

UNIVERSITET U NOVOM SADU

PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET

Katedra za fiziku

Butina Slavica

KOLEKTIVNE ROTACIONE EKSCITACIJE U KRISTALU

- DIPLOMSKI RAD -

NOVI SAD 1975.

Zahvaljujem se svom profesoru  
i mentoru dr.BRATISLAVU TOŠIĆU  
na nesebično pruženoj pomoći  
pri izradi mog diplomskog rada  
kao i mr.MARKU MARINKOVIĆU na  
mnogim korisnim savetima.



## SADRŽAJ

### U V O D

Glava I. TRANSLACIONI FONONI ..... 1

1. Fononi u jednodimenzionalnoj rešetci ..... 1
2. Fononi u trodimenzionalnoj rešetci ..... 3
3. Unutrašnja energija i specifična  
toplota kristala ..... 7

Glava II. ROTACIONI FONONI ..... 12

1. Uopšte o pobudjenjima rotacionog tipa ..... 12
2. Kinetička energija izolovanog molekula ..... 13
3. Stabilizacija sistema ..... 20
4. Lagranževe jednačine za sistem dipola ..... 22
5. Diskusija zakona disperzije ..... 32
6. Lokalizovana stanja ..... 33

Z A K L J U Č A K ..... 37

Dodatak: Momenti i proizvodi inercije troosnog  
elipsoida i cilindra ..... 39

### LITERATURA

## U V O D

Prilikom teorijske analize kristala, kada je cilj ove analize ispitivanje kolektivnih mehaničkih oscilacija sistema, obično se atomi ili molekuli kristala u aproksimaciji identifikuju sa svojim centrom mase (tačkasti model) i ispituju se efekti koji dolaze zbog odstupanja položaja centra mase od njihovih ravnotežnih položaja. Na ovaj način dolazi se do kolektivnih mehaničkih oscilacija celog kristala i kvanti ovih oscilacija nazivaju se *f o n o n i*. Ovakve mehaničke oscilacije, kao što je napred rečeno, javljaju se kao posledica promene tri translaciona stepena slobode molekula ili atoma.

U izvesnim slučajevima molekul ili atom nemože se aproksimirati materijalnom tačkom, jer u suštini svaki od njih pretstavlja kruto telo koje ima šest stepeni slobode i to tri translaciona i tri rotaciona. U slučaju kada potencijalna energija celog kristala zavisi ne samo od mesta gde se centar mase molekula nalazi, već i od orijentacije molekula, mora se voditi računa ne samo o promeni položaja centra mase već i o promeni tri Ojlerova ugla koji karakterišu rotacione stepene slobode molekula. Usled promene Ojlerovih uglova mogu da se javi kolektivne mehaničke oscilacije kristala rotacionog tipa koji čemo, za razliku od običnih translacionih fonona, zvati *a n g u l a r n i m f o n o n i m a*. Diplomski rad biće posvećen problemima vezanim za ovu vrstu fonona.

Na kraju treba napomenuti da se promene rotacionih stepeni slobode vrše kontinuirano što pretstavlja bitnu razliku u odnosu na neke druge orijentisane sisteme, kao što je naprimjer Hajzenbergov feromagnetik u kome spinovi vrše diskretnе promene svoje orijentacije pri čemu se projekcija na osu orijentacije može promeniti za veličinu  $\pm \frac{\pi}{2}$ . Tipični predstavnik sistema, u kojima se mora voditi računa o orijentaciji molekula, je kristal sa dipol-dipolnom interakcijom. Za razliku od feromagnetika, ovde su promene orijentacije dипола kontinuirane.



## GLAVA I

### TRANSLACIONI FONONI



#### § 1. Fononi u jednodimenzionalnoj rešetci

Razmotrićemo prvo jedan jednodimenzionalni problem vibracija elastičnog lanca u kome se nalazi beskonačno mnogo atoma ili molekula sa međusobnom udaljenošću  $a$ . Potencijalna energija ovakvog sistema ima oblik:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{nm} V(n - m), \quad (1.1)$$

gde su  $n$  i  $m$  položaji molekula ili atoma u rešetci, a  $V(n - m)$  je potencijal koji zavisi od rastojanja izmedju  $n$ -tog i  $m$ -tog molekula ili atoma.

Kada jedan atom ili molekul izvedemo iz ravnotežnog položaja, pošto je u pitanju sistem vezanih oscilatora, nastaje pomeranje poremećaja duž samog pravca. Potencijalna energija  $n$ -tog i  $m$ -tog atoma ili molekula, koji se longitudinalno pomeraju za veličine  $U_n$  i  $U_m$  respektivno, je oblika:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{nm} V(n - m) + (U_n - U_m). \quad (1.2)$$

Pošto su pomaci mali izraz pod sumom razvijamo u Tajlorov red po članu  $U_n - U_m$  i zaustavljamo se na kvadratnom članu (ostajemo u harmonijskoj aproksimaciji).

$$U = \frac{1}{2} \sum_{nm} V(n - m) + \frac{1}{4} \sum_{nm} \frac{\partial^2 V(n-m)}{\partial(n-m)^2} (U_n - U_m)^2.$$

Kako mi analiziramo fonone, a oni su uslovljeni pomakom molekula, za nulti nivo potencijalne energije možemo uzeti energiju stanja mirovanja. Prema tome, efektivna potencijalna energija koja dolazi od fononskih poremećaja je oblika:

$$W = \frac{1}{4} \sum_{nm} \frac{\partial^2 V(n-m)}{\partial(n-m)^2} (U_n - U_m)^2 \quad (1.3)$$

U aproksimaciji najблиžih suseda, gde  $m$  uzima vrednosti  $n+1$  i  $n-1$ , i uz pretpostavku da je rešetka beskonačna  $n \rightarrow n+1$ , konačan izraz za efektivnu potencijalnu energiju dobija oblik:

$$W = \frac{1}{2} f_0 \sum_{n=1}^{\infty} (U_n - U_{n+1})^2, \quad (1.4)$$

gde je  $f_0 = \left[ \frac{\partial^2 V(n-m)}{\partial(n-m)^2} \right] |_{(n-m)=1}$  koeficijent koji karakteriše ovu interakciju.

Sila koja deluje na  $n$ -ti atom u rešetci usled pomaka je:

$$F_n = - \frac{\partial W}{\partial U_n} = - f_0 [2U_n - U_{n+1} - U_{n-1}] . \quad (1.5)$$

Jednačina kretanja  $n$ -tог atoma je:

$$m \ddot{U}_n = - f_0 (2U_n - U_{n+1} - U_{n-1}), \quad (1.6)$$

čije rešenje se traži u obliku ravnog talasa:

$$U_n = A e^{ikna - i\omega(k)t} \quad (1.7)$$

Unoseći pretpostavljeni rešenje (1.7) u jednačinu (1.6) dobijamo disperzionalni zakon za fonone u jednodimenzionalnoj rešetci, koji je oblika:

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{f_0}{m}} \sin \frac{ka}{2} . \quad (1.8)$$

Iz ovog zakona disperzije sledi da frekvencija vezanih oscilatora linearno zavisi od talasnog vektora  $k$  za male vrednosti  $k$  tj.  $ka \ll 1$ ,

$$\omega = \sqrt{\frac{f_0}{m}} ka .$$

Znači, za male talasne vektore, fononi predstavljaju zvučne talase u sistemu.

Hamiltonijan kristala ima oblik:

$$H = T + U = \frac{m}{2} \sum_n \dot{U}_n^2 + \frac{f}{2} \sum_n (U_n - U_{n+1})^2, \quad (1.9)$$

a pomeraj pišemo kao razvoj po ravnim talasima:

$$U_n = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega(k)}} \left\{ b_k e^{ikna - i\omega(k)t} + b_k^+ e^{-ikna + i\omega(k)t} \right\} \quad (1.10)$$

gde je N ukupan broj atoma u kristalu a  $b_k$  i  $b_k^+$  su Boze operatori. Izrazi za kinetičku i potencijalnu energiju sistema su:

$$T = \frac{\hbar}{4} \sum_k \omega(k) \left\{ b_k b_k^+ + b_k^+ b_k - b_k b_{-k} e^{-2i\omega(k)t} - b_k^+ b_{-k}^+ e^{2i\omega(k)t} \right\} \quad (1.11)$$

$$U = \frac{\hbar}{4} \sum_k \omega(k) \left\{ b_k b_k^+ + b_k^+ b_k + b_k b_{-k} b_{-k}^+ e^{-2i\omega(k)t} + b_k^+ b_{-k}^+ b_{-k} e^{2i\omega(k)t} \right\} \quad (1.12)$$

a hamiltonijan sistema je:

$$\hat{H} = \sum_k (b_k^+ b_k + \frac{1}{2}) \hbar \omega(k). \quad (1.13)$$

Prema tome, sistem vezanih oscilatora sveli smo na sumu nezavisnih oscilatora.

## § 2. Fononi u trodimenzionalnoj rešetci

Za slučaj trodimenzionalne rešetke ukupna potencijalna energija kristala se može napisati kao:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}), \quad (2.1)$$

gde su  $\vec{n}$  i  $\vec{m}$  vektori čvorova rešetke na apsolutnoj nuli.

Pri povišenju temperature atomi počinju da osciluju i svaki od čvorova rešetke dobija neki priraštaj  $\vec{U}_{\vec{n}}$ , odnosno

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{U}_{\vec{n}} \quad \text{i} \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{U}_{\vec{m}} \quad (2.2)$$

S obzirom na (1.2) i činjenicu da su pomaci  $\vec{U}_{\vec{n}}, \vec{U}_{\vec{m}}$  mali, potencijalnu energiju kristala možemo, posle razvijanja funkcije u red, napisati kao:

$$\begin{aligned} U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V & \left[ (\vec{n} - \vec{m}) + (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}}) \right] \cong \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} [(\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}}) V_{\vec{n}-\vec{m}}]^2 V(\vec{n} - \vec{m}) = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} (\vec{U}_{\vec{n}}^{\alpha} - \vec{U}_{\vec{m}}^{\alpha}) \frac{\partial}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_{\alpha}} V(\vec{n} - \vec{m}) + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}, \vec{m}, \alpha, \beta} (\vec{U}_{\vec{n}}^{\alpha} - \vec{U}_{\vec{m}}^{\alpha})(\vec{U}_{\vec{n}}^{\beta} - \vec{U}_{\vec{m}}^{\beta}) \frac{\partial^2}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_{\alpha} \partial (\vec{n} - \vec{m})_{\beta}} V(\vec{n} - \vec{m}), \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\alpha, \beta = x, y, z$$

gde je  $U_{\vec{n}}^{\alpha}$  projekcija vektora  $\vec{U}_{\vec{n}}$  na osu  $\alpha$ . Pošto funkcija  $V(\vec{n} - \vec{m})$  mora imati ekstremume izmedju čvorova, to je:

$$\frac{\partial}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_{\alpha}} V(\vec{n} - \vec{m}) = 0$$

za sve  $\vec{n}, \vec{m}$  i  $\alpha$ .

Druge izvode koji figurišu u formuli (2.3) označićemo sa:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) = \frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_{\alpha} \partial (\vec{n} - \vec{m})_{\beta}} \quad (2.4)$$

Ove funkcije, očigledno imaju sledeća svojstva simetrije:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) = \Lambda_{\beta\alpha}(\vec{n} - \vec{m}) = \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{m} - \vec{n}) = \Lambda_{\beta\alpha}(\vec{m} - \vec{n}) . \quad (2.5)$$

Ako odbacimo prvi član iz formule (2.3), jer on pretstavlja potencijalnu energiju zamrznutog kristala, onda nam, kao potencijalna energija nastala usled povišenja temperature, ostaje izraz:

$$U_{f\vec{m}} = \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha\beta} \Lambda_{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{m})(U_{\vec{n}}^\alpha - U_{\vec{m}}^\alpha)(U_{\vec{n}}^\beta - U_{\vec{m}}^\beta) V(\vec{n} - \vec{m}). \quad (2.6)$$

Sila na  $\vec{n}$ -ti čvor, (tj. njena  $\alpha$ -komponenta), data je kao negativni izvod potencijalne energije po projekciji  $U_n^\alpha$ , tj.

$$F_{\vec{n}}^\alpha = - \frac{\partial U_{f\vec{m}}}{\partial U_{\vec{n}}^\alpha} = - \sum_{\vec{m}\beta} \Lambda_{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{m})(U_{\vec{n}}^\beta - U_{\vec{m}}^\beta). \quad (2.7)$$

Za najbliže susede  $\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) \rightarrow \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{v}) \equiv \Lambda_{\alpha\beta}$ ,

gde  $\vec{v}$  spaja najbliže susede za fiksirani atom. Pošto se radi o istom rastojanju  $\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{v})$  ne zavisi od  $\vec{v}$ . Znači za najbliže susede:

$$F_{\vec{n}}^\alpha = - \sum_{\beta} \Lambda_{\alpha\beta} \sum_{\vec{v}} (U_{\vec{n}}^\beta - U_{\vec{n}+\vec{v}}^\beta). \quad (2.8)$$

Ako sa  $M$  označimo masu atoma (molekula), onda, na osnovu II Njutnovog zakona, možemo pisati:

$$\ddot{M}U_{\vec{n}}^\alpha = F_{\vec{n}}^\alpha = \sum_{\beta} \Lambda_{\alpha\beta} \sum_{\vec{v}} (U_{\vec{n}}^\beta - U_{\vec{n}+\vec{v}}^\beta). \quad (2.9)$$

Ako pretpostavimo da su komponente pomaka  $U_{\vec{n}}^\alpha$  periodične funkcije prostora i vremena

$$U_{\vec{n}}^\alpha = A^\alpha e^{i\vec{k}\cdot\vec{n} - i\omega_k t}, \quad (2.10)$$

onda, zamenom (2.10) u (2.9) dobijamo sledeći sistem homogenih jednačina za određivanje komponenti atomskih pomeraja.

$$\left. \begin{aligned} & \left[ \Lambda_{xx} - \frac{M}{f_k} \omega_k^2 \right] U_{\vec{n}}^x + \Lambda_{xy} U_{\vec{n}}^y + \Lambda_{xz} U_{\vec{n}}^z = 0 \\ & \Lambda_{yx} U_{\vec{n}}^x + \left[ \Lambda_{yy} - \frac{M}{f_k} \omega_k^2 \right] U_{\vec{n}}^y + \Lambda_{yz} U_{\vec{n}}^z = 0 \\ & \Lambda_{zx} U_{\vec{n}}^x + \Lambda_{zy} U_{\vec{n}}^y + \left[ \Lambda_{zz} - \frac{M}{f_k} \omega_k^2 \right] U_{\vec{n}}^z = 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.11)$$

gde je:

$$f_{\vec{k}} = \sum_{\vec{v}} (1 - e^{i\vec{k}\vec{v}}).$$

Da bi ovaj sistem imao netrivijalna rešenja, determinanta sistema mora biti jednaka nuli, tj:

$$\begin{vmatrix} \Lambda_{xx} - \frac{M}{f_{\vec{k}}} \omega_i^2 & \Lambda_{xy} & \Lambda_{xz} \\ \Lambda_{yx} & \Lambda_{yy} - \frac{M}{f_{\vec{k}}} \omega_i^2 & \Lambda_{yz} \\ \Lambda_{zx} & \Lambda_{zy} & \Lambda_{zz} - \frac{M}{f_{\vec{k}}} \omega_i^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.12)$$

Ova jednačina daje tri dozvoljene frekvencije fonona. Pri tome, u slučaju proste čelije, sve ove tri frekvencije teže nuli kada  $\vec{k}$  teži nuli i takvi fononi se nazivaju akustični fononi.

