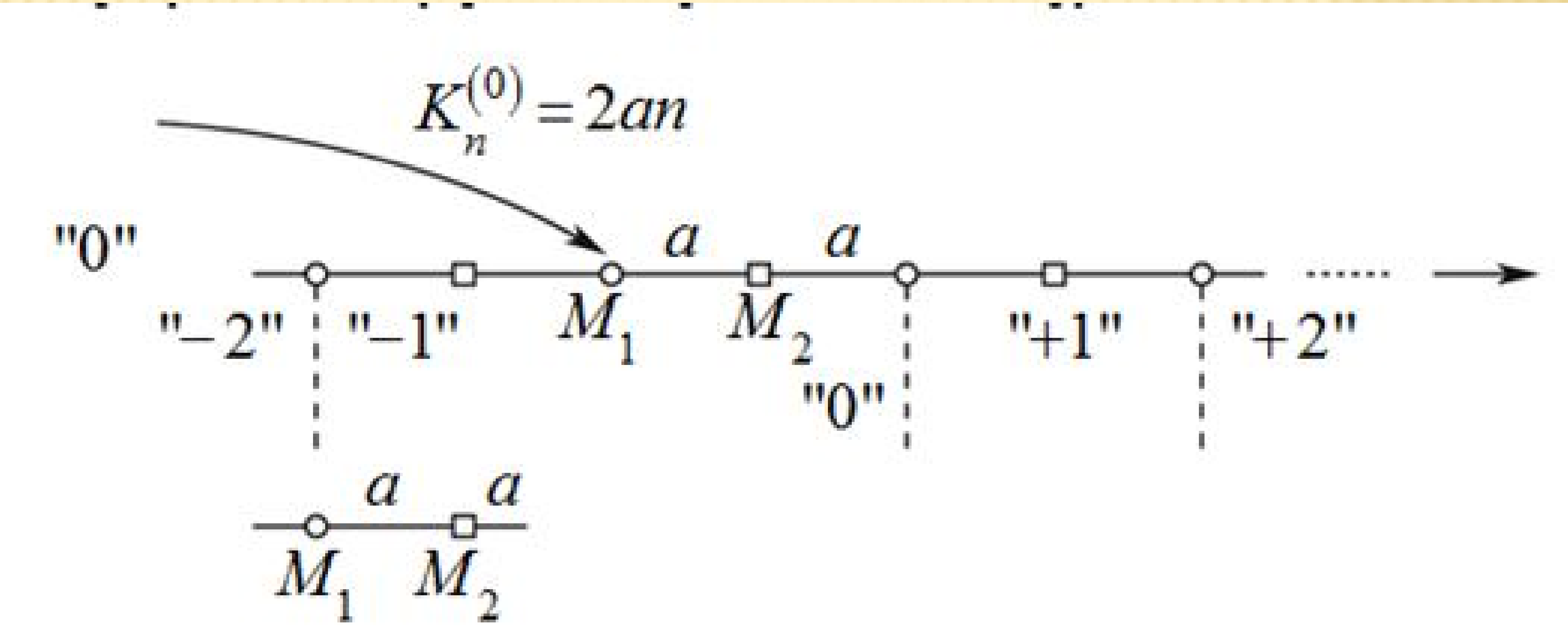
**<u>Лекция 5.</u>**

**Спектр колебаний двухатомного одномерного кристалла (двухатомной линейной цепочки). Акустические и оптические частоты. Скорости распространения и относительные смещения атомов.**




$$\left.\begin{array}{l}\alpha, \beta = 1 \\ j, j_1 = 1, 2\end{array}\right\}\{\alpha\}\cdot\{j\} = 2$$

$$j = 1 \rightarrow \omega^2 l_1 = C_{11} l_1 + C_{12} l_2$$

$$j = 2 \rightarrow \omega^2 l_2 = C_{21} l_1 + C_{22} l_2$$

Перепишем в стандартной форме :

$$\begin{cases} (\omega^2 - C_{11}) l_1 + (-C_{12}) l_2 = 0 \\ (-C_{12}) l_1 + (\omega^2 - C_{22}) l_2 = 0 \end{cases}$$

