

Квантовый характер колебаний решетки	171
Импульс фонона	173
Неупругое рассеяние фотонов на акустических фононах	174
Пример: Генерация фононов (176).	
Неупругое рассеяние рентгеновских лучей на фононах	177
Неупругое рассеяние нейтронов на фононах	178
Колебания в решетке из одинаковых атомов	181
Первая зона Бриллюэна (185). Групповая скорость (187). Область больших длин волн, или континуальное приближение (187). Вычисление силовых постоянных из экспериментально найденного дисперсионного закона (183).	
Решетка с двумя атомами в примитивной ячейке	189
Оптические свойства в инфракрасной области спектра	193
Нули и полюсы диэлектрической функции $\epsilon(\omega)$	195
Локальные фононные колебания	203
Резюме	206
Задачи	207
Литература	274

Замечание: В системе СГС (в гауссовой системе) $D = \epsilon E$, где ϵ называется диэлектрической проницаемостью или относительной диэлектрической проницаемостью (взятой относительно вакуума), для фурье-коэффициента $D(\omega, K) = \epsilon(\omega, K) E(\omega, K)$, где $\epsilon(\omega, K)$ называется диэлектрической функцией. В системе СИ $D = \epsilon \epsilon_0 E$, где ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость и $\epsilon_0 E$ — диэлектрическая проницаемость свободного пространства; аналогично, $D(\omega, K) = \epsilon(\omega, K) \epsilon_0 E(\omega, K)$. Величины ϵ и $\epsilon(\omega, K)$ тождественны в этих двух системах. См. также перечень содержания в гл. 13 (стр. 465).

КВАНТОВЫЙ ХАРАКТЕР КОЛЕБАНИЙ РЕШЕТКИ

Энергия колебаний решетки, или энергия упругой волны, является квантовой величиной. Квант энергии упругой волны называется *фононом*, который назван так по аналогии с фотоном — квантом энергии электромагнитной волны (рис. 5.1). Вспомним вначале историю возникновения понятия «фотон». Почти все концепции, используемые в применении к фотонам, например концепция корпускулярно-волнового дуализма, в равной степени хорошо подходят и к фононам. Звуковые волны в кристаллах можно рассматривать как распространение фононов. Тепловые колебания атомов в кристаллах можно рассматривать как термическое возбуждение фононов, по аналогии с термическим возбуждением фотонов, из которых состоит излучение абсолютно черного тела.

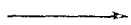
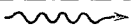
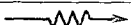
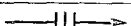
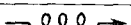
Обозначение	Название	Поле
	Электрон	—
	Фотон	Электромагнитная волна
	Фонон	Упругая волна
	Плазмон	Коллективная электронная волна
	Магنون	Волна перемагничивания
—	Полярон	Электрон + упругая деформация
—	Экситон	Волна поляризации

Рис. 5.1. Некоторые важные элементарные возбуждения в твердых телах. Условные обозначения этих возбуждений, показанные на рисунке, используются в тексте. Происхождение названий этих возбуждений обсуждается в работе Уолкера и Слэка [1].

Квантовая теория возникла в 1900 г., когда Макс Планк показал, что квантованием энергии можно было бы объяснить экспериментально наблюдаемую зависимость от частоты энергии электромагнитного излучения абсолютно черного тела при тепловом равновесии. Планк предположил, что энергия каждого вида колебаний электромагнитного поля в полости пропорциональна величине $h\nu$. Энергия одного фотона равна $\epsilon = h\nu$; энергия n фотонов в моде колебаний частоты ν равна

$$\epsilon = nh\nu, \quad (5.1)$$

где n — положительное целое число или нуль, а постоянная h (названная впоследствии постоянной Планка) имеет величину $6,6262 \cdot 10^{-27}$ эрг·сек. Для удобства в (5.1) не включен нулевой член $\frac{1}{2}h\nu$; однако это не меняет дела.

Соотношение (5.1) чаще записывается через угловую частоту:

$$\epsilon = n\hbar\omega,$$

где $\omega \equiv 2\pi\nu$ — угловая частота, $\hbar \equiv h/2\pi \approx 1,0546 \cdot 10^{-27}$ эрг·сек.

С одной стороны, из многочисленных дифракционных экспериментов следует, что электромагнитное поле обладает многими свойствами волн, а с другой стороны, из планковского закона распределения энергии излучения по частоте следует, что энергия электромагнитного поля является квантованной. Аналогичная ситуация существует и в случае упругих волн.

Первым экспериментальным доказательством квантования энергии упругих волн явилось наблюдение того, что вклад решетки в теплоемкость твердых тел (гл. 6) всегда приближается

к нулю по мере того, как температура стремится к нулю; это можно было объяснить только предположением, что энергия колебаний решетки квантуется.

Рентгеновские лучи и нейтроны испытывают неупругое рассеяние при взаимодействии с кристаллами, в результате чего энергия и импульс изменяются таким образом, что эти изменения соответствуют возникновению или поглощению одного или более фононов. Точное измерение эффектов, связанных с такими процессами, позволяет определить свойства отдельных фононов и в частности установить зависимость частоты от волнового вектора, т. е. закон дисперсии.

ИМПУЛЬС ФОНОНА

Фонон с волновым вектором \mathbf{K} взаимодействует с другими частицами или полями так, как если бы он имел импульс $\hbar\mathbf{K}$ ¹⁾. В действительности фонон в решетке не имеет импульса; мы увидим при решении задачи 5.5, что только фонон с волновым вектором $\mathbf{K} = 0$ имеет физически существующий импульс для типа колебания, соответствующего равномерному перемещению системы. Однако для большинства практических целей поведение фонона можно рассматривать так, как если бы он обладал импульсом $\hbar\mathbf{K}$. Иногда $\hbar\mathbf{K}$ называют *квазиимпульсом*.

Для кристаллов существуют правила отбора для значений волнового вектора \mathbf{K} , соответствующие разрешенным переходам между квантовыми состояниями. В гл. 2 указывалось, что для упругого рассеяния (брегговской дифракции) рентгеновских фотонов на кристалле справедливо следующее правило отбора для волнового вектора:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}, \quad (5.2)$$

где \mathbf{G} — вектор обратной решетки, \mathbf{k} и \mathbf{k}' — волновые векторы падающего и рассеянного фотонов. При рассеянии кристалл в целом будет испытывать отдачу с импульсом $\hbar\mathbf{G}$, однако этот вопрос обычно подробно не рассматривается. Суммарный волновой вектор взаимодействующих волн сохраняется в периодической решетке, но только с возможным добавлением вектора обратной решетки. Истинный импульс всей системы строго постоянен.

¹⁾ Этот достаточно тонкий вопрос обсуждается в работах [2—4]. Причина того, что фононы в решетке не имеют импульса, заключается в том, что координаты фононов (за исключением фонона с $\mathbf{K} = 0$) выражаются через *относительные* координаты атомов. Так, в молекуле H_2 координата межъядерного колебания $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ является относительной координатой и фонон, соответствующий этому колебанию, не обладает импульсом; координата центра масс $\frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ соответствует равномерному колебанию и может иметь импульс.

Если фотон испытывает неупругое рассеяние, при котором образуется фотон с волновым вектором \mathbf{K} , то правило отбора для волнового вектора имеет вид ¹⁾

$$\mathbf{k}' + \mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}. \quad (5.3)$$

Если же в рассматриваемом процессе фотон с волновым вектором \mathbf{K} поглощается, то вместо (5.3) имеем следующее соотношение:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K} + \mathbf{G}. \quad (5.4)$$

Соотношения (5.3) и (5.4) аналогичны соотношению (5.2).

НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ФОТОНОВ НА АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНАХ

Рассмотрим фотон с частотой $\nu = \omega/2\pi$, который распространяется в кристалле. Если кристалл рассматривать как сплошную среду с показателем преломления n , то волновой вектор фотона определяется соотношениями

$$\omega = \frac{ck}{n}, \quad \text{или} \quad \lambda\nu = \frac{c}{n}, \quad (5.5)$$

где c — скорость света. Импульс фотона равен

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (5.6)$$

Пусть фотон взаимодействует с пучком фононов или звуковой волной в кристалле. Фотон может рассеиваться звуковой волной. Это взаимодействие может произойти из-за того, что

¹⁾ Как пример, мы можем привести математические соотношения, содержащие различные правила отбора для решетки и для континуума. Предположим, что два фонона с волновыми векторами \mathbf{K}_1 и \mathbf{K}_2 взаимодействуют так, что этому взаимодействию соответствуют ангармонические члены третьего порядка в выражении для упругой энергии (см. гл. 6), и в результате образуется третий фотон с волновым вектором \mathbf{K}_3 . В выражение для вероятности W столкновения этих фононов будет входить произведение волновых амплитуд трех фононов, просуммированное по всем узлам решетки:

$$W \sim \sum_n e^{-i\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{r}_n} e^{-i\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{r}_n} e^{i\mathbf{K}_3 \cdot \mathbf{r}_n} = \sum_n \exp [i(\mathbf{K}_3 - \mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2) \cdot \mathbf{r}_n].$$

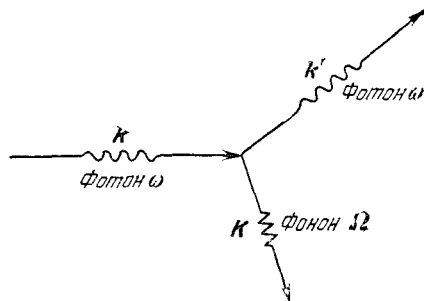
Эта сумма при большом числе узлов стремится к нулю, если только не выполняются условия $\mathbf{K}_3 = \mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2$ или $\mathbf{K}_3 = \mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2 + \mathbf{G}$. Первое условие является частным случаем второго. Если же эти условия выполняются, то сумма равна числу узлов решетки N . Аналогичная сумма была рассмотрена в задаче 2.5.

Для континуума матричный элемент в той же задаче содержит величину

$$\int d^3x \exp [i(\mathbf{K}_3 - \mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2) \cdot \mathbf{r}] = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{K}_3 - \mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2),$$

где δ — дельта-функция Дирака. Для континуума понятие векторов обратной решетки не вводится; если же их определить как некие предельные характеристики, то наикратчайший ненулевой вектор имел бы бесконечную длину.

Рис. 5.2. Схема неупругого рассеяния фотона с волновым вектором \mathbf{k} . В результате образуется фотон с волновым вектором \mathbf{k}' . Фотон, испытавший рассеяние, имеет волновой вектор \mathbf{k}' .



поле упругих деформаций звуковой волны изменяет локальную концентрацию атомов, а, следовательно, и показатель преломления кристалла. Таким образом, звуковая волна модулирует оптические свойства среды. И, наоборот, электрическое поле световой волны модулирует упругие свойства среды.

В кристалле фотон может испытывать рассеяние, что может привести к образованию или поглощению фонона. При этом волновой вектор фотона и частота изменяется: $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$, $\omega \rightarrow \omega'$. Предположим, что при рассеянии фотона образуется фонон с волновым вектором \mathbf{K} и угловой частотой Ω . Схема этого процесса (рис. 5.2) довольно проста. По условию сохранения энергии

$$\hbar\omega = \hbar\omega' + \hbar\Omega. \quad (5.7)$$

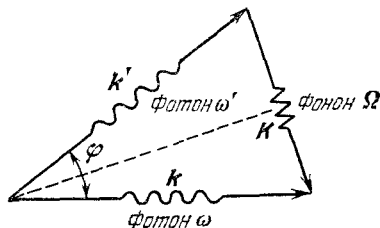
Правило отбора для волнового вектора запишется в виде

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{K}, \quad (5.8)$$

где для простоты не учтена возможность сочетания процессов рассеяния и брэгговской дифракции, и поэтому соотношение (5.8) не содержит вектора обратной решетки, который присутствует в (5.3). Если скорость звука v_s постоянна, то $\Omega = v_s K$, так как $\lambda\Omega/2\pi = v_s$.

Из-за большого различия скоростей звука и света лишь малая часть энергии падающего фотона может быть передана фонону. Для фонона с волновым вектором \mathbf{K} , сравнимым по величине с волновым вектором фотона \mathbf{k} , можно записать, что $ck \gg \gg v_s K$. А так как $\omega = ck$ и $\Omega = v_s K$, то $\omega \gg \Omega$. Из (5.7) следует, что $\omega' \approx \omega$ и $k' \approx k$.

Рис. 5.3. Диаграмма, иллюстрирующая правило отбора для процесса, изображенного на рис. 5.2. Если $k = k'$, то треугольник является равнобедренным. Основанием треугольника является волновой вектор длиной $K = 2k \sin(\varphi/2)$.



Если $k' \approx k$, из рис. 5.3 видно, что

$$K \approx 2k \sin(\varphi/2), \quad (5.9)$$

или, поскольку $k = \omega n/c$ [см. соотношение (5.5)], можно записать:

$$v_s K \approx \frac{2v_s \omega n}{c} \sin(\varphi/2). \quad (5.10)$$

А так как $\Omega = v_s K$, то фононы, образовавшиеся при неупругом рассеянии фотонов под углом φ к первоначальному направлению падения, будут иметь частоту

$$\Omega \approx \frac{2v_s \omega n}{c} \sin(\varphi/2), \quad (5.11)$$

где n — показатель преломления кристалла.

