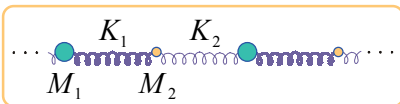


# КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ: ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ, ЧАСТЬ 2

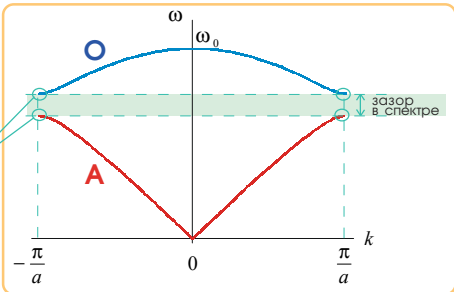
одномерные модели:  
цепочки атомов

двухатомная  
цепочка



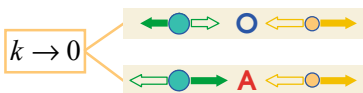
Двухатомная цепочка с потенциальной энергией

$$U = \frac{1}{2} \sum_n [K_1(u_{n,2} - u_{n,1})^2 + K_2(u_{n+1,2} - u_{n,1})^2]$$



Дисперсионные ветви колебаний двухатомной цепочки. Для обеих ветвей на границе зоны Бриллюэна ( $k = \pm \pi/a$ ) групповая скорость  $v_g = d\omega/dk$  обращается в 0.

$$k \rightarrow 0, \lambda \equiv \frac{2\pi}{k} \rightarrow \infty$$



Рассмотрим две одномерные модели, в которых роль решетки Браве играет последовательность расположенных на одной прямой точек с координатами  $x_n = na$  ( $a$  - период цепочки), а смещения относительно положений равновесия имеют лишь по одной ненулевой компоненте  $u_{n\alpha}$  (индекс  $\alpha$ , как избыточный, будем в этих примерах опускать). Кроме того, будем учитывать взаимодействие каждого атома лишь с двумя его ближайшими соседями, полагая  $A_{|n| \geq 2}^{ss} = 0$ .

Пусть  $q=2$ ; тогда в приближении взаимодействия с ближайшими соседями ненулевые компоненты матрицы силовых коэффициентов выражаются через две независимые константы:  $A_0^{12} = A_0^{21} \equiv -K_1/2$ ,  $A_1^{12} = A_1^{21} \equiv -K_2/2$  и  $A_0^{11} = A_0^{22} = (K_1 + K_2)/2$ . Решение для смещений ищем в виде

$$u_{ns} = u_s \exp[i(kna - \omega t)], \quad s=1, 2.$$

Система уравнений (6.13) из лекции 6 принимает вид:

$$(-M_1\omega^2 + K_1 + K_2)u_1 - (K_1 + K_2)e^{ika}u_2 = 0, \quad (7.1)$$

$$-(K_1 + K_2)e^{-ika}u_1 + (-M_2\omega^2 + K_1 + K_2)u_2 = 0. \quad (7.2)$$

Приравняв нулю детерминант этой системы, получаем квадратное уравнение относительно  $\omega^2$ :

$$M_1 M_2 \omega^4 - M K \omega^2 + 4 K_1 K_2 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) = 0,$$

где  $M = M_1 + M_2$  и  $K = K_1 + K_2$ . Для акустической и оптической дисперсионных ветвей имеем соответственно

$$\omega_{ac}(k) = \omega_0 \sqrt{\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - \left[\frac{2\Omega_0}{\omega_0} \sin\frac{ka}{2}\right]^2}}, \quad (7.3)$$

$$\omega_{opt}(k) = \omega_0 \sqrt{\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \left[\frac{2\Omega_0}{\omega_0} \sin\frac{ka}{2}\right]^2}}, \quad (7.4)$$

где  $\omega_0 = \sqrt{K/\tilde{M}}$ ,  $\Omega_0 = \sqrt{\tilde{K}/M}$ ,  $\tilde{M} = M_1 M_2 / M$  и  $\tilde{K} = K_1 K_2 / K$ .

