Лекция 6-я.

Периодическая зависимость собственных частот и векторов смещения от квазиволнового вектора. Обратная решётка и её базис. Длинноволновое приближение для частот и амплитуд смещения атомов в произвольном кристалле. Числа акустических и оптических частот.

Анализ поведения в общем случае:

$$\omega^2\left(\vec{f}\right) l_j^{\alpha}\left(\vec{f}\right) = \sum_{j_1} C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}\right) l_{j_1}^{\beta}\left(\vec{f}\right) \qquad (*)$$

$$C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\overline{f}\right) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}} \sum_{\overline{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\overline{n} - \overline{n}_1\right) e^{-i\overline{f}\left(\overline{n} - \overline{n}_1\right)}$$

$$1)\quad C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec f\right)=\frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}}\sum_{n_1}\underbrace{A_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec n-\vec n_1\right)}_{A_{j_1 j}^{\beta\alpha}\left(\vec n-\vec n_1\right)e^{-i\vec f\left(\vec n_1-\vec n\right)}}e^{+i\vec f\left(\vec n-\vec n_1\right)}=C_{j_1 j}^{\beta\alpha}\left(\vec f\right)$$

$$A_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec n-\vec n_1\right)=\left(\frac{\partial^2 U}{\partial R_{j\vec n}^{\alpha}\partial R_{j_1\vec n_1}^{\beta}}\right)_0\equiv A_{j_1 j}^{\beta\alpha}\left(\vec n_1-\vec n\right)$$

$\omega^2\hat{\vec l}=\widehat{C}\hat{\vec l}$ - задача Штурма-Лиувилля; $\widehat{C}$ - эрмитов оператор (у матрицы $C^*=C^T$ $\rightarrow$ собственные значения вещественны, а собственные функции образуют полную ортонормированную систему функций)

2) $C_{jj_1}^{*\alpha\beta}\left(-\vec{f}\right)=C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}\right)$ (т.к. при сопряжении меняется только знак в *exp*)

(1) $\omega^2\left(-\vec{f}\right)l_j^{*\alpha}\left(-\vec{f}\right)=\sum\limits_{j_1}C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}\right)l_{j_1}^{*\beta}\left(-\vec{f}\right)$ в (*) взяли комплексное сопряжение

и заменили $\vec{f}\rightarrow-\vec{f}$.

Теперь условием разрешимости системы стало $\det\left\|\omega^2\left(-\vec{f}\right)\delta^{\alpha\beta}\delta_{jj_1}-C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}\right)\right\|=0$

было : $\det\left\|\omega^2\left(\vec{f}\right)\delta^{\alpha\beta}\delta_{jj_1}-C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}\right)\right\|=0$.

Таким образом $\boxed{\omega^2\left(\vec{f}\right)\equiv\omega^2\left(-\vec{f}\right)}$.

В силу этого одновременно получаем $\begin{cases} l_j^{*\alpha}\left(-\vec{f}\right) \equiv l_j^{\alpha}\left(\vec{f}\right) \\ l_j^{*\alpha}\left(\vec{f}\right) \equiv l_j^{\alpha}\left(-\vec{f}\right) \end{cases}$

Из условия на det получаем $\omega_s^2\left(\vec{f}\right), S = 1, \ldots.., d, \ldots.., dg$.

Получив набор характеристических корней, последовательно подставляем их в систему ;

$$\omega_{s_1}^2\left(\vec{f}\right) l_{js_1}^{*\alpha}\left(\vec{f}\right) = \sum_{j_1} C_{jj_1}^{*\alpha\beta}\left(\vec{f}\right) l_{j_1s_1}^{*\beta}\left(\vec{f}\right)$$ (взяли комплексное сопряжение)

$$\|$$

(2) $$\sum_{j_1} l_{j_1s_1}^{*\beta}\left(\vec{f}\right) C_{jj_1}^{*\alpha\beta}\left(\vec{f}\right)$$ - в силу эрмитовости.

$$\omega_s^2\left(\vec{f}\to 0\right)\sum_j M_j W_{js}^{\alpha}\left(\vec{f}\to 0\right)\cdot 1 \approx \sum_j\sum_{j_1}\sum_{\vec{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)\,\underline{\times}\, W_{j_1 s}^{\beta}\left(\vec{f}\to 0\right)\cdot 1$$

