

А РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ

Мы рассмотрим нормальные моды электромагнитных волн в конечных кристаллах ²⁾, чтобы получить закон дисперсии $\omega(\mathbf{k})$, т.е. зависимость частоты от волнового вектора \mathbf{k} . Законы дисперсии дают полосы запрещенных значений \mathbf{k} , которые удовлетворяют условию Брэгга — Вульфа $2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2$. Для частот внутри запрещенной полосы волновые векторы не являются вещественными. Это означает, что электромагнитные волны, имеющие волновой вектор, удовлетворяющий условию Брэгга — Вульфа, не могут без затухания распространяться в кристалле. Мы воспользуемся могучим методом анализа Фурье.

Основное предположение состоит в том, что поляризация $\mathbf{P}(\mathbf{x})$, т.е. электрический дипольный момент единицы объема, линейно зависит от напряженности электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{x})$, что можно записать в виде

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \chi(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x}), \quad (\text{A.1})$$

где $\chi(\mathbf{x})$ — диэлектрическая восприимчивость кристалла в точке \mathbf{x} (см. гл. 13).

Записывая поляризацию в виде (A.1), мы для удобства предполагали, что связь между \mathbf{P} и \mathbf{E} — локальная, т.е. что поляризация в точке \mathbf{x} определяется электрическим полем в точке \mathbf{x} (и не зависит от электрических полей в других точках \mathbf{x}'). При частотах рентгеновского диапазона восприимчивость χ по порядку величины около 10^{-4} или меньше. Сама восприимчивость может быть функцией не только \mathbf{x} , но и частоты ω , однако, за исключением областей частот, близких к краю поглощения рентгеновских лучей, и областей резонанса оптического поглощения, у нас нет необходимости учитывать частотную зависимость χ .

Для анализа восприимчивости кристаллической решетки можно воспользоваться разложением $\chi(\mathbf{x})$ в ряд Фурье:

$$\chi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} \chi_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}}, \quad (\text{A.2})$$

где \mathbf{G} пробегает все узлы обратной решетки, включая и $\mathbf{G} = 0$. Для вещественных $\chi(\mathbf{x})$ легко показать, что коэффициенты $\chi_{-\mathbf{G}}^*(\mathbf{x})$ должны быть

¹⁾ Во всех приложениях используется только система единиц СГС.

²⁾ Эта проблема рассматривалась в ряде работ. Укажем, например, Форстерлинга [1] и Фуэса [2].

равными $\chi_{\mathbf{G}}(\mathbf{x})$. Это видно из того, что в сумме (A.2) в этом случае пары членов

$$\chi_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} + \chi_{-\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{A.3})$$

должны быть тождественно равны комплексно сопряженным парам. Сумма в (A.2) берется только по векторам обратной решетки по причине того, что величина $\chi(\mathbf{x})$ инвариантна относительно трансляций на векторы, компоненты которых кратны постоянным решеткам.

Коэффициенты Фурье $\chi_{\mathbf{G}}$ в разложении восприимчивости имеют важное значение и прямо пропорциональны рентгеновским структурным факторам $\mathcal{P}_{\mathbf{G}}$ (см. гл. 2). Мы можем путем обратного преобразования (A.2) получить выражение для $\chi_{\mathbf{G}}$ через $\chi(\mathbf{x})$:

$$\chi_{\mathbf{G}} = V^{-1} \int_V d^3x \chi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}}, \quad (\text{A.4})$$

где V — объем кристалла. Чтобы получить этот результат, следует умножить обе стороны (A.2) на $\exp(-i\mathbf{G}'\cdot\mathbf{x})$ и проинтегрировать по объему кристалла V :

$$\int d^3x \chi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{G}'\cdot\mathbf{x}} = \sum_{\mathbf{G}} \chi_{\mathbf{G}} \int d^3x e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{x}} = \chi_{\mathbf{G}'} V, \quad (\text{A.5})$$

поскольку интеграл от $\exp[i(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\cdot\mathbf{x}]$ равен V при $\mathbf{G} = \mathbf{G}'$, а в остальных случаях (т. е. $\mathbf{G} \neq \mathbf{G}'$) он равен нулю. Чтобы убедиться в равенстве его нулю в этих остальных случаях, рассмотрим, например, одномерную решетку (цепочку) из N ячеек (пусть постоянная решетки равна a). Тогда $\mathbf{G} - \mathbf{G}' = = 2\pi h/a$, где h — целое число, и

$$\int_0^{Na} dx e^{i2\pi h x/a} = \frac{1}{2\pi i h a} (e^{i2\pi N h} - 1) = 0, \quad (\text{A.6})$$

поскольку Nh — целое число.

