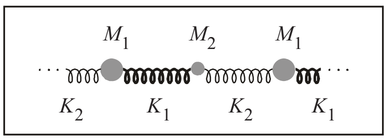
Колебания кристаллической решетки в гармоническом приближении, часть 2

одномерные модели: цепочки атомов

Рассмотрим две одномерные модели, в которых роль решетки Браве играет последовательность расположенных на одной прямой точек с координатами $x_n = na$ (a — период цепочки), а смещения относительно положений равновесия имеют лишь по одной ненулевой компоненте u_{ns} (индекс α, как избыточный, будем в этих примерах опускать). Кроме того, будем учитывать взаимодействие каждого атома лишь с двумя его ближайшими соседями, полагая $A^{ss'}_{|n| \geq 2} \equiv 0$.

двухатомная цепочка

Пусть $q = 2$. Тогда в приближении взаимодействия с ближайшими соседями ненулевые компоненты матрицы силовых коэффициентов выражаются через две независимые константы K_1 и K_2:



двухатомная цепочка с потенциальной энергией $U = \frac{1}{2}\sum_n [K_1(u_{n2} - u_{n1})^2 + K_2(u_{n-1,2} - u_{n1})^2]$

$$A_0^{12} = A_0^{21} = -\frac{K_1}{2}, \quad A_0^{11} = A_0^{22} = \frac{K_1 + K_2}{2},$$

$$A_1^{12} = A_1^{21} = -\frac{K_2}{2}.$$

Решение для смещений ищем в виде $u_{ns} = u_s \exp[i(kn - \omega t)]$ ($s = 1, 2$). Система уравнений (6.14) из лекции 6 принимает вид:

$$(-M_1\omega^2 + K_1 + K_2)u_1 - (K_1 + K_2 e^{ika})u_2 = 0, \qquad (7.1)$$

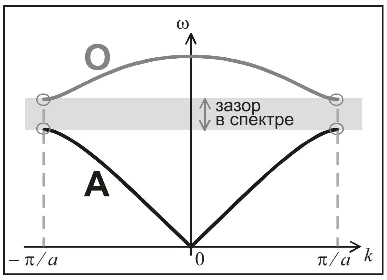
$$-(K_1 + K_2 e^{-ika})u_1 - (-M_2\omega^2 + K_1 + K_2)u_2 = 0, \qquad (7.2)$$

откуда получаем дисперсионное уравнение (6.18) в виде биквадратного уравнения относительно ω:

$$M_1 M_2 \omega^4 - MK\omega^2 + 4K_1K_2\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) = 0, \qquad (7.3)$$

где $M = M_1 + M_2$ и $K = K_1 + K_2$.

двухатомная цепочка



дисперсионные ветви колебаний двухатомной цепочки: для обеих ветвей на границе зоны Бриллюэна ($k = \pm\pi/a$) групповая скорость $v_g = d\omega_j/dk$ обращается в 0

Решения уравнения (7.3) соответствуют акустической и оптической дисперсионным ветвям

$$\omega_{ac} = \omega_0 \sqrt{\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - \left(\frac{2\Omega_0}{\omega_0}\sin\frac{ka}{2}\right)^2}}, \tag{7.4}$$

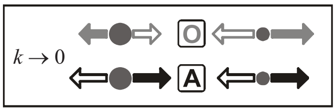
$$\omega_{opt} = \omega_0 \sqrt{\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \left(\frac{2\Omega_0}{\omega_0}\sin\frac{ka}{2}\right)^2}}, \tag{7.5}$$

где $\omega_0 = \sqrt{K/\tilde{M}}$, $\Omega_0 = \sqrt{\tilde{K}/M}$, $\tilde{M} = M_1 M_2/M$, $\tilde{K} = K_1 K_2/K$.

Из (7.1) получаем:

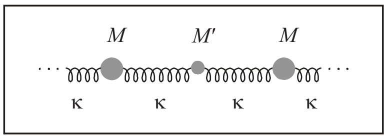
$$\frac{u_2}{u_1} = \frac{K - M_1\omega^2}{K_1 + K_2 e^{ika}} \Rightarrow \lim_{k\to 0}\left[\frac{u_2}{u_1}\right]_{ac} = 1, \quad \lim_{k\to 0}\left[\frac{u_2}{u_1}\right]_{opt} = -\frac{M_1}{M_2},$$

т.е. в длинноволновом пределе ($k \to 0$, $\lambda = \frac{2\pi}{k} \to \infty$) для акустической моды колебания атомов в элементарной ячейке сфазированы и имеют одинаковые асмплитуды — элементарная ячейка движется как целое; в оптической моде атомы элементарной ячейки колеблются в противофазе, при этом центр масс элементарной ячейки остается неподвижным.