Kod složene rešetke za tri frekvencije dobijene iz (2.12) važi isto pravilo, tj. kada  $\vec{k}$  teži nuli,  $\omega_{\vec{k}}$  teži nuli, a za preostale 36-3 frekvencije, frekvencije ne postaju ravne nuli kada  $\vec{k}$  teži nuli i takvi fononi nazivaju se optički fononi.

Za slučaj proste prostorne rešetke svakoj od tri akustičke frekvencije odgovara jedan polarizacioni vektor  $\hat{l}_j(\vec{k})$ ,  $j=1,2,3$  i ovi vektori zadovoljavaju uslov:

$$\hat{l}_j(\vec{k}) \hat{l}_{j'}(\vec{k}) = \delta_{jj'}.$$

Ova tri vektora odgovaraju trima komponentama zvuka, jednoj longitudinalnoj i dvema transverzalnim.

Hamiltonian sistema i operator pomaka imaju sledeći oblik:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}_j} (b_{\vec{k}_j}^\dagger b_{\vec{k}_j} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_{\vec{k}_j} \quad (j=1,2,3), \quad (2.13)$$

$$\hat{U}_n = \sum_{\vec{k}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{k}_j}}} (b_{\vec{k}_j} e^{i\vec{k}_j \vec{n} - i\omega_{\vec{k}_j} t} + b_{\vec{k}_j}^\dagger e^{-i\vec{k}_j \vec{n} + i\omega_{\vec{k}_j} t}). \quad (2.14)$$

### § 3. Unutrašnja energija i specifična toplota kristala

Termodinamičke veličine koje karakterišu čvrsto telo odredićemo primenom poznatih statističkih metoda.

Prilikom izračunavanja termodinamičkih velečina kristala moramo razlikovati udeo rešetke i udeo elektrona u tim veličinama. Naše razmatranje biće usredsredjeno na udeo rešetke u termodynamičkim veličinama.

Sa mehaničke tačke gledišta možemo sistem od  $3N\nu$  oscilatornih stepena slobode posmatrati kao sumu od  $3N\nu$  nezavisnih oscilatora, od kojih svaki odgovara pojedinoj normalnoj oscilaciji. Na osnovu poznatih formula za termodinamičke veličine, koje se odnose na jedan stepen slobode oscilovanja, možemo neposredno napisati izraz za slobodnu energiju čvrstog tela u obliku:

$$F = N\varepsilon_0 + kT \sum_{\alpha} \ln(1 - e^{-\frac{\hbar\omega_{\alpha}}{kT}}), \quad (3.1)$$

gde je  $N$  broj molekula, a  $\nu$  broj atoma u molekulu. Sumiranje se vrši po svim  $3N\nu$  normalnim oscilovanjima koja se numerišu indeksom  $\alpha$ . Član  $N\varepsilon_0$  pretstavlja energiju interakcije svih atoma tela u ravnotežnom položaju (tačnije, u stanju "nultih" oscilovanja). Neophodno je imati u vidu da  $\varepsilon_0$ , uopšte uzevši, nije konstantno, nego je funkcija gustine tela. Pri zadanoj zapremini  $\varepsilon_0$  ne zavisi od temperature:

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_0 \left( \frac{V}{N} \right).$$

Posmatraćemo sada dva granična slučaja.

#### a) Niske temperature

Za male vrednosti  $kT$ , u sumi pod, igraju ulogu samo članovi sa malim frekvencijama:  $\hbar\omega_{\alpha} \sim kT$ . No, oscilacije sa malim frekvencijama, kao što je poznato, ne pretstavljaju ništa drugo do obične zvučne talase. Talasna dužina zvučnog talasa povezana je sa frekvencijom pomoću relacije  $\lambda \sim \frac{u}{\omega}$ , gde je  $u$  brzina zvuka. Kod zvučnih talasa talasna dužina je velika u odnosu na konstantu rešetke  $a$  ( $\lambda \gg a$ ). To znači da je  $\omega \ll \frac{u}{a}$ . Drugim rečima, da bi se oscilacije mogle posmatrati kao zvučni talasi, temperatura mora zadovoljavati uslov,

koji se može napisati u obliku:

$$kT \ll \frac{\hbar u}{a} . \quad (3.2)$$

Broj "sopstvenih oscilacija" u spektru zvučnih talasa sa apsolutnom vrednošću talasnog vektora  $f$  u intervalu  $df$  i sa datom polarizacijom iznosi:

$$V \frac{4\pi f^2 df}{(2\pi)^3} ,$$

gde je  $V$  zapremina tela. Kada predjemo sa talasnog vektora na frekvencije dobijamo izraz:

$$V \frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 \bar{u}^3} , \quad (3.3)$$

gde je  $\bar{u}$  dato relacijom:

$$\frac{3}{\bar{u}^3} = 2/u_t^3 + 1/u_1^3 ,$$

a  $u_t$  i  $u_1$  su brzine prostiranja transverzalnih i longitudinalnih talasa respektivno.

Na osnovu (3.3) i (3.1) dobijamo da je slobodna energija oblika:

$$F = N\epsilon_0 + kT \frac{3V}{2\pi^2 \bar{u}^3} \int_0^\infty \ln(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}) \omega^2 d\omega . \quad (3.4)$$

Ovaj izraz analogan je formuli za slobodnu energiju zračenja crnog tela. Razlika je samo u tome što umesto brzine svetlosti c stoji brzina zvuka  $\bar{u}$  i u faktoru  $3/2$ . Na osnovu ove analogije dobijamo konačan izraz za slobodnu energiju čvrstog tela:

$$F = N\epsilon_0 - V \frac{\pi^2 (kT)^4}{30 (\hbar \bar{u})^3} . \quad (3.5)$$

Energija tela biće:

$$E = N\epsilon_0 + V \frac{\pi^2 (kT)^4}{10 (\hbar \bar{u})^3} \quad (3.6)$$

i specifična toplota:

$$C = \frac{2\pi^2 k}{5(\hbar \bar{u})^3} (kT)^3 V . \quad (3.7)$$

Na taj način specifična toplota čvrstog tela na niskim temperaturama proporcionalna je trećem stepenu temperature.

Za čvrsto telo sa prostom kristalnom rešetkom (elementi i prosta jedinjenja) zakon  $T^3$  za specifičnu toplotu faktično se počinje ispunjavati na temperaturama reda desetina stepena, a za tela sa složenom rešetkom može se očekivati ispunjavanje toga zakona samo na znatno nižim temperaturama.

b) Visoke temperature

Ako je  $kT \gg \frac{\hbar\omega}{a}$  može se staviti da je:

$$1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \approx \frac{\hbar\omega}{kT}$$

i slobodna energija je:

$$F = N\varepsilon_0 + kT \sum_a \ln \frac{\hbar\omega_a}{kT} . \quad (3.8)$$

Ako uvedemo "srednju geometrijsku" frekvenciju  $\bar{\omega}$  prema definiciji:

$$\ln \bar{\omega} = \frac{1}{3N\nu} \sum_a \ln \omega_a ,$$

za slobodnu energiju tela dobijamo formulu:

$$F = N\varepsilon_0 - 3N\nu kT \ln kT + 3N\nu kT \ln \hbar \bar{\omega} , \quad (3.9)$$

gde je  $\bar{\omega} = \bar{\omega}\left(\frac{V}{N}\right)$ , a energija tela je:

$$E = F - T \frac{\partial F}{\partial T} = N\varepsilon_0 + 3N\nu kT . \quad (3.10)$$

Za specifičnu toplotu na visokim temperaturama imamo:

$$C = N c = 3N\nu k = \text{const}, \quad (3.11)$$

gde je  $c = 3\nu k$  specifična toplota jednog molekula. Prema tome, na dovoljno visokim temperaturama, specifična toplota čvrstog tela je konstantna, pri čemu zavisi samo od broja atoma u telu. Ovaj zaključak je poznati Dilon-Ptiov zakon koji je dobijen eksperimentalno.

c) Interpolaciona Debajeva formula

U prethodna dva granična slučaja, i za niske i za visoke temperature videli smo da je moguće dovoljno tačno izračunavanje termodinamičkih veličina čvrstog tela. Ali u oblasti temperature izmedju ta dva granična slučaja takvo izračunavanje je nemoguće jer suma po delovima u (3.1) bitno zavisi od konkretne raspodele frekvencija po celom spektru oscilacija datog tela.

Zbog toga je interesantno da se dobije jedinstvena interpolaciona formula koja bi davala pravilne vrednosti termodinamičkih veličina za oba granična slučaja.

Prema tome za dobijanje tražene interpolacione formule prirodno je poći od modela u kojem se po celom intervalu spektra oscilacija frekvencije raspodeljuju po zakonu (3.4). Pri tom se spektar, koji počinje od  $\omega = 0$ , lomi kod neke konačne frekvencije  $\omega = \omega_m$ .

Na taj način raspodela frekvencija kod posmatranog modela daje se formulom:

$$9NV \frac{\omega^2 d\omega}{\omega_m^3} \quad (\omega \leq \omega_m), \quad (3.12)$$

gde je

$$\omega_m = \bar{\mu} \left( \frac{6\pi^2 NV}{V} \right)^{1/3}.$$

Ako još uvedemo tzv. Debajevu ili karakterističnu temperaturu tela  $\Theta$  definišući je pomoću relacije:

$$k\Theta = \hbar\omega_m,$$

gde je  $\Theta$  funkcija gustine tela i izvršimo integriranje uvodjenjem Debajeve funkcije:

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{z^3 dz}{e^z - 1}, \quad (3.13)$$

za slobodnu energiju čvrstog tela dobijamo:

$$F = N\varepsilon_0 + NVkT \left[ 3 \ln(1 - e^{-\frac{\Theta}{T}}) - D\left(\frac{\Theta}{T}\right) \right]. \quad (3.14)$$

Energija je:

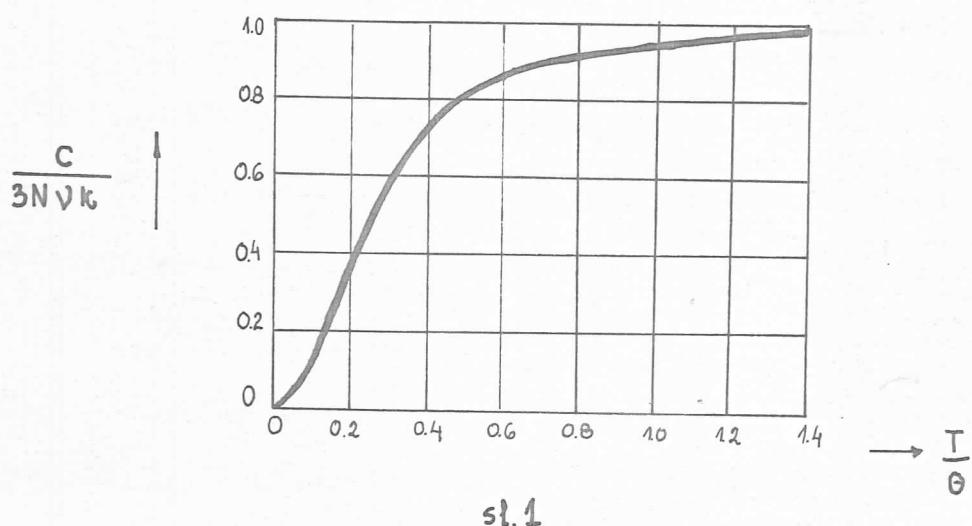
$$E = N \epsilon_0 + 3N\gamma kT D\left(\frac{\Theta}{T}\right), \quad (3.15)$$

a specifična toplota.

$$C = 3N\gamma k \left\{ D\left(\frac{\Theta}{T}\right) - \frac{\Theta}{T} D'\left(\frac{\Theta}{T}\right) \right\}. \quad (3.16)$$

Formule (3.15), (3.16) i (3.17) pretstavljaju interpolacione formule termodinamičkih veličina čvrstog tela. Lako je vidi-  
ti da ove formule stvarno daju prave rezultate i za oba gra-  
nična slučaja.

Na slici (1) dat je grafik zavisnosti  $\frac{C}{3N\gamma k}$  od  $\frac{T}{\Theta}$ .



## GLAVA II

### ROTACIONI FONONI

#### § 1. Uopšte o pobudjenjima rotacionog tipa

Elementi od kojih je sastavljen kristal, a to su atomi ili molekuli, pretstavljaju svaki za sebe kruto telo koje, kao što se zna, ima šest stepeni slobode. Tri stepena slobode vezana su za kretanje centra mase molekula ili atoma, a tri za njegove rotacije oko centra mase. Ovi rotacioni stepeni slobode poznati su pod imenom Ojlerovi uglovi.

Prilikom teorijskih analiza kristala češće se u račun uvode samo tri translaciona stepena slobode, što u suštini znači aproksimiranje krutog tela materijalnom tačkom. Ove promene tri translaciona stepena slobode dovode do kolektivnih pobudjenja kristala koji se nazivaju fononi i oni interaguju i izmedju sebe i sa ostalim elementarnim ekscitacijama koje mogu da se pojave u kristalu. Uzimanje u račun samo translacionih fonona opravdano je u svim onim slučajevima kada potencijalna energija kristala kao celine pretstavlja sumu članova koji su isključivo funkcija rastojanja izmedju molekula. Ukoliko interakcija izmedju dva molekula ili atoma zavisi od orijentacije ovih u prostoru, onda očigledno, sve fizičke karakteristike sistema počinju da zavise od promene orijentacije, a to znači da korektna analiza kristala zahteva da se uzmu u obzir i rotacioni stepeni slobode molekula i kolektivni efekti koji dolaze usled promene ovih stepeni slobode. Diplomski rad je posvećen izučavanju rotacionih kolektivnih efekata u sistemima sa dipol-dipolnim interakcijama, pri čemu je reč o električnim dipolima. Na analogan način mogao bi se ispitivati i sistem magnetnih dipola, ali s obzirom da je interakcija magnetnih dipola deset do sto puta slabija od interakcije električnih dipola, zadržaćemo se samo na sistemu električnih dipola.