Пример. Генерация фононов. Пусть на среду с показателем преломления $n \approx 1,5$ падает видимый свет, длина волны которого в вакууме равна $\lambda = 4000 \text{ \AA}$, и пусть скорость распространения звука в среде $v_s \approx 5 \cdot 10^5 \text{ см/сек}$. В этом случае для максимальной частоты фононов, возникающих в результате рассеяния света в среде, имеем:

$$\Omega \approx \frac{2 \cdot 5 \cdot 10^5 \cdot 2\pi \cdot 1,5}{4 \cdot 10^{-5}} \approx 2 \cdot 10^{11} \text{ рад/сек} \quad (5.12)$$

[мы воспользовались формулой (5.11), где положили $\sin(\varphi/2) = 1$]. На этой частоте $K = \Omega/v_s \approx 4 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$. Относительное изменение частоты света в результате рассеяния равно $5 \cdot 10^{-5}$.

Рассеяние видимого света от интенсивного лазерного источника использовалось для генерации фононов в микроволновой области в кварце и сапфире [5]. Наблюдаемые смещения частоты фотонов находятся в хорошем соответствии с величинами, рассчитанными из соотношения (5.11) с использованием величины скорости звука, измеренной при низких частотах ультразвуковыми методами.

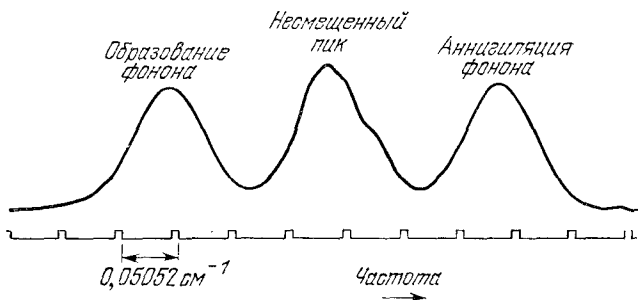


Рис. 5.4. Спектральная кривая световой волны с $\lambda = 6328 \text{ \AA}$, рассеянной под прямым углом в воде при комнатной температуре [8]. Несмещенный центральный пик в районе частоты излучения лазера обусловлен главным образом тиндалевским рассеянием на мельчайших частицах, находящихся во взвешенном состоянии в воде. Ширина линии обусловлена шириной щели спектрографа. Спектр был снят с помощью регистрирующего прибора за 5 минут. Частота фонона, определенная из этой спектральной кривой, равнялась $(4,33 \pm 0,02) \cdot 10^9 \text{ Гц}$. Скорость рассчитывалась из соотношения (5.11) и равнялась $(1,457 \pm 0,010) \cdot 10^9 \text{ см/сек}$.

Рассеяние света на фононах в твердых телах и жидкостях известно под названием *бриллюэновского рассеяния*¹⁾. Спектр монохроматического света, рассеянного в воде, показан на рис. 5.4. Возбуждение акустических фононов в кристаллах было зарегистрировано с помощью дифракции света [9] (см. также рис. 1 в работе [10]).

НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА ФОНОНАХ

Одним из методов изучения фононного спектра твердых тел является метод неупругого рассеяния рентгеновских лучей на фононах. Проведенное выше рассмотрение можно использовать и для случая неупругого или диффузного рассеяния рентгеновских фотонов в процессах, в которых возникает или поглощается

¹⁾ См. работу Бриллюэна [6]. Обзор работ по эффекту Рамана в кристаллах дан в работе Лаудона [7].

Рис. 5.5. Дисперсионные кривые, определенные с помощью неупругого рассеяния рентгеновских лучей на фононах, распространяющихся вдоль оси [110] в алюминии. Черными точками показаны значения для продольной волны L ; светлыми — для поперечной волны T_1 , в которой частицы колеблются параллельно оси [001]; треугольниками — для поперечной волны T_2 , параллельной направлению [110]. (По Уолкеру [11].)

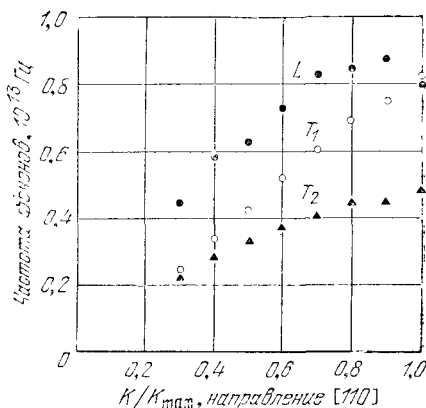
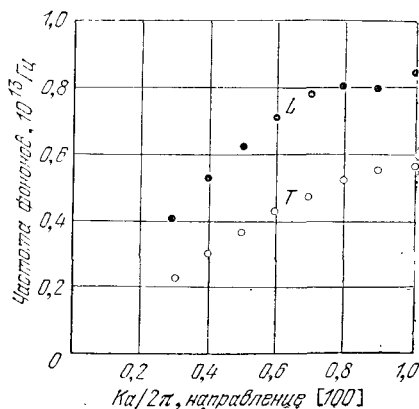


Рис. 5.6. Дисперсионные кривые для упругих волн, распространяющихся вдоль оси [100] в алюминии, полученные с помощью неупругого рассеяния рентгеновских лучей. Значения для продольной и поперечной волн обозначены соответственно темными и светлыми точками. (По Уолкеру.)



ся один фонон. На рис. 5.5 и 5.6 показаны результаты рассеяния такого рода в алюминии, полученные в работе Уолкера [11].

В таких экспериментах мы ищем частоту фонона как функцию его волнового вектора \mathbf{K} . Волновой вектор фонона определяется из законов сохранения волнового вектора, т. е. из вытекающих из них соотношений (5.10) или (5.11). К сожалению, трудно непосредственно определить обусловленное рассеянием очень небольшое изменение частоты рентгеновских лучей. Эксперименты по рассеянию нейтронов имеют то преимущество, что изменение их энергии (и, следовательно, частоты) можно определить непосредственно.

НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ НА ФОНОНАХ

Нейтрон взаимодействует с кристаллической решеткой главным образом за счет взаимодействия с ядрами атомов. Кинематическая схема рассеяния пучка нейтронов на кристаллической решетке обуславливается обычным правилом отбора волнового вектора [см. соотношения (5.3) или (5.4)]

$$\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}' \pm \mathbf{K} \quad (5.13)$$

и требованием сохранения энергии. Знак плюс перед волновым вектором \mathbf{K} соответствует процессу образования фонона, знак минус — процессу исчезновения фонона; \mathbf{G} — произвольный вектор обратной решетки.

Кинетическая энергия падающего на кристалл нейтрона равна $p^2/2M_n$, где M_n — масса нейтрона. Импульс нейтрона \mathbf{p} равен $\hbar\mathbf{k}$, где \mathbf{k} — волновой вектор нейтрона. Таким образом, кинетическая энергия падающего на кристалл нейтрона равна $\hbar^2 k^2/2M_n$. Если волновой вектор нейтрона, претерпевшего рассеяние, равен \mathbf{k}' , то энергия такого нейтрона равна $\hbar^2 k'^2/2M_n$. Условие сохранения энергии можно написать так:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2M_n} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2M_n} \pm \hbar\omega_{\mathbf{K}} \quad (5.14)$$

Знак плюс перед значением энергии фонона $\hbar\omega_{\mathbf{K}}$ соответствует процессу образования фонона, а минус — процессу исчезновения фонона.

Для нахождения дисперсионного закона¹⁾ с использованием выражений (5.13) и (5.14) необходимо экспериментально определить приращение или потерю энергии нейтронов, испытавших рассеяние, в зависимости от направления рассеяния $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$.

¹⁾ Кинематическая схема, иллюстрирующая неупругое рассеяние нейтронов, приведена в книге автора [12]. Очень хороший обзор работ по неупругому рассеянию нейтронов дан в книге [13].

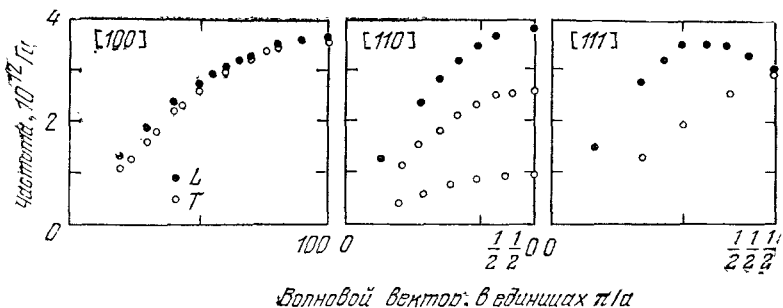


Рис. 5.7а. Дисперсионные кривые натрия для фононов, распространяющихся в направлениях $[100]$, $[110]$ и $[111]$ при 90°K , полученные с помощью неупругого рассеяния нейтронов [14]; ● — продольная волна, ○ — поперечная. (Из работы Вудса и др. [14].)

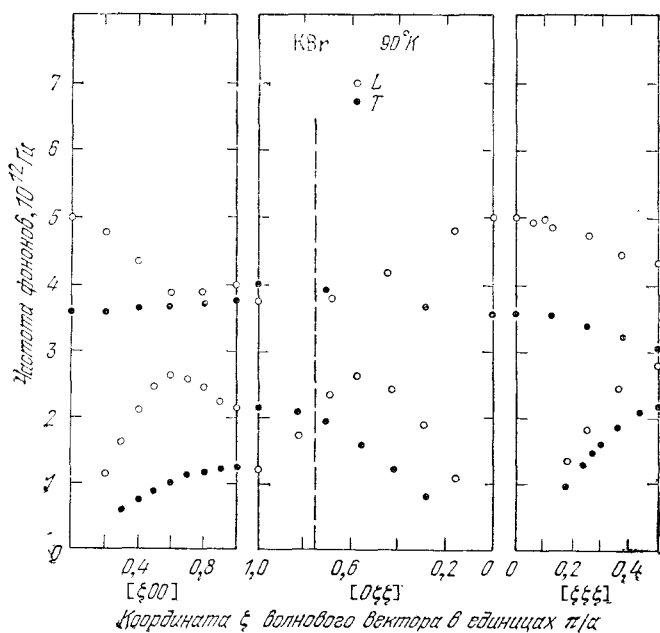


Рис. 5.7б. Дисперсионные кривые для оптической и акустической ветвей фононного спектра KBr при 90°K [15]. Данные могут очень хорошо соответствовать простой оболочечной модели, обсуждаемой в работах [16—18].

На рис. 5.7а показан фононный спектр натрия, как пример надежно определенного фононного спектра для металла. На рис. 5.7б показан фононный спектр ионного кристалла KBr.

При подходящих условиях метод нейтронного рассеяния является идеальным методом для определения фононного спектра. Однако этот метод не может быть использован, когда поглощение нейтронов ядрами атомов, составляющих кристалл,

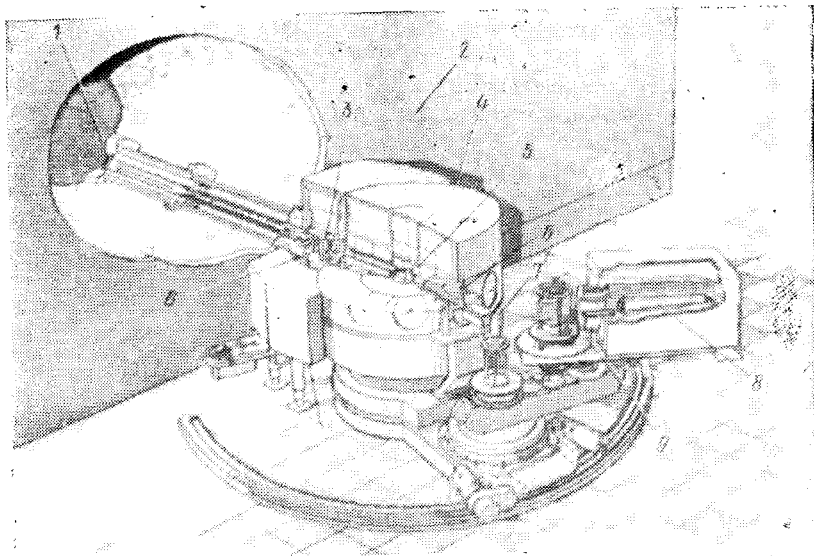


Рис. 5.8. Разрез трехканального кристаллического спектрометра Брокхауза, показанного на рис. 5.9. 1 — заглушка канала реактора; 2 — наружная поверхность реактора; 3 — вспомогательная заглушка; 4 — вращающееся защитное ограждение; 5 — кристалл-монокроматор; 6 — контрольный счетчик; 7 — образец; 8 — счетчик, наполненный BF_3 ; 9 — кристалл-анализатор.