;

$$\sum_j\sum_{\vec{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)\equiv 0$$

получили

$$(1)\to\omega_s^2\left(\vec{f}\right)\sum_j l_{js_1}^{*\alpha}\left(\vec{f}\right)l_{js}^{\alpha}\left(\vec{f}\right)=\sum_{jj_1} l_{js_1}^{*\alpha}\left(\vec{f}\right)C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}\right)l_{j_1 s}^{\beta}\left(\vec{f}\right)$$

$$(2)\to\omega_{s_1}^2\left(\vec{f}\right)\sum_j l_{js_1}^{*\alpha}\left(\vec{f}\right)l_{js}^{\alpha}\left(\vec{f}\right)=\sum_{jj_1} l_{j_1 s_1}^{*\beta}\left(\vec{f}\right)C_{j_1 j}^{\beta\alpha}\left(\vec{f}\right)l_{js}^{\alpha}\left(\vec{f}\right)$$

т.к. индексы “немые”, то поменяем $\alpha \rightleftarrows \beta,\ j \rightleftarrows j_1 \Rightarrow \sum_{jj_1} l_{js_1}^{*\alpha}\left(\vec{f}\right)C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}\right)l_{j_1 s}^{\beta}\left(\vec{f}\right),$

и правые части идентичны.

Вычитаем $\left[\omega_s^2\left(\vec{f}\right)-\omega_{s_1}^2\left(\vec{f}\right)\right]\sum_j l_{js_1}^{*\alpha}\left(\vec{f}\right)l_{js}^{\alpha}\left(\vec{f}\right)\equiv 0$

$1)\, s\neq s_1 \rightarrow \sum_j l_{js_1}^{*\alpha}\left(\vec{f}\right)l_{js}^{\alpha}\left(\vec{f}\right)=0$

$2)\, s=s_1 \rightarrow \sum_j l_{js_1}^{*\alpha}\left(\vec{f}\right)l_{js}^{\alpha}\left(\vec{f}\right)=\sum_j\left|\vec{l}_{js}\left(\vec{f}\right)\right|^2 \not\to \infty!$

Положим $\sum_j\left|\vec{l}_{js}\left(\vec{f}\right)\right|^2=1$ (конечное)

Объединяя 1), 2), получим $\boxed{\sum_j l_{js}^{*\alpha}\left(\vec{f}\right)l_{js_1}^{\alpha}\left(\vec{f}\right)=\delta_{ss_1}}$ $\rightarrow$ ортонормированная система собственных векторов.

Умножим это соотношение на $e^{\beta}_{j_1 s}\left(\vec{f}\right)$ (справа) и просуммируем по s.

$$\sum_j \left\{ \sum_s l^{*\alpha}_{js}\left(\vec{f}\right) l^{\beta}_{j_1 s}\left(\vec{f}\right) \right\} l^{\alpha}_{js_1}\left(\vec{f}\right) = \sum_s \delta_{ss_1} l^{\beta}_{j_1 s}\left(\vec{f}\right) = l^{\beta}_{j_1 s_1}\left(\vec{f}\right)$$, левая часть перейдет в

правую, только если в нее входят $\delta^{\alpha\beta}, \delta_{jj_1}$.

$$\sum_s l^{*\alpha}_{js}\left(\vec{f}\right) l^{\beta}_{j_1 s}\left(\vec{f}\right) = \delta^{\alpha\beta}\delta_{jj_1}$$

$$f \to 0: \quad \omega_s^2\left(\vec{f} \to 0\right) \sum_j M_j W^{\alpha}_{js}\left(\vec{f} \to 0\right) \cdot 1 \approx \sum_j \sum_{j_1} \sum_{\vec{n}_1} A^{\alpha\beta}_{jj_1}\left(\vec{n} - \vec{n}_1\right) \veebar W^{\beta}_{j_1 s}\left(\vec{f} \to 0\right) \cdot 1$$

