

ность и чем больше жесткость кристалла, тем выше скорости распространения упругих (звуковых) волн. Из этих же выражений следует, что круговая частота колебаний ω пропорциональна волновому числу k , т. е. *дисперсионное соотношение получилось таким же, как и для случая упругой струны.*

5.3. КОЛЕБАНИЯ ОДНОАТОМНОЙ ЛИНЕЙНОЙ ЦЕПОЧКИ

В качестве одномерной модели твердого тела рассмотрим цепочку из N одинаковых атомов с массой M и межатомным расстоянием a (рис. 5.4), которые могут перемещаться вдоль прямой линии. Каждый атом в такой системе обладает одной степенью свободы, а вся система N — степенями свободы. Модель с точки зрения атомной структуры хорошо описывается линейной примитивной ячейкой Бравэ, в которой положения атомов определяются вектором трансляции $T=na$, где n — целое число, указывающее положение равновесия атомов в цепочке.

Допустим, в момент времени $t=0$ мы сместили из положения равновесия атом с номером $n=0$ на расстояние u_0 . Так как атомы в цепочке связаны друг с другом силами связи, то такое возбуждение распространится по цепочке в виде волны сжатия и все остальные атомы сместятся из своих положений равновесия.

Пусть $u_n(x, t)$ есть смещение в какой-то момент времени n -го атома относительно его положения равновесия в точке с координатой $x_n=na$. Если смещения атомов из положений равновесия малы по сравнению с расстоянием a , то силы межатомного взаимодействия можно считать квазиупругими; согласно закону Гука, они пропорциональны смещениям. Атомы в цепочке как бы связаны между собой упругими пружинками, каждая из которых характеризуется упругой постоянной C , а смещение u_n описывает колебания атома вблизи положения равновесия.

Найдем уравнение движения n -го атома. При отыскании результирующей силы, действующей на n -й атом, будем считать, что имеют место только короткодействующие силы, это означает, что рассматриваемый атом взаимодействует лишь с ближайшими соседними $(n-1)$ -м и $(n+1)$ -м атомами, воздействие на него других атомов пренебрежимо мало. Уравнение

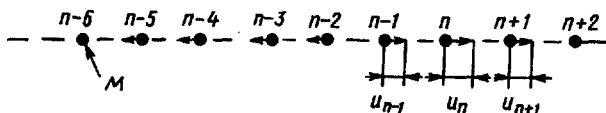


Рис. 5.4. Линейная цепочка из одинаковых атомов

движения в этом случае принимает особенно простой вид. С учетом того, что силы взаимодействия между атомами квазиупругие, на n -й атом действует результирующая сила

$$F_n = \beta(u_{n+1} - u_n) - \beta(u_n - u_{n-1}) = \beta(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n), \quad (5.19)$$

где β — силовая постоянная, которая связана с упругой постоянной выражением $C = \beta a$. Определив силу F_n , записываем уравнение движения

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n). \quad (5.20)$$

Теперь найдем нормальные моды колебаний, т. е. такие типы движения, при которых все атомы колеблются во времени с одной и той же частотой ω по закону $\exp(-i\omega t)$. Будем искать решение уравнения (5.20) в виде бегущей волны:

$$u_n = u_0 \exp[i(\kappa n a - \omega t)] = u_0 \exp[i(\kappa x_n - \omega t)]. \quad (5.21)$$

Здесь u_0 — определяет смещение атома с $n=0$ в момент $t=0$; $\kappa = 2\pi/\lambda$ — волновое число; ω — круговая частота данной моды.

Как видно из (5.21), вид нормальной моды полностью определяется заданием смещения единственного атома с $n=0$.

После подстановки решения (5.21) в уравнение (5.20), получим

$$-M\omega^2 = \beta[\exp(i\kappa a) + \exp(-i\kappa a) - 2] = -4\beta \sin^2(\kappa a/2). \quad (5.22)$$

Отсюда видим, что каждому значению волнового числа соответствует определенное значение ω^2 , при этом $\omega^2(\kappa) = \omega^2(-\kappa)$, т. е. ω^2 является четной функцией аргумента κ . Из (5.22) следует дисперсионное соотношение для волн, распространяющихся в линейной цепочке из одинаковых атомов:

$$\omega = \pm (4\beta/M)^{1/2} \sin(\kappa a/2). \quad (5.23)$$

Поскольку ω не может быть отрицательной величиной, минус в (5.23) соответствует области отрицательных значений κ .

Как видно из (5.23), частота колебаний n -го атома не зависит от n , а это значит, что все атомы в цепочке колеблются с одной и той же частотой. Зависимость (5.23) изображена на рис. 5.5.