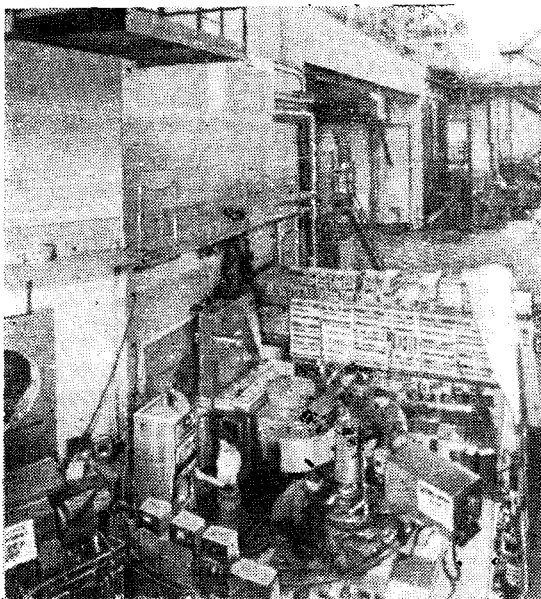


Рис. 5.9. Трехканальный кристаллический спектрометр, расположенный возле реактора с большой плотностью нейтронного потока. Спектрометр разработан Б. Н. Брокхаузом с сотрудниками в Лаборатории ядерной физики Центра по атомной энергии в Чок-Ривер (Канада) для исследования фононов в кристаллах с помощью неупругого рассеяния нейтронов.

велико. При определенных обстоятельствах можно получить ценные сведения о временах жизни фононов из угловой ширины пучка нейтронов, испытавшего рассеяние. На рис. 5.8 и 5.9 показан спектрометр, используемый для исследования фононов в кристаллах с помощью неупругого рассеяния нейтронов в лаборатории Чок-Ривер (Канада). Другим крупным центром по изучению данной проблемы является Брукхейвенская национальная лаборатория (США).

КОЛЕБАНИЯ В РЕШЕТКЕ ИЗ ОДИНАКОВЫХ АТОМОВ

Рассмотрим упругие колебания атомов в кристаллах в области коротких упругих волн, когда длина волны сравнима с постоянной решетки кристалла. Периодичность кристаллической структуры существенно влияет на характер распространения упругих волн, как и в случае рентгеновских лучей.

Для простоты рассмотрим распространение упругих волн по направлениям, для которых упругая волна является или чисто поперечной, или чисто продольной¹⁾. (Рассматриваем только кристаллы с примитивным базисом из одного атома.) В кубическом кристалле такими направлениями являются направления $[100]$, $[111]$ и $[110]$. Когда упругая волна распространяется вдоль одного из этих направлений, все атомные плоскости в кристалле смещаются синфазно. Это смещение параллельно направлению распространения для продольной волны и перпендикулярно направлению распространения для поперечной волны. Для этих частных случаев распространения упругих волн математическое рассмотрение является довольно простым, и мы из соотношений между частотой ω и волновым вектором \mathbf{K} можем многое узнать о силах связи между атомными плоскостями.

Если атомные плоскости смещаются как единое целое параллельно или перпендикулярно волновому вектору \mathbf{K} при прохождении волны, то смещение плоскости s из положения равновесия может быть описано с помощью величины u_s , характеризующей величину смещения. Предполагаем пока, что все атомные плоскости одинаковы. На рис. 5.10 показано смещение атомов при прохождении продольной волны, а на рис. 5.11 — при прохождении поперечной.

Предположим, что сила, действующая на плоскость s и обусловленная смещением плоскости $s + p$, пропорциональна разности их смещений $u_{s+p} - u_s$. Тогда для результирующей силы, действующей на плоскость s , можно записать:

$$F_s = \sum_p C_p (u_{s+p} - u_s). \quad (5.15)$$

¹⁾ Для произвольного направления распространения упругая волна не является ни чисто поперечной, ни чисто продольной.

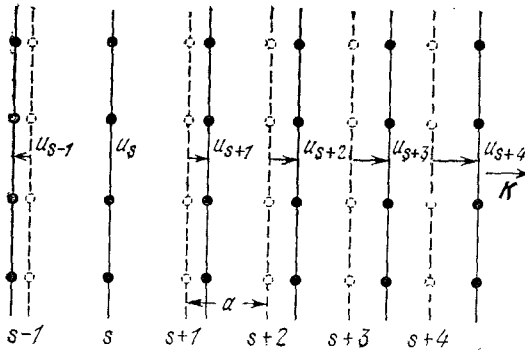


Рис. 5.10. Штриховыми линиями обозначены атомные плоскости, находящиеся в равновесном состоянии, сплошными линиями — атомные плоскости, смещенные относительно равновесного положения при прохождении продольной волны. Величина u служит мерой смещения плоскостей.

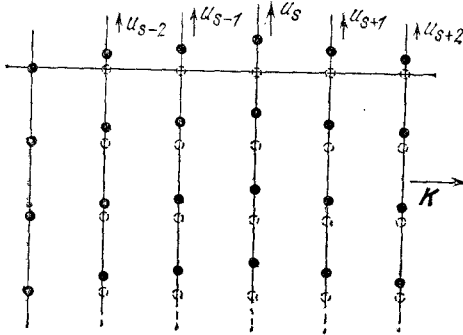


Рис. 5.11. Смещение атомных плоскостей при прохождении поперечной волны.

Из (5.15) видно, что сила F_s является линейной функцией смещений; выражение (5.15) записано в форме закона Гука. Постоянная C_p есть силовая постоянная для плоскостей, находящихся на расстоянии p . Она будет иметь различную величину для продольной и поперечной воли. Удобно рассматривать C_p как силовую постоянную, определенную для одного атома, так что сила F_s в данном случае является силой, действующей на один атом в плоскости s .

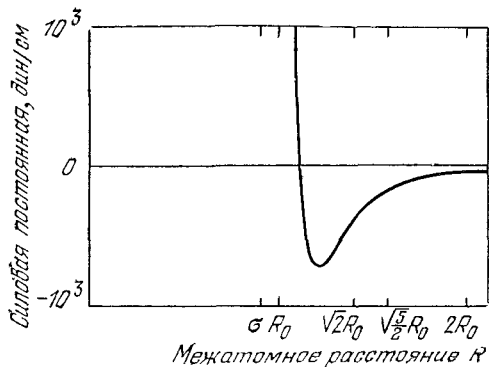
Какова связь между C_p и потенциальной энергией двух атомов? Пусть $U(R_0)$ — потенциальная энергия системы, состоящей из двух атомов, находящихся в состоянии равновесия на расстоянии R_0 . Если расстояние между атомами увеличивается на величину ΔR , то новую величину потенциальной энергии можно записать в виде ряда:

$$U(R) = U(R_0) + \left(\frac{dU}{dR}\right)_{R_0} \Delta R + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R_0} (\Delta R)^2 + \dots \quad (5.15a)$$

Для силы, вызванной изменением межатомного расстояния на ΔR , имеем

$$F = -\frac{dU}{d\Delta R} = -\left(\frac{dU}{dR}\right)_{R_0} - \left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R_0} \Delta R + \dots \quad (5.15b)$$

Рис. 5.12. Зависимость силовой постоянной $C = \partial^2 U / \partial R^2$ от межатомного расстояния для случая взаимодействия двух атомов аргона в соответствии с потенциалом Леннарда-Джонса. По горизонтальной оси отложены расстояния между ближайшими, вторыми, третьими и четвертыми соседями. Силовая постоянная взаимодействия двух атомов, находящихся на расстоянии $R_0 = 1,11\sigma$, которое является равновесным расстоянием в кристалле, равна $+6,6 \cdot 10^3$ дин/см $= 6,6$ Н/м. (R. Gray.)



Однако нас не интересует член $-(dU/dR)_{R_0}$, потому что, во-первых, он не зависит от ΔR , а, во-вторых, когда мы суммируем по всем плоскостям, взаимодействующим с данной, результирующая сила в состоянии равновесия должна равняться нулю. В данном случае силовая постоянная C определяется соотношением $F = -C \Delta R$, и для нее можно записать:

$$C = \left(\frac{d^2 U}{dR^2} \right)_{R_0}. \quad (5.15в)$$

Последнее выражение характеризует вклад этой пары атомов в силовую постоянную. Зависимость $C = f(R)$ для потенциала Леннарда-Джонса для аргона приведена на рис. 5.12. Для того чтобы получить величину C_p , необходимо просуммировать вклады от всех пар атомов в двух плоскостях, а затем разделить на число атомов в одной плоскости.

Уравнение движения плоскости s можно записать в виде

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_p C_p (u_{s+p} - u_s), \quad (5.16)$$

где M — масса атома. При суммировании индекс p принимает все возможные положительные и отрицательные целые значения.

Ищем решение уравнения (5.16) в форме поперечной волны:

$$u_{s+p} = u e^{i(s+p)Ka} e^{-i\omega t}, \quad (5.17)$$

где a — расстояние между плоскостями¹⁾, а K — волновой вектор. Подставляя (5.17) в (5.16), получаем:

$$-\omega^2 M u e^{i s K a} e^{-i \omega t} = \sum_p C_p (e^{i(s+p)Ka} - e^{i s K a}) u e^{-i \omega t}. \quad (5.18)$$

¹⁾ Величина межплоскостного расстояния для данной решетки будет зависеть от направления K .

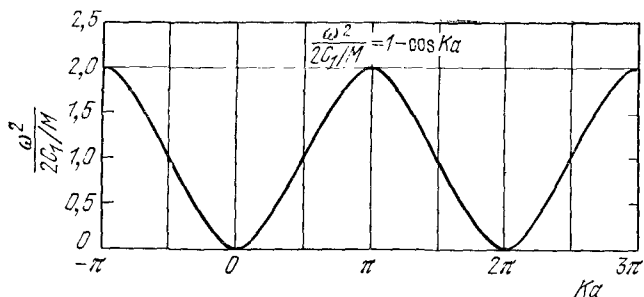


Рис. 5.13а. Зависимость ω^2 от K для решетки, в которой учитываются взаимодействия только между ближайшими соседними плоскостями. C_1 — межплоскостная силовая постоянная, a — межплоскостное расстояние.

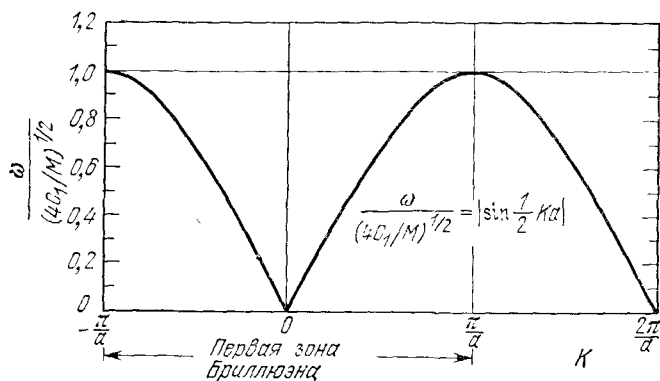


Рис. 5.13б. Зависимость ω от K для модели, используемой в рис. 5.12. Область $K \ll 1/a$, или $\lambda \gg a$, соответствует континуальному приближению; здесь ω прямо пропорциональна K .

После сокращения на $ue^{isKa}e^{-i\omega t}$ получим:

$$\omega^2 M = - \sum_p C_p (e^{ipKa} - 1). \quad (5.19)$$

Если примитивный базис содержит только один атом, то из трансляционной симметрии следует, что $C_p = C_{-p}$, и (5.19) можно перегруппировать следующим образом:

$$\omega^2 M = - \sum_{p>0} C_p (e^{ipKa} + e^{-ipKa} - 2). \quad (5.20)$$

Используя тождество $2 \cos pKa \equiv e^{ipKa} + e^{-ipKa}$, получаем дисперсионный закон:

$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p (1 - \cos pKa). \quad (5.21)$$

Заметим, что тангенс угла наклона кривой, описывающей зависимость $\omega = f(K)$, всегда равен нулю при $K = \pm\pi/a$. В этом случае имеем:

$$\frac{d\omega^2}{dK} = \frac{2}{M} \sum_{p>0} paC_p \sin pKa = 0, \quad (5.22)$$

так как $\sin pKa = \sin(\pm p\pi) = 0$. Этот результат показывает, что значение волнового вектора фонона, лежащее на границе зоны Бриллюэна, является особым, как и для волнового вектора фотона (см. гл. 2).

Если учитывать взаимодействия только между ближайшими соседними плоскостями, то (5.21) сводится к выражению

$$\omega^2 = (2C_1/M) (1 - \cos Ka). \quad (5.23a)$$

Используя известное тригонометрическое тождество, можно записать (5.23a) в ином виде:

$$\omega^2 = \frac{4C_1}{M} \sin^2 \frac{Ka}{2}, \quad \omega = \left(\frac{4C_1}{M} \right)^{1/2} \left| \sin \frac{Ka}{2} \right|. \quad (5.23b)$$

Мы выбираем знак квадратного корня так, чтобы частота ω для устойчивой решетки была всегда положительна. На рис. 5.13a и 5.13б приводятся зависимости ω^2 от Ka и ω от K . Обе зависимости являются периодическими функциями с периодом $2\pi/a$.