Из (7.1):

$$\frac{u_2}{u_1} = \frac{K - M_1\omega^2}{K_1 + K_2 e^{ika}}.$$

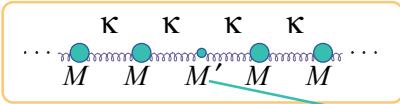
В длинноволновом пределе:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \left[ \frac{u_2}{u_1} \right]_{ac} = 1, \quad \lim_{k \rightarrow 0} \left[ \frac{u_2}{u_1} \right]_{opt} = -\frac{M_1}{M_2},$$

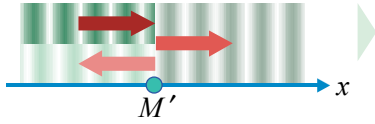
т.е. для акустической моды колебания атомов в элементарной ячейке сфазированы и имеют одинаковые амплитуды - элементарная ячейка движется как целое, в то время как в оптической моде атомы элементарной ячейки колеблются в противофазе, при этом центр масс элементарной ячейки остается неподвижным. Относительные смещения атомов в оптической моде приводят к появлению у элементарной ячейки осциллирующего дипольного момента (электрической поляризации), обеспечивая тем самым взаимодействие оптических колебаний с электромагнитным полем в оптическом (инфракрасная область спектра) диапазоне.

**колебания кристаллической решетки:  
гармоническое приближение, часть 2**

одноатомная  
цепочка  
с изотопической  
примесью



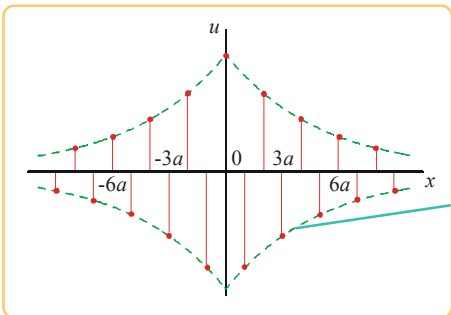
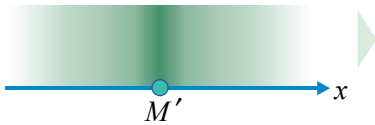
Одноатомная цепочка с одиночной пространственной неоднородностью в виде изотопической примеси (масса другая, силовая константа - та же)  
Потенциальная энергия:  $U = \frac{\kappa}{2} \sum_n (u_{n-1} - u_n)^2$ .



не путать обозначения!

$\kappa$  (греч. "каппа") - силовая константа  
 $k$  (лат. "ка") - волновое число

неоднородные уравнения  
с правой частью  $\propto u_0$



Пусть  $q = 1$ . Индекс  $s$ , как избыточный, будем опускать. При этом один из атомов цепочки (для определенности: с  $n = 0$ ) имеет массу, отличную от массы остальных атомов (изотопическая примесь). Для изотопической примеси будем пренебрегать отличием электронного состояния от того, которое реализуется в случае идеальной решетки (когда все атомы одинаковы). Поэтому эффективная потенциальная энергия взаимодействия с ближайшими соседями и, следовательно, соответствующая силовая константа остаются для примесного атома такими же, что и для остальных атомов в цепочке:  $A_{nn} = -A_{n,n-1} = -A_{n-1,n} = \kappa/2$  ( $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ).

Уравнения движения:

$$M' \ddot{u}_0 = \kappa(u_1 + u_{-1} - 2u_0), \quad n = 0, \tag{7.5}$$

$$M \ddot{u}_n = \kappa(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n), \quad |n| \geq 1. \tag{7.6}$$

Возможны два типа решений.