Условие существования ненулевых решений : детерминант

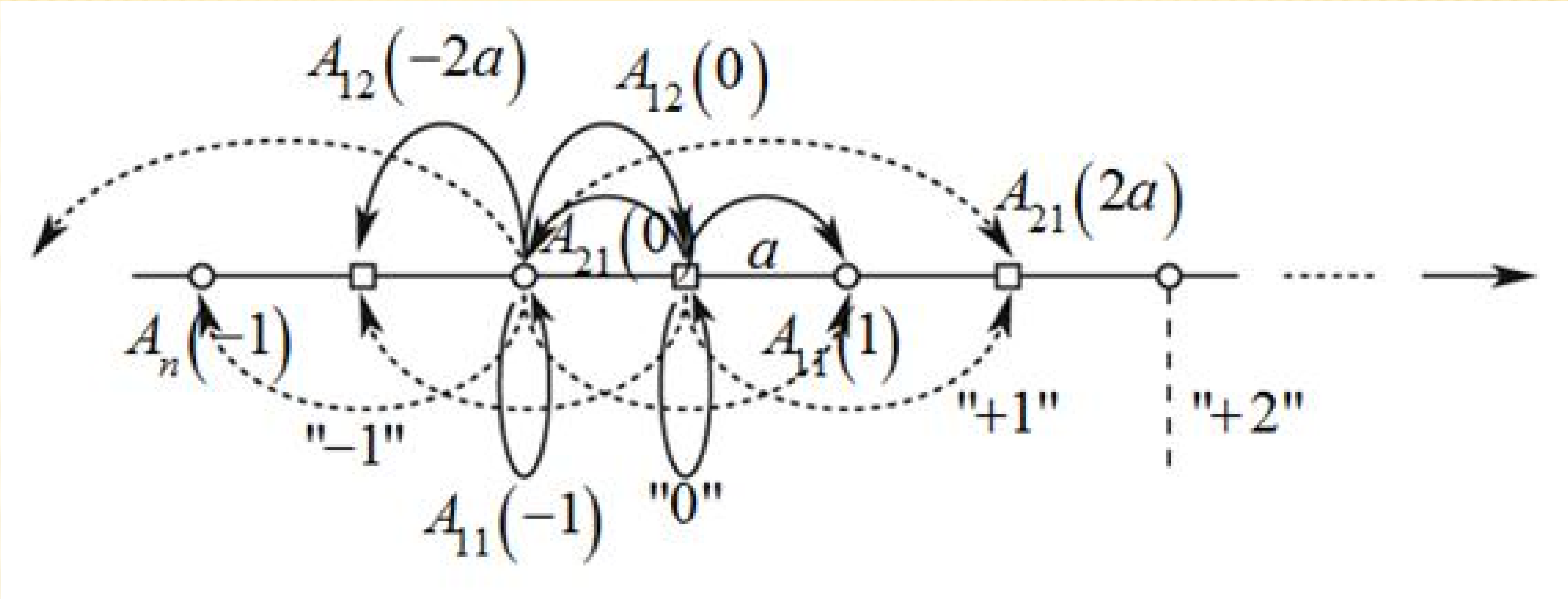
$$\begin{vmatrix} (\omega^2 - C_{11}) & (-C_{12}) \\ (-C_{21}) & (\omega^2 - C_{22}) \end{vmatrix} = 0 \rightarrow \left(\omega^2\right)^2 - \omega^2 (C_{11} + C_{22}) + \left(C_{11} C_{22} - C_{12} C_{21}\right) = 0$$

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{C_{11} + C_{22}}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{C_{11} + C_{22}}{2}\right)^2 - C_{11} C_{22} + C_{12} C_{21}}$$

Таким образом, $\omega_{1,2}^2 = \frac{C_{11}+C_{22}}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{C_{11}+C_{22}}{4}\right)^2 + C_{12}C_{21}}$ - получено без всяких приближений.

$$C_{jj_1}(f) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}} \sum_n A_{jj_1}(2an) e^{-if\,2an}$$

$$C_{11}(f) = \frac{1}{M_1} \sum_n A_{11}(2an) e^{-if\,2an} = \frac{1}{M_1}\left\{A_{11}(0)\cdot 1 + A_{11}(+2a\cdot 1)e^{-if\,2a1} + ....\right\}$$