Уравнение распространения электромагнитных волн. Электромагнитное поле в кристалле не обязано обладать трансляционной инвариантностью с периодичностью решетки, и поэтому вектор напряженности электрического поля, исходя из общего подхода, основанного на анализе Фурье, естественно представить не в виде суммы типа (A.2), а в виде интеграла Фурье:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \int d^3K \mathbf{E}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}. \quad (\text{A.7})$$

Подставляя (A.2) и (A.7) в (A.1), мы найдем поляризацию:

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \left(\sum_{\mathbf{G}} \chi_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} \right) \left(\int d^3k \mathbf{E}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right) = \sum_{\mathbf{G}} \chi_{\mathbf{G}} \int d^3K \mathbf{E}(\mathbf{K} - \mathbf{G}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}, \quad (\text{A.8})$$

где в качестве переменной интегрирования мы ввели $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$.

Итак, нас интересует решение уравнения распространения электромагнитной волны:

$$c^2 \nabla^2 \mathbf{E} = \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}). \quad (\text{A.9})$$

Мы ищем какое-нибудь решение уравнения (A.9), для которого все компоненты Фурье $\mathbf{E}(\mathbf{K} - \mathbf{G})$ имеют одинаковую периодическую (гармоническую) зависимость от времени, т.е. зависимость вида $\exp(-i\omega t)$. Такие решения будут являться нормальными колебаниями (модами) электромагнитного поля в кристалле. Далее, используя представление (A.7), запишем левую часть (A.9) в виде:

$$c^2 \nabla^2 \mathbf{E} = -c^2 \int d^3 K K^2 \mathbf{E}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}}; \quad (\text{A.10})$$

имея в виду (A.7) и (A.8), правую часть (A.9) запишем в виде:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) = \\ & = -\omega^2 \int d^3 K \left\{ (1 + 4\pi \chi_0) \mathbf{E}(\mathbf{K}) + 4\pi \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \chi_{\mathbf{G}} \mathbf{E}(\mathbf{K} - \mathbf{G}) \right\} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}}. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Уравнение (A.9) удовлетворяется, если коэффициенты при $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x})$ равны между собой. Отсюда следует, что

$$\boxed{c^2 K^2 \mathbf{E}(\mathbf{K}) = \omega^2 \sum_{\mathbf{G}} \varepsilon_{\mathbf{G}} \mathbf{E}(\mathbf{K} - \mathbf{G})}, \quad (\text{A.12})$$

где величина $1 + 4\pi \chi_0$ равна ε_0 , а величина $4\pi \chi_{\mathbf{G}}$ обозначена через $\varepsilon_{\mathbf{G}}$. Итак, мы получили систему однородных линейных алгебраических уравнений (A.12), вид которых зависит от структуры кристалла через коэффициенты Фурье $\varepsilon_{\mathbf{G}}$. Приближенное решение уравнений (A.12) будем искать для рентгеновской области, где можно предполагать, что $\varepsilon_0 \gg \varepsilon_{\mathbf{G}}$, поскольку $\chi_{\mathbf{G}} \ll 1$.