Из анализа выражения (5.23) следует, что при значении волнового числа $|\kappa| = 2\pi/\lambda = \pi/a$, т. е. при коротких длинах волн $\lambda = 2a$, циклическая частота колебаний достигает максимального значения:

$$\omega = \omega_{\max} = (4\beta/M)^{1/2}. \quad (5.24)$$

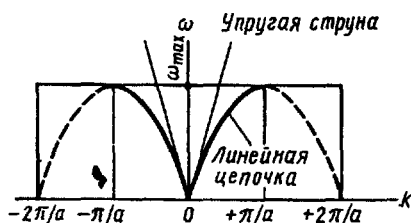


Рис. 5.5. Дисперсионная кривая линейной одноатомной цепочки

Оценим величину $\omega_{\max} \approx v_{\text{зв}} \kappa$, где $v_{\text{зв}} = \sqrt{C/\rho}$ — скорость распространения акустических волн. В § 5.1 мы получили $v_{\text{зв}} = 5 \cdot 10^3$ м/с. Если принять для твердых тел $a = 3 \cdot 10^{-10}$ м, то $\kappa = \pi/a \approx 10^{10}$ м⁻¹ и $\omega_{\max} = 5 \cdot 10^3 \cdot 10^{10} \approx 5 \cdot 10^{13}$ с⁻¹, что по порядку величины соответствует частотам тепловых колебаний атомов в твердых телах.

При малых значениях κ или, что то же, при длинах волн, значительно больших расстояний между атомами в цепочке, ω зависит от κ линейно, как и для случая непрерывной упругой струны с линейной плотностью $\rho = M/a$:

$$\omega = \left(\frac{4\beta}{M} \right)^{1/2} \sin \frac{\kappa a}{2} \approx \left(\frac{4\beta}{M} \right)^{1/2} \frac{\kappa a}{2} \left(\frac{C}{\rho} \right)^{1/2} \quad \kappa = v_{\text{зв}} \kappa. \quad (5.25)$$

Таким образом, отличие дискретной цепочки от непрерывной струны заключается в отсутствии пропорциональности между частотой ω и волновым числом κ . Это связано с дисперсией волн. Короткие волны, которым соответствует более высокая частота колебаний частиц, вследствие инерции масс частиц распространяются медленнее, чем длинные волны. Наличие дисперсии волн проявляется в отклонении кривой $\omega = \omega(\kappa)$ от линейной зависимости (см. рис. 5.5), справедливой для упругой струны. Цепочка из одинаковых атомов ведет себя в отношении распространения акустических волн как упругая струна только лишь при длинах волн $\lambda \gg 2a$.

Скорость распространения акустической волны вдоль дискретной цепочки в отличие от скорости распространения волны вдоль упругой струны [см. формулу (5.6)] зависит от длины волны:

$$v = \frac{\omega(\lambda)}{2\pi} = \lambda \left(\frac{\beta}{M} \right)^{1/2} \sin \frac{\pi a}{\lambda}. \quad (5.26)$$

Такая зависимость характерна для распространения упругих волн в среде с дискретной структурой. Решение (5.21) описывает волны, распространяющиеся вдоль цепочки с фазовой скоростью

$$v_{\text{ф}} = \frac{\omega}{\kappa} = v_{\text{зв}} \left| \frac{\sin(\kappa a/2)}{\kappa a/2} \right| \quad (5.27)$$

и групповой скоростью

$$v_{\text{гр}} = \frac{\partial \omega}{\partial \kappa} = v_{\text{зв}} \left| \cos \frac{\kappa a}{2} \right|. \quad (5.28)$$

При малых значениях волнового числа κ (рис. 5.6) фазовая и групповая скорости совпадают и равны скорости звука:

$$v_{\text{ф}} = v_{\text{гр}} = v_{\text{зв}}. \quad (5.29)$$

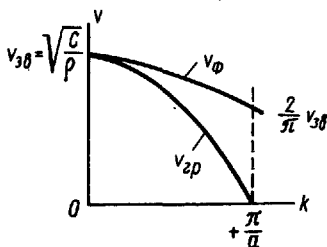


Рис. 5.6. Зависимость фазовой и групповой скорости от волнового числа

Как видно из (5.28) и рис. 5.6, групповая скорость с которой переносится энергия колебаний атомов в цепочке, для самых коротких длин волн, т. е. для $k = \pi/a$, обращается в нуль. Это говорит о том, что эти моды колебаний характеризуют в цепочке стоячие волны вида

$$u_n = u_0 \exp i(\kappa n a - \omega t) = u_0 \exp(-i\omega t) \cos n\pi, \quad (5.30)$$

которые являются результатом сложения двух бегущих волн с равными амплитудами, частотами и длинами, но распространяющихся в противоположных направлениях.