Зависимость от $\vec{n}$, сидевшая в экспоненте , исчезает: $\sum_j \sum_{\vec{n}_1} A^{\alpha\beta}_{jj_1}\left(\vec{n} - \vec{n}_1\right) \equiv 0$

$$1)\begin{cases}\omega_s^2\left(\vec f\to 0\right)\simeq 0\\ \sum\limits_j M_j W_{js}^{\alpha}\left(\vec f\to 0\right)\not\to 0\end{cases}$$

отвечает акустической ветви

$$2)\begin{cases}\omega_{s_1}^2\left(\vec f\to 0\right)\not\to 0\\ \sum\limits_j M_j W_{js_1}^{\alpha}\left(\vec f\to 0\right)\simeq 0\end{cases}$$

такое поведение отвечает оптической ветви

$u_{j\vec n_1 s}^{\alpha}\left(\vec f\to 0\right)\simeq const^{\alpha}$ (зависит от α)

Получим $\omega_s^2\left(\vec f\to 0\right)\cdot\sum\limits_j M_j\cdot const^{\alpha}\simeq\sum\limits_j\underbrace{\sum\limits_{j_1}\sum\limits_{n_1}A_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec n-\vec n_1\right)const}_{\equiv 0}$

$$\Rightarrow\omega_s^2\left(\vec f\to 0\right)\cdot\sum_j M_j\cdot const^{\alpha}\equiv 0$$

Сумма в ноль не обращается , т.к. $const\not\equiv 0, M_j>0$

$$\Rightarrow\boxed{\omega_s^2\left(\vec f\to 0\right)=0\sim W_{js}^{\alpha}\left(\vec f\to 0\right)\simeq const^{\alpha}}$$

$\alpha = 1,....,d \Rightarrow s = 1,....,d$ Т.е. акустических ветвей в произвольном кристалле может быть столько, сколько независимых смещений у атомов кристалла (какова мерность пространства). Акустические ветви : $\{s\} = d$;

остальные ветви $s_1 = d+1,....,dg \to \{s_1\} = d(g-1)$ - оптические ветви.

Исследуем, как ведет себя $\omega_s^2(\vec{f} \to 0)$ для акустики:

$1)\, s = 1,....,d$

$\omega_s^2(\vec{f} \to 0) \simeq 0 +$

$\omega_s^2(-\vec{f}) \equiv \omega_s^2(\vec{f}) + \gamma_s^{\alpha\beta} f^{\alpha} f^{\beta} + ... \simeq (\gamma_s^{\alpha\beta} n_f^{\alpha} n_f^{\beta}) f^2 \equiv C_s^2(\vec{n}_f) \cdot f^2$

Так можно записать, так как все квадраты частот заведомо положительные величины.

$$\gamma_s^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \omega_s^2\left(\vec{f}\right)}{\partial f^{\alpha} \partial f^{\beta}}\right)_0$$

$$\gamma_s^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \omega_s^2\left(\vec{f}\right)}{\partial f^{\alpha} \partial f^{\beta}}\right)_0 \quad , \quad \vec{n}_f = \frac{\vec{f}}{f}$$

$$\omega_s\left(\vec{f} \to 0\right) \simeq C_s\left(\vec{n}_f\right) \cdot \left|\vec{f}\right|, C_s\left(\vec{n}_f\right) = \sqrt{\gamma_s^{\alpha\beta} n_f^{\alpha} n_f^{\beta}}$$

$$\omega_s\left(\vec{f} \to 0\right) \simeq C_s\left(\vec{n}_f\right) \cdot \left|\vec{f}\right| \quad , \quad C_s\left(\vec{n}_f\right) = \sqrt{\gamma_s^{\alpha\beta} n_f^{\alpha} n_f^{\beta}}$$

Получили звук, скорость которого является анизотропной величиной. Продольный звук – за счет сжатия и разрежения; поперечный – за счет сдвиговой деформации (с запаздыванием: каждый деформирующийся слой зацепляет следующий и т.д.). Т.к. поперечный звук распространяется с запаздыванием, его скорость меньше.