Первая зона Бриллюэна. Какая область значений K имеет физический смысл для фононов? Из (5.17) можно получить отношение смещений двух соседних плоскостей:

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = \frac{u e^{i(s+1)Ka} e^{-i\omega t}}{u e^{isKa} e^{-i\omega t}} = e^{iKa}. \quad (5.24)$$

Область от $-\pi$ до $+\pi$ для фазы Ka экспоненциального множителя e^{iKa} включает все независимые значения этого множителя. Абсолютно бессмысленно утверждение, что два соседних атома не могут иметь фазы, отличающиеся более чем на $+\pi$: так, относительная фаза $1,2\pi$, например, физически идентична относительной фазе $-0,8\pi$, а относительная фаза $4,2\pi$ — фазе $0,2\pi$. Необходимо, чтобы существовали как положительные, так и отрицательные величины K , так как волны могут распространяться

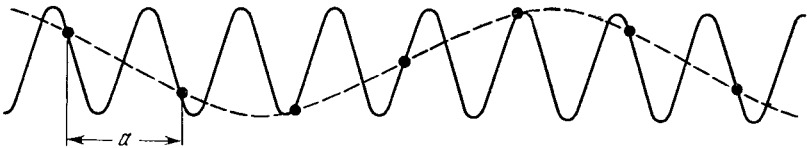


Рис. 5.13в. Волна, изображенная сплошной линией, содержит ту же информацию, что и волна, изображенная пунктиром, у которой $\lambda \gg 2a$. С помощью последней показано смещение атомов. (Р. Хансма)

как направо, так и налево. Таким образом, область независимых значений K можно определить следующими неравенствами¹⁾:

$$-\pi \leq Ka \leq \pi, \text{ или } -\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}. \quad (5.25)$$

Эта область значений K называется *первой зоной Бриллюэна* линейной решетки (см. гл. 2). Предельные значения K в этой зоне равны

$$K_{\max} = \pm \frac{\pi}{a}, \quad (5.26)$$

где K_{\max} может быть порядка 10^8 см^{-1} .

Предположим, что мы используем значения K , лежащие вне первой зоны Бриллюэна (рис. 5.13в). Такие значения просто воспроизводят движения решетки, уже описанные значениями K , лежащими в пределах $\pm\pi/a$. Таким образом, величину K внутри этих пределов можно рассматривать как результат вычитания соответствующего значения, кратного $2\pi/a$, что дает в результате волновой вектор, величина которого лежит внутри указанных пределов.

Предположим, что K лежит вне первой зоны Бриллюэна, но волновой вектор, связанный с ним соотношением $K' \equiv K - (2\pi n/a)$, где n — целое число, лежит в первой зоне. Тогда отношение смещений (5.24) можно записать так:

$$\frac{u_{s+p+1}}{u_{s+p}} = e^{iKa} \equiv e^{2\pi ni} e^{i(Ka - 2\pi n)} \equiv e^{iK'a}, \quad (5.27)$$

так как $e^{i2\pi n} = 1$. Таким образом, смещение всегда можно описать с помощью значения волнового вектора, лежащего в первой зоне Бриллюэна. Заметим, что поскольку $2\pi n/a$ — вектор обратной решетки, то и $2\pi/a$ — вектор обратной решетки. Вычитанием соответствующего вектора обратной решетки из K мы всегда получим эквивалентный волновой вектор в первой зоне Бриллюэна.

У границ первой зоны Бриллюэна $K_{\max} = \pm\pi/a$ и решение

$$u_s = u e^{isKa} e^{-i\omega t}$$

будет описывать не бегущую, а стоячую волну²⁾. У границ зоны $sK_{\max}a = \pm s\pi$, откуда

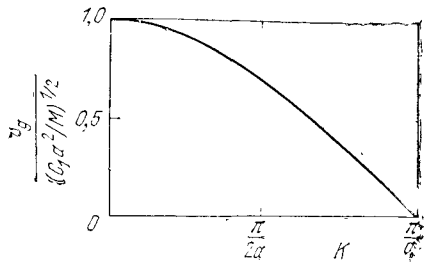
$$u_s = u e^{\pm is\pi} e^{-i\omega t} = u (-1)^s e^{-i\omega t}. \quad (5.28)$$

Это и есть уравнение стоячей волны. Ниже мы покажем, что групповая скорость равна нулю. Для этой волны соседние ато-

¹⁾ Заметим, что в этом заключается существенное отличие дискретной структуры от упругой сплошной среды. В континуальном приближении $a \rightarrow 0$ и $K_{\max} \rightarrow \pm\infty$.

²⁾ Мы обнаружим это свойство также для волновых функций электронов проводимости у границ зоны (см. гл. 9).

Рис. 5.14. Зависимость групповой скорости от K для модели, используемой в рис. 5.13. На границе зоны групповая скорость равна нулю. Получаемая в настоящее время в лабораторных условиях область значений K слишком ограничена, и часть экспериментального графика для значений K , близких к нулю, построить нельзя.



мы движутся в противофазе, так как $\cos \pi = \pm 1$ в зависимости от того, является ли s четным или нечетным целым числом. Волна не движется ни влево, ни вправо, т. е. является стоячей.

В этом результате легко усмотреть полную аналогию с брэгговским отражением рентгеновских лучей. Действительно, когда условие Брэгга выполняется, бегущая волна уже не может распространяться в решетке, поскольку имеют место прямое и обратное отражения и в кристалле устанавливается стоячая волна. Критические значения волнового вектора $K_{\max} = \pm \pi/a$ удовлетворяют условию Брэгга $2d \sin \theta = n\lambda$, если положить $\theta = \pi/2$, $d = a$, $K = 2\pi/\lambda$, $n = 1$, так что $\lambda = 2a$. Для рентгеновских лучей n может равняться и другим целым числам, а не только 1, так как понятие амплитуды волны имеет смысл в пространстве между атомами, а понятие амплитуды смещения упругой волны имеет смысл только вблизи самих атомов.

Групповая скорость. Скорость волнового пакета является групповой скоростью. В физической оптике для групповой скорости приводятся следующие выражения:

$$v_g = \frac{d\omega}{dK}, \quad \text{или} \quad v_g = \text{grad}_K \omega(K) \quad (5.29a)$$

в двух или трех измерениях, где grad_K есть градиент по K . Групповая скорость — это скорость переноса энергии в среде. Для дисперсионного соотношения (5.23) групповая скорость (рис. 5.14) равна

$$v_g = \left(\frac{C_0 a^2}{M} \right)^{1/2} \cos \frac{Ka}{2}. \quad (5.29b)$$

Наш основной результат (5.22) показывает, что на краю зоны Бриллюэна групповая скорость равна нулю. А этот результат как раз и справедлив для стоячей волны.

Область больших длин волн, или континуальное приближение. Для $pKa \ll 1$ получаем: $\cos pKa \approx 1 - 1/2(pKa)^2$, и дисперсионный закон примет вид:

$$\omega^2 = K^2 \left(\frac{a^2}{M} \right) \sum_{p>0} p^2 C_p. \quad (5.30)$$

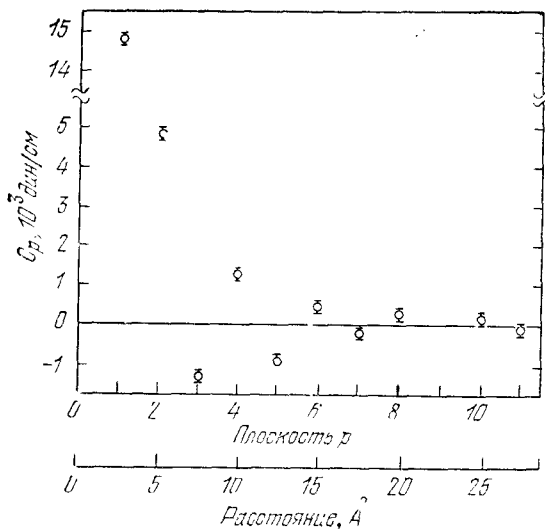


Рис. 5.15. Межплоскостные силовые постоянные для продольных волн в направлении [100] в свинце при 100°К (из работы [21]). По горизонтальной оси отложено расстояние от исходной плоскости. (10^3 дин/см = 1 Н/м.)

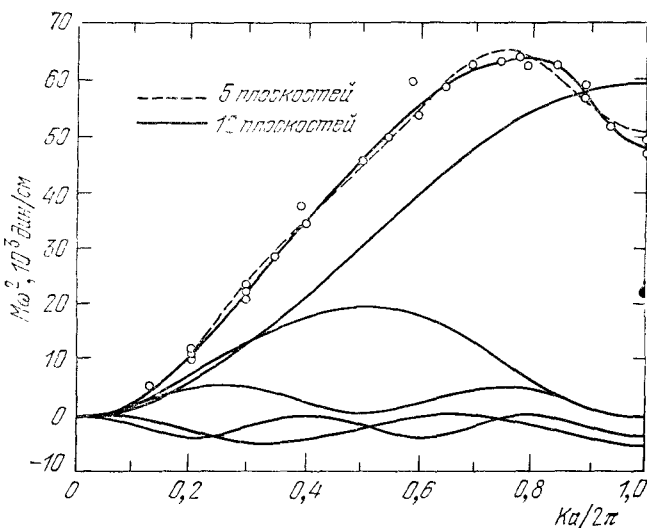


Рис. 5.16. Зависимость величины $M\omega^2$ от $Ka/2\pi$ для продольной ветви в направлении [100] в свинце. Показаны эмпирически подобранные кривые для двенадцати плоскостей (хорошая аппроксимация) и пяти плоскостей. Начерчены также первые пять фурье-компонент.

Из гл. 4 мы знаем, что $\omega^2 = K^2 \times \left(\frac{\text{упругая жесткость}}{\text{плотность}} \right)$. Член p^2 при суммировании в (5.30) будет стремиться дать дальнедействующие силовые компоненты, играющие важную роль при определении макроскопических упругих постоянных.

Вычисление силовых постоянных из экспериментально найденного дисперсионного закона. Во многих металлах результирующие силы могут быть достаточно дальнедействующими. Были наблюдаемы явления, в которых обнаруживалась связь между атомными плоскостями, разделенными друг от друга двадцатью межатомными расстояниями [19]. Область действия сил довольно просто можно определить из дисперсионного закона для ω .

Решим уравнение (5.21) относительно C_p , умножив правую и левую его части на $\cos rKa$, где r — целое число, и интегрируя по K в пределах первой зоны Бриллюэна:

$$M \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dK \omega_K^2 \cos rKa = 2 \sum_{p>0} C_p \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dK (1 - \cos pKa) \cos rKa = \\ = -2\pi C_p/a. \quad (5.31a)$$

Все интегралы равны нулю, за исключением интеграла, для которого $p = r$. Таким образом,

$$C_p = -\frac{Ma}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dK \omega_K^2 \cos pKa. \quad (5.31б)$$

Это соотношение является важным результатом¹⁾: оно выражает силовую постоянную от p -й атомной плоскости через косинус-преобразование Фурье ω^2 как функцию K . Это выражение справедливо только для моноатомных решеток.

РЕШЕТКА С ДВУМЯ АТОМАМИ В ПРИМИТИВНОЙ ЯЧЕЙКЕ

В кристаллах, которые имеют несколько атомов в примитивной ячейке, спектр колебаний обладает новыми особенностями. Рассмотрим кристаллы, имеющие два атома в примитивной ячейке, как в структурах NaCl и алмаза. Для каждого вида смещений (как для продольного, так и для поперечного) при данном направлении распространения в дисперсионном законе, т. е. в зависимости ω от K , возникают две ветви, называемые *акустической* и *оптической ветвями*. Аналогично называются соответствующие фононы. Обозначим через LA продольные, а через TA поперечные акустические фононы, а через LO и TO , соответственно, — продольные и поперечные оптические фононы (см. рис. 5.17а).

¹⁾ Этот результат получен Фореманом и Ломером [20]. Его связь с экспериментально установленным дисперсионным законом для свинца (рис. 5.15 и 5.16) рассматривается Брокхаузом и др. [21]. Происхождение дальнедействующих сил в нескольких металлах обсуждается в работах [22, 23]. Впервые этот вопрос был рассмотрен для натрия в 1958 г. в работах Тойя (Т. Тоуя).

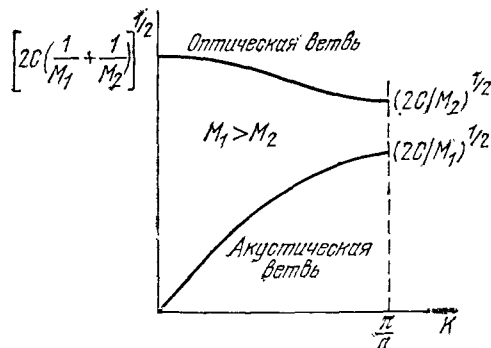


Рис. 5.17а. Оптические и акустические фоновые ветви дисперсионного закона для двухатомной линейной решетки. Показаны предельные значения частот при $K=0$ и $K=K_{\max}=\pi/a$, где a — постоянная решетки.