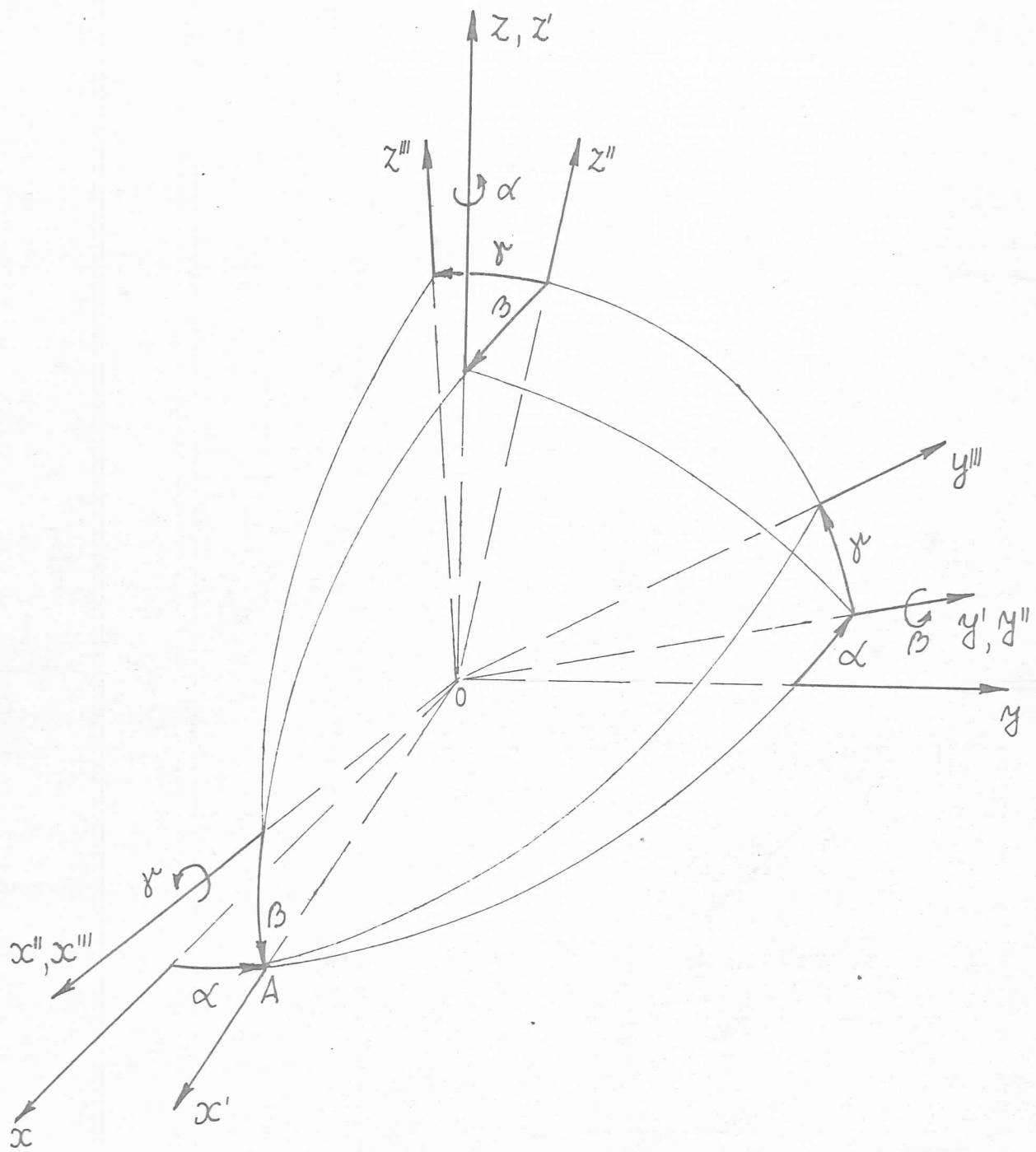
Treba, na kraju, napomenuti da će ovde biti ispitivani efekti koji nastaju usled kontinuirane promene orjentacije i koji se bitno razlikuju od efekata diskretne promene orjentacije. Slučaj diskretnih promena orjentacije imamo u sistemu paralelnih spinova (feromagnetik), zatim kod feroelektrika sa vodoničnom vezom i u teoriji librona, tj. takvih elementarnih ekscitacija koje nastaju kao rezultat diskretne promene orjentacije kvadrupolnih osa.

## § 2. Kinetička energija izolovanog molekula

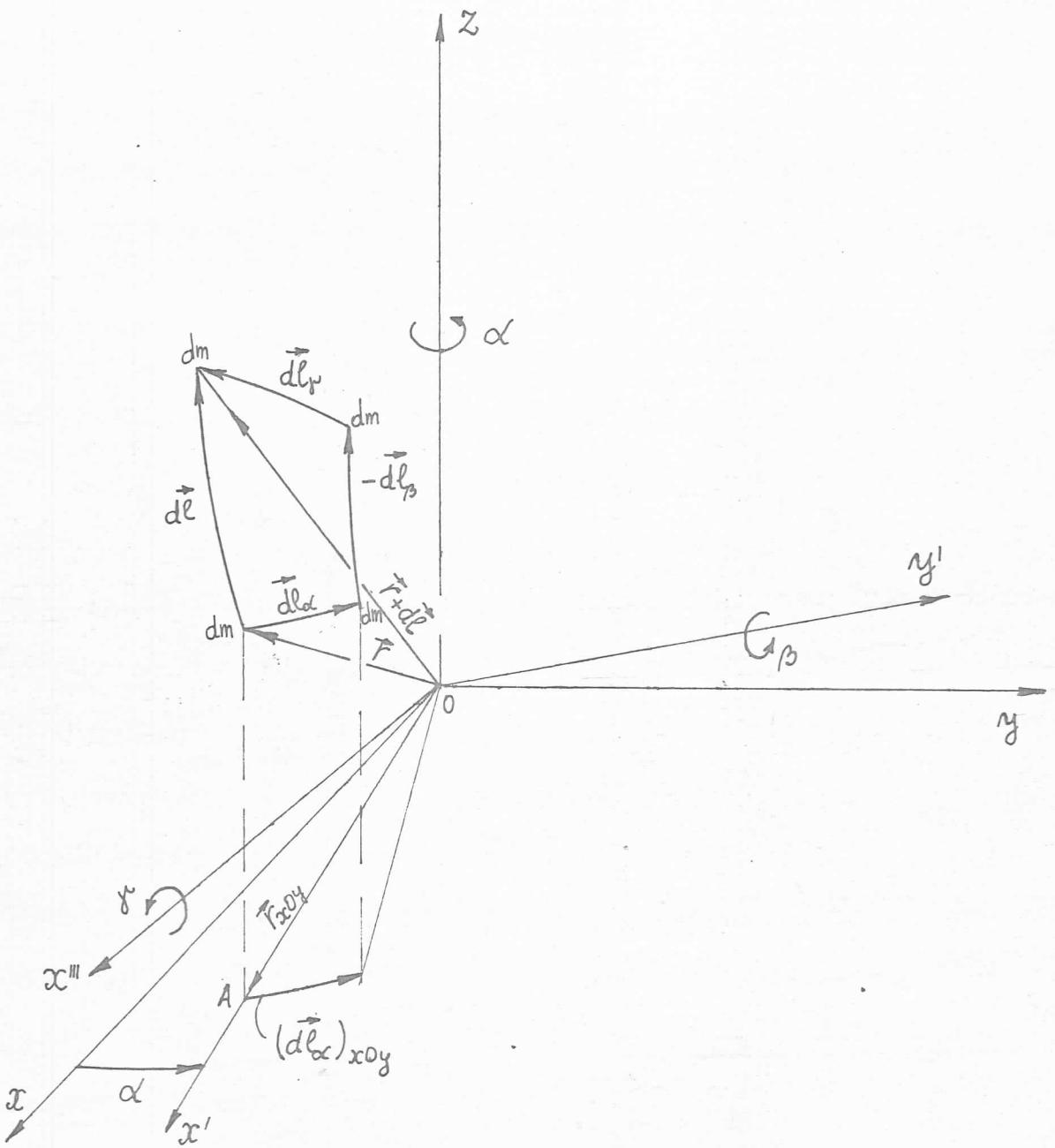
Pretpostavimo da je molekul troosni elipsoid homogene gustine  $\rho$  i da mu je dipolni moment  $\vec{D}$  uperen duž najduže od osa, koja se poklapa sa osom  $Ox$  (sl.2). Molekul, kao kruto telo, vrši rotaciju oko nepomične tačke. Za nepomičnu tačku odabiramo centar mase molekula i u njega postavljamo koordinatni početak (sl.2). Sa tačke gledišta kretanja dipola fizički efekat mogu da izazovu, u datom slučaju, samo promene njegovog pravca, dok su njegove rotacije oko ose koja se poklapa sa njegovim pravcem neopservabilne, jer je sam dipol jednodimenzionalna figura. Međutim, ako želimo da opišemo kretanje molekula, posmatranog samo kao kruto telo, moramo uzeti u obzir sve tri rotacije koje su odredjene trima ugaonim koordinatama.

Od dve, fizički opservabilne rotacije molekula, posmatranog kao dipol, uzećemo da je prva rotacija dipola u  $xOy$  ravni, oko ose  $Oz$ . Ugao koji zaklapa trenutni položaj dipola ( $OA$ ) sa  $Ox$  osom obeležićamo sa  $\alpha$ . Druga rotacija je ona koju dipol vrši u ravni koju obrazuje  $Oz$  osa i prava ( $OA$ ) koja u sebi sadrži trenutnu projekciju dipola na  $xOy$  ravan. Ugao koji karakteriše ovu rotaciju je  $\beta$ . Treća rotacija je ona koju vrši molekul, kao kruto telo, oko ose koja prolazi kroz trenutni pravac dipola. Ovu rotaciju karakteriše ugao  $\gamma$ . (sl.2)

Uglove možemo predstaviti kao vektore normalne na ravan u kojoj leži ugao, usmerene na osnovu pravila desnog zavrtnja i po intenzitetu jednake brojnoj vrednosti ugla. Očigledno je:

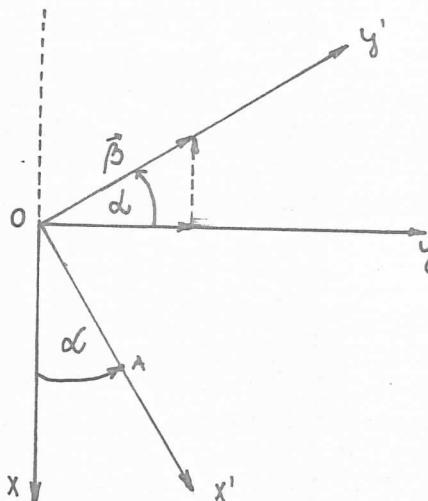


sl. 2.



sl. 3.

Nešto je složenije određivanje orta ugla  $\beta$ . Sam ugao  $\beta$  je kao vektor paralelan sa  $xOy$  ravni i normalan je na ravan  $AOz$  prema slici 4.



sl. 4.

Znači:

$$\vec{\beta} = |\vec{\beta}| (-\vec{i} \sin \alpha + \vec{j} \cos \alpha)$$

pa je:

$$\text{ort } \vec{\beta} = -\vec{i} \sin \alpha + \vec{j} \cos \alpha$$

Rezime:

$$\text{ort } \vec{\alpha} = \vec{k}$$

$$\text{ort } \vec{\beta} = -\vec{i} \sin \alpha + \vec{j} \cos \alpha \quad (1.1)$$

$$\text{ort } \vec{\gamma} = \vec{i} \cos \alpha \cos \beta + \vec{j} \sin \alpha \cos \beta + \vec{k} \sin \beta$$

Ako uočimo bilo koji element mase molekula  $dm$ , onda njemu odgovara kinetička energija rotacije:

$$dT = \frac{1}{2} dm \vec{\nu}^2 \quad (1.2)$$

Brzina  $\vec{\nu}$  je:

$$\vec{\nu} = \frac{d\vec{l}}{dt} \quad (1.3)$$

gde je  $d\vec{l}$  elementarni luk koji opisuje element mase  $dm$  prilikom tri elementarne rotacije za uglove  $d\alpha$ ,  $d\beta$  i  $d\gamma$  (sl. 3).

Očigledno je:

$$\vec{dl} = \vec{dl}_\alpha + \vec{dl}_\beta + \vec{dl}_\gamma. \quad (1.2)$$

Takođe važe relacije:

$$\begin{aligned}\vec{dl}_\alpha &= \vec{d\alpha} \times \vec{r} \\ \vec{dl}_\beta &= \vec{d\beta} \times \vec{r} \\ \vec{dl}_\gamma &= \vec{d\gamma} \times \vec{r}.\end{aligned} \quad (1.3)$$

Ispravnost ovih relacija pokazaćemo na luku  $\vec{dl}_\alpha$ . Vektor položaja  $\vec{r}$  uočene elementarne mase  $dm$  razložimo na dve komponente, jednu u pravcu Oz ose ( $\vec{r}_z$ ) a drugu u pravcu ortogonalne projekcije vektora  $\vec{r}$  na ravan xOy ( $\vec{r}_{xoy}$ ).

$$\vec{r} = \vec{r}_{xoy} + \vec{r}_z.$$

$\vec{dl}_\alpha$  u xOy ravni  $(\vec{dl}_\alpha)_{xoy}$  je isto što i  $\vec{dl}_\alpha$  jer se rotacija za ugao  $d\alpha$  vrši oko Oz ose,

$$\vec{dl}_\alpha = (\vec{dl}_\alpha)_{xoy} \quad (\text{ort } \vec{d\alpha} = \vec{k}).$$

Prema tome je:

$$(\vec{dl}_\alpha)_{xoy} = \vec{dl}_\alpha = \vec{d\alpha} \times \vec{r}_{xoy}$$

$$\vec{dl}_\alpha = \vec{d\alpha} \times \vec{r}_{xoy} + \vec{d\alpha} \times \vec{r}_z,$$

jer je  $\vec{d\alpha} \times \vec{r}_z = 0$  zbog kolinearnosti ovih vektora.

$$\vec{dl}_\alpha = \vec{d\alpha} \times (\vec{r}_{xoy} + \vec{r}_z) = \vec{d\alpha} \times \vec{r}.$$

Isto rezonovanje važi i za ostale lukove.

