

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.

Резонансные частоты осцилляторов (когда можно пренебречь взаимодействием между ними, например, при достаточно большом R) одинаковы:

$$\omega_0^{(1)} = \omega_0^{(2)} = \omega_0 = (\beta/m)^{1/2}. \quad (\text{B } 2)$$

Резонансная частота ω_0 совпадает с собственной частотой простого гармонического осциллятора.

Пусть \mathcal{H}_1 — энергия взаимодействия между осцилляторами. Геометрия системы показана на рис. В.1. В качестве координаты, описывающей расстояние между ядрами, возьмем R . Тогда выражение для \mathcal{H}_1 можно записать в виде:

$$\mathcal{H}_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R + x_1 - x_2} - \frac{e^2}{R + x_1} - \frac{e^2}{R - x_2}. \quad (\text{B } 3a)$$

В приближении $|x_1|, |x_2| \ll R$ имеем:

$$\mathcal{H}_1 \approx - \frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}. \quad (\text{B } 3b)$$

Полный гамильтониан ($\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$), если взять \mathcal{H}_1 в приближении (B.3b), может быть легко диагонализирован путем линейного преобразования к нормальным модам; введем нормальные координаты x_s и x_a следующим образом:

$$x_s \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 + x_2), \quad x_a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 - x_2). \quad (\text{B } 4)$$

Решая (B.4) относительно x_1, x_2 , получим:

$$x_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x_s + x_a), \quad x_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x_s - x_a). \quad (\text{B } 5)$$

Индексы s и a относятся к симметричной и антисимметричной модам соответственно. Далее можно ввести соответствующие этим двум модам импульсы p_s и p_a :

$$p_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (p_s + p_a), \quad p_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (p_s - p_a). \quad (\text{B } 6)$$

После преобразований (B.5) и (B.6) для полного гамильтониана \mathcal{H} имеем:

$$\mathcal{H} = \left[\frac{1}{2m} p_s^2 + \frac{1}{2} \left(\beta - \frac{2e^2}{R^3} \right) x_s^2 \right] + \left[\frac{1}{2m} p_a^2 + \frac{1}{2} \left(\beta + \frac{2e^2}{R^3} \right) x_a^2 \right]. \quad (\text{B } 7)$$

Из изучения вида (B.7) легко найти две частоты связанных осцилляторов:

$$\omega = \left[\frac{1}{m} \left(\beta \pm \frac{2e^2}{R^3} \right) \right]^{1/2} \approx \omega_0 \left[1 \pm \frac{1}{2} \left(\frac{2e^2}{\beta R^3} \right) - \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{\beta R^3} \right)^2 + \dots \right], \quad (\text{B } 8)$$

где для ω_0 имеем (B.2). В (B.8) мы разложили в ряд квадратный корень.

Энергия нулевых колебаний системы равна $1/2 \hbar (\omega_s + \omega_a)$; полная энергия уменьшается из-за взаимодействия на величину

$$\Delta U = \frac{1}{2} \hbar (\Delta \omega_s + \Delta \omega_a) = - \hbar \omega_0 \cdot \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{\beta R^3} \right)^2. \quad (\text{B } 9)$$

Это взаимодействие проявляется в притяжении, которое обратно пропорционально седьмой степени расстояния между двумя осцилляторами.

Поляризуемость осциллятора, по определению поляризуемости (см. гл. 13), равна отношению

$$\alpha \equiv \frac{\text{электрический дипольный момент}}{\text{напряженность электрического поля}} = \frac{e^2}{\beta}. \quad (\text{B.10})$$

Итак, для ΔU имеем:

$$\Delta U = -\hbar\omega_0 \frac{\alpha^2}{2R^6} = -\frac{C}{R^6}, \quad (\text{B.11})$$

где $C \equiv \hbar\omega_0\alpha^2$. Это и есть обсуждавшееся в гл. 3 *ван-дер-ваальсово взаимодействие* (3.3). Это взаимодействие относится к числу квантовых взаимодействий, поскольку $\Delta U \rightarrow 0$ при $\hbar \rightarrow 0$. Резюмируя, можно сказать, что энергия нулевых колебаний системы уменьшается за счет диполь-дипольного взаимодействия $\mathcal{H}_1 = -2e^2x_1x_2/R^3$ (B.3), хотя дипольный момент $-ex_1$, усредненный по изолированному атому, равен нулю.

Ван-дер-Ваальсово взаимодействие приводит к притяжению даже между параллельными пластинками плоского конденсатора. Весьма простая и изящная теория для этой геометрии была предложена Казимиром [3]. Непосредственные измерения взаимодействия между параллельными пластинками были выполнены Б. Н. Дерягиным [4].

Расчет ван-дер-ваальсовых сил между двумя атомами водорода дан в курсе Полинга и Уилсона [5]. Эффекты запаздывания изменяют форму взаимодействия на очень больших расстояниях; соответствующие поправки были вычислены Казимиром и Голдером [6].

С. СИНГУЛЯРНОСТИ ВАН ХОВА В ФУНКЦИИ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

Для функции плотности состояний было получено выражение (6.34):

$$\mathcal{D}(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int \frac{dS_{\omega}}{v_g}. \quad (\text{C.1})$$

Из этого выражения можно видеть, что подынтегральная функция имеет сингулярность (особенность) там, где обращается в нуль групповая скорость $v_g \equiv |\nabla_{\mathbf{K}}\omega|$, т. е. там, где зависимость частоты ω от волнового вектора \mathbf{K} имеет локальный плоский участок. Точки в \mathbf{K} -пространстве, для которых это имеет место, называются *критическими точками*. Критическая точка может отвечать максимуму или минимуму функции, а также быть седловой точкой. Мы последовательно рассмотрим поведение функции плотности состояний в каждом из этих случаев. Приводимые ниже соображения относятся к любому дисперсионному закону (т. е. зависимости ω от \mathbf{K}) и не ограничены случаем фононов. Они, следовательно, применимы к электронным энергетическим зонам (гл. 9) и к спектрам спиновых волн (гл. 16). В случае седловых точек ход изменения функции плотности состояний в зависимости от частоты меняется особенно резко, как можно видеть из графиков на рис. С.1, а и г.