$$2)\ s_1 = d+1,\dots,dg$$

$$\omega_{s_1}^2\left(\vec{f}\to 0\right) \simeq \omega_{s_1,0}^2 + \gamma_{s_1}^{\alpha\beta} f^{\alpha} f^{\beta} + \dots.$$

$$\omega_{s_1}\left(\vec{f}\to 0\right) = \sqrt{\omega_{s_1,0}^2 + \gamma_{s_1}^{\alpha\beta} f^{\alpha} f^{\beta}} \simeq \omega_{s_1,0}\sqrt{1+\frac{\gamma_{s_1}^{\alpha\beta} n_f^{\alpha} n_f^{\beta}}{\omega_{s_1,0}^2} f^2}$$

$$\boxed{\omega_{s_1}\left(\vec{f}\to 0\right) = \omega_{s_1,0} + \frac{\gamma_{s_1}^{\alpha\beta} n_f^{\alpha} n_f^{\beta}}{2\omega_{s_1,0}^2} f^2}$$ - коэффициент при f^2 может быть разного знака.

Таким образом, оптическая ветвь при $\vec{f}\to 0$ обращается в *const*, и «уходит» оттуда квадратичным образом.

$\omega^2\left(\vec{f}\right)$ имеет период $\dfrac{2\pi}{\textit{размер ячейки}}$;

$$\det\left\|\omega_s^2\left(\vec{f}\right)\delta^{\alpha\beta}\delta_{jj_1}-C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}\right)\right\|=0$$

$$C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}\right)=\frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}}\sum_{\vec{n}}A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n})e^{-i\vec{f}\vec{n}}$$

$\omega_s^2\left(\vec{f}\right)$ “ привязано ” к матрице C $\Rightarrow$ зависимость от $\vec{f}$ такая же.

$\widehat{C}\left(\vec{f}+\vec{G}\right)=\widehat{C}\left(\vec{f}\right)$ если такой вектор $\vec{G}$ существует, то он есть период этой функции.

$$C_{jj_1}^{\alpha\beta}\left(\vec{f}+\vec{G}\right)=\frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}}\sum_{\vec{n}}A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n})e^{-i\vec{f}\vec{n}}e^{-i\vec{G}\vec{n}}$$

Необходимо $e^{-i\vec{G}\vec{n}}\equiv 1$ при $\forall\ \vec{G},\vec{n}$

$$\Rightarrow \vec{G}\vec{n}=2\pi\cdot p;\, p\in\mathbb{Z}$$

$$\vec{n} = \sum_{\alpha} n_\alpha \vec{a}_\alpha \quad ; \quad \sum_{\alpha} n_\alpha \underbrace{\left(\vec{G}\vec{a}_\alpha\right)}_{2\pi p_\alpha} = 2\pi \cdot p$$

Ищем вектор $\vec{G}$ в виде :

$$\vec{G} = 2\pi\left(p_1\vec{b}_1 + p_2\vec{b}_2 + p_3\vec{b}_3\right) \quad ; \quad p_\alpha \text{ - целые}$$

$$\left(\vec{b}_j\vec{a}_i\right) = \delta_{ij}$$

$$\left(\vec{b}_1, \vec{a}_1\right) = 1$$

$$\left(\vec{b}_1, \vec{a}_{2,3}\right) = 0 \Rightarrow \vec{b}_1 = const\left[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right]$$

$$1 = \left(\vec{a}_1\vec{b}_1\right) = const\underbrace{\left(\vec{a}_1\left[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right]\right)}_{\substack{V_0 - \text{объем} \\ \text{ячейки}}} = const \cdot V_0$$

$$\vec{b}_1 = \frac{1}{V_0}\left[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right]$$

Аналогично (циклической перестановкой)

$$\vec{b}_2 = \frac{1}{V_0}\left[\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\right]$$

$$\vec{b}_3 = \frac{1}{V_0}\left[\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\right]$$

$$\boxed{\omega_s^2\left(\vec{f} + \vec{G}\right) \equiv \omega_s^2\left(\vec{f}\right)}$$

$$\Rightarrow \{s\} \cdot \left\{\vec{f}\right\} = dg \cdot N \qquad -\frac{G_{\min}^{\alpha}}{2} < f_\alpha \le \frac{G_{\min}^{\alpha}}{2}$$

