ЛЕКЦИЯ 3

ГАРМОНИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ ОДНОМЕРНОЙ РЕШЕТКИ ИЗ ЧЕРЕДУЮЩИХСЯ АТОМОВ ДВУХ СОРТОВ

1. Акустические и оптические моды колебаний атомов в кристаллах

Рис. 3.1

В прошлый раз мы получили дисперсионное соотношение для цепочки атомов:

$$\omega^2 = 2\frac{\beta}{m}(1 - \cos ka) = 4\frac{\beta}{m}\sin^2\frac{ka}{2}\,.$$

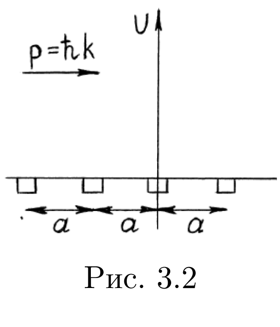

Рис. 3.2

Первой зоной Брилюэна называется промежуток от $-\frac{\pi}{a}$ до $\frac{\pi}{a}$. В нем находятся все физически различные значения k. Чтобы найти соответствующую частоту для k, не входящего в этот промежуток, нужно сначала найти аналог для k из первой зоны Брилюэна.

На границе зоны Брилюэна касательная должна быть равна нулю. Это означает, что групповая скорость равна нулю.

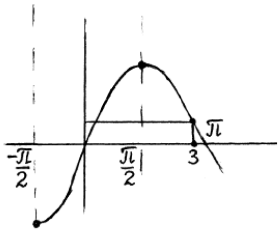

Рис. 3.3

Можно провести аналогию с $\arcsin(\sin 3) = ?$, который выбирают из промежутка $-\frac{\pi}{2}$ до $\frac{\pi}{2}$, где функция арксинуса монотонно возрастает.

Покажем, что волновой вектор $k = \frac{\pi}{a}$ соответствует брэгговскому отражению. Условие Брэгга записывается в виде:

$$2d \sin \phi = m\lambda \,,$$

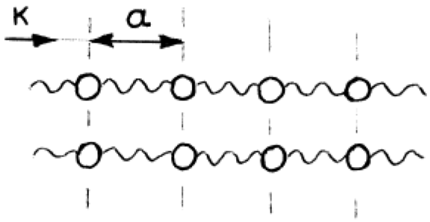

Рис. 3.4

$$2a * 1 = 1 * \frac{2\pi}{k} \,,$$

$$\boxed{k = \frac{\pi}{a}}$$

Физический смысл данного k заключается в том, что волна не может бежать по решетке, она отражается от плоскостей.

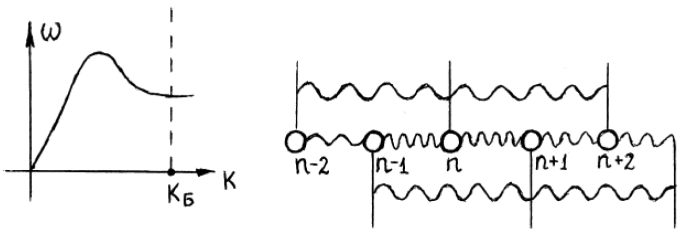

Рис. 3.5

Учет не только ближайших атомов, а еще и следующих изменяет дисперсионное соотношение. Взаимодействие с другими атомами учитывается с помощью более длинных пружин. Тогда соотношение будет выглядеть следующим образом:

$$\omega^2 = 2\frac{\beta_1}{m}(1-\cos ka) + 2\frac{\beta_2}{m}(1-\cos 2ka)\,.$$

Ясно, что константа $\beta_1 > \beta_2$ и, только если $\beta_1 < 4\beta_2$, дисперсионное соотношение поменяется.

Теперь рассмотрим задачу с различными шариками и пружинками.