$A_{11}(-1), A_{11}(1)$ можно отбросить по сравнению с $A_{11}(0)$ -ближайшим (также как и “-2”,”2”, и т.д.). Таким образом $C_{11} \approx \dfrac{A_{11}(0)}{M_1}; C_{22} \simeq \dfrac{A_{22}(0)}{M_2}$

$$C_{12}=\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}\sum_n A_{12}(2an)e^{-ifa2n}\simeq\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}\left\{A_{12}(0)\cdot 1+A_{21}(-2a)e^{-if(-2a)}+....\right\}$$

$$C_{21}=\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}\sum_n A_{21}(2an)e^{-ifa2n}\simeq\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}\left\{A_{21}(0)\cdot 1+A_{21}(2a)e^{-if2a}+....\right\}$$

$A_{12}(0)\equiv A_{21}(0)=A_{12}(-2a)=A_{21}(-2a)\equiv-\gamma$ одно и тоже (взаимодействие атома (1) с атомом (2) на одинаковом расстоянии -а). Здесь $\gamma$ уже другое (раньше оно обозначало взаимодействие двух одинаковых атомов).

$A_{11}(0)$ и $A_{22}(0)$ найдем из условия $\sum_{nj_1} A_{jj_1}(2an)\equiv 0$.

$$j=1\to\sum_n A_{11}(2an)+\sum_n A_{12}(2an)\equiv 0$$

$$j=2\to\sum_n A_{21}(2an)+\sum_n A_{22}(2an)\equiv 0$$

$$j=1\rightarrow A_{11}(0)+A_{12}(0)+A_{12}(-2a)\simeq 0$$

$$j=2\rightarrow A_{21}(0)+A_{21}(+2a)+A_{22}(0)\simeq 0$$

Учли только самодействие , возникающее из-за связи с ближайшими соседями.

Получаем:

$$A_{11}(0)=-A_{12}(0)-A_{12}(-2a)=+2\gamma>0$$

$$A_{22}(0)=-A_{21}(0)-A_{21}(+2a)=+2\gamma>0$$

Вторая производная в точке абсолютного минимума. Таким образом, $C_{11}\simeq\dfrac{2\gamma}{M_1}$, $C_{22}\simeq\dfrac{2\gamma}{M_2}$

$$C_{12}\simeq\frac{-\gamma}{\sqrt{M_1M_2}}\left(1+e^{+if2a}\right)$$

$$C_{21}\simeq\frac{-\gamma}{\sqrt{M_2M_1}}\left(1+e^{-if2a}\right)$$

В этом приближении получилось $C_{12}=C_{21}^{*}$.

$$\omega_{1,2}^2(f) \simeq \gamma\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \mp \sqrt{\gamma^2\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 + \frac{\gamma^2}{M_1 M_2}\left|1+e^{ifa}\right|^2}$$

$$\left|1+e^{if\,2a}\right|^2 = \left(1+\cos 2fa\right)^2 + \left(\sin 2fa\right)^2 = 1+2\cos 2fa + 1 = 4\cos^2 fa = 4(1-\sin^2 fa)$$

$$\omega_{1,2}^2(f) = \begin{cases} \gamma\left\{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \mp \sqrt{\left(\frac{1}{M_1}-\frac{1}{M_2}\right)^2 + \frac{4\cos^2 fa}{M_1 M_2}}\right\} \\ \gamma\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)\left\{1 \mp \sqrt{1-\frac{4\sin^2 fa}{M_1 M_2\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2}}\right\} \end{cases}$$

Эти выражения идентичны

$$\omega_{1,2}^2(f+\frac{2\pi}{2a}k)\equiv\omega_{1,2}^2(f)\quad k\in Z$$

$-\dfrac{\pi}{2a}<f\leq\dfrac{\pi}{2a}$ - область однозначности $f$, $2a$ – размер ячейки.