относительные смещения атомов в оптической моде приводят к появлению у элементарной ячейки осциллирующего дипольного момента (электрической поляризации), обеспечивая тем самым взаимодействие оптических колебаний с электромагнитным полем в оптическом диапазоне (инфракрасная область спектра)

одноатомная цепочка с изотопической примесью



одноатомная цепочка с одиночной пространственной неоднородностью в виде изотопической примеси (масса другая, силовая константа — та же); потенциальная энергия: $U = \frac{\kappa}{2}\sum_n (u_{n-1} - u_n)^2$

Пусть $q = 1 \Rightarrow$ индекс s, как избыточный, будем опускать. При этом один из атомов цепочки (для определенности: с $n = 0$) имеет массу, отличную от массы остальных атомов (изотопическая примесь). Для изотопической примеси будем пренебрегать отличием электронного состояния от того, которое реализуется в случае идеальной решетки (когда все атомы одинаковы). Поэтому эффективная потенциальная энергиия взаимодействия с ближайшими соседями и, следовательно, соответствующая силовая константа остаются для примесного атома такими же, что и для остальных атомов в цепочке:

$$A_{nn} = -A_{n,n-1} = -A_{n-1,n} = \frac{\kappa}{2}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

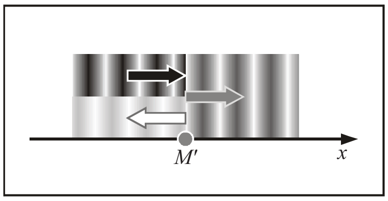
Уравнения движения:

$$M'\ddot{u}_0 = \kappa(u_1 + u_{-1} - 2u_0), \ n = 0, \tag{7.6}$$

$$M\ddot{u}_n = \kappa(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_0), \ |n| \geq 1. \tag{7.7}$$

одноатомная цепочка с изотопической примесью

не затухающие в пространстве решения



κ (греч. “каппа”) — силовая константа
k (лат. “ка”) — волновое число

(I) *Бегущие волны, рассеянные на примеси.*

Для определенности рассмотрим случай падающей волны с $k > 0$. Решение уравнений (7.6), (7.7) ищем при $n \le -1$ в виде суперпозиции падающей и отраженной волн, а при $n \ge 1$ — в виде прошедшей волны:

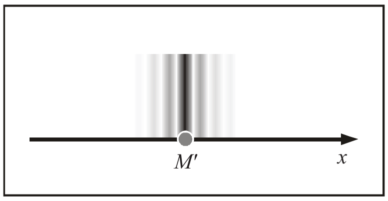
$$u_{n \le -1} = (A\, e^{ikna} + B\, e^{-ikna})e^{-i\omega(k)t}, \qquad (7.8)$$

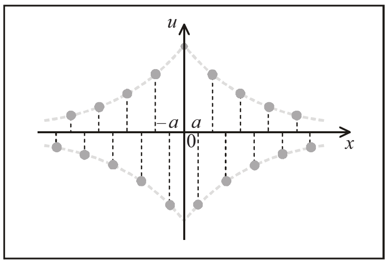
$$u_{n \ge 1} = Ce^{i[kna - \omega(k)t]}, \qquad (7.9)$$

где $\omega(k) = 2\sqrt{\dfrac{\kappa}{M}}\left|\sin\left(\dfrac{ka}{2}\right)\right|$ — закон дисперсии, соответствующий единственной (акустической) ветви для однородной одноатомной цепочки. Зависимости (7.8) и (7.9) являются решениями (7.7) при $n \ge 1$ и произвольных A, B и C. Амплитуды A, B и C могут быть найдены (выражены через амплитуду u_0) сшивкой решений (7.8), (7.9) в точке $n = 0$, т.е. из системы трех уравнений, получаемой в результате подстановки (7.8), (7.9) в уравнение (7.6) и в два уравнения вида (7.7), соответствующие $n = -1$ и $n = 1$.

