sum_{\ell'} V_{\ell\ell'}\, q_\ell q_{\ell'} + \ldots,$$

όπου ο δείκτης ℓ παίρνει τιμές από $-\infty$ έως ∞ και

$$V^0 \equiv V(\boldsymbol{X}), \qquad V_\ell \equiv \left(\frac{\partial V}{\partial x_\ell}\right)_{\boldsymbol{X}}, \qquad V_{\ell\ell'} \equiv \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_\ell \partial x_{\ell'}}\right)_{\boldsymbol{X}}.$$

Το V^0 είναι μία σταθερά η οποία μπορεί να παραλειφθεί από την δυναμική ενέργεια. Οι ποσότητες V_ℓ μηδενίζονται βάσει του ορισμού (1) της θέσης ισορροπίας. Τελικά, αρκεί να χρησιμοποιήσουμε γιά το δυναμικό την μορφή

$$U = \frac{1}{2}\sum_\ell \sum_{\ell'} V_{\ell\ell'}\, q_\ell q_{\ell'}. \tag{2}$$

1.3. **Συνθήκες αναλλοίωτου.** Φυσικές και μαθηματικές ιδιότητες του κρυστάλλου επιβάλλουν μιά ειδικότερη μορφή των ποσοτήτων $V_{\ell\ell'}$. Αυτές οι ιδιότητες είναι οι ακόλουθες.

1) Η U δεν πρέπει να εξαρτάται από τον τρόπο αρίθμησης των σημείων. Δηλαδή, αν θέσουμε $\ell = 0$ οπουδήποτε δεν αλλάζει το αποτέλεσμα, η μορφή του U είναι αμετάβλητη στην μετάθεση $\ell \to \ell + p$ (p ένας ακέραιος), ώστε $V_{\ell\ell'} = V_{\ell+p,\ell'+p}$. Η συνθήκη ικανοποιείται αν τα ℓ και ℓ' εμφανίζονται μόνο ως $\ell - \ell'$, δηλαδή

$$V_{\ell\ell'} = V_{\ell-\ell'}.$$

2) Δεν αλλάζει το αποτέλεσμα εάν μετράμε από δεξιά προς αριστερά ή αντίθετα. Η συνθήκη ικανοποιείται αν

$$V_{\ell-\ell'} = V_{\ell'-\ell}.$$

3) Μιά συνολική μετατόπιση του κρυστάλλου δεν αλλάζει την ενέργεια του. Δηλαδή, αν θέσουμε γιά όλες τις μετατοπίσεις $q_\ell = \delta$ (δ μιά σταθερά) θα έχουμε $U = 0$. Η συνθήκη δίνει την σχέση

$$\frac{1}{2}\left[\sum_\ell \sum_{\ell'} V_{\ell-\ell'}\right]\delta^2 = 0 \Rightarrow \sum_{\ell'} V_{\ell-\ell'} = 0,$$

η οποία ισχύει για κάθε ℓ. Γράφομε τώρα $\sum_{\ell'} V_{\ell-\ell'} = V_0 + \sum'_{\ell'} V_{\ell-\ell'}$, όπου ο τόνος στο σύμβολο της άθροισης σημαίνει ότι αθροίζουμε σε όλες τις τιμές του ℓ' εκτός της $\ell' = 0$. Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω εξάγομε τελικά την σχέση

$$\sum_{\ell'}{}' V_{\ell-\ell'} = -V_0.$$

1.4. **Εξισώσεις κίνησης.** Η κινητική ενέργεια είναι το άθροισμα των κινητικών ενεργειών των σωματίων

$$T = \frac{1}{2}\sum_{\ell} m\dot{q}_{\ell}^2.$$

Η Lagrangian είναι

$$L = \frac{1}{2}\sum_{\ell} m\dot{q}_{\ell}^2 - \frac{1}{2}\sum_{\ell}\sum_{\ell'} V_{\ell\ell'}\, q_{\ell} q_{\ell'}.$$

Οι εξισώσεις κίνησης είναι

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n} = \frac{\partial L}{\partial q_n} \Rightarrow m\ddot{q}_n = -\sum_{\ell'} V_{n\ell'}\, q_{\ell'}.$$

Χρησιμοποιούμε την πρώτη συνθήκη αναλλοίωτου και βρίσκουμε

$$\sum_{\ell'} V_{n\ell'}\, q_{\ell'} = \sum_{\ell'} V_{n-\ell'}\, q_{\ell'}.$$

Χρησιμοποιούμε την τρίτη συνθήκη αναλλοίωτου και έχουμε

$$\sum_{\ell'} V_{n-\ell'}\, q_{\ell'} = V_0\, q_n + {\sum_{\ell'}}'\, V_{n-\ell'}\, q_{\ell'} = -\left[{\sum_{\ell'}}'\, V_{n-\ell'}\right] q_n + {\sum_{\ell'}}'\, V_{n-\ell'}\, q_{\ell'} = {\sum_{\ell'}}'\, V_{n-\ell'}\,(q_{\ell'} - q_n)$$

και επειδή για $\ell' = n$ έχουμε $V_{n-n}(q_n - q_n) = 0$ μπορούμε να γράψουμε τελικά

$$\sum_{\ell'} V_{n\ell'}\, q_{\ell'} = \sum_{\ell'} V_{n-\ell'}\,(q_{\ell'} - q_n).$$

Θέτουμε τώρα $n - \ell' = p$ και χρησιμοποιούμε την δεύτερη σχέση αναλλοίωτου για να βρούμε

$$\sum_{\ell'} V_{n\ell'}\, q_{\ell'} = \sum_{p=-\infty}^{\infty} V_p\,(q_{n-p} - q_n) = \sum_{p=1}^{\infty} V_p\,(q_{n-p} - 2q_n + q_{n+p}).$$

Η εξίσωση κίνησης τελικά γράφεται στη μορφή

$$m\ddot{q}_n = \sum_{p=1}^{\infty} V_p\,(q_{n-p} - 2q_n + q_{n+p}).$$