1) $f\to 0\sim af\ll 1\to\dfrac{a}{\lambda}\ll 1$ (длинная волна)

$$\sin fa\Big|_{fa\ll 1}\simeq fa+.......$$

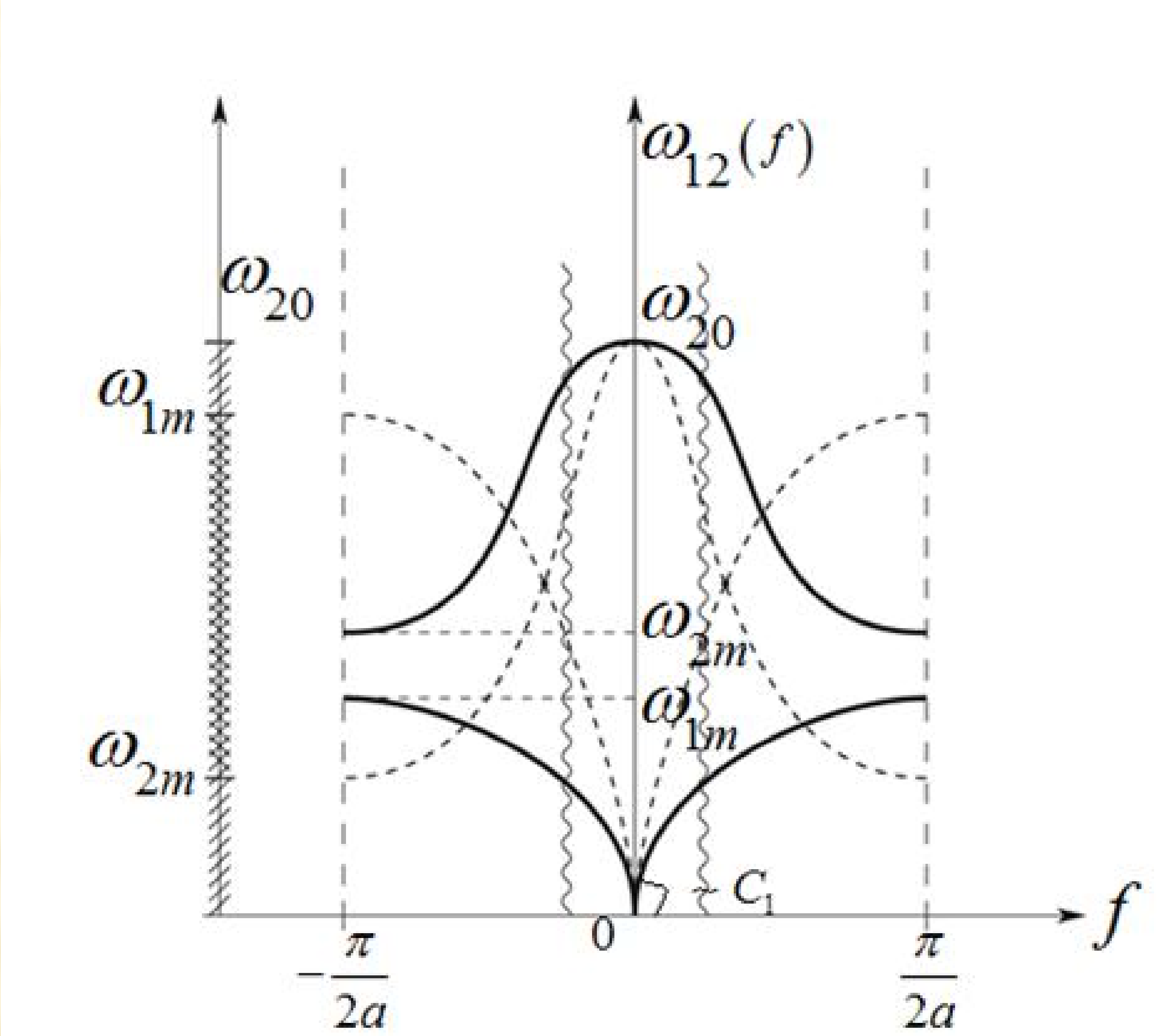
$$\omega_{1,2}^2(f\to 0)\simeq\gamma(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2})\left\{1\mp\sqrt{1-\frac{4a^2}{M_1M_2(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2})^2}f^2}\right\}\qquad;$$

$$\sqrt{1-x}\Big|_{x\ll 1} \approx 1-\frac{1}{2}x+....$$

$$\Rightarrow \omega_{1,2}^{2}(f\to 0)\simeq \gamma\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)\left\{1-\frac{2a^2}{M_1M_2\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2}f^2\right\}$$

Тогда :

$$\omega_{1,2}^{2}(f\to 0)\simeq \gamma\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)\left\{0\mp\frac{2a^2}{M_1M_2\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2}f^2\right\}=\frac{2\gamma a^2}{M_1+M_2}f^2\equiv C_1^2 f^2$$