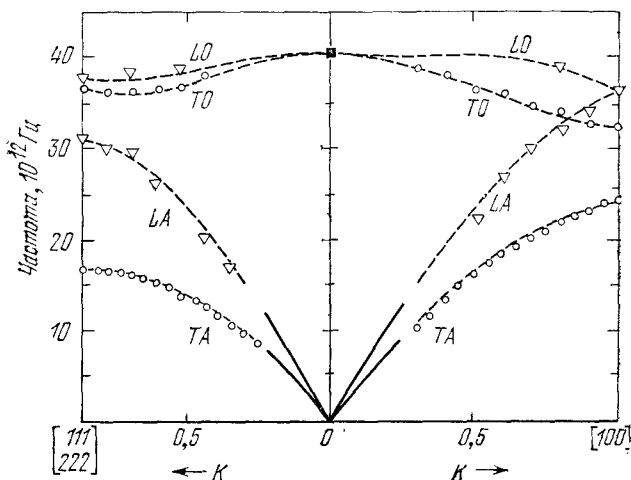


Рис. 5.17б. Экспериментальные дисперсионные кривые зависимости ν от K для алмаза в направлениях $[100]$ и $[111]$, где K — приведенный волновой вектор в единицах π/a . Обращает на себя внимание существование оптической и акустической ветвей, характерное для кристалла с двумя атомами (даже одинаковыми) на примитивную ячейку. Правая половина рисунка относится к фононам, распространяющимся в направлении $[100]$, левая — к распространяющимся в направлении $[111]$. В указанных направлениях распространения поперечные моды являются дважды вырожденными: имеются два независимых направления поляризации для каждой точки кривых TA и TO [24].

Если примитивная ячейка содержит p атомов, то в дисперсионном законе для фононов возникнут $3p$ ветвей: 3 акустические ветви и $(3p - 3)$ оптические ветви. Так, алмаз, у которого примитивная ячейка содержит два атома углерода, имеет шесть фоновых ветвей: одну LA , одну LO , две TA , две TO (рис. 5.17б).

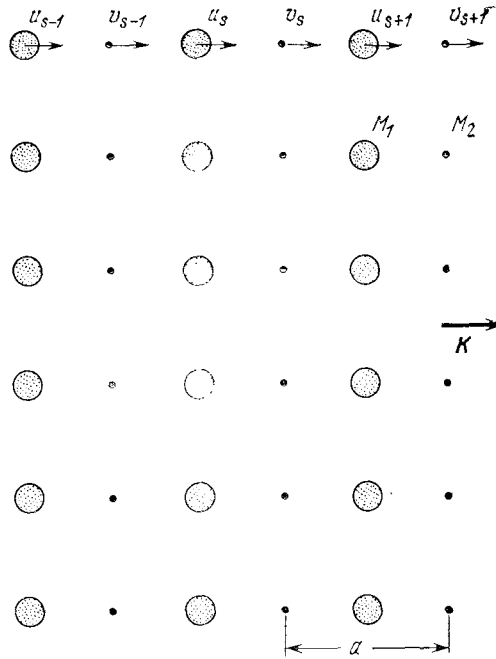


Рис. 5.17в. Двухатомная кристаллическая структура, атомные массы которой равны M_1 и M_2 ; смежные плоскости в этой структуре связаны посредством силовой постоянной C . Смещения атомов M_1 обозначены u_{s-1} , u_s , u_{s+1} , атомов M_2 — v_{s-1} , v_s , v_{s+1} . Через a обозначен период повторяемости в направлении волнового вектора K . Атомы показаны в равновесных (несмещенных) позициях.

Рассмотрим кубический кристалл, в котором атомы с массой M_1 образуют одну систему плоскостей, а атомы с массой M_2 — другую систему плоскостей, которые расположены между плоскостями первой системы (рис. 5.17в). Не существенно, равны эти массы или нет; существенно, что эти два атома базиса действительно не эквивалентны либо по их силовым постоянным, либо по их массам. Обозначим через a период решетки в направлении нормали к рассматриваемым плоскостям решетки. Рассматриваем только волны, распространяющиеся в симметричном направлении, для которого каждая отдельная плоскость содержит только один тип ионов; такими направлениями являются направление $[111]$ в структуре NaCl и направление $[100]$ в структуре CsCl .

Запишем уравнения движения в предположении, что каждая плоскость взаимодействует только с ближайшими соседними плоскостями и что силовые постоянные одинаковы для всех пар плоскостей, являющихся ближайшими соседями. Пользуясь схемой рис. 5.17в, получим:

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C (v_s + v_{s-1} - 2u_s), \quad M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C (u_{s+1} + u_s - 2v_s). \quad (5.32)$$

Решения этих уравнений будем искать в форме бегущей волны с различными амплитудами u и v для чередующихся плоскостей:

$$u_s = u e^{i s K a} e^{-i \omega t}, \quad v_s = v e^{i s K a} e^{-i \omega t}. \quad (5.33)$$

Подставляя (5.33) в (5.32), получим:

$$-\omega^2 M_1 u = C v (1 + e^{-iKa}) - 2Cu, \quad -\omega^2 M_2 v = Cu (e^{iKa} + 1) - 2Cv. \quad (5.34)$$

Эта система однородных линейных уравнений относительно двух неизвестных u и v имеет нетривиальное решение лишь в том случае, если детерминант, составленный из коэффициентов при u и v , равен нулю:

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1 \omega^2 & -C(1 + e^{-iKa}) \\ -C(1 + e^{iKa}) & 2C - M_2 \omega^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (5.35)$$

или

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos Ka) = 0. \quad (5.36)$$

Мы можем решить это уравнение точно относительно ω^2 , но проще сразу рассмотреть предельные случаи $Ka \ll 1$ и $Ka = \pm\pi$ у границы зоны. В первом случае (для малых значений Ka) имеем: $\cos Ka \approx 1 - 1/2 K^2 a^2 + \dots$, и получаем два корня уравнения (5.36):

$$\omega^2 \approx 2C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{оптическая ветвь}), \quad (5.37)$$

$$\omega^2 \approx \frac{1/2 C}{M_1 + M_2} K^2 a^2 \quad (\text{акустическая ветвь}). \quad (5.38)$$

Область значений K в первой зоне Бриллюэна описывается неравенством $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$, где a — период решетки; второй случай отвечает границам первой зоны, где значения K максимальны, т. е. $K_{\max} = \pm\pi/a$; тогда имеем корни

$$\omega^2 = 2C/M_1, \quad \omega^2 = 2C/M_2. \quad (5.39)$$

Зависимость ω от K показана на рис. 5.17а для случая $M_1 > M_2$.

Колебания частиц в поперечной акустической (TA) и поперечной оптической (TO) ветвях показаны на рис. 5.18. Для оптической ветви при $K = 0$ из (5.34) и (5.37) можно найти:

$$\frac{u}{v} = -\frac{M_2}{M_1}. \quad (5.40)$$

Этот результат показывает, что атомы при оптических колебаниях движутся навстречу друг другу, причем так, что центр их масс в ячейке остается фиксированным. Если ионы заряжены противоположно, то движение такого типа можно возбудить электрическим полем световой волны¹⁾; по этой причине верхняя ветвь кривой на рис. 5.17а и была названа оптической²⁾.

¹⁾ Влиянием на ионы магнитного поля световой волны можно пренебречь, так как в выражение для силы, действующей со стороны магнитного поля на электрический заряд иона, входит отношение v/c , где v — скорость движения иона в решетке.

²⁾ Частоты поглощения в оптической ветви лежат в инфракрасной области спектра.

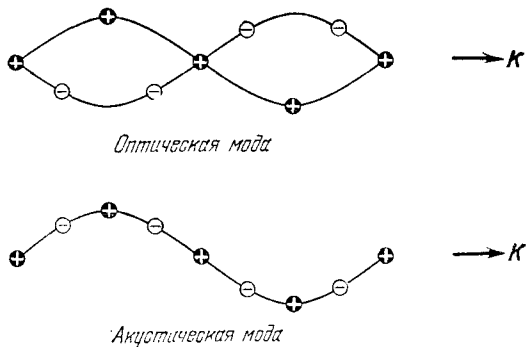


Рис. 5.18. Поперечные оптические и поперечные акустические волны одинаковой длины волны в двухатомной линейной решетке, иллюстрирующие колебания частиц двух видов колебаний (оптического и акустического).

Если кристалл поглощает фотон с образованием одного фонона¹⁾, то условие сохранения волнового вектора приводит к равенству $k_{\text{фотон}} = K_{\text{фонон}}$. Значения волновых векторов фотонов на соответствующих частотах ($\sim 10^{13}$ Гц) имеют порядок величины 10^3 см^{-1} , но значения волновых векторов фононов доходят до 10^8 см^{-1} . Таким образом, фононы, образованные фотонами в прямых процессах, имеют малые волновые векторы.

Заметим, что из рис. 5.17а вытекает отсутствие решений уравнения для волн, распространяющихся в двухатомной решетке, когда частоты заключены в интервале между $\sqrt{2C/M_1}$ и $\sqrt{2C/M_2}$. Этот факт является характерной особенностью распространения упругих волн в многоатомной решетке. Можно сказать, что в этом случае имеется *запрещенная область* частот, расположенная у границы $K_{\text{max}} = \pm\pi/a$ первой зоны Бриллюэна. В этой области не существует решений для вещественных значений K и волновой вектор является комплексной величиной, так что любая волна с частотой, попадающей в запрещенную область, сильно поглощается. Аналогичный эффект для фотонов описан в Приложении А.

Другое решение, помимо (5.40), соответствующее малым значениям K , отвечает равенству амплитуд

$$u = v.$$

В этом случае атомы (и центр их масс) движутся вместе, как при длинноволновых акустических колебаниях (5.38); отсюда и возник термин: акустическая ветвь.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА В ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

Теперь рассмотрим, как действует электромагнитное излучение в инфракрасной части спектра (инфракрасные фотоны) на кристалл, состоящий из ионов двух сортов с зарядами $\pm e$.

¹⁾ Этот процесс отличается от процесса, рассмотренного ранее, в котором фотон рассеивался с образованием или поглощением фонона.

При больших значениях длин воли или при $K = 0$ смещения u_s , v_s не зависят от индекса s . Уравнения движения (5.34) в локальном электрическом поле $Ee^{-i\omega t}$ с добавлением членов, описывающих действие этого поля, примут вид

$$-\omega^2 M_1 u = 2C(v - u) + eE, \quad -\omega^2 M_2 v = 2C(u - v) - eE. \quad (5.41)$$

Разделив первое уравнение на M_1 , а второе на M_2 и вычитая второе уравнение из первого, получим:

$$u - v = \frac{eE/\mu}{\omega_T^2 - \omega^2}, \quad (5.42)$$

где

$$\frac{1}{\mu} \equiv \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}, \quad \omega_T^2 \equiv \frac{2C}{\mu}. \quad (5.43)$$

Здесь μ — приведенная масса пары ионов, а ω_T — частота, соответствующая $K \rightarrow 0$ для оптической ветви. Из (5.42) видно, что при $\omega = \omega_T$ будет наблюдаться резонанс.

Приложенное электрическое поле вызывает смещение положительных и отрицательных ионов в противоположных направлениях и поляризует кристалл. Диэлектрическую поляризацию P можно определить как дипольный момент единицы объема. Если в единице объема имеется N положительно и N отрицательно заряженных ионов, то вклад в поляризацию в результате относительного смещения этих ионов можно записать так:

$$P = Ne(u - v) = \frac{Ne^2/\mu}{\omega_T^2 - \omega^2} E. \quad (5.44)$$

Заметим, что при $\omega = \omega_T$ наблюдается резонанс. Электрическое поле E , входящее в уравнения (5.41) — (5.44), есть локальное электрическое поле¹⁾ и оно не обязательно совпадает со средним макроскопическим электрическим полем, входящим в уравнения Максвелла. Этот вопрос будет обсуждаться в гл. 13. Однако уравнение (5.44) всегда приводит к частотной зависимости диэлектрической проницаемости, которую в общем виде можно записать так:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2} [\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)], \quad (5.45)$$

что показано на рис. 5.19а. Этот результат справедлив для кубического кристалла, имеющего два атома в примитивной ячейке. Здесь $\varepsilon(0)$ — статическая диэлектрическая проницаемость, а

¹⁾ В гл. 13 показано, что локальное электрическое поле в узле кубической решетки равно $E + 4\pi P/3$ в системе СГС или $E + P/3\varepsilon_0$ в системе СИ.

Рис. 5.19а. График зависимости $\epsilon(\omega)$, выражаемой уравнением (5.45) при $\epsilon(\infty) = 2$ и $\epsilon(0) = 3$. Диэлектрическая проницаемость отрицательна в интервале частот от $\omega = \omega_T$ до $\omega = \omega_L = (\frac{3}{2})^{1/2}\omega_T$, т. е. между полюсом функции $\epsilon(\omega)$ и нулем этой функции. Падающие на поверхность среды электромагнитные волны с частотой в интервале $\omega_T < \omega < \omega_L$ не будут распространяться в среде, а будут отражаться от ее границы. Здесь для всех диэлектрических функций ϵ приведены относительные значения.