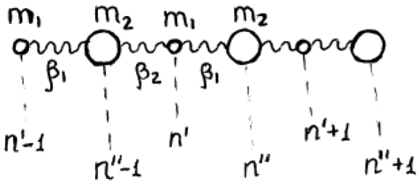

Рис. 3.6

Рассмотрим цепочку, состоящую из двух типов шариков — массами m_1 и m_2 и двух типов пружин β_1 и β_2. То, что относится к шарикам первого вида — со штрихом, второго вида — с двумя штрихами. Тогда запишем уравнение движения для обоих типов шариков:

$$m_1\ddot{U}_{n'} = -\beta_1(U_{n'} - U_{n''}) - \beta_2(U_{n'} - U_{n''-1})\,,$$
$$m_2\ddot{U}_{n''} = -\beta_2(U_{n''} - U_{n'+1}) - \beta_1(U_{n''} - U_{n'})\,.$$

Два уравнения возникают из-за того, что нужно описывать движения легких и тяжелых атомов с помощью разных амплитуд. Теперь мы ищем решение в виде:

$$U_{n'} = A' \exp i(kx_{n'} - \omega t) \text{ — для легких атомов;}$$

$$U_{n''} = A'' \exp i(kx_{n''} - \omega t) \text{ — для тяжелых атомов.}$$

Подставив данные выражения в уравнения движения, получаем систему линейных уравнений.

Получим из системы выражение для ω^2, то есть два решения для ω. Это две разные ветви. Запишем это выражение:

$$\omega_\pm^2 = \frac{\omega_0^2}{2}\left\{1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2\frac{ka}{2}}\right\},$$

где

$$\omega_0^2 = \frac{(\beta_1+\beta_2)(m_1+m_2)}{m_1 m_2}\,, \qquad \gamma^2 = 16\frac{\beta_1\beta_2}{(\beta_1+\beta_2)^2}\frac{m_1 m_2}{(m_1+m_2)^2}\,.$$

Но тут под a понимается уже расстояние между шариками одного типа. Это размер элементарной ячейки. Эти выражения для общего случая, когда ячейка составлена из двух разных атомов, содержит антисимметрию.

Теперь упростим задачу, когда $\beta_1 = \beta_2 = \beta$.

Если k мало, то мы можем разложить корень и получим примерно такую же зависимость, какую мы уже получали.

Акустическая ветвь — то, что со знаком минус. Оптическая ветвь — то, что со знаком плюс.

Зона Бриллюэна будет выглядеть следующим образом:

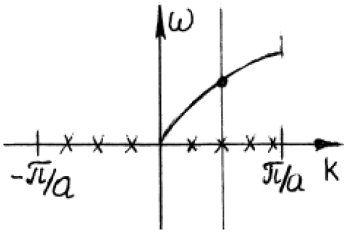

Рис. 3.7

Найдем отношение смещений легкого и тяжелого атома $\frac{U_{n'}}{U_{n''}}$. Это соотношение зависит от того, на какой ветви мы находимся и точки, в которой его рассматриваем.

Сначала рассмотрим точку $k = 0$. Получается:

$$\frac{U_{n'}}{U_{n''}} = \begin{cases} -\frac{m_2}{m_1}, & \omega_+ \, , \\ 1, & \omega_- \, . \end{cases}$$

Физически это означает, что когда длины волн велики по сравнению с постоянной решетки, атомы движутся в фазе, а если мы находимся на оптической ветви, то соседние атомы движутся уже в противофазе.

Для оптической ветви:

$$m_1 \dot{U}_{n'} + m_2 \dot{U}_{n''} = 0$$

— это значит, что суммарный импульс элементарной ячейки равен нулю, то есть центр масс элементарной ячейки остается на месте, все ячейки локализованы.

Это объясняет названия:

$$\omega = \omega_0 \sin \frac{ka}{2} \text{ при } k \text{ стремящемся к нулю;}$$

$\omega = \omega_0 \dfrac{ka}{2} = \dfrac{\omega_0 a}{2} k = sk$ — выражение для скорости звука в твердом теле, где $s = \sqrt{\frac{\beta}{m}}a$.

В реальных твердых телах $a \sim 10^{-8}$ см, а скорость звука — $s \sim 10^5$ см/с, т. е. $\omega_0 \sim 10^{13} c^{-1}$. Понятно, почему нижняя ветвь называется акустической.

Если взять систему $NaCl$, то в ней есть дипольный момент. Когда происходят акустические колебания, оба атома смещаются одинаково, то есть дипольный момент не изменяется.

Если же колебания оптические, то атомы то прижимаются, то отдаляются, и, соответственно, дипольный момент изменяется. А если дипольный момент изменяется, то такая система может как излучать, так и поглощать оптические кванты.