одноатомная цепочка с изотопической примесью

локализованные в пространстве решения





соседние узлы колеблются в противофазе

(II) *Колебания, локализованные вблизи примеси.*

Ищем решение уравнений (7.6), (7.7) с комплексным волновым числом $k = k' + ik''$ (по-прежнему $\operatorname{Im}\omega = 0$). В неограниченной цепочке с одиночной изотопической примесью физически реализуемы колебания атомов с амплитудой, экспоненциально затухающей по мере удаления от примесного атома:

$$u_n = u_0 \exp[i(k'na - \omega t) - k''|n|a]. \qquad (7.10)$$

Подстановка (7.10) в (7.7) дает

$$\operatorname{Im}\omega^2 = 0 = \frac{2\kappa \sin k'a \,\operatorname{sh} k''a}{M}, \qquad (7.11)$$

$$\operatorname{Re}\omega^2 = \omega^2 = \frac{2\kappa(1 - \cos k'a \,\operatorname{ch} k''a)}{M} > 0. \qquad (7.12)$$

Из (7.11) для $k' \ne 0$ имеем $k'a = \pi l$ ($l = 0, \pm1, \pm2, \ldots$). Из условия (7.12) получаем, что l должно быть нечетным: $l = \pm1, \pm3, \ldots$. Поскольку различные нечетные значения l реализуют одно и то же решение, полагаем для определенности $l = 1$. Выражение (7.10) принимает вид: $u_n = (-1)^n u_0 \exp[-k''|n|a - i\omega t]$, $k'' > 0$.

одноатомная цепочка с изотопической примесью

Подстановкой этого выражения в (7.6) получаем уравнение, которое вместе с уравнением, получающимся из (7.12), образует систему с двумя неизвестными, ω и k'':

$$\omega^2 = \frac{2\kappa(1+\operatorname{ch} k''a)}{M}, \qquad (7.13)$$

$$\omega^2 = \frac{2\kappa(1+e^{-k''a})}{M'}. \qquad (7.14)$$

Вводя переменную $\xi = e^{k''a}$, получим из (7.13), (7.14) квадратное уравнение относительно ξ:

$$\xi^2 - \frac{2\Delta M}{M'}\xi - \frac{M+\Delta M}{M'} = 0, \qquad (7.15)$$

$\xi = e^{k''a} > 0$

где $\Delta M \equiv M - M'$. Положительный корень:

$$\xi = \frac{M+\Delta M}{M-\Delta M}, \qquad (7.16)$$

$\xi = e^{k''a}\big|_{k''>0} > 1$

причем $\Delta M > 0$, поскольку $\xi > 1$. Таким образом, локальная мода существует при выполнении условия

условие существования локальной моды

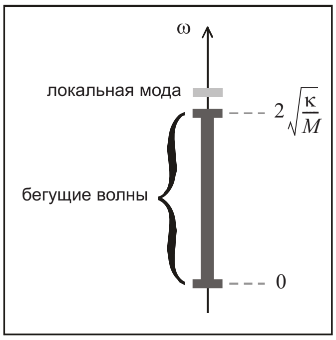
$$M' < M. \qquad (7.17)$$

одноатомная цепочка с изотопической примесью

Для пространственного масштаба затухания и частоты локальных колебаний имеем соответственно

$$k'' = \frac{1}{a}\ln\frac{M+\Delta M}{M-\Delta M} \underset{\Delta M \ll M}{\approx} \frac{1}{a}\frac{2\Delta M}{M}, \qquad (7.18)$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\kappa M}{M^2-(\Delta M)^2}} \underset{\Delta M \ll M}{\approx} 2\sqrt{\frac{\kappa}{M}}\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta M}{M}\right)^2\right]. \qquad (7.19)$$



частота локальной моды лежит вне полосы частот, соответствующих решениям в виде бегущих волн

Таким образом, $\omega > 2\sqrt{\frac{\kappa}{M}}$, где $2\sqrt{\frac{\kappa}{M}}$ — верхняя граница спектра для бегущих волн в одноатомной цепочке. Такое отщепление частоты локальной моды “вверх” обеспечено как раз условием $M' < M$ (собственная частота колебаний с участием более легкого, чем остальные, атома, лежит выше максимальной частоты колебаний однородной цепочки из более тяжелых атомов с массой M).