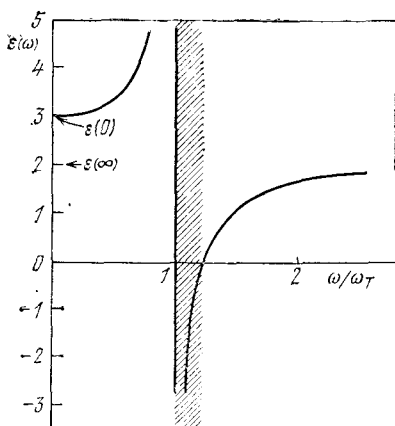
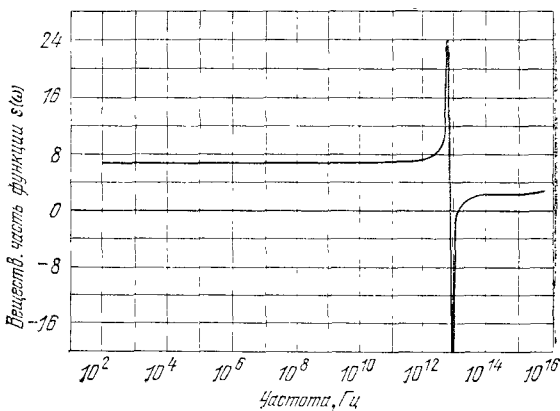


Рис. 5.19б. Относительная диэлектрическая функция (вещественная часть) SrF_2 , измеренная для широкого диапазона частот, показывающая уменьшение ионной поляризуемости на высоких частотах. (A. von Hippel.)



$\epsilon(\infty)$ — высокочастотная (оптическая) диэлектрическая проницаемость, обусловленная смещением электронных облаков. Экспериментальные результаты показаны на рис. 5.19б.

НУЛИ И ПОЛЮСЫ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ $\epsilon(\omega)$

Неожиданным результатом, который следует из (5.45), является то, что электромагнитные волны не могут распространяться в некоторой (запрещенной) области частот

$$\omega_T^2 < \omega^2 < \omega_L^2 \equiv \omega_T^2 \frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)}. \quad (5.46)$$

Соотношение в правой части (5.46) определяет частоту ω_L ; значение ω_L мы дадим ниже. С учетом (5.46) соотношение (5.45)

можно переписать так:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}. \quad (5.47)$$

Для частот в интервале от ω_T до ω_L диэлектрическая функция отрицательна.

Соотношение между частотой и волновым числом для электромагнитных волн в диэлектрике имеет вид

$$(\text{СГС}) \quad c^2 K^2 = \epsilon(\omega) \omega^2; \quad (\text{СИ}) \quad K^2 = \epsilon(\omega) \epsilon_0 \omega^2. \quad (5.48)$$

Это следует из уравнения электромагнитной волны. Если ω является вещественной и $\epsilon(\omega)$ отрицательна, то K должно быть мнимым, и волна принимает форму

$$e^{iKx} \rightarrow e^{-|K|x}. \quad (5.49)$$

Такая волна затухает в пространстве и не распространяется через кристалл. Она может пройти только через тонкую пластинку, имеющую толщину порядка $1/|K|$. Отсюда и возникает выражение *запрещенный интервал*: если на кристалл падают волны с частотами, заключенными в интервале между ω_T и ω_L , то они будут отражаться. Этот запрещенный частотный интервал

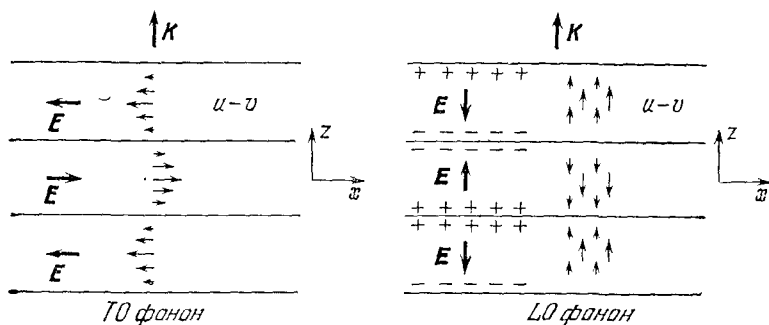


Рис. 5.19в. Наборы стрелок представляют относительные смещения положительных ионов в определенный момент времени для волны в оптической моде, распространяющейся вдоль оси z . Показаны плоскости узлов (нулевое смещение); для длинноволновых фононов узловые плоскости отделены друг от друга многими атомными плоскостями. В поперечной оптической фононной моде, показанной на рисунке слева, смещение частицы перпендикулярно к волновому вектору \mathbf{K} ; макроскопическое электрическое поле в бесконечной среде будет действовать только в направлении $\pm x$ для показанной моды, и симметрией задачи обусловлено, что $\partial E_x / \partial x = 0$. Отсюда следует, что $\text{div } \mathbf{E} = 0$ для поперечных оптических фононов. В продольной оптической фононной моде, показанной на рисунке справа, смещения частицы и, следовательно, диэлектрическая поляризация \mathbf{P} параллельны волновому вектору. Макроскопическое электрическое поле \mathbf{E} удовлетворяет соотношению $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = 0$ в системе СГС и $\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = 0$ в системе СИ; симметрией обусловлена параллельность \mathbf{E} и \mathbf{P} оси z , и $\partial E_z / \partial z \neq 0$. Таким образом, $\text{div } \mathbf{E} \neq 0$ для продольных оптических фононов, и $\epsilon(\omega) \text{div } \mathbf{E}$ равно нулю, только если $\epsilon(\omega) = 0$.

существенно отличается от интервала, в котором наблюдается брэгговское отражение, потому что инфракрасное отражение не связано с периодичностью кристаллической решетки.

Верхней границей запрещенного частотного интервала является частота ω_L , при которой правая часть соотношения (5.47) обращается в нуль:

$$\varepsilon(\omega_L) = 0. \quad (5.50)$$

Частоту ω_L , определяемую соотношениями (5.46) или (5.50), можно идентифицировать с *длинноволновой оптической фоновой частотой* для малых K . Эту на первый взгляд неожиданную связь можно подтвердить некоторыми общими рассуждениями, например, следующим образом. Уравнение Максвелла

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0 \quad \text{или} \quad \varepsilon(\omega) \operatorname{div} \mathbf{E} = 0 \quad (5.51)$$

имеет два типа корней. Для одного типа корней условие $\operatorname{div} \mathbf{E} = 0$ всегда удовлетворяется, если волновой вектор \mathbf{K} перпендикулярен \mathbf{E} , как в случае поперечных оптических колебаний (см. рис. 5.19в). Другой тип корней возникает, когда $\varepsilon(\omega) = 0$ [соотношение (5.50)]; для этого корня $\mathbf{D} = 0$, что характерно для продольных оптических колебаний¹⁾.

После такого определения корней становится ясным физический смысл величины ω_L [соотношение (5.46)]; итак, имеем:

$$\boxed{\frac{\omega_T^2}{\omega_L^2} = \frac{\varepsilon(\infty)}{\varepsilon(0)},} \quad (5.52)$$

где ω_T — частота поперечных оптических колебаний, ω_L — частота продольных оптических колебаний; оба значения — для малых K . Соотношение (5.52) известно как *соотношение Лиддейна — Сакса — Теллера*²⁾. Заметим, что $\varepsilon(0) \rightarrow \infty$, так как $\omega_T \rightarrow 0$; это существенно в случае сегнетоэлектриков (см. гл. 14).

¹⁾ Для подтверждения этого предлагаем два аргумента. Геометрией продольно поляризованной волны обусловлено наличие деполаризующего поля $\mathbf{E} = -4\pi\mathbf{P}$ (этот вопрос обсуждается в гл. 13). Таким образом, $\mathbf{D} \equiv \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = 0$. В системе СИ $\mathbf{D} = \varepsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P} = 0$.

Второе соображение заключается в том, что продольная волна не имеет магнитной компоненты, так что уравнение Максвелла

$$\text{(СГС)} \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = -\frac{i\omega\varepsilon(\omega)}{c} \mathbf{E}; \quad \text{(СИ)} \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon(\omega) \varepsilon_0 \mathbf{E}$$

удовлетворяется для \mathbf{H} , только если $\varepsilon(\omega) = 0$. В уравнении, записанном в системе СИ, через $\varepsilon(\omega)$ обозначается относительная диэлектрическая проницаемость, или диэлектрическая функция; она имеет ту же величину, что и в уравнении, записанном в СГС.

²⁾ Распространение указанного рассмотрения на сложные структуры сделано несколькими учеными; особенно интересна работа Баркера [25]. В ней приводится интересный вывод соотношения Лиддейна — Сакса — Теллера, основанный на соображениях причинности.

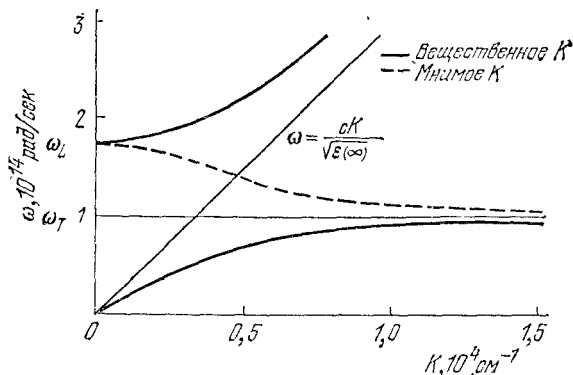


Рис. 5.20. Связанные колебания фотонов и поперечных оптических фоонов в полном кристалле. Тонкая горизонтальная линия отвечает колебаниям частоты ω_T в отсутствие взаимодействия с электромагнитным полем, а тонкая линия, помеченная надписью $\omega = cK/\sqrt{\epsilon(\infty)}$, соответствует электромагнитным волнам в кристалле, не связанным с колебаниями решетки ω_T . Жирные линии представляют дисперсионные соотношения при наличии взаимодействия между колебаниями решетки и электромагнитной волной. Взаимодействие увеличивает диэлектрическую функцию в соответствии с выражением

$$\frac{\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2} [\epsilon(0) - \epsilon(\infty)],$$

как в уравнении (5.45). Одним из следствий этого взаимодействия является возникновение интервала запрещенных частот между ω_L и ω_T : внутри этого интервала волновой вектор является чисто мнимой величиной; на рисунке это показано прерывистой линией. В запрещенном интервале волна затухает по закону $\exp\{-|K|x\}$, и из графика видно, что затухание намного сильнее вблизи ω_T , чем вблизи ω_L . Область изменения значений K на графике — порядка 10^4 см^{-1} , что соответствует крайней левой области значений K для дисперсионных зависимостей, приведенных на рис. 5.17а и соответствующих колебаниям, не зависящим от электромагнитных волн. На данном рисунке не показаны ни акустические, ни продольные оптические фооны; ни те, ни другие не связаны с поперечным электромагнитным полем. Квант связанных фотон-фононных колебаний называется *поляритоном*.

Каков физический смысл полюса диэлектрической функции $\epsilon(\omega)$? Мы видели, что полюс при $\omega = \omega_T$ является частотой поперечных оптических колебаний, пока нет взаимодействия с поперечными электромагнитными волнами. При наличии взаимодействия смысл полюса при ω_T сохраняется неизменным при условии, что мы находимся в районе волновых векторов, достаточно больших для того, чтобы не находиться в области пересечения, где фооны и фотоны сильно взаимодействуют друг с другом (см. рис. 5.20).

Для свободных механических поперечных колебаний поляризация P будет намного больше, чем электрическое поле E , так как в поперечно поляризованной волне электрическое поле воз-

никает в сочетании с электромагнитным полем и этот эффект значителен только вблизи области пересечения. А поскольку

$$(СГС) \quad P = \frac{\epsilon(\omega) - 1}{4\pi} E; \quad (СИ) \quad P = [\epsilon(\omega) - 1] \epsilon_0 E, \quad (5.53)$$

то мы получаем «механические» колебания, когда $\epsilon(\omega) \gg 1$, т. е. по существу полюс функции $\epsilon(\omega)$. Таким образом, *полюсы диэлектрической функции связаны с поперечными оптическими фонами* для значений волновых чисел свыше 10^4 см^{-1} .

Сопоставим отношения ω_L/ω_T , полученные с помощью неупругого нейтронного рассеяния [15, 26], с экспериментальными значениями $[\epsilon(0)/\epsilon(\infty)]^{1/2}$, полученными из диэлектрических измерений:

	NaI	KBr	GaAs
ω_L/ω_T	$1,44 \pm 0,05$	$1,39 \pm 0,02$	$1,07 \pm 0,02$
$[\epsilon(0)/\epsilon(\infty)]^{1/2}$	$1,45 \pm 0,03$	$1,38 \pm 0,03$	1,08

Видно, что соответствие с расчетной формулой (5.52) очень хорошее.