Поэтому колебания и называются оптическими. Также воздействие излучением является одним из способов возбуждения колебаний в системе.

Главное требование для существования оптических колебаний — наличие больше одного атома в элементарной ячейке. Если добавить третий атом в ячейку, то появится еще одна оптическая ветвь.

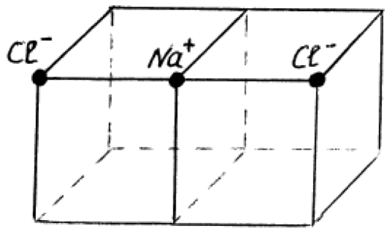

Рис. 3.8

2. Продольные и поперечные волны

Продольные волны — L (longitudnal), поперечные — T (transversal). Если вектор смещения направлен вдоль волнового вектора, то это L-случай; если вектор смещения направлен перпендикулярно волновому вектору, это T-случай.

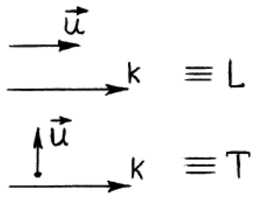

Рис. 3.9

В изотропном теле 3 волны — $1L + 2T$. В кристаллах в общем случае нельзя выделить продольные и поперечные волны. Это можно сделать, только если вектор k совпадает с одним из направлений: $[100], [110], [111]$.

Поперечные волны связаны с желанием тела сохранить форму. У жидкостей нет сопротивления деформации сдвига, поэтому поперечных волн тоже нет.

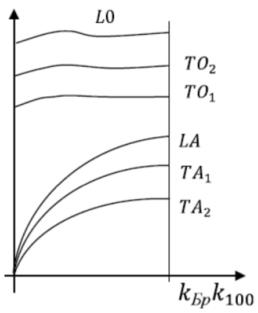

Рис. 3.10

Существуют продольная оптическая, поперечная оптическая ветви, и то же самое с акустическими. Важно, что между ветвями существуют промежутки.

Рассмотрим, как колеблются атомы вблизи границы зоны Брилюэна. Здесь $\beta_1 = \beta_2 = \beta, m_1 = m, m_2 = M$. Расчет показывает, какими будут частоты на границе (на графике). При $k \to \frac{\pi}{a}$:

$$\frac{U_{n'}(m)}{U_{n''}(M)} = \begin{cases} 0, & \omega_- \\ \infty, & \omega_+ \, . \end{cases}$$

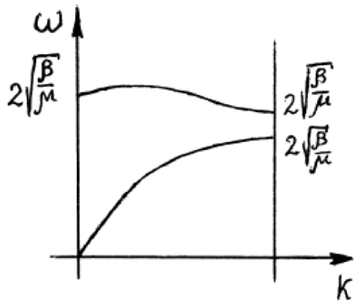

Рис. 3.11

Это означает, что на акустической ветви на границе зоны Брилюэна будут колебаться только тяжелые атомы, а на оптической — наоборот, только легкие.

Если есть периодичность в прямом пространстве, то будет периодичность и в обратном — периодическая зависимость частоты от волнового вектора. Когда мы предполагали вид функции U, мы по сути брали разложение в ряд Фурье, но сильно упрощенное. В общем случае, поскольку функция периодическая, то нам нужно разложить только в ряд Фурье.

$$U(\vec{r} + n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3) = U(\vec{r})$$

— некая периодическая функция, где $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ — главные направления кристалла. Ее можно разложить в ряд Фурье:

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{b}} U_b e^{i\,\vec{b}\,\vec{r}\,2\,\pi}\,.$$

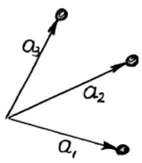

Рис. 3.12

Но разложение можно привести не при всех $\vec{b}$. Он должен удовлетворять следующим условиям:

$$\vec{a}_1\vec{b} = p_1; \qquad \vec{a}_2\vec{b} = p_2; \qquad \vec{a}_3\vec{b} = p_3\,.$$

Значит, вектор $\vec{b}$ можно представить в следующем виде:

$$\vec{b} = p_1\vec{b}_1 + p_2\vec{b}_2 + p_3\vec{b}_3, \text{ где } \delta_{ik} \text{ — символ Кронекера.}$$