Эти точки для обоих корней являются точками экстремума, т.к. произв. $\cos\cdot\sin = 0$ при

$f = \pm \pi/2a$.

$$\omega_1(f\to 0)\simeq C_1\left|f\right|$$

$$\omega_2^2(f\to 0)\simeq\gamma\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)\left\{2-0\left(f^2\right)\right\}$$

$$\omega_2(f\to 0)\simeq\omega_{20}-0\left(f^2\right)$$

$$\omega_{20}\equiv\sqrt{2\gamma\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)}$$

2) $f\to\pm\dfrac{\pi}{2a}$

$$2)\ f \to \pm\frac{\pi}{2a}$$

$$\cos\left(\pm\frac{\pi}{2a}\right) = 0$$

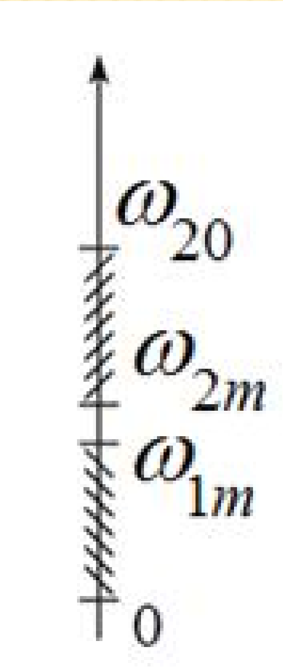
$$\omega_{1,2}^2\left(f \to \pm\frac{\pi}{2a}\right) \simeq \gamma\left\{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \mp \sqrt{\left(\frac{1}{M_1}-\frac{1}{M_2}\right)^2}\right\} =$$

$$= \gamma\left\{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \mp \left|\frac{1}{M_1}-\frac{1}{M_2}\right|\right\}_{M_1>M_2} = \gamma\left\{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \mp \left(\frac{1}{M_1}-\frac{1}{M_2}\right)\right\}$$

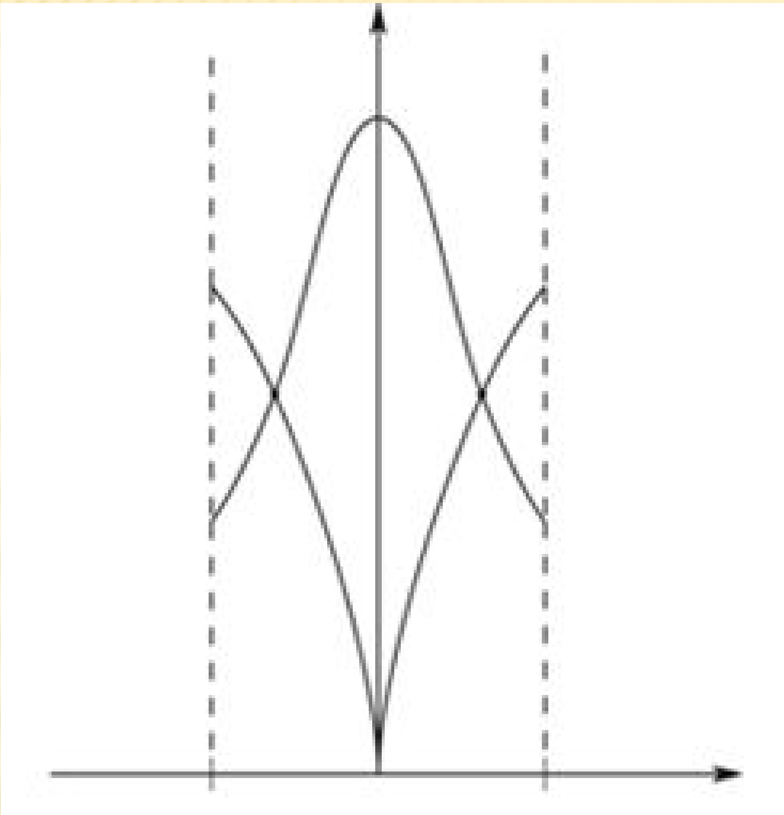
$$\omega_1^2\left(f \to \pm\frac{\pi}{2a}\right) \simeq \frac{2\gamma}{M_1} \equiv \omega_{1m}^2$$

$$\omega_2^2\left(f \to \pm\frac{\pi}{2a}\right) \simeq \frac{2\gamma}{M_2} \equiv \omega_{2m}^2$$

$$\omega_{1m} < \omega_{2m}\,(M_1 > M_2)$$




Область расширенных частот состоит из двух неперекрывающихся частей: спектр имеет полосатую структуру. Разрешенные частоты вызывают резонанс и возбуждают колебания, частоты, не попадающие в разрешенный интервал или попадающие в щель, вызывают полное внутреннее отражение.