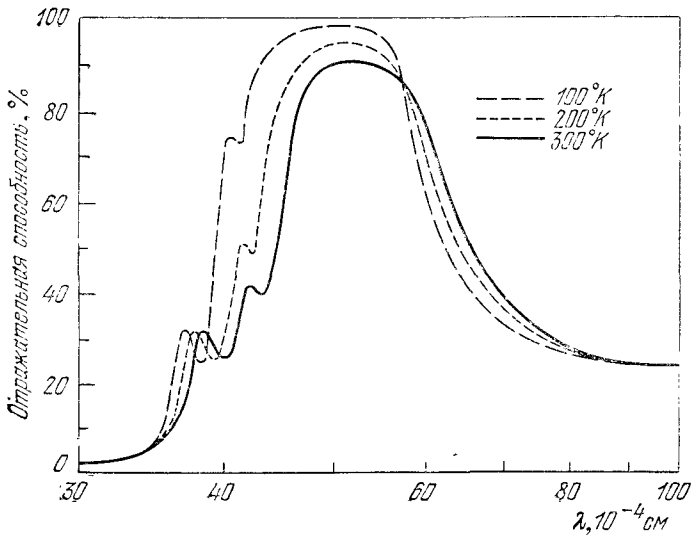


Рис. 5.21. Отражательная способность кристалла NaCl большой толщины при нескольких температурах в зависимости от длины волны [27]. Номинальные величины ω_L и ω_T при комнатной температуре соответствуют длинам волн $38 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ и $61 \cdot 10^{-4} \text{ см}$.

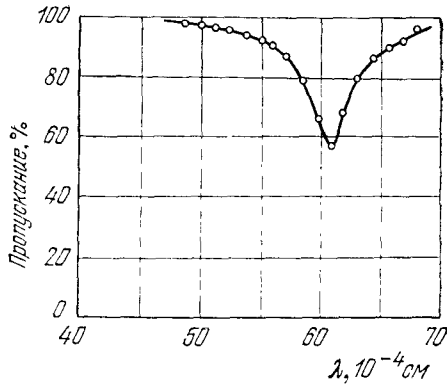


Рис. 5.22. Спектр пропускания инфракрасного излучения при нормальном падении на тонкую пленку ($0,17 \cdot 10^{-4}$ см) NaCl [28]. Минимум определяет частоту ω_T .

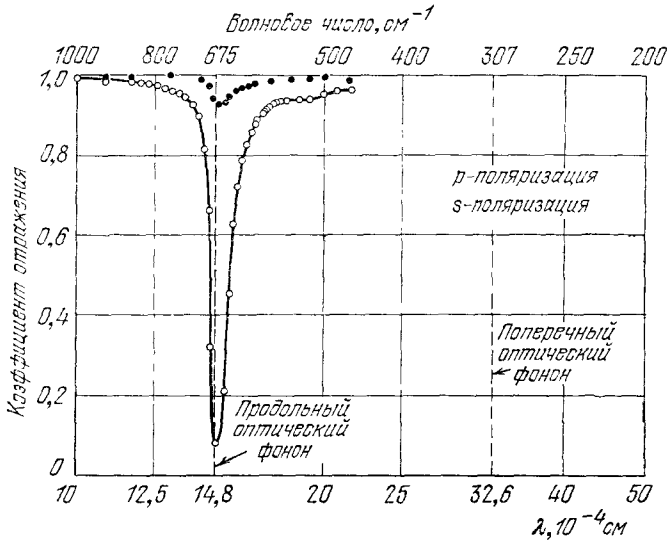


Рис. 5.23. Коэффициент отражения пленки LiF, нанесенной на серебро, в зависимости от длины волны для излучения с углом падения примерно 30° [29]. Продольный оптический фонon сильно поглощает излучение p, поляризованное в плоскости, нормальной к пленке, но слабо поглощает излучение s, поляризованное параллельно пленке.

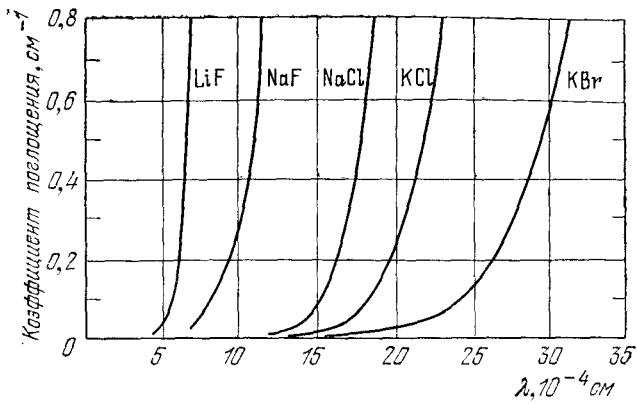


Рис. 5.24. Инфракрасное поглощение кристаллов. На графике коэффициент поглощения — это величина α в выражении $I(x) = I_0 \cdot 10^{-\alpha x}$ для интенсивности. (G. Joos)

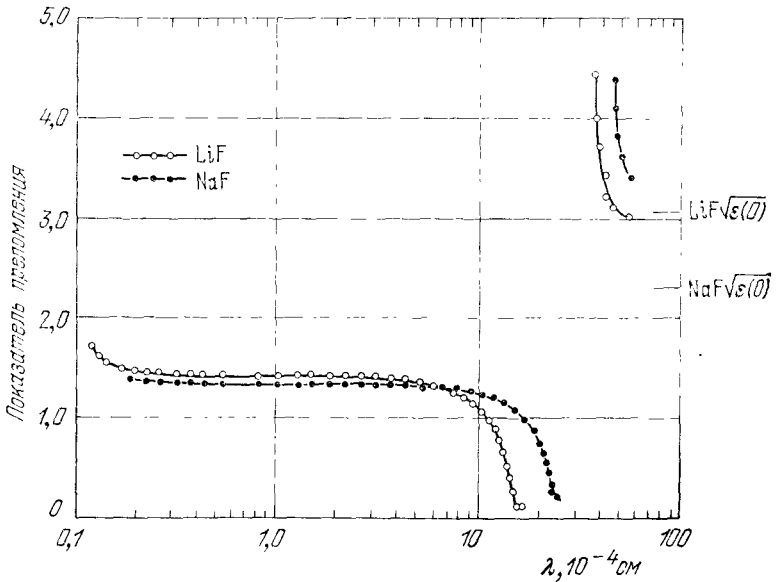


Рис. 5.25. Зависимость показателя преломления от длины волны для кристаллов LiF и NaF [30].

На рис. 5.20 графически показаны решения дисперсионного соотношения $\omega^2 \varepsilon(\omega) = c^2 K^2$ (дисперсионные кривые) для электромагнитных волн в веществе. Видно, что имеются две ветви и запрещенный интервал частот между ω_T и ω_L . Электромагнитные волны, имеющие частоты, лежащие в этом интервале, не могут распространяться в кристалле большой толщины. Отражение от поверхности кристалла, как ожидается, будет в этой области частот высоким (рис. 5.21).

Для пленок с толщиной меньшей, чем длина волны, ситуация изменяется: так как для частот, лежащих в указанном интервале, волна затухает по закону $\exp\{-|K|x\}$, то возможно, что при малых величинах $|K|$ излучение будет проходить через пленку. Для больших величин $|K|$ вблизи ω_T волна будет отражаться (рис. 5.22). При отражении излучения, падающего не перпендикулярно к поверхности кристалла, может наблюдаться частота ω_L продольных оптических фононов, что видно из рис. 5.23.

ТАБЛИЦА 5.1

Параметры колебаний кристаллической решетки в инфракрасной области для ряда кристаллов со структурой NaCl или CsCl

(при комнатной температуре)

Кристалл	Статическая диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(0)$	Оптическая диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\infty)$	ω_T , 10^{13} рад/сек (экспериментальные значения)	ω_L , 10^{13} рад/сек
LiH	12,9	3,6	11	21
LiF	8,9	1,9	5,8	12
LiCl	12,0	2,7	3,6	7,5
LiBr	13,2	3,2	3,0	6,1
NaFl	5,1	1,7	4,5	7,8
NaC	5,9	2,25	3,1	5,0
NaBr	6,4	2,6	2,5	3,9
KF	5,5	1,5	3,6	6,1
KCl	4,85	2,1	2,7	4,0
KI	5,1	2,7	1,9	2,6
RbF	6,5	1,9	2,9	5,4
RbI	5,5	2,6	1,4	1,9
CsCl	7,2	2,6	1,9	3,1
CsI	5,65	3,0	1,2	1,6
TlCl	31,9	5,1	1,2	3,0
TlBr	29,8	5,4	0,81	1,9
AgCl	12,3	4,0	1,9	3,4
AgBr	13,1	4,6	1,5	2,5
MgO	9,8	2,95	7,5	14

Значения ω_L рассчитаны из соотношения Лидейна — Сакса — Теллера с использованием данных из первых трех столбцов таблицы.

Длина волны, соответствующая ω_T , известна как длина волны остаточных лучей (Reststrahl). Дисперсия оптических свойств ионных кристаллов используется в инфракрасной спектроскопии для изготовления специальных призм. Зависимость коэффициентов поглощения и показателей преломления от длины волны для ряда кристаллов показана на рис. 5.24 и 5.25. Для изготовления призм, а также оптических окон и линз налажен промышленный выпуск больших монокристаллов. Для некоторых целей желательно иметь как можно более низкое значение ω_T : тогда атомы, из которых состоит кристалл, должны быть как можно тяжелее. Так, смешанный кристалл бромид галлия — подвид галлия, известный под названием KRS-5, широко используется, так как он состоит из тяжелых атомов.

Экспериментальные величины $\epsilon(0)$, $\epsilon(\infty)$ и ω_T приведены в табл. 5.1. Эти величины взяты главным образом из обзора E. Burstein. Величины ω_L рассчитаны по другим данным с помощью соотношения Лиддейна — Сакса — Теллера, формула (5.52). Величины ω_T при температуре 4°K даны в работе Джонса и др. [31].

ЛОКАЛЬНЫЕ ФОНОННЫЕ КОЛЕБАНИЯ

Фононный спектр кристалла может изменяться в присутствии дефектов решетки и примесных атомов. Рассмотрим замену тяжелого иона легким, например, замену иона Cl^- в кристалле KCl на ион H^- (рис. 5.26). Этот дефект называется *U-центром*. Физически картина выглядит так: легкий ион H^- колеблется с высокой частотой в окружении тяжелых ионов K^+ . При этих колебаниях образуется электрический дипольный момент. Кристаллическая решетка вблизи иона H^- будет слегка деформироваться в процессе движения, но величина деформации должна быстро уменьшаться с увеличением расстояния от иона H^- . Такое колебание называется *локальным фононом*. Наиболее раннее теоретическое изучение локальных фононов сделано И. М. Лифшицем¹⁾.

Экспериментальное исследование оптического поглощения, обусловленного локальными фононами, связанными с ионами H^- в щелочно-галогидных кристаллах, выполнено Шафером [33]. На рис. 5.27 показаны результаты для KCl . Локальные фононы наблюдались также при помощи нейтронного рассеяния.

Простейшей задачей, в которой рассматривается локальный фонон, является линейная решетка (цепочка) атомов, в которой все атомы, кроме одного, имеют массу M , а один атом имеет массу $M' < M$. Мы покажем, что одно из нормальных колебаний

¹⁾ Все ссылки на работы по теоретическим вопросам можно найти в гл. 5 книги Марадулина, Монтролла и Вейсса [32].

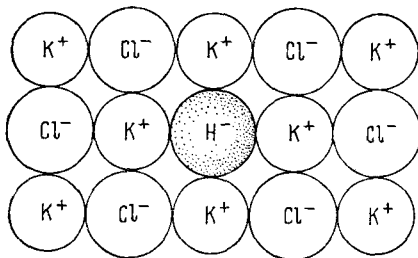


Рис. 5.26. Ион H^- , замесивший ион Cl^- в кристалле KCl ; такой примесный центр называется U -центром. Высокочастотные локальные фоновые колебания обусловлены ионами H^- .

решетки локализуется в районе легкого атома и соответствующая частота увеличивается сверх ω_{\max} ненарушенной (невозмущенной) решетки. Учитываем взаимодействие только ближайших соседей и предполагаем, что это взаимодействие одинаково как для атомов M' и M , так и для атомов M и M .