Na osnovu gore navedenog sledi da je kinetička energija elementa mase  $dm$  jednaka:

$$dT = \frac{1}{2} dm \vec{v}^2 = \frac{1}{2} dm \left[ \left( \frac{d\vec{r}}{dt} + \vec{d\alpha} \times \vec{r} \right) \times \vec{r} \right]^2.$$

Pošto je element mase  $dm$  povezan sa gustinom molekula relacijom

$$dm = \rho dx dy dz,$$

a vektori elementarnih uglova rotacija dati izrazima:

$$\vec{d\alpha} = d\alpha \text{ort } \vec{d\alpha} = d\alpha \vec{k}$$

$$\vec{d\beta} = d\beta \text{ort } \vec{d\beta} = d\beta (-\vec{i} \sin \alpha + \vec{j} \cos \alpha)$$

$$\vec{d\gamma} = d\gamma \text{ort } \vec{d\gamma} = d\gamma (\vec{i} \cos \alpha \cos \beta + \vec{j} \sin \alpha \cos \beta + \vec{k} \sin \beta),$$



za kinetičku energiju dobijamo izraz:

$$dT = \frac{1}{2} g dx dy dz \left\{ [(\dot{\gamma} \cos \alpha \cos \beta - \dot{\beta} \sin \alpha) \vec{i} + (\dot{\gamma} \sin \alpha \cos \beta + \dot{\beta} \cos \alpha) \vec{j} + (\dot{\alpha} + \dot{\gamma} \sin \beta) \vec{k}] \times (x \vec{i} + y \vec{j} + z \vec{k}) \right\}^2. \quad (1.4)$$

Poznato je da se kvadrat vektorskog proizvoda može napisati u obliku:

$$(\vec{A} \times \vec{B})^2 = [\|\vec{A}\| \|\vec{B}\| \sin \varphi_{AB}]^2 = A^2 B^2 \sin^2 \varphi_{AB} = A^2 B^2 (1 - \cos^2 \varphi_{AB}).$$

Iz definicije skalarnog proizvoda sledi:

$$\cos \varphi_{AB} = \frac{\vec{A} \cdot \vec{B}}{\|\vec{A}\| \|\vec{B}\|}.$$

Prema tome možemo pisati:

$$(\vec{A} \times \vec{B})^2 = A^2 B^2 - (\vec{A} \cdot \vec{B})^2. \quad (1.5)$$

Ako još uvedemo oznake:

$$\begin{aligned} \Omega_x &= \dot{\gamma} \cos \alpha \cos \beta - \dot{\beta} \sin \alpha \\ \Omega_y &= \dot{\gamma} \sin \alpha \cos \beta + \dot{\beta} \cos \alpha \\ \Omega_z &= \dot{\alpha} + \dot{\gamma} \sin \beta. \end{aligned} \quad (1.6)$$

izraz za kinetičku energiju dobija oblik:

$$dT = \frac{1}{2} g dx dy dz [\Omega^2 r^2 - (\vec{\Omega} \cdot \vec{r})^2]$$

$$dT = \frac{1}{2} g dx dy dz [(y^2 + z^2) \Omega_x^2 + (x^2 + z^2) \Omega_y^2 + (x^2 + y^2) \Omega_z^2 - 2xy \Omega_x \Omega_y - 2xz \Omega_x \Omega_z - 2yz \Omega_y \Omega_z].$$

Kako  $\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z$  ne zavise od  $x, y$  i  $z$ , ukupna kinetička energija molekula dobija konačan oblik:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \left\{ J_x \Omega_x^2 + J_y \Omega_y^2 + J_z \Omega_z^2 - 2 \Pi_{xy} \Omega_x \Omega_y - \right. \\ &\quad \left. - 2 \Pi_{xz} \Omega_x \Omega_z - 2 \Pi_{yz} \Omega_y \Omega_z \right\}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

gde su  $J_x, J_y, J_z$  momenti inercije u odnosu na x, y i z osu, respektivno, definisani izrazima:

$$\begin{aligned} J_x &= \int dxdydz (y^2 + z^2) \rho \\ J_y &= \int dxdydz (x^2 + z^2) \rho \\ J_z &= \int dxdydz (x^2 + y^2) \rho \end{aligned} \quad , \quad (1.8)$$

a  $\Pi_{xy}, \Pi_{xz}$  i  $\Pi_{yz}$  su proizvodi inercije definisani izrazima:

$$\begin{aligned} \Pi_{xy} &= \int dxdydz xy \rho \\ \Pi_{xz} &= \int dxdydz xz \rho \\ \Pi_{yz} &= \int dxdydz yz \rho \end{aligned} \quad . \quad (1.9)$$

Na osnovu (1.6) i (1.7) izraz za kinetičku energiju možemo napisati u eksplicitnom obliku:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \left\{ J_x (\dot{\gamma}^2 \cos^2 \alpha \cos^2 \beta + \dot{\beta}^2 \sin^2 \alpha - \right. \\ &\quad - 2 \dot{\gamma} \dot{\beta} \sin \alpha \cos \alpha \cos \beta) + J_y (\dot{\gamma}^2 \sin^2 \alpha \cos^2 \beta + \\ &\quad + \dot{\beta}^2 \cos^2 \alpha - 2 \dot{\gamma} \dot{\beta} \sin \alpha \cos \alpha \cos \beta) + \\ &\quad + J_z (\dot{\alpha}^2 + \dot{\gamma}^2 \sin^2 \beta - 2 \dot{\alpha} \dot{\gamma} \sin \beta) - \\ &\quad - \Pi_{xy} [\dot{\gamma}^2 \sin \alpha \cos \alpha \cos^2 \beta - \dot{\beta}^2 \sin \alpha \cos \alpha + \\ &\quad + \dot{\gamma} \dot{\beta} (\cos^2 \alpha \cos \beta - \sin^2 \alpha \cos \beta)] - \\ &\quad - \Pi_{xz} [\dot{\alpha} \dot{\gamma} \cos \alpha \cos \beta + \dot{\gamma}^2 \cos \alpha \cos \beta \sin \beta - \\ &\quad - \dot{\alpha} \dot{\beta} \sin \alpha - \dot{\beta} \dot{\gamma} \sin \alpha \sin \beta] - \end{aligned}$$

$$-\Pi_{yz} [\dot{\gamma} \dot{\alpha} \sin \delta \cos \beta + \dot{\gamma}^2 \sin \delta \sin \beta \cos \beta + \\ + \dot{\alpha} \dot{\beta} \cos \delta + \dot{\beta} \dot{\gamma} \cos \delta \sin \beta] \}.$$

U aproksimaciji malih uglova i u kvadratnoj aproksimaciji po uglovima i njihovim izvodima kinetička energija postaje:

$$T = \frac{1}{2} \left\{ J_x \dot{\gamma}^2 + J_y \dot{\beta}^2 + J_z \dot{\alpha}^2 - 2 \Pi_{xy} \dot{\beta} \dot{\gamma} - \right. \\ \left. - 2 \Pi_{xz} \dot{\alpha} \dot{\gamma} - 2 \Pi_{yz} \dot{\alpha} \dot{\beta} \right\}. \quad (1.10)$$

Ukupna kinetička energija kristala za jednu, dve i tri dimenzije je, respektivno:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{n_x} \left\{ J_x \dot{\gamma}_{n_x}^2 + J_y \dot{\beta}_{n_x}^2 + J_z \dot{\alpha}_{n_x}^2 - 2 \Pi_{xy} \dot{\beta}_{n_x} \dot{\gamma}_{n_x} - \right. \\ \left. - 2 \Pi_{xz} \dot{\alpha}_{n_x} \dot{\gamma}_{n_x} - 2 \Pi_{yz} \dot{\alpha}_{n_x} \dot{\beta}_{n_x} \right\}, \quad (1.11)$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_{n_x n_y} \left\{ J_x \dot{\gamma}_{n_x n_y}^2 + J_y \dot{\beta}_{n_x n_y}^2 + J_z \dot{\alpha}_{n_x n_y}^2 - 2 \Pi_{xy} \dot{\beta}_{n_x n_y} \dot{\gamma}_{n_x n_y} - \right. \\ \left. - 2 \Pi_{xz} \dot{\alpha}_{n_x n_y} \dot{\gamma}_{n_x n_y} - 2 \Pi_{yz} \dot{\alpha}_{n_x n_y} \dot{\beta}_{n_x n_y} \right\}; \quad (1.12)$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_{n_x n_y n_z} \left\{ J_x \dot{\gamma}_{n_x n_y n_z}^2 + J_y \dot{\beta}_{n_x n_y n_z}^2 + J_z \dot{\alpha}_{n_x n_y n_z}^2 - 2 \Pi_{xy} \dot{\beta}_{n_x n_y n_z} \dot{\gamma}_{n_x n_y n_z} - \right. \\ \left. - 2 \Pi_{xz} \dot{\alpha}_{n_x n_y n_z} \dot{\gamma}_{n_x n_y n_z} - 2 \Pi_{yz} \dot{\alpha}_{n_x n_y n_z} \dot{\beta}_{n_x n_y n_z} \right\}. \quad (1.13)$$

Potražimo sada potencijalnu energiju. Potencijalna energija interakcije dva molekula na mestu  $\vec{n}$  i  $\vec{m}$  je data izrazom:

$$W_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{\vec{d}_{\vec{n}} \cdot \vec{d}_{\vec{m}}}{|\vec{R}_{\vec{n}\vec{m}}|^3} - 3 \frac{(\vec{d}_{\vec{n}} \cdot \vec{R}_{\vec{n}\vec{m}})(\vec{d}_{\vec{m}} \cdot \vec{R}_{\vec{n}\vec{m}})}{|\vec{R}_{\vec{n}\vec{m}}|^5}, \quad (1.14)$$

gde je  $\vec{d}_{\vec{n}}$  dipolni moment molekula na mestu  $\vec{n}$ , a  $\vec{R}_{\vec{n}\vec{m}}$  rastojanje izmedju  $\vec{n}$ -tog i  $\vec{m}$ -tog molekula. Za slučaj kada su svi dipoli identični važi relacija:

$$|\vec{d}_{\vec{n}}| = d \quad \text{za sve } \vec{n}. \quad (1.15)$$

U daljem izračunavanju ograničićemo se na taj slučaj.

Ukupna potencijalna energija je data kao:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}. \quad (1.16)$$

U aproksimaciji najbližih suseda za prostu kubnu strukturu imamo:

$$|\vec{R}_{\vec{n}\vec{m}}| = a \quad (1.17)$$

Prema relaciji (1.16) ukupna potencijalna energija za jednu, dve i tri dimenzije ima oblik:

$$W = \frac{1}{2} \sum_n (W_{n,n+1} + W_{n,n-1}) \quad (1.18)$$

$$W = \frac{1}{2} \sum_{n_x n_y} \{ W_{n_x n_y, n_{x+1} n_y} + W_{n_x n_y, n_{x-1} n_y} + W_{n_x n_y, n_x n_{y+1}} + \\ + W_{n_x n_y, n_x n_{y-1}} \} \quad (1.19)$$

$$W = \frac{1}{2} \sum_{n_x n_y n_z} \{ W_{n_x n_y n_z, n_{x+1} n_y n_z} + W_{n_x n_y n_z, n_{x-1} n_y n_z} + W_{n_x n_y n_z, n_x n_{y+1} n_z} + \\ + W_{n_x n_y n_z, n_x n_{y-1} n_z} + W_{n_x n_y n_z, n_x n_y n_{z+1}} + W_{n_x n_y n_z, n_x n_y n_{z-1}} \} \quad (1.20)$$

### 3. Stabilizacija sistema

Uz pretpostavku da su u osnovnom stanju svi dipoli paralelni, biraćemo pravce tako da potencijalna energija ima minimalnu vrednost. Kao što je već rečeno radićemo u aproksimaciji najbližih suseda i uz pretpostavku da su svi dipoli isti.

Vektor dipolnog momenta je dat izrazom:

$$\vec{d} = d (\vec{i} \cos \varphi \sin \theta + \vec{j} \sin \varphi \sin \theta + \vec{k} \cos \theta). \quad (3.1)$$

a) Slučaj jedne dimenzije

$$\vec{R}_{n,n+1} = a \vec{i}; \quad \vec{R}_{n,n-1} = -a \vec{i}. \quad (3.2)$$

S obzirom na (1.14), (3.1) i (3.2) imamo:

$$W_{n_k, n_{k+1}} = \frac{d^2}{a^3} \left\{ 1 - 3 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta \right\} = W_{n_k, n_{k-1}}.$$

Ukupna potencijalna energija je prema (1.18) jednaka:

$$W = 2 \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_k} \left\{ 1 - 3 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta \right\},$$

ili, kako je  $\sum_{n_k} 1 = N$ , imamo:

$$W = \frac{Nd^2}{a^3} \left\{ 1 - 3 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta \right\} \quad (3.3)$$

Da bi potencijalna energija imala minimalnu vrednost uglovi  $\varphi$  i  $\theta$  moraju imati vrednosti 0 i  $\pi/2$ , respektivno.

Znači:

$$\min W = -2N \frac{d^2}{a^3}, \quad (N = N_k).$$

Prema tome, u osnovnom stanju svi dipoli moraju biti usmereni duž rešetke.

b) Slučaj dve dimenzije

$$\vec{R}_{01} = a \vec{i}; \quad \vec{R}_{02} = -a \vec{i}; \quad \vec{R}_{03} = a \vec{j}; \quad \vec{R}_{04} = -a \vec{j}, \quad (3.4)$$

gde su označke:

$$n_x n_y \equiv 0; n_{x+1} n_y \equiv 1; n_{x-1} n_y \equiv 2; n_x n_{y+1} \equiv 3; n_x n_{y-1} \equiv 4.$$

Prema relacijama (1.14), (3.1) i (3.4) imamo:

$$\begin{aligned} W_{01} &= W_{02} = \frac{d^2}{a^3} \left\{ 1 - 3 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta \right\} \\ W_{03} &= W_{04} = \frac{d^2}{a^3} \left\{ 1 - 3 \sin^2 \varphi \sin^2 \theta \right\}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

S obzirom na (1.19) i (3.5) za ukupnu potencijalnu energiju dobijamo:

$$W = \frac{Nd^2}{a^3} \left\{ 2 - 3 \sin^2 \theta \right\}, \quad (3.6)$$

gde je  $N = \sum_{n_x n_y} 1$ .