**1. Бегущие волны, рассеянные на примеси.** Для определенности рассмотрим случай падающей волны с  $k > 0$ . Решение уравнений (7.5), (7.6) ищем при  $n \leq -1$  в виде суперпозиции падающей и отраженной волн, а при  $n \geq 1$  - в виде прошедшей волны:

$$u_{n \leq -1} = (A e^{ikna} + B e^{-ikna}) e^{-i\omega(k)t}, \tag{7.7}$$

$$u_{n \geq 1} = C e^{i(kna - \omega(k)t)}, \tag{7.8}$$

где  $\omega(k) = 2\sqrt{\kappa/M} |\sin(ka/2)|$  - закон дисперсии, соответствующий единственной (акустической) ветви для однородной одноатомной цепочки. Зависимости (7.7) и (7.8) являются решениями (7.6) при  $|n| \geq 1$  и произвольных  $A, B$  и  $C$ . Амплитуды  $A, B$  и  $C$  могут быть найдены (выражены через амплитуду  $u_0$ ) "сшивкой" решений (7.7), (7.8) в точке  $n = 0$ , т.е. из системы **трех уравнений**, получаемой в результате подстановки (7.7), (7.8) в уравнение (7.5) и в два уравнения вида (7.6), соответствующие  $n = -1$  и  $n = 1$ .

**2. Колебания, локализованные вблизи примеси.** Ищем решение уравнений (7.5), (7.6) с комплексным волновым числом  $k = k' + ik''$  (по-прежнему  $\text{Im } \omega = 0$ ). В неограниченной цепочке с одиночной изотопической примесью физически реализуемы колебания атомов с амплитудой, экспоненциально затухающей по мере удаления от примесного атома:

$$u_n = u_0 \exp[i(k'n - \omega t) - k''|n|]. \tag{7.9}$$

Подстановка (7.9) в (7.6) дает

$$\text{Im } \omega^2 = 0 = 2\kappa \sin k'a \text{ sh } k''a / M, \tag{7.10}$$

$$\text{Re } \omega^2 = \omega^2 = 2\kappa(1 - \cos k'a \text{ ch } k''a) / M > 0. \tag{7.11}$$

Из (7.10) для  $k'' \neq 0$  имеем  $k'a = \pi l$  ( $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ). Из условия (7.11) получаем, что  $l$  должно быть нечетным:  $l = \pm 1, \pm 3, \dots$ . Поскольку различные нечетные значения  $l$  реализуют одно и то же решение, полагаем для определенности  $l = 1$ . Выражение (7.9) принимает вид:  $u_n = u_0 (-1)^n \exp[-k''|n| - i\omega t]$ ,  $k'' > 0$ . Подстановкой этого выражения в (7.5) получаем уравнение, которое вместе с уравнением, получающимся из (7.11), образует систему с двумя неизвестными,  $\omega$  и  $k''$ :

$$\omega^2 = 2\kappa(1 + \text{ch } k''a) / M, \tag{7.12}$$

$$\omega^2 = 2\kappa(1 + e^{-k''a}) / M'. \tag{7.13}$$

Вводя переменную  $\xi = e^{k''a}$ , получим из (7.12), (7.13) квадратное уравнение относительно  $\xi$ :

$$\xi^2 - \frac{2\Delta M}{M'} \xi - \frac{M + \Delta M}{M'} = 0, \tag{7.14}$$

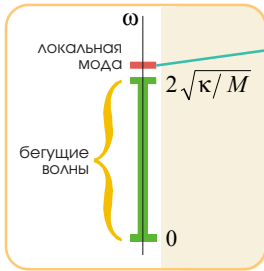
где  $\Delta M \equiv M - M'$ .

**колебания кристаллической решетки:  
гармоническое приближение, часть 2**

по определению  
 $\xi = e^{k'a} > 0$

по определению  
 $\xi = e^{k'a} |_{k \rightarrow 0} > 1$   
условие существования  
локальной моды

в представляющих  
практический интерес  
случаях (за исключением  
изотопов водорода)  
 $\Delta M \ll M$



НАЧАЛО  
- в ЛЕКЦИИ 6

каноническое преобразование  
(т.е. не изменяющее вида  
гамильтоновых уравнений:  
 $\dot{y} = \partial H / \partial P, \dot{P} = -\partial H / \partial y$ )