При решении дифференциального уравнения (5.20) мы ничего не говорили о граничных условиях задачи. Задание граничных условий позволит установить интервал изменений волновых чисел κ и число допустимых значений κ в этом интервале. До сих пор мы имели дело с бесконечно длинной цепочкой. Ясно, что силы, действующие на атомы в середине цепочки, отличны от сил, действующих на ее концах. Это приводит к тому, что положения равновесия на концах цепочки нарушаются. Эту трудность можно обойти, если считать, что атомы образуют большое кольцо, так что последний атом ($n=N$) снова находится на расстоянии a от первого ($n=1$). Если N велико, то свойства такого кольца мало отличаются от свойств линейной цепочки. Тогда в качестве граничных условий удобно выбрать периодические граничные условия Борна — Кармана, в соответствии с которыми смещения должны удовлетворять условию цикличности:

$$u_{n+N} = u_n, \quad (5.31)$$

так как порядковые номера n и $n+N$ относятся к одному и тому же атому. Подставляя решение (5.21) в условие (5.31), получим

$$u_{n+N} = \exp i(\kappa N a) u_n, \text{ если } \exp(i\kappa N a) = 1. \quad (5.32)$$

Отсюда следует, что решение (5.21) удовлетворяет граничным условиям (5.31), если

$$\kappa N a = 2\pi n \quad (n=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots), \quad (5.33)$$

т. е. $\kappa = 2\pi/a (n/N)$ квантуется.

Поскольку κ встречается только в выражениях типа

$\exp i(\kappa n a)$, то ничего не изменится, если добавить к нему величину, кратную $2\pi/a$. Поэтому изменения κ можно ограничить интервалом

$$-\pi/a \leq \kappa \leq +\pi/a. \quad (5.34)$$

Интервал (5.34) совпадает, как мы увидим позже (см. гл. 7), с зоной Бриллюэна для волнового вектора электронов. Очевидно, что число допустимых или собственных значений κ в интервале (5.34) при выполнении условия цикличности (5.31) с учетом (5.33) равно N , т. е. числу атомов или элементарных ячеек в цепочке. Каждому собственному значению κ соответствует своя собственная функция в форме решения (5.21), поэтому число таких функций или линейно независимых решений не может превышать N .

Теперь мы можем построить общее решение линейного уравнения движения. В случае гармонических колебаний движение атомов в цепочке, в силу линейности уравнения движения, можно представить в виде суперпозиции бегущих волн типа (5.21), каждая из которых характеризуется волновым числом κ , частотой ω_κ и амплитудой A_κ . Тогда смещение u_n мы можем записать в виде

$$u_n = \sum_{\kappa} A_{\kappa} \exp[i(\kappa n a - \omega_{\kappa} t)], \quad (5.35)$$

где суммирование ведется по всем значениям κ , удовлетворяющим условию (5.32).

Подходящим выбором координат движение любой системы частиц, совершающих малые колебания, может быть сведено к движению независимых осцилляторов. Для этого введем так называемые нормальные координаты q_κ , которые являются независимыми переменными, изменяющимися во времени по гармоническому закону:

$$q_\kappa = A_\kappa \sqrt{N} \exp[-i \omega_\kappa t]. \quad (5.36)$$

После подстановки (5.36) в (5.35), получим

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum q_\kappa \exp(i \kappa n a). \quad (5.37)$$

Легко показать путем дифференцирования выражения (5.36) по t , что уравнение движения для любого q_κ имеет вид

$$\ddot{q}_\kappa + \omega_\kappa^2 q_\kappa = 0 \quad (\kappa = 1, 2, 3, \dots, N). \quad (5.38)$$

Известно, что это есть уравнение движения линейного гармонического осциллятора. Полная энергия такого осциллятора

E_{κ} складывается из его кинетической и потенциальной энергий и определяется классическим выражением

$$E_{\kappa} = \frac{M}{2} \dot{q}_{\kappa}^2 + \frac{M}{2} \omega_{\kappa}^2 q_{\kappa}, \quad (5.39)$$

где M — масса осциллятора. Тогда полная энергия колебаний атомов цепочки

$$E = T + U = U_0 + \sum_{\kappa} E_{\kappa}, \quad (5.40)$$

где T — кинетическая энергия; U_0 — значение потенциальной энергии в состоянии равновесия; U — потенциальная энергия.