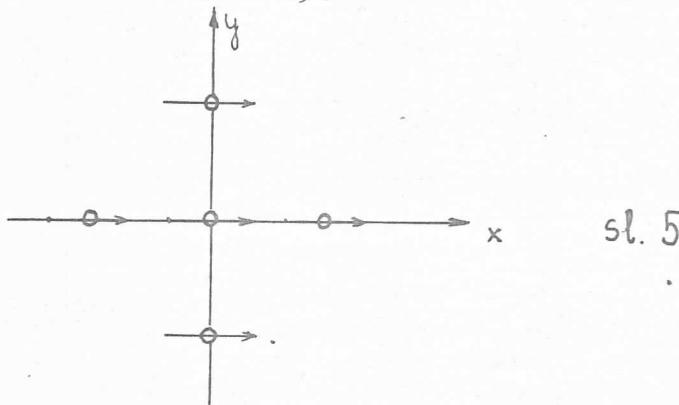
Da bi potencijalne energije bila minimalna mora biti  $\theta = \frac{\pi}{2}$  na osnovu izraza (3.6), tj.

$$\min W = -\frac{Nd^2}{a^3},$$

odnosno

$$\min W = -N_x N_y \frac{d^2}{a^3}.$$

Znači, svi dipoli leže u  $xOy$  ravni i usmereni su duž  $Ox$  ose kao što je prikazano na slici 5.



sl. 5

c) Slučaj tri dimenzije

$$\begin{aligned} \vec{R}_{01} &= a\vec{i}; \vec{R}_{02} = -a\vec{i}; \vec{R}_{03} = a\vec{j}; \vec{R}_{04} = -a\vec{j}; \\ \vec{R}_{05} &= a\vec{k}; \vec{R}_{06} = -a\vec{k}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

gde su označke:

$$n_x n_y n_z \equiv 0; n_{x+1} n_y n_z \equiv 1; n_{x-1} n_y n_z \equiv 2; n_x n_{y+1} n_z \equiv 3;$$

$$n_x n_{y-1} n_z \equiv 4; n_x n_y n_{z+1} \equiv 5; n_x n_y n_{z-1} \equiv 6.$$

Na isti način, kao u prethodna dva slučaja, imamo:

$$\left. \begin{aligned} W_{01} &= W_{02} = \frac{d^2}{a^3} \{ 1 - 3 \cos^2 \varphi \sin^2 \Theta \} \\ W_{03} &= W_{04} = \frac{d^2}{a^3} \{ 1 - 3 \sin^2 \varphi \sin^2 \Theta \} \\ W_{05} &= W_{06} = \frac{d^2}{a^3} \{ 1 - 3 \cos^2 \Theta \} \end{aligned} \right\} \quad (3.8)$$

S obzirom na (1.20) i (3.8) imamo:

$$W = \frac{d^2}{a^3} \sum_{n_x n_y n_z} \{ 3-3 \}$$

$$\min W = 0$$

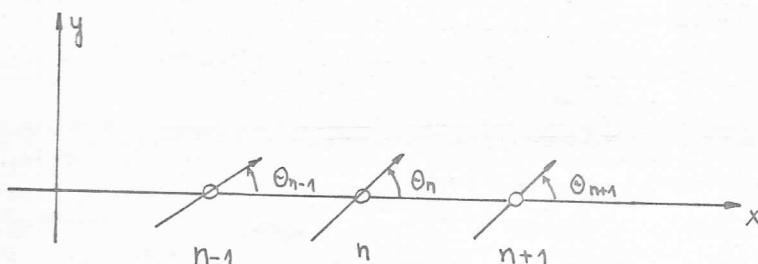
Znači, za ovaj slučaj, nema privilegovanih pravaca tj. moguće su sve orijentacije dipola.

#### § 4. Lagranževe jednačine za sistem dipola

Lagranževe jednačine predstavljaju jednačine kretanja, a da bismo ih našli moramo, prvo, potražiti operator potencijalne energije za sistem dipola. Posmatraćemo opet slučaj jedne, dve i tri dimenzije posebno.

##### a) S l u č a j      j e d n e      d i m e n z i j e

Pretpostavimo sada da svi dipoli nisu usmereni u pravcu rešetke već da su u prostoru različito orijentisani (sl. 6).



sl. 6

Zbog učinjene pretpostavke vektor dipolnog momenta će biti dat izrazom:

$$\left. \begin{aligned} \vec{d}_{n_x} &= d \{ \vec{i} \cos d_{n_x} \cos \beta_{n_x} + \vec{j} \sin d_{n_x} \cos \beta_{n_x} + \vec{k} \sin \beta_{n_x} \} \\ \vec{d}_{n_{x+1}} &= d \{ \vec{i} \cos d_{n_{x+1}} \cos \beta_{n_{x+1}} + \vec{j} \sin d_{n_{x+1}} \cos \beta_{n_{x+1}} + \vec{k} \sin \beta_{n_{x+1}} \} \\ \vec{d}_{n_{x-1}} &= d \{ \vec{i} \cos d_{n_{x-1}} \cos \beta_{n_{x-1}} + \vec{j} \sin d_{n_{x-1}} \cos \beta_{n_{x-1}} + \vec{k} \sin \beta_{n_{x-1}} \}. \end{aligned} \right\} \quad (4.1)$$

Prema (1.14), (1.18) i (4.1) sledi da je operator potencijalne energije oblika:

$$W = \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_x} \left\{ \sin d_{n_x} \cos \beta_{n_x} [\sin d_{n_{x+1}} \cos \beta_{n_{x+1}} + \sin d_{n_{x-1}} \cos \beta_{n_{x-1}}] + \right. \\ \left. + \sin \beta_{n_x} [\sin \beta_{n_{x+1}} + \sin \beta_{n_{x-1}}] - 2 \cos d_{n_x} \cos \beta_{n_x} [\cos d_{n_{x+1}} \cos \beta_{n_{x+1}} + \right. \\ \left. + \cos d_{n_{x-1}} \cos \beta_{n_{x-1}}] \right\},$$

$$\sin d_{n_x} \approx \alpha_{n_x} \quad (4.2)$$

ili, u harmonijskoj aproksimaciji

$$\cos d_{n_x} \approx 1 - \frac{\epsilon}{2} \alpha_{n_x}^2$$

$$W = -\frac{2d^2}{a^3} N + \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_x} \left\{ 4d_{n_x}^2 + d_{n_x} [d_{n_{x+1}} + d_{n_{x-1}}] + \right. \\ \left. + 4\beta_{n_x}^2 + \beta_{n_x} [\beta_{n_{x+1}} + \beta_{n_{x-1}}] \right\}. \quad (4.3)$$

Ako je molekul simetrična figura homogene gustine  $\rho$  onda su proizvodi inercije jednaki nuli, pa se operator kinetičke energije, koji je dat relacijom (1.11) svodi na oblik:

~~$$\hat{T} = \frac{1}{2} \sum_{n_x} \{ J_x \dot{\gamma}_{n_x}^2 + J_y \dot{\beta}_{n_x}^2 + J_z \dot{\alpha}_{n_x}^2 \}. \quad (4.4)$$~~

Lagranževa funkcija, koja je definisana kao:

~~$$L = T - W,$$~~

s obzirom na relacije (4.3) i (4.4) ima oblik:

~~$$L = \frac{1}{2} \sum_{n_x} \{ J_x \dot{\alpha}_{n_x}^2 + J_y \dot{\beta}_{n_x}^2 + J_z \dot{\gamma}_{n_x}^2 \} + \frac{2d^2 N}{a^3} - \\ - \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_x} \{ 4d_{n_x}^2 + d_{n_x} [d_{n_{x+1}} + d_{n_{x-1}}] + 4\beta_{n_x}^2 + \beta_{n_x} [\beta_{n_{x+1}} + \beta_{n_{x-1}}] \}. \quad (4.5)$$~~

Znajući Lagranževu funkciju možemo napisati jednačine kretanja

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad (4.6)$$

gde su generalisane brzine i generalisane koordinate respektivno:

$$\dot{q}_i = \dot{\alpha}_{nx}, \dot{\beta}_{nx}, \dot{\gamma}_{nx},$$

$$q_i = \alpha_{nx}, \beta_{nx}, \gamma_{nx}.$$

Na osnovu (4.5) i (4.6) dobijamo sledeći sistem jednačina kretanja:

$$J_z \ddot{\alpha}_{mx} + \frac{d^2}{a^3} \left\{ 4\alpha_{mx} + \alpha_{m_{x+1}} + \alpha_{m_{x-1}} \right\} = 0 \quad (4.7)$$

$$J_y \ddot{\beta}_{mx} + \frac{d^2}{a^3} \left\{ 4\beta_{mx} + \beta_{m_{x+1}} + \beta_{m_{x-1}} \right\} = 0 \quad (4.8)$$

$$J_x \ddot{\gamma}_{mx} = 0. \quad (4.9)$$

Rešenja ovih jednačina tražimo u obliku periodičnih funkcija:

$$\begin{aligned} \alpha_{mx} &= \alpha_0 e^{ik_m a - i\omega(k)t} \\ \beta_{mx} &= \beta_0 e^{ik_m a - i\omega(k)t} \\ \gamma_{mx} &= \gamma_0 e^{ik_m a - i\omega(k)t} \end{aligned} \quad (4.10)$$

S obzirom na relaciju (4.10) iz jednačina (4.7), (4.8) i (4.9) dobijamo sledeći sistem jednačina:

$$-J_z \omega_a^2 + \frac{d^2}{a^3} \left\{ 4 + e^{ik_m a} + e^{-ik_m a} \right\} = 0 \quad (4.11)$$

$$-J_y \omega_a^2 + \frac{d^2}{a^3} \left\{ 4 + e^{ik_m a} + e^{-ik_m a} \right\} = 0 \quad (4.12)$$

$$-J_x \omega_a^2 = 0. \quad (4.13)$$

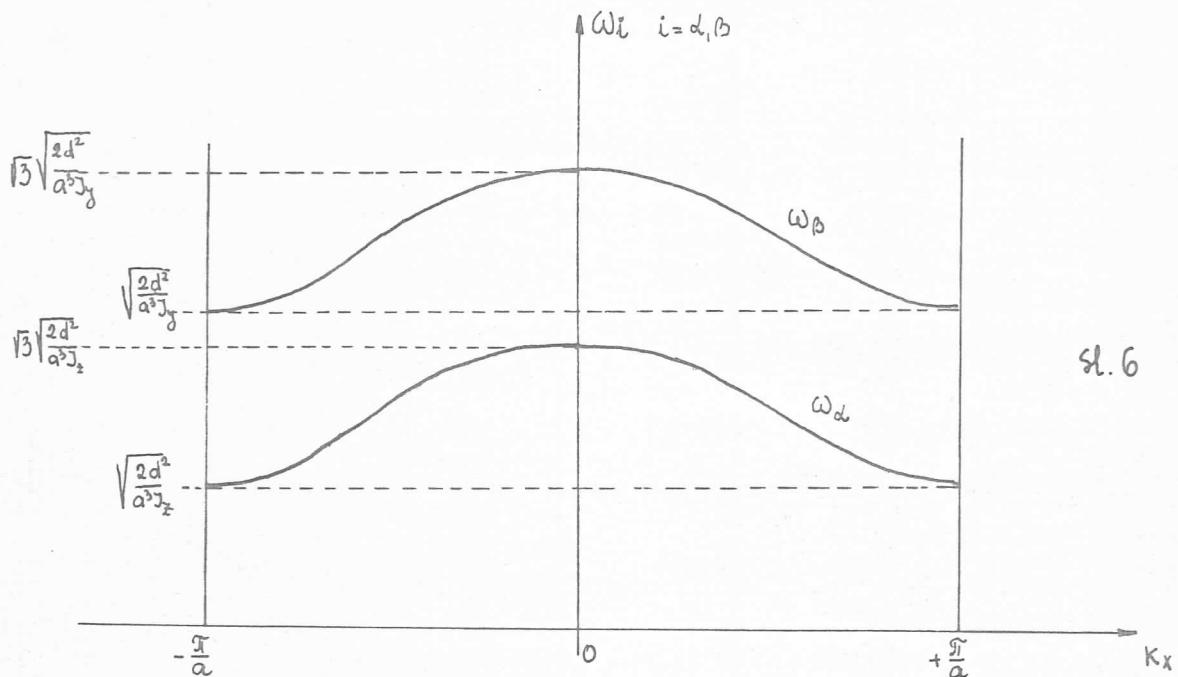
Rešenja jednačina (4.11), (4.12) i (4.13) su zakoni disperzije za rotacione fonone:

$$\omega_\alpha = \sqrt{\frac{2d^2}{\alpha^3 J_z}} \sqrt{(2 + \cos k_x a)}, \quad (4.14)$$

$$\omega_\beta = \sqrt{\frac{2d^2}{\alpha^3 J_y}} \sqrt{(2 + \cos k_x a)}, \quad (4.15)$$

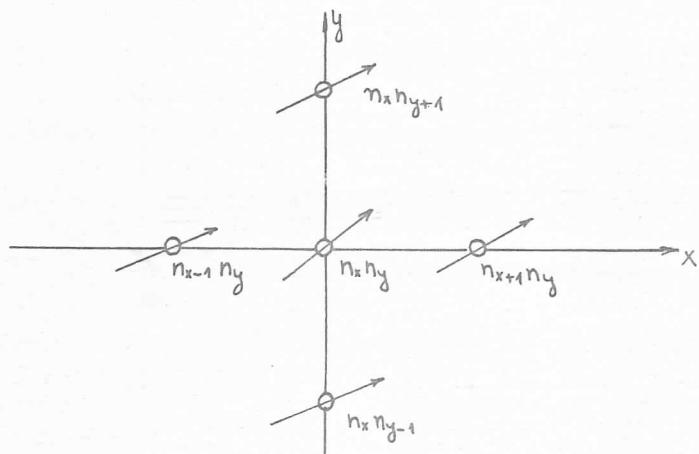
$$\omega_\gamma = 0. \quad (4.16)$$

Na osnovu (4.14) i (4.15) možemo zaključiti da je zakon disperzije definisan u I Briluenovoj zoni. (sl.6).