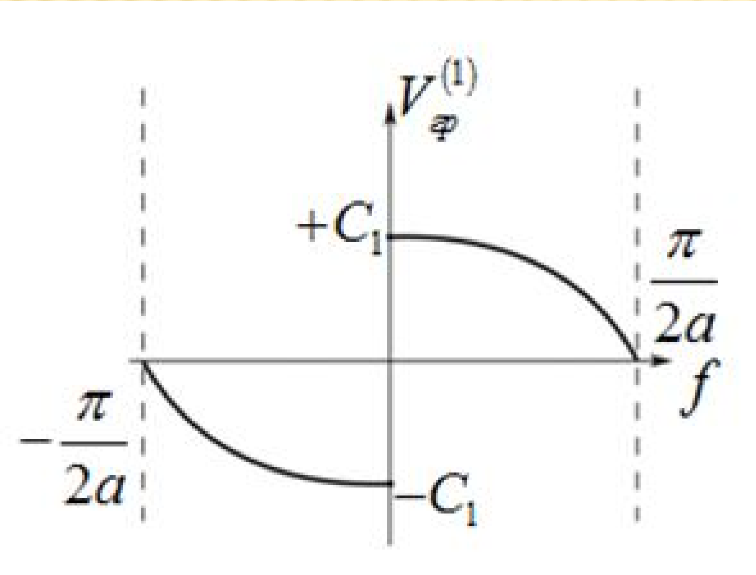


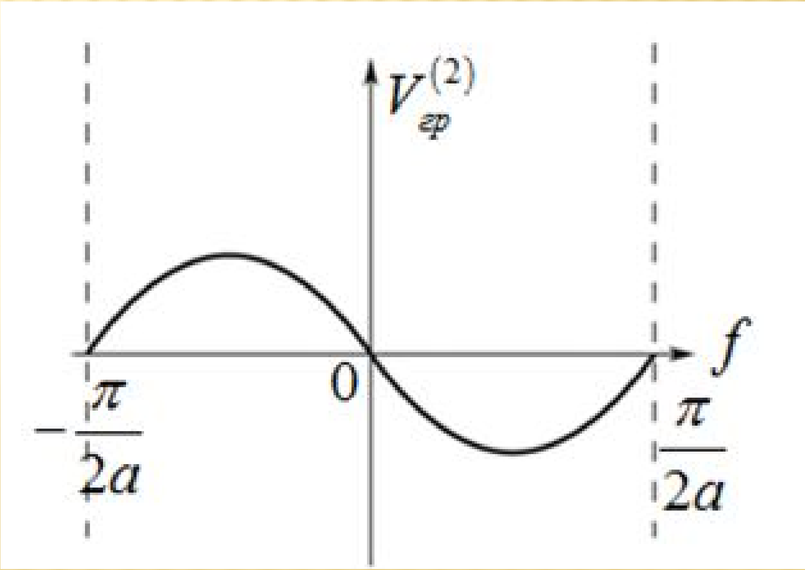
В принципе, такое может быть при учете взаимодействия с более далеими соседями.

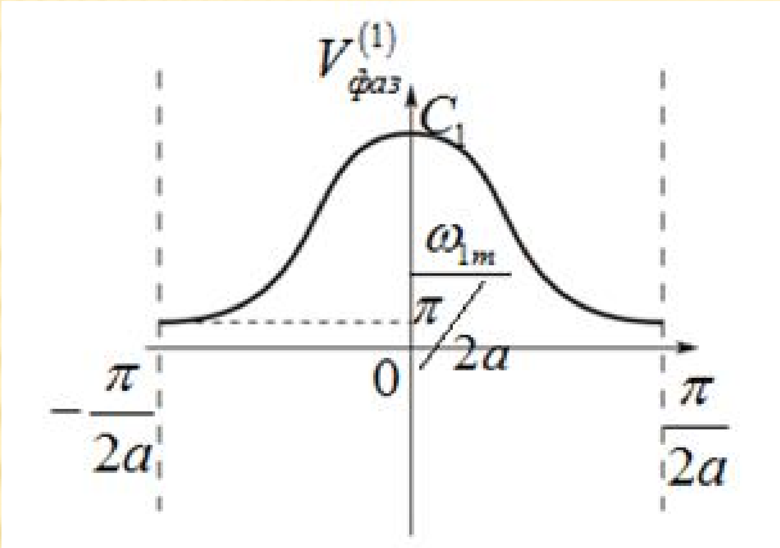
Рассмотрим поведение групповой и фазовой скорости.