Брэгговское отражение. В случае рентгеновских лучей волновой вектор \mathbf{k} может быть порядка вектора обратной решетки \mathbf{G} . Наиболее интересная ситуация имеет место для тех векторов \mathbf{G} , для которых выполняется условие

$$(\mathbf{k} - \mathbf{G})^2 = k^2, \quad \text{или} \quad 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2. \quad (\text{A.13})$$

Это и есть известное условие дифракции Брэгга. Когда это условие приближенно выполняется, величины $c^2(\mathbf{k} - \mathbf{G})^2$ и $c^2 k^2$ оказываются приближенно равными при одном и том же значении $\omega^2 \varepsilon_0$. Можно показать, что в этом случае падающая волна $\mathbf{E}(\mathbf{k})$ и отраженная брэгговская волна $\mathbf{E}(\mathbf{k} - \mathbf{G})$ будут в кристалле доминирующими. Уравнения (A.12) в этом случае упрощаются и принимают вид

$$c^2 k^2 \mathbf{E}(\mathbf{k}) = \omega^2 [\varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{\mathbf{G}} \mathbf{E}(\mathbf{k} - \mathbf{G})], \quad (\text{A.14})$$

где мы вместо \mathbf{K} написали \mathbf{k} . Далее, подставляя в (A.12) вместо \mathbf{K} величину $\mathbf{k} - \mathbf{G}$, получим:

$$c^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2 \mathbf{E}(\mathbf{k} - \mathbf{G}) = \omega^2 [\varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{k} - \mathbf{G}) + \varepsilon_{-\mathbf{G}} \mathbf{E}(\mathbf{k})]. \quad (\text{A.15})$$

Здесь мы, исходя из (A.2), можем заменить $\varepsilon_{-\mathbf{G}}$ величиной $\varepsilon_{\mathbf{G}}^*$.

Уравнения (A.14) и (A.15) составляют вместе систему связанных линейных уравнений для амплитуд поля $\mathbf{E}(\mathbf{k})$ и $\mathbf{E}(\mathbf{k} - \mathbf{G})$. Нетривиальные решения этих уравнений существуют при условии равенства нулю детерминанта, составленного из их коэффициентов:

$$\begin{vmatrix} c^2 k^2 - \omega^2 \varepsilon_0 & -\omega^2 \varepsilon_{\mathbf{G}} \\ -\omega^2 \varepsilon_{\mathbf{G}}^* & c^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2 - \omega^2 \varepsilon_0 \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{A.16})$$

или

$$\omega^4 (\varepsilon_0^2 - |\varepsilon_{\mathbf{G}}|^2) - \omega^2 \varepsilon_0 c^2 [k^2 + (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2] + c^4 k^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2 = 0. \quad (\text{A.17})$$

Условие Брэгга имеет место, когда величина $(\mathbf{k} - \mathbf{G})^2$ точно равна k^2 . Значение k для этого случая обозначим через k_0 . Тогда (A.17) примет вид

$$\omega^4 (\varepsilon_0^2 - |\varepsilon_{\mathbf{G}}|^2) - 2\omega^2 \varepsilon_0 c^2 k_0^2 + c^4 k_0^4 = 0. \quad (\text{A.18})$$

Решая это квадратное относительно ω^2 уравнение, получим два корня:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{c^2 k_0^2}{\varepsilon_0 \pm |\varepsilon_{\mathbf{G}}|}. \quad (\text{A.19})$$

Для вещественных значений ω , лежащих в интервале между ω_+ и ω_- , корни уравнения (A.17) для комплексных значений k соответствуют волнам, затухающим с расстоянием. На рис. A.1 приведена дисперсионная кривая,