b) Slučaj dve dimenzije

Pretpostavimo sada da su dipoli proizvoljno orijentisani u xOy ravni. (sl.7).



sl. 7

Analogno jednodimenzionalnom slučaju imamo:

$$\begin{aligned}\vec{d}_{n_x n_y} &= d \{ \vec{i} \cos d_{n_x n_y} \cos \beta_{n_x n_y} + \vec{j} \sin d_{n_x n_y} \cos \beta_{n_x n_y} + \vec{k} \sin \beta_{n_x n_y} \} \\ \vec{d}_{n_{x+1} n_y} &= d \{ \vec{i} \cos d_{n_{x+1} n_y} \cos \beta_{n_{x+1} n_y} + \vec{j} \sin d_{n_{x+1} n_y} \cos \beta_{n_{x+1} n_y} + \vec{k} \sin \beta_{n_{x+1} n_y} \} \\ \vec{d}_{n_x n_{y+1}} &= d \{ \vec{i} \cos d_{n_x n_{y+1}} \cos \beta_{n_x n_{y+1}} + \vec{j} \sin d_{n_x n_{y+1}} \cos \beta_{n_x n_{y+1}} + \vec{k} \sin \beta_{n_x n_{y+1}} \} \\ \vec{d}_{n_{x-1} n_y} &= d \{ \vec{i} \cos d_{n_{x-1} n_y} \cos \beta_{n_{x-1} n_y} + \vec{j} \sin d_{n_{x-1} n_y} \cos \beta_{n_{x-1} n_y} + \vec{k} \sin \beta_{n_{x-1} n_y} \} \\ \vec{d}_{n_x n_{y-1}} &= d \{ \vec{i} \cos d_{n_x n_{y-1}} \cos \beta_{n_x n_{y-1}} + \vec{j} \sin d_{n_x n_{y-1}} \cos \beta_{n_x n_{y-1}} + \vec{k} \sin \beta_{n_x n_{y-1}} \}.\end{aligned}$$

(4.17)

Na osnovu relacija (1.14), (1.19) i (4.17) i ranije uvedenih oznaka za dvodimenzionalni slučaj, operator potencijalne energije postaje:

$$\begin{aligned}W = \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_x n_y} & \left\{ \sin \alpha_0 \cos \beta_0 [\sin \alpha_1 \cos \beta_1 + \sin \alpha_2 \cos \beta_2] - \right. \\ & - 2 \cos \alpha_0 \cos \beta_0 [\cos \alpha_1 \cos \beta_1 + \cos \alpha_2 \cos \beta_2] + \\ & + \sin \beta_0 [\sin \beta_1 + \sin \beta_2] + \cos \alpha_0 \cos \beta_0 [\cos \alpha_3 \cos \beta_3 + \\ & + \cos \alpha_4 \cos \beta_4] - 2 \sin \alpha_0 \cos \beta_0 [\sin \alpha_3 \cos \beta_3 + \sin \alpha_4 \cos \beta_4] + \\ & \left. + \sin \beta_0 [\sin \beta_3 + \sin \beta_4] \right\}. \quad (4.18)\end{aligned}$$

Vraćajući se na stare oznake, operator potencijalne energije, za dvodimenzionalni slučaj, u kvadratnoj aproksimaciji po uglovima, postaje:

$$\begin{aligned}W = -\frac{d^2}{a^3} N + \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_x n_y} & \left\{ d_{n_x n_y} [d_{n_{x+1} n_y} + d_{n_{x-1} n_y}] + \beta_{n_x n_y} [\beta_{n_{x+1} n_y} + \beta_{n_{x-1} n_y}] - \right. \\ & - 2 d_{n_x n_y} [d_{n_x n_{y+1}} + d_{n_x n_{y-1}}] + 2 d_{n_x n_y}^2 + 2 \beta_{n_x n_y}^2 + \\ & \left. + \beta_{n_x n_y} [\beta_{n_x n_{y+1}} + \beta_{n_x n_{y-1}}] \right\}. \quad (4.19)\end{aligned}$$

Na osnovu (1.12) i (4.19) Lagranževa funkcija postaje:

$$\begin{aligned}
 L = & \frac{1}{2} \sum_{n_x n_y} \left\{ J_z \ddot{d}_{n_x n_y}^2 + J_y \ddot{\beta}_{n_x n_y}^2 + J_x \ddot{\gamma}_{n_x n_y}^2 \right\} + N \frac{d^2}{a^3} - \\
 & - \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_x n_y} \left\{ d_{n_x n_y} [d_{n_x+1 n_y} + d_{n_x-1 n_y}] + \beta_{n_x n_y} [\beta_{n_x n_y+1} + \beta_{n_x n_y-1}] + \right. \\
 & + \beta_{n_x n_y} [\beta_{n_x+1 n_y} + \beta_{n_x-1 n_y}] - 2 d_{n_x n_y} [d_{n_x n_y+1} + d_{n_x n_y-1}] + \\
 & \left. + 2 d_{n_x n_y}^2 + 2 \beta_{n_x n_y}^2 \right\}. \tag{4.20}
 \end{aligned}$$

Jednačine kretanja dobijaju oblik:

$$J_z \ddot{d}_{m_x m_y} + \frac{d^2}{a^3} \left\{ 2 d_{m_x m_y} + d_{m_x+1 m_y} + d_{m_x-1 m_y} - 2 d_{m_x m_y+1} - 2 d_{m_x m_y-1} \right\} = 0 \tag{4.21}$$

$$J_y \ddot{\beta}_{m_x m_y} + \frac{d^2}{a^3} \left\{ 2 \beta_{m_x m_y} + \beta_{m_x+1 m_y} + \beta_{m_x-1 m_y} + \beta_{m_x m_y+1} + \beta_{m_x m_y-1} \right\} = 0 \tag{4.22}$$

$$J_x \ddot{\gamma}_{m_x m_y} = 0 \tag{4.23}$$

Rešenja jednačina (4.21), (4.22) i (4.23) tražimo u obliku periodičnih funkcija:

$$\begin{aligned}
 d_{m_x m_y} &= d_0 e^{i k_x m_x a + i k_y m_y a - i \omega t} \\
 \beta_{m_x m_y} &= \beta_0 e^{i k_x m_x a + i k_y m_y a - i \omega t} \\
 \gamma_{m_x m_y} &= \gamma_0 e^{i k_x m_x a + i k_y m_y a - i \omega t} \tag{4.24}
 \end{aligned}$$

S obzirom na relaciju (4.24) i jednačine (4.21), (4.22) i (4.23) dobijamo sledeće jednačine:

$$-\bar{J}_z \omega_a^2 + \frac{d^2}{a^3} \left\{ 2 + e^{iak_x} + e^{-iak_x} - 2[e^{iaky} + e^{-iaky}] \right\} = 0 \quad (4.25)$$

$$-\bar{J}_y \omega_B^2 + \frac{d^2}{a^3} \left\{ 2 + e^{iak_x} + e^{-iak_x} + e^{ikya} + e^{-ikya} \right\} = 0 \quad (4.26)$$

$$-\bar{J}_x \omega_y^2 = 0. \quad (4.27)$$

Rešenje jednačine (4.26) daje zakon disperzije za rotacione fonone u obliku:

$$\omega_B = \sqrt{\frac{2d^2}{a^3 J_y}} \sqrt{1 + \cos k_x a + \cos k_y a}, \quad (4.28)$$

gde je:

$$k_x = k \cos \varphi \quad i \quad k_y = k \sin \varphi,$$

a  $\varphi$  je ugao koji karakteriše pravac prostiranja rotacionih talasa kroz kristal.

U oblasti malih talasnih vektora relacija (4.28) prelazi u:

$$\omega_B = \sqrt{\frac{2d^2}{a^3 J_y}} \sqrt{3 - \frac{a^2 k^2}{2}}. \quad (4.29)$$

Jednačina (4.25) daje zakon disperzije u obliku:

$$\omega_a = \sqrt{\frac{2d^2}{a^3 J_z}} \sqrt{1 + \cos ak_x - 2 \cos ak_y}, \quad (4.30)$$

koji se u slučaju malih talasnih vektora svodi na:

$$\omega_a = C(\varphi) \cdot k, \quad (4.31)$$

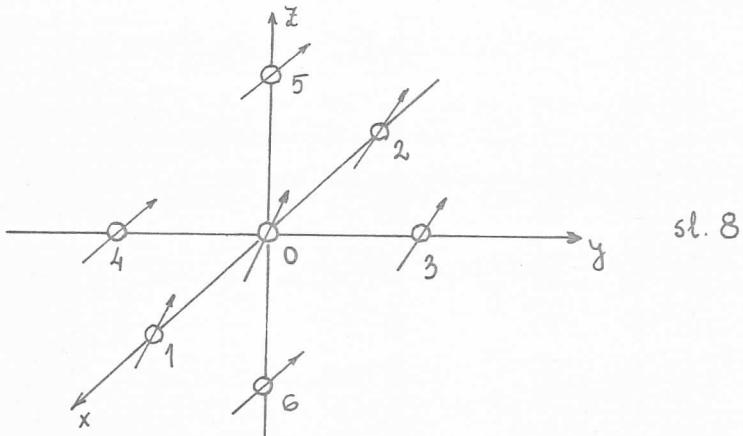
gde je:

$$C(\varphi) = d \sqrt{\frac{3 \sin^2 \varphi - 1}{a J_z}}. \quad (4.32)$$

$$\omega_y = 0$$

c) Slučaj tri dimenzije

Pretpostavimo, kao i u prethodnom slučaju, da su dipoli произvoljno orijentisani u prostoru (sl. 8).



sl. 8

Za ovaj slučaj operator potencijalne energije ima oblik:

$$\begin{aligned}
 W = & \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_x n_y n_z} \left\{ \sin \alpha_0 \cos \alpha_0 [\sin \alpha_1 \cos \beta_1 + \sin \alpha_2 \cos \beta_2] - \right. \\
 & - 2 \cos \alpha_0 \cos \beta_0 [\cos \alpha_1 \cos \beta_1 + \cos \alpha_2 \cos \beta_2] + \\
 & + \sin \beta_0 [\sin \beta_1 + \sin \beta_2] + \cos \alpha_0 \cos \beta_0 [\cos \alpha_3 \cos \beta_3 + \cos \alpha_4 \cos \beta_4] - \\
 & - 2 \sin \alpha_0 \cos \beta_0 [\sin \alpha_3 \cos \beta_3 + \sin \alpha_4 \cos \beta_4] + \sin \beta_0 [\sin \beta_3 + \sin \beta_4] + \\
 & + \cos \alpha_0 \cos \beta_0 [\cos \alpha_5 \cos \beta_5 + \cos \alpha_6 \cos \beta_6] + \\
 & \left. + \sin \alpha_0 \cos \beta_0 [\sin \alpha_5 \cos \beta_5 + \sin \alpha_6 \cos \beta_6] - 2 \sin \beta_0 [\sin \beta_5 + \sin \beta_6] \right\}. \\
 & \quad (4.33)
 \end{aligned}$$

U harmonijskoj aproksimaciji operator potencijalne energije je oblika:

$$\begin{aligned}
 W = & \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_x n_y n_z} \left\{ d_{n_x n_y n_z} [d_{n_x+1 n_y n_z} + d_{n_x-1 n_y n_z}] + \beta_{n_x n_y n_z} [\beta_{n_x+1 n_y n_z} + \beta_{n_x-1 n_y n_z}] - \right. \\
 & - 2 d_{n_x n_y n_z} [d_{n_x n_y+1 n_z} + d_{n_x n_y-1 n_z}] + \beta_{n_x n_y n_z} [\beta_{n_x n_y+1 n_z} + \beta_{n_x n_y-1 n_z}] + \\
 & \left. + d_{n_x n_y n_z} [d_{n_x n_y n_z+1} + d_{n_x n_y n_z-1}] - 2 \beta_{n_x n_y n_z} [\beta_{n_x n_y n_z+1} + \beta_{n_x n_y n_z-1}] \right\}. \\
 & \quad (4.34)
 \end{aligned}$$

Prema (1.13) i (4.34) Lagranževa funkcija postaje:

$$\begin{aligned} L = & \frac{1}{2} \sum_{n_x n_y n_z} \left\{ J_z \ddot{\alpha}_{n_x n_y n_z}^2 + J_y \ddot{\beta}_{n_x n_y n_z}^2 + J_x \ddot{\gamma}_{n_x n_y n_z}^2 \right\} - \\ & - \frac{d^2}{2a^3} \sum_{n_x n_y n_z} \left\{ d_{n_x n_y n_z} [d_{n_{x+1} n_y n_z} + d_{n_{x-1} n_y n_z}] + \beta_{n_x n_y n_z} [\beta_{n_{x+1} n_y n_z} + \beta_{n_{x-1} n_y n_z}] - \right. \\ & - 2 d_{n_x n_y n_z} [d_{n_x n_{y+1} n_z} + d_{n_x n_{y-1} n_z}] + \beta_{n_x n_y n_z} [\beta_{n_x n_{y+1} n_z} + \beta_{n_x n_{y-1} n_z}] + \\ & \left. + d_{n_x n_y n_z} [d_{n_x n_{y+1} n_{z+1}} + d_{n_x n_{y+1} n_{z-1}}] - 2 \beta_{n_x n_y n_z} [\beta_{n_x n_{y+1} n_{z+1}} + \beta_{n_x n_{y+1} n_{z-1}}] \right\}. \end{aligned}$$

(4.35)

Ako za generalisane koordinate i generalisane brzine uzmemos:

$$q_i = \dot{\alpha}_{n_x n_y n_z}; \beta_{n_x n_y n_z}; \gamma_{n_x n_y n_z},$$

$$\dot{q}_i = \ddot{\alpha}_{n_x n_y n_z}; \ddot{\beta}_{n_x n_y n_z}; \ddot{\gamma}_{n_x n_y n_z},$$

Lagranževe jednačine postaju:

$$\begin{aligned} J_z \ddot{\alpha}_{m_x m_y m_z} + \frac{d^2}{2a^3} \left\{ 2 d_{m_{x+1} m_y m_z} + 2 d_{m_{x-1} m_y m_z} - 4 d_{m_x m_{y+1} m_z} - \right. \\ \left. - 4 d_{m_x m_{y-1} m_z} + 2 d_{m_x m_y m_{z+1}} + 2 d_{m_x m_y m_{z-1}} \right\} = 0 \quad (4.36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_y \ddot{\beta}_{m_x m_y m_z} + \frac{d^2}{2a^3} \left\{ 2 \beta_{m_{x+1} m_y m_z} + 2 \beta_{m_{x-1} m_y m_z} + 2 \beta_{m_x m_{y+1} m_z} + \right. \\ \left. + 2 \beta_{m_x m_{y-1} m_z} - 4 \beta_{m_x m_y m_{z+1}} - 4 \beta_{m_x m_y m_{z-1}} \right\} = 0 \quad (4.37) \end{aligned}$$

$$J_x \ddot{\gamma}_{m_x m_y m_z} = 0. \quad (4.38)$$

Rešenje jednačina (4.36), (4.37) i (4.38) tražimo, respektivno, u obliku:

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_{m_x m_y m_z} &= \dot{\alpha}_0 e^{i \omega_m t} \\ \dot{\beta}_{m_x m_y m_z} &= \dot{\beta}_0 e^{i \omega_m t} \\ \dot{\gamma}_{m_x m_y m_z} &= \dot{\gamma}_0 e^{i \omega_m t} \end{aligned} \quad (4.39)$$

Uvrštavanjem (4.39) u Lagranževe jednačine dobijamo:

$$-\mathbb{J}_z \omega_\alpha^2 + \frac{d^2}{a^3} \left\{ e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} - 2[e^{i k_y a} + e^{-i k_y a}] + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a} \right\} = 0 \quad (4.40)$$

$$-\mathbb{J}_y \omega_\beta^2 + \frac{d^2}{a^3} \left\{ e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{i k_y a} + e^{-i k_y a} - 2[e^{ik_z a} + e^{-ik_z a}] \right\} = 0 \quad (4.41)$$

$$-\mathbb{J}_x \omega_\gamma^2 = 0 \quad (4.42)$$

Rešavanjem kvadratne jednačine (4.40) dobijamo disperzionalni zakon u obliku:

$$\omega_d = \sqrt{\frac{2d^2}{a^3 \mathbb{J}_z}} \sqrt{\cos k_x a - 2 \cos k_y a + \cos k_z a}, \quad (4.43)$$

gde su komponente talasnog vektora

$$k_x = K \cos \varphi \sin \theta, \quad k_y = K \sin \varphi \sin \theta, \quad k_z = K \cos \theta,$$

a uglovi  $\varphi, \theta$  karakterišu pravce prostiranja rotacionih talasa kroz kristal.