$$V_{гр}^{(1)} = \frac{\partial \omega_1}{\partial f} \simeq \begin{cases} \frac{\partial}{\partial f} C_1 \left| f \right| = \pm C_1, \ f \to 0 \\ \frac{\partial}{\partial f} \omega_{1m} = 0, \ f \to \pm \frac{\pi}{2a} \end{cases}$$

$$V_{гр}^{(2)} = \frac{\partial \omega_2}{\partial f} \simeq \begin{cases} \frac{\partial}{\partial f} \omega_{20} = 0, \ f \to 0 \\ \frac{\partial}{\partial f} \omega_{2m} = 0, \ f \to \pm \frac{\pi}{2a} \end{cases}$$

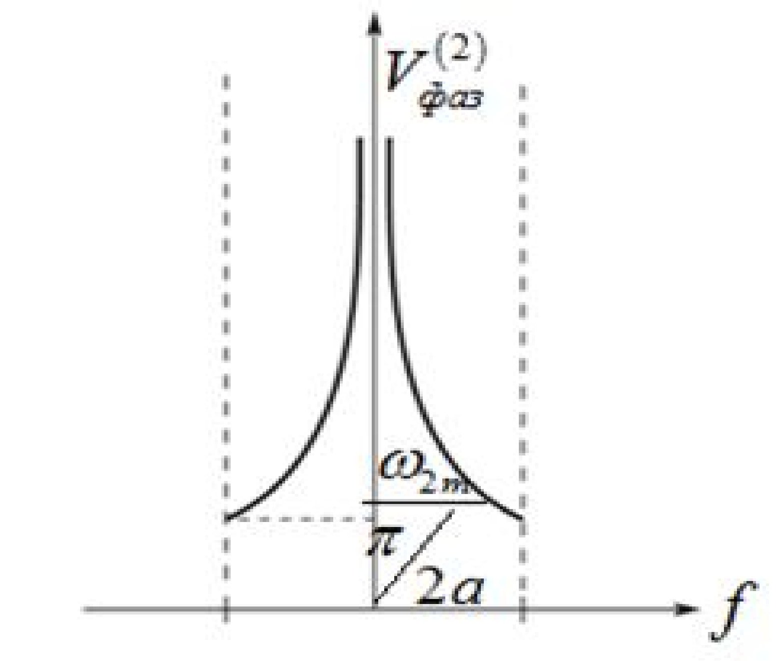


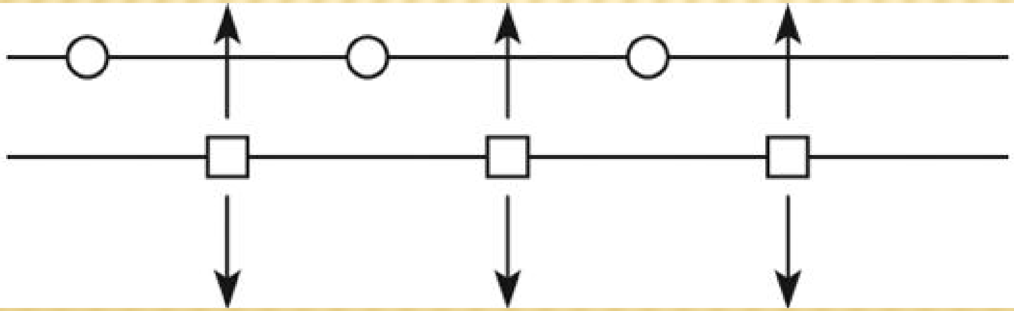



$$V^{(2)}_{фаз} = \frac{\omega_1}{|f|} \simeq \begin{cases} \dfrac{C_1|f|}{|f|} = C_1,\ f \to 0 \\ \dfrac{\omega_{1m}}{\pi/2a},\ f \to \pm\dfrac{\pi}{2a} \end{cases}$$

$$V^{(2)}_{фаз} = \begin{cases} \dfrac{\omega_{20}}{|f|} \to \infty,\ f \to 0 \\ \dfrac{\omega_{2m}}{|\pm\pi/2a|},\ f \to \pm\dfrac{\pi}{2a} \end{cases}$$