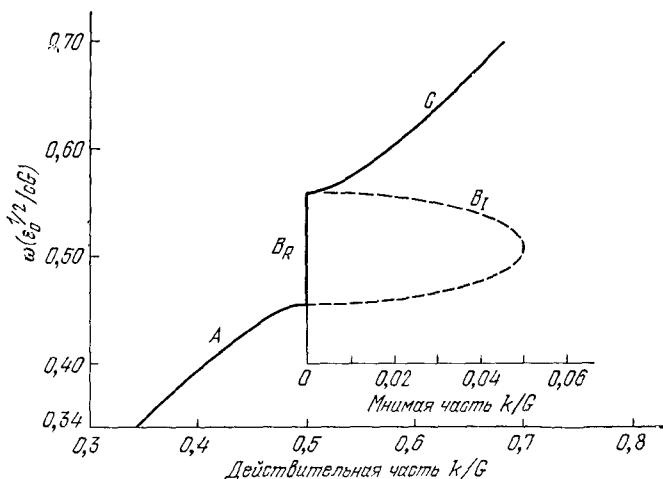


Рис. A.1. Дисперсионная кривая с областью запрещенных частот, отвечающей брэгговскому отражению. Если в уравнение (A.17) подставить вещественные значения частот и затем разрешить это уравнение относительно волнового числа k , то мы установим, что k вещественны на ветвях A и C дисперсионной кривой. Ветвь A начинается с нуля и претерпевает разрыв (нижний) при $k = 1/2 G$. Ветвь C начинается в верхней точке разрыва (при $k = 1/2 G$). Ветвь B при $k = 1/2 G$ отвечает комплексным значениям ω , причем вещественная часть k на всей ширине разрыва равна $k = 1/2 G$ (ветвь B_R), а мнимая — изменяется; ход этого изменения показан пунктиром (ветвь B_I). Приведенная кривая для наглядности построена для случая $\varepsilon_{\mathbf{G}} = 0,2\varepsilon_0$, т. е. для неправдоподобно большого значения $\varepsilon_{\mathbf{G}}$.

иллюстрирующая вещественную и комплексную области значений корней для случая выполнения условия (А.13). Про частоты в интервале между ω_+ и ω_- говорят, что они лежат в *запрещенной полосе*. Волны с частотами в этой области в кристалле не распространяются, но испытывают сильное отражение.

Эти утверждения проще всего продемонстрировать на примере, в котором векторы \mathbf{k} и $\mathbf{k} - \mathbf{G}$ почти равны по величине, но точно противоположны по направлению. Подставим в уравнение (А.17) значение $k = 1/2G + \delta$, где $\delta \ll 1/2G$. Тогда получим:

$$\delta^4 - 2\delta^2 \left(\frac{1}{4} G^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_0}{c^2} \right) + \left(\frac{1}{4} G^2 \right)^2 - 2 \left(\frac{1}{4} G^2 \right) \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_0}{c^2} \right) + \frac{\omega^4}{c^4} (\varepsilon_0^2 - |\varepsilon_G|^2) = 0. \quad (\text{А.20})$$

Членом δ^4 пренебрежем и будем решать уравнение относительно δ для произвольной частоты $\omega^2 = (1/2Gc)^2/\varepsilon_0$, лежащей внутри интервала между ω_+ и ω_- . Итак, после отбрасывания δ^4 уравнение (А.20) примет вид:

$$-2\delta^2 \left(\frac{1}{2} G^2 \right) + \left[- \left(\frac{1}{4} G^2 \right)^2 + \left(\frac{1}{4} \frac{G^2}{\varepsilon_0} \right)^2 (\varepsilon_0^2 - \varepsilon_G^2) \right] = 0, \quad (\text{А.21})$$

или

$$4\delta^2 = - \left(\frac{1}{4} G^2 \right) \left(\frac{\varepsilon_G}{\varepsilon_0} \right)^2; \quad \delta = \pm i \left(\frac{1}{2} G \right) \frac{\varepsilon_G}{2\varepsilon_0}. \quad (\text{А.22})$$

Следовательно, для частот, лежащих вблизи середины запрещенной полосы, волновой вектор описывается выражением

$$k = \frac{1}{2} G \left(1 \pm i \frac{\varepsilon_G}{2\varepsilon_0} \right). \quad (\text{А.23})$$

Загущание с расстоянием нормальных волн (мод) определяется в основном величиной ε_G — компонентой диэлектрической восприимчивости при данной величине вектора обратной решетки \mathbf{G} .

В. ВЫВОД ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА

Рассмотрим систему из двух идентичных линейных осцилляторов 1 и 2, находящихся на расстоянии R один от другого. Каждый осциллятор несет заряды $\pm e$; примем расстояния между зарядами соответственно равными x_1 и x_2 (рис. В.1). Пусть колебания происходят вдоль оси x ; p_1 и p_2 — импульсы: $m(dx_1/dt)$ и $m(dx_2/dt)$. Для гамильтониана такой системы (в невозмущенном состоянии) имеем:

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m} p_1^2 + \frac{1}{2} \beta x_1^2 + \frac{1}{2m} p_2^2 + \frac{1}{2} \beta x_2^2. \quad (\text{В.1})$$



Рис. В.1. Координаты двух осцилляторов.