U oblasti malih talasnih vektora disperzionalni zakon (4.43) se svodi na izraz:

$$\omega_d = \sqrt{\frac{d^2 k^2}{a \mathbb{J}_z}} \sqrt{3 \sin^2 \varphi \sin^2 \theta - 1},$$

ili

$$\omega_d = C_\alpha(\theta, \varphi) \cdot K, \quad (4.44)$$

$$C_\alpha(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{d^2}{a \mathbb{J}_z}} \sqrt{3 \sin^2 \varphi \sin^2 \theta - 1}. \quad (4.45)$$

Takodje, rešavanjem kvadratne jednačine (4.41) dobijamo disperzionalnu relaciju:

$$\omega_\beta = \sqrt{\frac{2d^2}{a^3 \mathbb{J}_y}} \sqrt{\cos k_x a + \cos k_y a - 2 \cos k_z a} \quad (4.46)$$

U oblasti malih talasnih vektora, disperziona relacija (4.46) se svodi na izraz:

$$\omega_\beta = C_\beta(\theta) \cdot k \quad (4.47)$$

$$C_\beta(\theta) = \sqrt{\frac{d^2}{a^3 J_y}} \sqrt{3 \cos^2 \theta - 1} \quad (4.48)$$

$$\omega_\varphi = 0.$$

## § 5. Diskusija zakona disperzije

Za male talasne vektore, relacije (4.14) i (4.15) prelaze, respektivno, u:

$$\omega_d = \sqrt{\frac{2d^2}{a^3 J_z}} \cdot \sqrt{3}$$

$$\omega_\beta = \sqrt{\frac{2d^2}{a^3 J_y}} \cdot \sqrt{3},$$

što znači da frekvencije ne zavise od talasnog vektora i da pobudjivanje ovakvih fonona zahteva neki minimalni prag energije eksitatora,

$$E_{\min} = \hbar \omega_i ; \quad (i = d, \beta).$$

Za dvodimenzionalni slučaj relacija (4.28) predstavlja zakon disperzije rotacionog zvuka, dok se relacija (4.30) svodi, u slučaju malih talasnih vektora, na izraz:

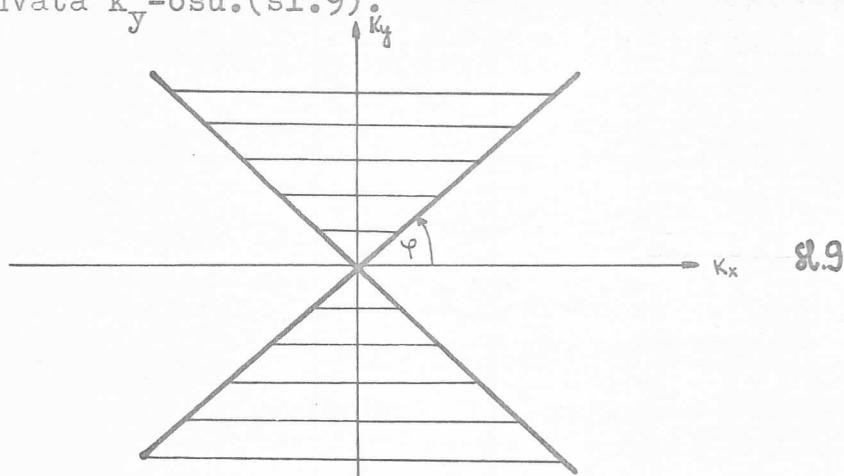
$$\omega_d = C_d(\psi) \cdot k ,$$

$$C_d(\psi) = d \sqrt{\frac{3 \sin^2 \psi - 1}{a^3 J_z}} ,$$

gde je  $C_d(\psi)$  brzina prostiranja angуларног звука. Iz date relacije sledi da se rotacioni zvuk može prostirati samo u oblasti koja je definisana uglom  $\psi$  i to za  $|\psi| > 39^\circ 21'$ , što se, u dvodimenzionalnom k-prostoru, može predstaviti oblašću izmedju dveju pravih, čije su jednačine:

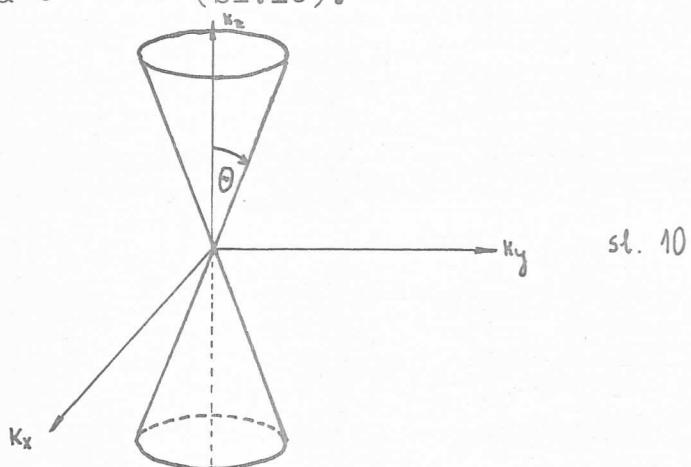
$$k_y = \tan \psi \cdot k_x ; \quad k_y = \tan(\pi - \psi) \cdot k_x ,$$

a koja obuhvata  $k_y$ -osu. (sl.9).



sl.9

Analiza izraza za  $C_{\alpha}(\theta)$  (4.48) pokazuje da se rotacioni zvuk može prostirati samo u konusu oko  $k_z$ -ose čija je veličina poluotvora  $\Theta = 54^\circ 30'$  (sl.10).



sl. 10

Mada izraz za  $C_{\alpha}(\theta, \varphi)$  zavisi i od  $\Theta$  i od  $\varphi$ , može se pokazati da se i ova grana zvučnih talasa može prostirati u konusu čiji je poluotvor  $54^\circ 30'$  a osa mu je uperena duž  $k_z$ -ose. Van ovih pravaca prostiranja, energija rotacionog pobudjenja postaje imaginarna i ovi talasi se prigušuju.

## § 6. Lokalizovana stanja

Pokazaćemo sada, da za dvo- i tro-dimenzionalni slučaj, sistem Lagranževih jednačina kratanja može biti zadovoljen i aperiodičnim rešenjima.

a) S l u č a j   d v e   d i m e n z i j e

Rešenje Lagranževih jednačina (4.21) tražićemo u obliku:

$$\frac{dm_x m_y}{m_x m_y} = \alpha_0 e^{i \omega t} \quad (6.1)$$

Tada se dobija:

$$-\mathbb{J}_z \omega_d^2 + \frac{2d^2}{\alpha^3} \left\{ 1 + \cos \text{hyp} \alpha - 2 \cos \alpha k_y \right\} = 0.$$

U slučaju malih talasnih vektora,  $k_y \alpha, \alpha \ll 1$ , možemo uzeti:

$$\cos \alpha k_y = 1 - \frac{1}{2} \alpha^2 k_y^2$$

$$\cos \text{hyp} \alpha = 1 + \frac{1}{2} \alpha^2 \alpha^2$$

$$\cos \text{hyp} \alpha = \frac{\bar{e}^x + \bar{e}^y}{2},$$

pa je:

$$\omega_d = d \sqrt{\frac{\alpha^2}{\mathbb{J}_z}} \sqrt{\frac{\alpha^2}{2} + k_y^2}. \quad (6.2)$$

Dobijena frekvencija važi za rešenja tipa:

$$d_{m_x m_y} = d_0 e^{-i\omega t + i\alpha k_y m_y} \begin{cases} e^{-\alpha m_x} & m_x > 0 \\ e^{\alpha m_x} & m_x < 0 \end{cases} \quad (6.3)$$

$$\alpha > 0$$

$$(6.4)$$

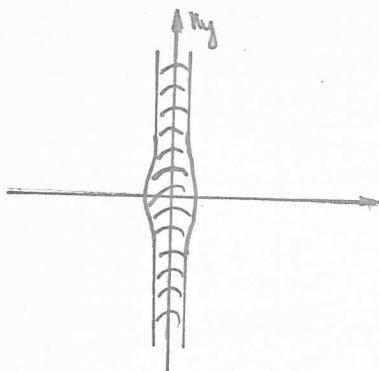
Kao što smo videli u § 4, za periodična rešenja tipa

$$d_0 e^{i\alpha m_x + i\alpha k_y m_y - i\omega t}$$

rotacioni talasi se prigušuju za sve uglove koji ne leže u projekciji konusa, otvora  $101^\circ 18'$ , u  $k_x$ - $k_y$  ravni. Sistem Lagranževih jednačina za ugao  $\alpha$  može da bude zadovoljen i aperiodičnim rešenjem tipa (6.3) i (6.4), pri čemu energija talasa, za male vrednosti  $k_i \alpha$ , ima oblik:

$$\omega \sim \sqrt{\frac{1}{2} \alpha^2 + \kappa^2 \sin^2 \alpha}.$$

Ovde vidimo da je za lokalizovana stanja tipa (6.4) energija definisana za sva vrednosti  $k_i \alpha$ . Ovi talasi periodično se prostiru duž  $k_y$ -ose a duž  $k_x$ -ose opadaju sa porastom  $m_x$ . Njihova je intenzivnost najveća za  $m_x = 0$ , a to znači duž  $k_y$ -ose (sl. 11)



sl. 11

b) Slučaj tri dimenzije

Rešenje Lagranževih jednačina (4.36) možemo tražiti i u obliku:

$$d_{m_x m_y m_z} = d_0 e^{i \omega t + i \alpha k_y - \alpha' a m_z - \alpha a m_x - i \cot \beta} \quad (6.5)$$

što daje sledeću relaciju:

$$-J_z \omega_d^2 + \frac{d^2}{a^3} \left\{ 2 \cosh \sqrt{\alpha a} - 4 \cos \alpha k_y + 2 \cosh \sqrt{\alpha' a} \right\} = 0, \quad (6.6)$$

tj:

$$\omega_d = \sqrt{\frac{2d^2}{a^3 J_z}} \sqrt{\cosh \sqrt{\alpha a} - 2 \cos \alpha k_y + \cosh \sqrt{\alpha' a}} \quad (6.7)$$

Za male  $\alpha, \alpha', k_y$  jednačina (6.6) se svodi na:

$$\omega_d = \sqrt{\frac{2d^2}{a J_z}} \sqrt{\frac{1}{2} \alpha^2 + k_y^2 + \frac{1}{2} \alpha'^2}. \quad (6.8)$$

Frekvencija (6.8) daje rešenje oblika:

$$d_{m_x m_y m_z} = d_0 e^{-i \omega t + i \alpha k_y} \begin{cases} e^{-\alpha a m_x - \alpha' a m_z} & m_x, m_z > 0 \\ e^{\alpha a m_x + \alpha' a m_z} & m_x, m_z < 0 \end{cases} \quad (6.9)$$

$$d_{m_x m_y m_z} = d_0 e^{-i \omega t + i \alpha k_y} \quad (6.10)$$

Rešenje jednačine za  $\beta$  takođe možemo izraziti aperiodičnom funkcijom:

$$\beta_{m_x m_y m_z} = \beta_0 e^{i \alpha a m_z - \alpha a m_x - \alpha'' a m_y - i \omega t} \quad (6.11)$$

Posle zamene u (4.37) dobijamo:

$$-J_y \omega_p^2 + \frac{d^2}{a^3} \left\{ \cosh \sqrt{\alpha a} + \cosh \sqrt{\alpha' a} - 2 \cos \alpha k_z a \right\} = 0.$$

Posle sredjivanja:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{2d^2}{a^3\gamma_y}} \sqrt{\cosh \gamma_y a + \cosh \gamma_z a - 2 \cos k_z a} , \quad (6.12)$$

dok za male  $k_z, \lambda; \lambda''$  dobijamo:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{2d^2}{a\gamma_y}} \sqrt{\frac{1}{2}\lambda^2 + \frac{1}{2}\lambda''^2 + k_z^2} , \quad (6.13)$$

koje odgovara rešenju oblika:

$$\beta m_x m_y m_z = \beta_0 e^{-i\omega t + i\alpha k_z m_z} \left\{ \begin{array}{ll} e^{-\lambda a m_x - \lambda'' a m_y} & m_x, m_y > 0 \\ e^{\lambda a m_x + \lambda'' a m_y} & m_x, m_y < 0 \end{array} \right. \quad (6.14)$$

$$\lambda, \lambda'' > 0 .$$

Znači, sistem Lagranževih jednačina za uglove  $\alpha, \beta$  može biti zadovoljen i aperiodičnim rešenjima (6.8), (6.9), (6.13) i (6.14). U tom slučaju energije talasa, za male vrednosti  $k, \lambda, \lambda' i \lambda''$ , imaju oblik:

$$\left. \begin{array}{l} \omega_a \sim \sqrt{\frac{1}{2}\lambda^2 + k_y^2 + \frac{1}{2}\lambda''^2} \\ \omega_p \sim \sqrt{\frac{1}{2}\lambda^2 + k_z^2 + \frac{1}{2}\lambda''^2} \end{array} \right\} \quad (6.16)$$

Odavde sledi da su za lokalizovana stanja oblika (6.10) i (6.15) energije definisane za sve vrednosti  $k, \lambda, \lambda' i \lambda''$ . Ovi talasi su lokalizovani oko  $k_y$  odnosno  $k_z$  ose.