Расположим легкий атом в начале координат, $s = 0$. Уравнения движения для решетки имеют вид

$$M' \frac{d^2 u_0}{dt^2} = C(u_1 + u_{-1} - 2u_0), \quad (5.54)$$

$$M \frac{d^2 u_1}{dt^2} = C(u_2 + u_0 - 2u_1), \quad \text{и т. д.} \quad (5.55)$$

Будем искать решение в форме экспоненциально затухающей (по мере удаления от $s = 0$) функции, которая в пределе $M' \rightarrow M$ приближается к форме нормального колебания максимальной частоты для ненарушенной решетки. Решение у границы зоны для невозмущенной решетки имеет вид (5.28):

$$u_s = u(0) \cos s\pi e^{-i\omega t} \equiv u(0) (-1)^s e^{-i\omega t}.$$

Для нарушенной решетки

$$u_s = u_0 (-1)^s e^{-i\omega t} e^{-|s|\alpha}, \quad (5.56)$$

где величина α должна быть определена. Подставляя (5.56) в (5.55), находим:

$$\omega^2 = (C/M)(2 + e^{-\alpha} + e^{\alpha}), \quad (5.57)$$

в то время как, подставляя (5.56) в (5.54), находим:

$$\omega^2 = (C/M')(2 + 2e^{-\alpha}). \quad (5.58)$$

Уравнения (5.57) и (5.58) являются совместными, если $e^{\alpha} = (2M - M')/M'$, откуда

$$\omega^2 = \omega_{\max}^2 \frac{M^2}{2MM' - M'^2}, \quad (5.59)$$

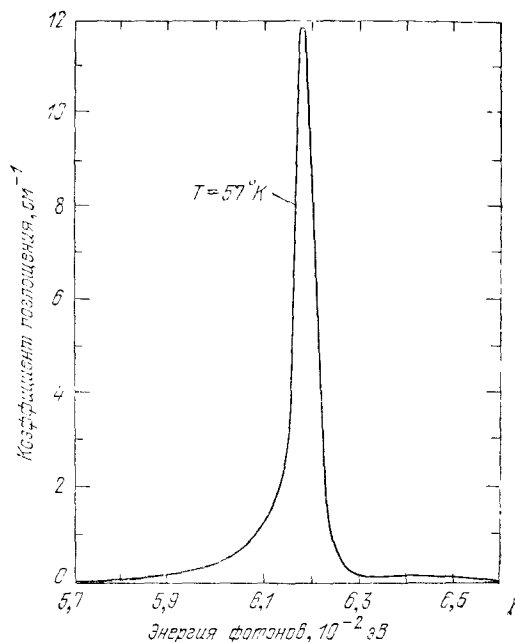


Рис. 5.27. Инфракрасное поглощение, обусловленное присутствием ионов H^+ в KCl [33]. Концентрация ионов H^+ составляла $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Энергия фотона в центре линии соответствует длине волны $\approx 21 \times 10^{-4} \text{ см}$.

где $\omega_{\text{max}} = (4C/M)^{1/2}$ — граничная (пороговая) частота [см. (5.23)] невозмущенной решетки, для которой $M = M'$. Если $M' \ll M$, то соотношение (5.59) сводится к

$$\omega^2 = \omega_{\text{max}}^2 (M/2M').$$

Другие типы примесных колебаний¹⁾ возможны в двухатомном кристалле с двумя атомами разного сорта в примитивной ячейке.

На рис. 5.28 показаны движения атомов при так называемых локальных, промежуточных и резонансных колебаниях. Мы уже видели, что *локальное колебание* возникает при замене тяжелого иона более легким, например иона Cl^- ионом H^- в KCl . Частота локального колебания выше максимальной фононной частоты «чистого» (беспримесного) кристалла. Частота *промежуточного колебания* лежит внутри интервала между акустическими и оптическими ветвями. Промежуточный тип колебания наблюдается, когда ион I^- замещает ион Cl^- в KCl .

¹⁾ Полезные списки литературы по этому вопросу имеются в статьях [34, 35].

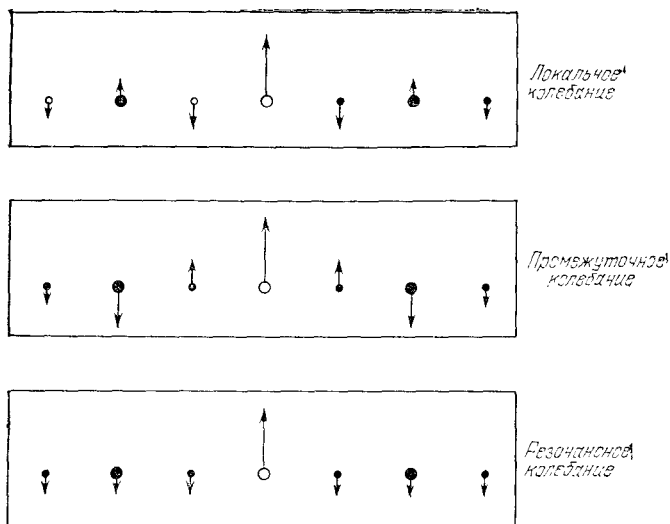


Рис. 5.28. Амплитуды колебаний частиц, связанные с локальным (а), промежуточным (б) и резонансным (в) видами колебаний в кристалле с двумя атомами на примитивную ячейку. Светлым кружком обозначен примесный атом. Расчеты амплитуд смещения для локального и промежуточного вида колебаний даны в работах [35, 36].

Определенные виды примесей, особенно очень тяжелые примеси, могут приводить к квазилокализованным *резонансным колебаниям*, чьи частоты лежат в области разрешенных фононных частот совершенного исходного кристалла; такие колебания характеризуются сильно увеличивающейся амплитудой колебания примесного атома. Это наблюдается, например, когда ион Ag^+ замещает ион K^+ в кристалле KI .

РЕЗЮМЕ

1. Квант энергии колебаний кристаллической решетки называется фононом. Энергия фонона равна $\hbar\omega$, где ω — угловая частота.

2. Если в процессе неупругого рассеяния фотона или нейтрона, при котором их волновой вектор изменяется от \mathbf{k} до \mathbf{k}' , образуется фонон с волновым вектором \mathbf{K} , то правило отбора для этого процесса запишется так:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{K} + \mathbf{G},$$

где \mathbf{G} — вектор обратной решетки.

3. Все волны решетки можно описать волновыми векторами, которые лежат внутри первой зоны Бриллюэна в обратном пространстве.

4. Если в примитивной ячейке имеются p атомов, то дисперсионный закон для фононов будет иметь три акустические фоновые ветви и $(3p - 3)$ оптические фоновые ветви.

5. В двухатомном кристалле имеется запрещенный интервал частот между ω_T и ω_L для связанных фонон-фотонных колебаний. Поперечные волны, имеющие частоты, заключенные в этом интервале, не будут распространяться в кристалле.

6. Соотношение Лиддейна — Сакса — Теллера

$$\frac{\omega_L^2}{\omega_T^2} = \frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)}$$

связывает величины ω_L и ω_T с диэлектрическими проницаемостями, измеренными на низких и высоких частотах.

7. Нули диэлектрической функции $\epsilon(\omega)$ или $\epsilon(\omega, K)$ связаны с продольными колебаниями, а полюсы функции — с поперечными колебаниями.

8. Локальные фоновые колебания связаны с точечными и линейными дефектами кристаллической решетки и с поверхностью кристалла.

ЗАДАЧИ

5.1. Колебания квадратной решетки. Рассмотрим поперечные колебания плоской квадратной решетки, состоящей из рядов и столбцов одинаковых атомов. Обозначим через u_{lm} смещение атома, находящегося на пересечении l -го столбца и m -го ряда, перпендикулярное к плоскости решетки (рис. 5.29). Масса каждого атома равна M , а C — силовая постоянная для атомов, являющихся ближайшими соседями.

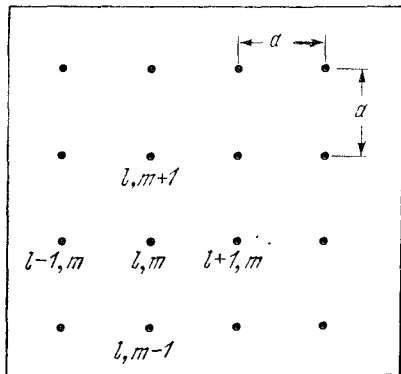


Рис. 5.29. Квадратная решетка с постоянной a . Смещения происходят нормально к плоскости решетки.

а) Показать, что уравнением движения является

$$M \frac{d^2 u_{lm}}{dt^2} = C [(u_{l+1, m} + u_{l-1, m} - 2u_{lm}) + (u_{l, m+1} + u_{l, m-1} - 2u_{lm})].$$

б) Предположить, что решения имеют форму

$$u_{lm} = u(0) \exp \{i(lK_x a + mK_y a - \omega t)\},$$

где a — расстояние между атомами, являющимися ближайшими соседями. Показать, что уравнение движения удовлетворяется, если

$$\omega^2 M = 2C (2 - \cos K_x a - \cos K_y a).$$

Это соотношение есть дисперсионный закон для данной задачи.

в) Показать, что область K -пространства, для которой существуют независимые решения, может быть взята в виде квадрата со стороной $2\pi/a$. Это есть первая зона Бриллюэна квадратной решетки. Начертить график зависимости ω от K для $K = K_x$ с $K_y = 0$ и для $K_x = K_y$.

г) для $Ka \ll 1$ показать, что

$$\omega = (Ca^2/M)^{1/2} (K_x^2 + K_y^2)^{1/2} = (Ca^2/M)^{1/2} K.$$

5.2. Моноатомная линейная решетка. Рассмотрим продольную волну

$$u_s = u \cos(\omega t - sKa),$$

которая распространяется в моноатомной линейной решетке; масса атома M , расстояние между атомами a , силовая постоянная для атомов, являющихся ближайшими соседями, равна C .

а) Показать, что полная энергия волны равна

$$E = \frac{1}{2} M \sum_s \left(\frac{du_s}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} C \sum_s (u_s - u_{s+1})^2,$$

где индекс s берется по всем атомам.

б) Подстановкой u_s в это выражение показать, что усредненная по времени полная энергия, приходящаяся на атом, равна

$$\frac{1}{4} M \omega^2 u^2 + \frac{1}{2} C (1 - \cos Ka) u^2 = \frac{1}{2} M \omega^2 u^2,$$

где на последней стадии мы использовали дисперсионный закон (5.23а) для этой задачи.

5.3. Волновое уравнение континуума. Показать, что для больших значений длин волн уравнение движения (5.16) приводится к волновому уравнению упругого континуума

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

где v — скорость звука.

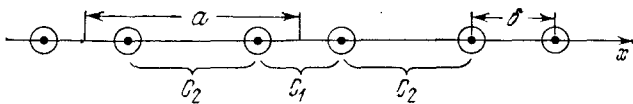


Рис. 5.30. Линейная решетка (цепочка) атомов, имеющих одинаковую массу; примитивный базис состоит из двух атомов, отделенных друг от друга расстоянием δ . Постоянная решетки равна a . Показаны две силовые постоянные.

5.4. Оптические фононы. Для оптических фононов с $K = 0$ относительное смещение соседних атомов в двухатомной решетке дается разностью $u - v$, где u и v — величины, определенные при записи соотношений (5.33). Определить среднеквадратичное значение величины $u - v$ (в Å) для $1 \text{ см}^3 \text{ KCl}$ при условии, что в процессе участвуют 100 фононов.

5.5. Импульс фонона. а) Показать из (5.17), что линейный импульс кристалла, в котором возбуждается волна с волновым вектором K , равен

$$p = -i\omega M u e^{-i\omega t} \sum_{r=0}^{N-1} e^{irKa},$$

если линейный кристалл состоит из N атомов массы M .

б) Для $K \neq 0$ показать, что сумма в выражении для p равна

$$\frac{1 - \exp(iNKa)}{1 - \exp(iKa)}.$$

в) Используя периодическое граничное условие $u_r = u_{r+N}$, показать, что это условие накладывает ограничения на значения K , которые должны быть такими, чтобы выполнялось равенство

$$\exp(iNKa) = 1.$$

Используя полученный в (б) результат, мы видим, что $p = 0$ всегда, кроме случая $K = 0$. Таким образом, фонон действительно имеет нулевой импульс, кроме случая, когда $K = 0$.

5.6. Базис, состоящий из двух одинаковых атомов. Найти и начертить продольный фононный акустический и оптический спектр линейной решетки с постоянной решетки a , имеющей базис, состоящий из двух одинаковых атомов массы M , равновесное расстояние между которыми равно $\delta < a/2$. Оба атома базиса расположены на прямой. Силовая постоянная равна C_1 для атомов базиса и C_2 для атома базиса и ближайшего из атомов, принадлежащих соседнему базису (рис. 5.30).

Примечание: Структура несколько похожа на линейную решетку молекулярного водорода.

5.7. Базис, состоящий из двух атомов разного сорта. Для проблемы, изложенной в данной главе [см. уравнения от (5.32) до (5.39)], найти отношения амплитуд u/v для двух ветвей при $K_{\max} = \pi/a$. Показать, что при этой величине две решетки действуют, как если бы они не были связаны: одна решетка остается в покое, в то время как другая движется.

5.8. Эффект Кона. Предполагаем, что выражение для межплоскостной силовой постоянной в уравнении (5.15) имеет следующий вид:

$$C_p = A \frac{\sin pk_0 a}{pa},$$

где A и k_0 — постоянные, а индекс p принимает все возможные целые значения. Такое выражение для силовой постоянной, как ожидается, будет справедливо для металлов. Используя это выражение и соотношение (5.21), найти выражение для ω^2 , а также для $\partial\omega^2/\partial K$. Доказать, что $\partial\omega^2/\partial K$ равна бесконечности, когда $K = k_0$. Таким образом, график зависимости ω^2 от K или ω от K при k_0 имеет вертикальную касательную: в дисперсионном законе для фононов $\omega(K)$ при k_0 имеется перегиб. Аналогичный эффект был предсказан Коном [37].