$M \omega_j^2(\mathbf{k})$  - собственные  
значения эрмитовой матрицы,  
т.е. все корни дисперсионного  
уравнения вещественны;  
доказательство их неотрицательности -  
на следующей лекции

векторы поляризации  
для **двухатомной цепочки**  
в длинноволновом пределе:

$$e^{ac}(k=0) = \{1, 1\}$$

$$e^{op}(k=0) = \left\{ \sqrt{\frac{M_2}{M_1}}, -\sqrt{\frac{M_1}{M_2}} \right\}$$

$$\bar{e}^{ac}(k=0) = \left\{ \sqrt{\frac{M_1}{M}}, \sqrt{\frac{M_2}{M}} \right\}$$

$$\bar{e}^{op}(k=0) = \left\{ \sqrt{\frac{M_2}{M}}, -\sqrt{\frac{M_1}{M}} \right\}$$

**Положительный корень:**

$$\xi = (M + \Delta M) / (M - \Delta M), \tag{7.15}$$

причем  $\Delta M > 0$ , т.е.

$$M' < M. \tag{7.16}$$

Для пространственного масштаба затухания и частоты локальных колебаний имеем соответственно

$$k'' = \frac{1}{a} \ln \frac{M + \Delta M}{M - \Delta M} \underset{\Delta M \ll M}{\approx} \frac{1}{a} \frac{2\Delta M}{M}, \tag{7.17}$$

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\kappa M}{M^2 - (\Delta M)^2}} \underset{\Delta M \ll M}{\approx} 2 \sqrt{\frac{\kappa}{M}} \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta M}{M} \right)^2 \right]. \tag{7.18}$$

Таким образом,  $\omega > 2\sqrt{\kappa/M}$ , где  $2\sqrt{\kappa/M}$  - верхняя граница спектра для бегущих волн в одноатомной цепочке. Такое отщепление частоты локальной моды "вверх" обеспечено как раз условием  $M' < M$  (собственная частота колебаний с участием более легкого, чем остальные, атома, лежит выше максимальной частоты колебаний однородной цепочки из более тяжелых атомов с массой  $M$ ).

Продолжим общее описание колебаний кристаллической решетки в гармоническом приближении. Вместо смещений  $u_{n\mu}$  и импульсов  $P_{n\mu}$  введем новые переменные:

$$\tilde{u}_{n\mu} = \alpha_s u_{n\mu}, \quad \tilde{P}_{n\mu} = \frac{1}{\alpha_s} P_{n\mu}, \tag{7.19}$$

где  $\alpha_s = \sqrt{M_s / M}$ ,  $M = \sum_s M_s$ . Уравнения (6.5), (6.6) приобретают вид:

$$\dot{\tilde{u}}_{n\mu} = \frac{\tilde{P}_{n\mu}}{M}, \tag{7.20}$$

$$\dot{\tilde{P}}_{n\mu} = -\sum_{n', \mu'} \tilde{A}_{n-n'}^{\mu\mu'} \tilde{u}_{n'\mu'}, \quad \tilde{A}_{n-n'}^{\mu\mu'} = \frac{1}{\alpha_s \alpha_{s'}} A_{n-n'}^{\mu\mu'}. \tag{7.21}$$

Для решений в виде бегущих волн:  $\tilde{u}_{n\mu} = \tilde{u}_\mu \exp[i(\mathbf{kR}_n - \omega t)]$  из (7.20), (7.21) получаем уравнение для амплитуды (аналог уравнения (6.13)):

$$\sum_{\mu'} \tilde{A}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}) \tilde{u}_{\mu'}(\mathbf{k}) = \omega_j^2(\mathbf{k}) M \tilde{u}_\mu(\mathbf{k}), \tag{7.22}$$