## ZAKLJUČAK

U radu su ispitivane kolektivne mehaničke oscilacije kristala rotacionog tipa. Razmatrani su molekularni kristali sa dipol-dipolnim interakcijama proste kubne strukture i u sve tri dimenzije. Ispostavilo se da, za kristal kao kolektiv molekula, značaj imaju promene samo dva od tri Ojlerova ugla. Treći ugao, koji karakteriše rotaciju molekula oko sopstvene ose, koja je istovremeno i osa dipola, ne ulazi u račun prilikom ispitivanja kolektivnih osobina kristala. Ovo je potpuno razumljivo jer potencijalna energija celog sistema ne zavisi od ovog trećeg ugla.

U jednodimenzionalnoj strukturi pokazuje se da postoje dve grane rotacionih fonona koje su definisane za sve vrednosti talasnog vektora unutar prve Briluenove zone i pri  $k \rightarrow 0$  imaju gеп koji zavisi od geometrije molekula i rasporeda mase u molekulu, tj., od momenta inercije molekula.

U dvodimenzionalnoj strukturi jedna grana angularnih fonona ima zakon disperzije sa gепом. Druga grana ima akustički zakon disperzije za male talasne vektore  $\omega = c \cdot k$ , pri čemu, brzina rotacionog zvuka с zavisi od pravca prostiranja rotacionih talasa i talasi se ne prigušuju samo u određenim pravcima prostiranja. U onim delovima prostora, gde se periodična rešenja prigušuju zbog imaginarnе energije, egzistiraju aperiodična rešenja sa imaginarnom komponentom talasnog vektora. Ova rešenja lokalizovana su duž Oy ose.

U slučaju trodimenzionalne strukture oba zakona disperzije rotacionih pobudjenja su akustičkog tipa a pravci prostiranja talasa, u kojima se ovi ne prigušuju, leže u jednom konusu odredjenog otvora čija je osa paralelna sa Oz osom. Kao i u slučaju dve dimenzije, u onim delovima gde se prigušuju periodična rešenja, ne prigušuju se aperiodična rešenja sa kompleksnim vrednostima talasnog vektora. Ova aperiodična rešenja su lokalizovana duž odredjene prave u prostoru.

D O D A T A K

Moment inercije troosnog elipsoida homogene gustine §

a) Moment inercije troosnog elipsoida u odnosu na z-osu

Moment inercije u odnosu na z-osu definisan je izrazom:

$$J_z = \iiint_{V} (x^2 + y^2) dx dy dz. \quad (1)$$

Jednačina elipsoida je:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1,$$

a jednačina elipse u xOy ravni je:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1.$$

Tada je:

$$x \in [-a, a]$$

$$y \in [-b\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}, +b\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}]$$

$$z \in [-c\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}-\frac{y^2}{b^2}}, +c\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}-\frac{y^2}{b^2}}].$$

Za  $J_z$  možemo pisati:

$$J_z = \iiint_{V} dx \int_{-b\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}}^{+b\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}} dy \int_{-c\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}-\frac{y^2}{b^2}}}^{+c\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}-\frac{y^2}{b^2}}} (x^2 + y^2) dz \quad (2)$$

$$J_z = 2cg \int_{-a}^a dx \int_{-\frac{b\sqrt{1-x^2/a^2}}{a}}^{\frac{b\sqrt{1-x^2/a^2}}{a}} (x^2 + y^2) \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2}} dy.$$

Uvedimo:

$$1 - \frac{x^2}{a^2} = R_x^2 \quad (3)$$

$$J_z = 2cg \left\{ \int_{-a}^a x^2 dx \int_{-\frac{bR_x}{a}}^{\frac{bR_x}{a}} \sqrt{R_x^2 - \frac{y^2}{b^2}} dy + \int_{-a}^a dx \int_{-\frac{bR_x}{a}}^{\frac{bR_x}{a}} y^2 \sqrt{R_x^2 - \frac{y^2}{b^2}} dy \right\}.$$

Obeležimo integrale sa:

$$J_1 = \int_{-bR_x}^{bR_x} \left( R_x^2 - \frac{y^2}{b^2} \right)^{1/2} dy \quad (4)$$

$$J_2 = \int_{-bR_x}^{bR_x} y^2 \left( R_x^2 - \frac{y^2}{b^2} \right)^{1/2} dy. \quad (5)$$

Integral (4) se rešava smenom:

$$\begin{aligned} \frac{y}{bR_x} &= \sin z & dy &= bR_x \cos z dz \\ y &= bR_x & \sin z &= 1 & z &= \frac{\pi}{2} \\ y &= -bR_x & \sin z &= -1 & z &= -\frac{\pi}{2} \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad (6)$$

$$J_1 = bR_x^2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 z dz = bR_x^2 I_1$$

$$J_1 = \frac{\pi}{2} bR_x^2 \quad (7)$$

$$J_2 = \int_{-bR_x}^{bR_x} y^2 \left( R_x^2 - \frac{y^2}{b^2} \right)^{1/2} dy = R_x \int_{-bR_x}^{bR_x} y^2 \left[ 1 - \left( \frac{y}{bR_x} \right)^2 \right]^{1/2} dy.$$

Uvodjenjem smene (6) ovaj integral postaje:

$$J_2 = b^3 R_x^4 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin^2 z \cos^2 z dz = b^3 R_x^4 I_2$$

$$J_2 = \frac{\pi}{8} b^3 R_x^4. \quad (8)$$

Prema (7) i (8) imamo:

$$J_z = \frac{4\pi}{15} gabc \left\{ a^2 + b^2 \right\}.$$

S obzirom da je masa elipsoida data kao:

$$m = \frac{4}{3} \pi abc g,$$

imamo konačno:

$$J_z = \frac{1}{5} m \left\{ a^2 + b^2 \right\}.$$

b) Moment inercije troosnog elipsoida u odnosuna x-osi

definisan je izrazom:

$$J_x = g \iiint_v (y^2 + z^2) dx dy dz, \quad (9)$$

$$J_x = g \int_{-a}^a \int_{-bR_x}^{bR_x} \int_{-c\sqrt{R_x^2 - \frac{y^2}{b^2}}}^{c\sqrt{R_x^2 - \frac{y^2}{b^2}}} (y^2 + z^2) dz dy dx,$$

$$J_x = g \left\{ \frac{2}{3} c^3 \int_{-a}^a \int_{-bR_x}^{bR_x} \int_{(R_x^2 - \frac{y^2}{b^2})^{3/2}} dy + 2c \int_{-a}^a \int_{-bR_x}^{bR_x} \int_{y^2(R_x^2 - \frac{y^2}{b^2})^{1/2}} dy \right\},$$

$$J_3 = \int_{-bR_x}^{bR_x} \left( R_x^2 - \frac{y^2}{b^2} \right)^{3/2} dy. \quad (10)$$

Uvodjenjem smene (3) i (6) integral (10) postaje:

$$J_3 = bR_x^4 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^4 \varphi d\varphi = bR_x^4 I_3,$$

$$J_3 = \frac{3\pi}{8} bR_x^4, \quad (11)$$

$$J_x = \rho \left\{ \frac{\pi}{4} c^3 b \int_{-a}^a R_x^4 dx + \frac{\pi}{4} b^3 c \int_{-a}^a R_x^4 dx \right\},$$

$$J_x = \frac{1}{5} \rho \pi abc \cdot \frac{4}{3} \{ b^2 + c^2 \},$$

$$J_x = \frac{1}{5} m \{ b^2 + c^2 \}. \quad (12)$$

c) Moment inercije troosnog elipsoida u odnosu na y-osu

Na analogan način se dobija da je moment inercije troosnog elipsoida u odnosu na y-osu, koji je definisan izrazom:

$$J_y = \rho \int_{-a}^a dx \int_{-b\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}}^{b\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}} dy \int_{-c\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}-\frac{y^2}{b^2}}}^{c\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}-\frac{y^2}{b^2}}} (x^2+z^2) dz,$$

jednak:

$$J_y = \frac{1}{5} m \{ a^2 + c^2 \}. \quad (13)$$

Moment inercije cilindra homogene gustine  $\rho$ , dužine L i poluprečnika R

a) Moment inercije u odnosu na z-osu

definisan je izrazom:

$$J_z = \rho \iiint_V (x^2+y^2) dx dy dz.$$

Jednačina cilindra je:

$$y^2 + z^2 = R^2; \quad x = \pm \frac{L}{2}.$$

Znači:

$$x \in \left[ -\frac{L}{2}, \frac{L}{2} \right]$$

$$y \in [-R, +R]$$

$$z \in [-\sqrt{R^2-y^2}, +\sqrt{R^2-y^2}]$$

$$J_z = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \int_{-R}^R dy \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-y^2}} (x^2+y^2) dz \\ J_z = 2 \left\{ \frac{2}{3} \left( \frac{L}{2} \right)^3 \int_{-R}^R (R^2-y^2)^{\frac{1}{2}} dy + L \int_{-R}^R y^2 (R^2-y^2)^{\frac{1}{2}} dy \right\} \quad (14)$$

Integral:

$$J_4 = \int_{-R}^R (R^2-y^2)^{\frac{1}{2}} dy, \quad (15)$$

rešava se sменом:

$$\begin{aligned} y &= R \sin z & dy &= R \cos z dz \\ y &= -R & \sin z &= -1 & z &= -\frac{\pi}{2} \\ y &= R & \sin z &= 1 & z &= \frac{\pi}{2} \end{aligned} \quad \left. \right\}, \quad (16)$$

$$J_4 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} R^2 \cos^2 z dz = R^2 I_1$$

$$J_4 = \frac{\pi}{2} R^2. \quad (17)$$

Integral

$$J_5 = \int_{-R}^R y^2 (R^2-y^2)^{\frac{1}{2}} dy, \quad (18)$$

uvodjenjem smene (16) postaje:

$$J_5 = \int_{-R}^R R^4 \sin^2 z \cos^2 z dz = R^4 I_2$$

$$J_5 = \frac{\pi}{8} R^4. \quad (19)$$

S obzirom na (17) i (19) izraz (14) postaje:

$$J_z = 2 \sqrt{\pi} R^2 L \left\{ \frac{L^2}{24} + \frac{R^2}{8} \right\},$$

odnosno:

$$J_z = \frac{1}{12} m \left\{ L^2 + 3 R^2 \right\}, \quad (20)$$

gde je masa cilindra data izrazom:

$$m = \rho \pi R^2 L.$$

Na analogan način se dokazuje da je  $J_y$ , koji je definisan izrazom

$$J_y = \rho \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_{-R}^R dy \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-y^2}} (x^2+z^2) dz,$$

jednak:

$$J_y = \frac{1}{12} m \left\{ L^2 + 3R^2 \right\}. \quad (21)$$

Kada  $R \rightarrow 0$  (tanak homogen štap) izrazi (20) i (21) se svede na:

$$J_y = J_z = \frac{1}{2} m L^2$$

Moment inercije u odnosu na x-osu, koji je definisan izrazom:

$$J_x = \rho \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_{-R}^R dy \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-y^2}} (y^2+z^2) dz$$

je jednak:

$$J_x = \frac{1}{2} m R^2$$

Dokaz da su proizvodi inercije za troosni elipsoid i cilindar homogene gustine jednaki nuli

Ovo se vrlo lako dokazuje s obzirom da je integral neparnih funkcija u simetričnim granicama uvek jednak nuli. Konkretno za cilindar imamo:

$$\Pi_{yz} = \rho \iiint yz \cdot dx dy dz$$

$$\Pi_{yz} = \rho \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \int_{-R}^R y dy \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-y^2}} z dz$$

$$\Pi_{yz} = \rho L \left\{ \int_{-R}^R y R^2 dy - \int_{-R}^R y^3 dy \right\} = 0$$

$$\Pi_{yz} = \Pi_{xy} = \Pi_{xz} = 0$$

Takodje za troosni elipsoid, poizvodi inercije su jednaki nuli, što se može lako pokazati na primeru:

$$\Pi_{yz} = \rho \int_{-a}^a dx \int_{-bRx}^{bRx} y dy \int_{-c\sqrt{R_x^2 - \frac{y^2}{b^2}}}^{c\sqrt{R_x^2 - \frac{y^2}{b^2}}} z dz$$

$$\Pi_{yz} = c^2 \rho \int_{-a}^a dx \int_{-bRx}^{bRx} y \left( R_x^2 - \frac{y^2}{b^2} \right)^{1/2} dy$$

$$\int_{-bRx}^{bRx} y \left( R_x^2 - \frac{y^2}{b^2} \right)^{1/2} dy = [ \text{смеша (6)} ] = b R_x^3 I_5 = 0$$

$$\Pi_{xy} = \Pi_{yz} = \Pi_{xz} = 0$$

Prilikom računanja momenata inercije i proizvoda inercije korišćeni su sledeći integrali:

$$I_1 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 z \, dz = \frac{\pi}{2}$$

$$I_2 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sin^2 z \cos^2 z \, dz = \frac{\pi}{8}$$

$$I_3 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^4 z \, dz = \frac{3\pi}{8}$$

$$I_4 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sin z \cos^3 z \, dz = 0$$

$$I_5 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sin z \cos^2 z \, dz = 0$$

## Литература

- 1) Л.Ландау, Е.Лифшиц: Статистическая физика,  
перевод, Београд 1960.
- 2) А.С.Давыдов: Теория молекуларных экситонов,  
"Наука" Москва 1968.
- 3) Й.Мумишик: Увод у теоријску физику I,  
Београд 1965.
- 4) А.С.Давыдов: Квантовая механика,  
"Наука" Москва 1973.
- 5) А.С.Давыдов: ЖКЭТФ 20 760 1950.