Можно выбрать следующие векторы:

$$\vec{b}_1 = \frac{[\vec{a}_2, \vec{a}_3]}{(\vec{a}_1[\vec{a}_2, \vec{a}_3])}\,, \quad \vec{b}_2 = \frac{[\vec{a}_3, \vec{a}_1]}{(\vec{a}_2[\vec{a}_3, \vec{a}_1])}\,, \quad \vec{b}_3 = \frac{[\vec{a}_1, \vec{a}_2]}{(\vec{a}_3[\vec{a}_1, \vec{a}_2])}\,.$$

Соотношение $\vec{r} = const$ показывает, что вектор обратной решетки перпендикулярен некой системе плоскостей в прямом пространстве.

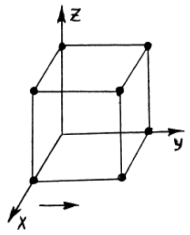

Рис. 3.13

Построим обратную решетку. Нужно выбрать наименьшее расстояние b.

Если взять Простую Кубическую решетку, то вектора в обратном пространстве тоже образуют Простую Кубическую решетку.

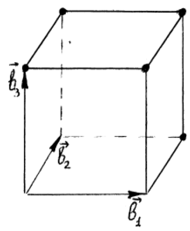

Рис. 3.14

Для ГЦК решетки обратной будет ОЦК. Верно и обратное.

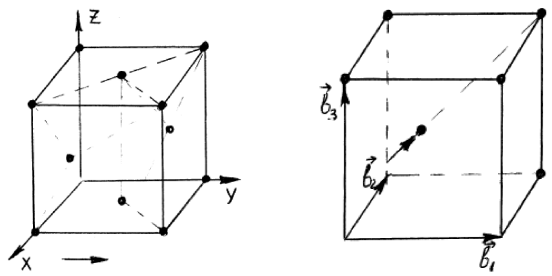

Рис. 3.15

Построим элементарную ячейку в k-пространстве с помощью ячейки Вигнера-Зейца. Таким образом найдем зону Брилюэна. Она будет правильным 14-угольником с гранями в виде шестиугольников и квадратов.

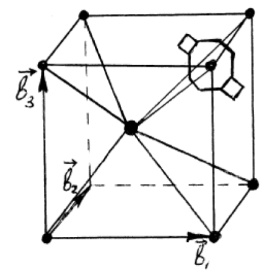

Рис. 3.16

Теперь мы хотим проквантовать колебания решетки. Но квантовать можно только конечную систему. Нужно граничное условие.

Условие Борна-фон Кармана (граничное условие). Соединяем в кольцо первый и последний атом. Тогда, чтобы колебание сохранилось нужно, чтобы последний и первый атом колебались в одной фазе, т. е. если есть N атомов, то должно выполняться:

$$kNa = 2\pi l.$$

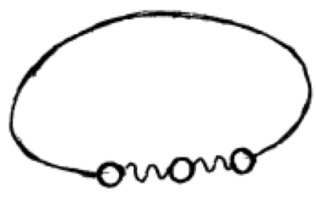

Рис. 3.17

Сразу получаем квантование для k:

$$k = \frac{2\pi}{Na} l.$$

Тогда зона Брилюэна видоизменится. Вместо сплошной линии получится набор точек.

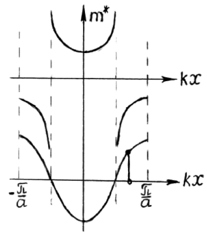

Рис. 3.18

Поскольку число разрешенных k равно числу типов колебаний и равно количеству точек в зоне Брилюэна, то получится всего одна ветвь. Если же мы добавим более тяжелые атомы, то в элементарной ячейке будет находится уже два атома. Число атомов удвоилось, стало $2N$, период ячейки остался тем же, т. е. количество точек в зоне Брилюэна равно N. Таким образом, на каждую точку будет приходится уже два типа колебания, то есть добавится оптическая ветвь.

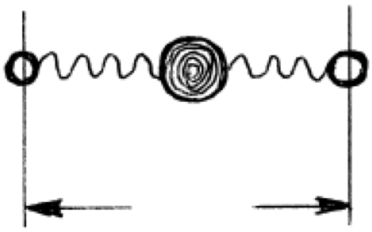

Рис. 3.19