Как и во всех задачах, связанных с гармоническим движением, в нашем случае легко произвести квантово-механическое обобщение. В классической механике для одномерного гармонического осциллятора функция Гамильтона имеет вид

$$H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{M\omega_{\kappa}^2}{2} x^2. \quad (5.41)$$

Здесь p_x — импульс частицы, M — ее масса, x — отклонение от положения равновесия, ω_{κ} — круговая, собственная частота осциллятора. В квантовой механике под *одномерным осциллятором* понимают систему, описываемую оператором Гамильтона \hat{H} , равным в полной аналогии с (5.41):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2M} + \frac{M\omega_{\kappa}^2}{2} x^2, \quad (5.42)$$

где $\hat{p}_x = i\hbar \frac{d}{dx}$ — оператор импульса; \hat{x} — оператор координаты.

Соответственно гамильтониану (5.42) уравнение Шредингера для стационарных состояний осциллятора записывается так:

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{M\omega_{\kappa}^2}{2} x^2 \psi = E_{\kappa} \psi. \quad (5.43)$$

Здесь \hbar — постоянная Планка; ψ — волновая функция; E_{κ} — полная энергия осциллятора.

Решением уравнения Шредингера (5.43) являются возможные (собственные) значения энергии

$$E_{\kappa} = \hbar \omega_{\kappa} (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (5.44)$$

где n — главное квантовое число. Формула (5.44) показывает, что энергия осциллятора может иметь лишь дискретные значения.

С учетом проведенного обобщения запишем полную энергию колебаний атомов в цепочке [см. (5.40)].

$$E = U_0 + \sum_{\kappa} E_{\kappa} = U_0 + \sum_{\kappa} \hbar \omega_{\kappa} (n + 1/2), \quad (5.45)$$

Член $1/2$ в скобках представляет «нулевую» энергию, наличие его обусловлено тем обстоятельством, что даже при 0 К , т. е. в состоянии самой низкой энергии, атомы не могут точно находиться в своих положениях равновесия (они совершают колебательные движения). Такая ситуация связана с тем, что точная локализация атомов в их положениях равновесия, в силу соотношения неопределенностей Гейзенберга ($\Delta p_x \Delta x \geq \hbar$) вызвала бы большую неопределенность в их скоростях.

Итак, полная тепловая энергия колебаний атомов в цепочке складывается из энергий нормальных колебаний, ведущих себя подобно линейным гармоническим осцилляторам с собственной частотой ω_k .

В заключение отметим, что, если при выводе уравнения движения учитывать не короткодействующие, а дальнедействующие силы, то окончательный результат, в общих чертах, останется без изменений. При этом, хотя зависимость $\omega = \omega_k$ будет иметь более сложный вид, но число нормальных колебаний типа (5.21) по-прежнему останется равным N , т. е. числу допустимых значений волновых чисел k в интервале (5.34). При малых k зависимость $\omega = \omega_k$ остается линейной, а при $k = \pm \pi/a$ групповая скорость обращается в нуль и решение в этом случае также описывается стоячими волнами типа (5.30).

5.4. КОЛЕБАНИЯ ОДНОМЕРНОЙ РЕШЕТКИ С БАЗИСОМ

В предыдущем разделе были определены моды нормальных колебаний одномерной монокристаллической решетки Бравэ. Рассмотрим теперь продольные колебания атомов одномерной решетки с базисом, когда на линейную элементарную ячейку Бравэ с параметром $2a$ приходится два атома. Предположим, что вдоль прямой линии располагается N ячеек. Такая система обладает $2N$ степенями свободы. При решении задачи о колебаниях атомов в такой системе возможны две модели цепочки, использование каждой из которых, в конечном итоге, приводит к одним и тем же результатам. Первая модель — двухатомная линейная цепочка из одинаковых атомов, связанных пружинками с чередующейся жесткостью (рис. 5.7). Вторая модель — двухатомная линейная цепочка (рис. 5.8), вдоль которой поочередно располагаются атомы с различной массой M_1 и M_2 , а силы между парами соседних атомов одинаковы (атомы связаны между собой пружинками одинаковой жесткости). Пружинка моделирует наличие силы притяжения, когда она растянута, и силы отталкивания, когда она сжата. Мы воспользуемся второй моделью.

Обозначим $2na$ четные положения равновесия атомов с массой M_1 , а $(2n+1)a$ — нечетные для атомов с массой M_2 (n — целое число). Пусть u_{2n} есть смещения атома с массой M_1