где  $\tilde{A}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}) = A^{\mu\mu'}(\mathbf{k}) / (\alpha_s \alpha_{s'})$  - эрмитова матрица. Таким образом, задача о корнях дисперсионного уравнения сводится к задаче о собственных значениях эрмитовой матрицы. Это доказывает сделанное в лекции 6 утверждение о вещественности всех  $3q$  корней дисперсионного уравнения. Компоненты соответствующих собственных векторов, нормированных на единицу, будем обозначать как  $\tilde{e}_\mu^j(\mathbf{k})$ . Эти векторы взаимно ортогональны:

$$\sum_\mu (\tilde{e}_\mu^j(\mathbf{k}))^* \tilde{e}_\mu^j(\mathbf{k}) = \delta_{jj}. \tag{7.23}$$

Векторы с компонентами  $e_\mu^j(\mathbf{k}) = \tilde{e}_\mu^j(\mathbf{k}) / \alpha_s$  являются решениями уравнения (6.13):

$$\sum_{\mu'} A^{\mu\mu'}(\mathbf{k}) e_{\mu'}^j(\mathbf{k}) = \omega_j^2(\mathbf{k}) M_s e_\mu^j(\mathbf{k}),$$

и взаимно ортогональны с весом:

$$\sum_\mu M_s (e_\mu^j(\mathbf{k}))^* e_\mu^j(\mathbf{k}) = M \delta_{jj}. \tag{7.24}$$

Итак, каждой колебательной моде, характеризуемой номером  $j$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$ , соответствует собственная частота  $\omega_j(\mathbf{k})$  и вектор поляризации с  $3q$  компонентами  $e_\mu^j(\mathbf{k})$ , определяющими для данной моды относительную амплитуду и направление смещений атомов базиса в элементарной ячейке.

**колебания кристаллической решетки: гармоническое приближение, часть 2**

**SUMMARY 7**

spelleология

Эрмит - *Ch. Hermite*

избранные трансляции

- собственное значение = eigenvalue
- собственный вектор = eigenvector
- эрмитова матрица = Hermitian matrix
- примесь = impurity

2 простых одномерных модели

... ... двухатомная цепочка

групповая скорость:  
 $v_g \equiv \frac{d\omega(k)}{dk}$

длинноволновый предел:  
 $k \rightarrow 0$

... ... одноатомная цепочка с изотопической примесью

рассеяние бегущих волн на примеси

локальная мода

условие существования локальной моды:  
 $M' < M$

спектр бегущих волн

частота локальной моды:  
 $2\sqrt{\frac{\kappa M}{M^2 - (\Delta M)^2}}$

решения

$\tilde{A}(\mathbf{k})$  - эрмитова матрица  $3q \times 3q$  с компонентами  $M^{\mu\nu}(\mathbf{k})/(\alpha_s \alpha_r)$ ,  
 $\tilde{e}^j(\mathbf{k})$  - комплексный собственный вектор матрицы  $\tilde{A}(\mathbf{k})$ , нормированный на единицу,  
 $M\omega_j^2(\mathbf{k})$  - соответствующее вещественное собственное значение:

$$\tilde{A}(\mathbf{k}) \cdot \tilde{e}^j(\mathbf{k}) = M\omega_j^2(\mathbf{k}) \tilde{e}^j(\mathbf{k}).$$

Векторы  $\tilde{e}^j(\mathbf{k})$  с различными  $j$  взаимно ортогональны:

$$\tilde{e}^j(\mathbf{k}) \cdot \tilde{e}^{j'}(\mathbf{k}) = \delta_{jj'}.$$

Компоненты вектора поляризации  $e^j(\mathbf{k})$ :  $\tilde{e}_s^j(\mathbf{k})/\alpha_s$ .

Векторы  $e^j(\mathbf{k})$  с различными  $j$  взаимно ортогональны с весом:

$$\sum_{\mu} M_{\mu} (e_{\mu}^j(\mathbf{k}))^* e_{\mu}^{j'}(\mathbf{k}) = M \delta_{jj'}.$$

линейная алгебра

вектор поляризации

для моды с номером  $j$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$  компоненты вектора поляризации  $e^j(\mathbf{k})$  задают относительную амплитуду и направление смещений атомов базиса

физический смысл величины