Бесконечная $V_{фаз}$ говорит о том, что фаза всех атомов одинакова (один подкристалл колеблется относительно другого как целое).



Отношение смещений атомов в ячейке с номером $n$ в зависимости от того, в каких колебаниях они участвуют:

$$\frac{U_{1,n}^{(s)}}{U_{2,n}^{(s)}} = \frac{\dfrac{l_1^{(s)}}{\sqrt{M_1}} e^{if\,2an - i\omega_s t}}{\dfrac{l_2^{(s)}}{\sqrt{M_2}} e^{if\,2an - i\omega_s t}} = \frac{l_1^{(s)}}{l_2^{(s)}} \sqrt{\frac{M_2}{M_1}}$$

$$\left(\omega_s^2 - C_{11}\right) l_1^{(s)} = C_{12} l_2^{(s)}$$

$$\frac{l_1^{(s)}}{l_2^{(s)}} = \frac{C_{12}}{\omega_s^2 - C_{11}} \simeq \frac{\dfrac{-\gamma}{\sqrt{M_1 M_2}}\left(1 + e^{if\,2a}\right)}{\omega_s^2 - \dfrac{2\gamma}{M_1}}$$

$$\frac{U_{1,n}^{(1)}}{U_{2,n}^{(1)}} = \frac{l_1^{(1)}}{l_2^{(1)}} \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} = \frac{\dfrac{-\gamma}{\sqrt{M_1 M_2}}\left(1 + e^{if\,2a}\right)}{\omega_1(f) - \dfrac{2\gamma}{M_1}} \sqrt{\frac{M_2}{M_1}}\Bigg|_{f\to 0} \approx \frac{\dfrac{+\gamma}{\sqrt{M_1 M_2}}\,2}{C_1^2 f^2 + \dfrac{2\gamma}{M_1}} \sqrt{\frac{M_2}{M_1}}\Bigg|_{f\to 0} = 1$$

Соседние атомы в ячейке при колеблются с частотой $\omega_1$ смещаются практически одинаково $\Rightarrow$ ячейка смещается как целое $\Rightarrow$ звуковая волна. $\omega_1$ - акустическая частота (в области длинных волн).

$$\left.\frac{u_{1,n}^{(2)}}{u_{2,n}^{(2)}}\right|_{f\to 0} = \frac{l_1^{(2)}}{l_2^{(2)}}\left.\sqrt{\frac{M_1}{M_2}}\right|_{f\to 0} \simeq \left.\frac{\dfrac{-2\gamma}{\sqrt{M_1 M_2}}}{2\gamma\left(\dfrac{1}{M_1}+\dfrac{1}{M_2}\right)-\dfrac{2\gamma}{M_1}}\sqrt{\frac{M_2}{M_1}}\right|_{f\to 0} \simeq -\frac{M_2}{M_1}$$

Т.е. при колебаниях с частотой $\omega_2$ в различных ячейках колеблются в противофазе : (в области длинных волн) $\dfrac{u_{1,n}^{(s)}}{u_{2,n}^{(s)}}$ . $M_1 u_{1,n}^{(2)}(f\to 0)+u_2 u_{2,n}^{(2)}(f\to 0)=0$ ~ это соотношение фиксирует центр масс, $\Rightarrow$ ячейку $\Rightarrow$ весь кристалл. $\omega_2$ - оптическая частота ($\sim 10^{15} c^{-1}$ - инфракрасная область спектра). В области $f\to\pm\dfrac{\pi}{2a}$ найти $\dfrac{u_{1,n}^{(s)}}{u_{2,n}^{(s)}}$ самостоятельно!

Четкое разделение на оптическую и акустическую ветви (даже при перекрытии) возможно только в области малых $f$ .