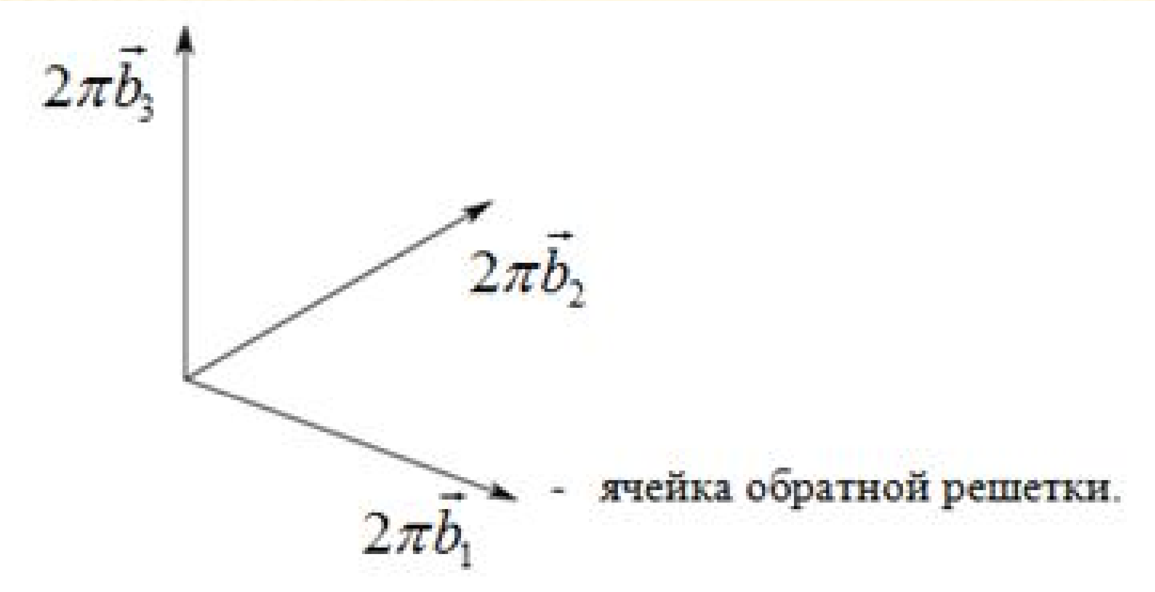
$$G_{\min}^{\alpha} = 2\pi b_\alpha \quad ; \quad -\pi b_\alpha < f_\alpha \le \pi b_\alpha$$

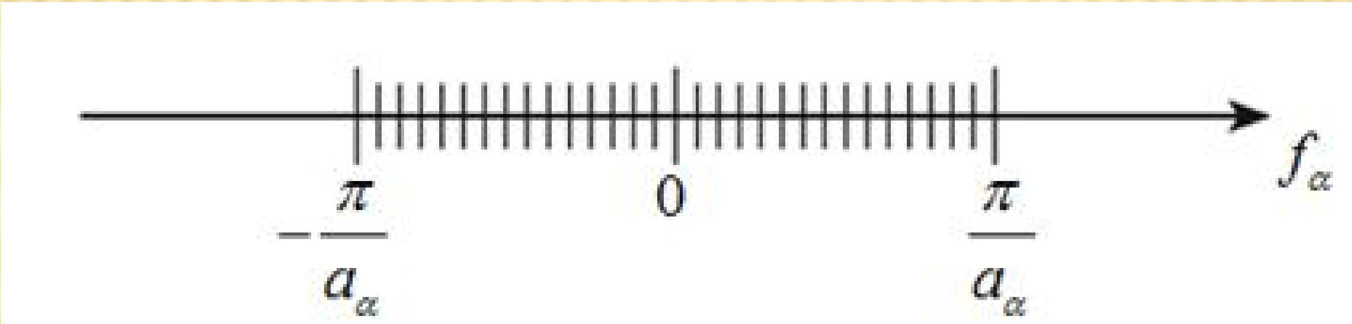
$$b_1 = \left(\vec{b}_1 \vec{e}_1\right) = \frac{\cancel{\vec{e}_1\left[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right]}}{a_1\,(\cancel{\vec{e}_1\left[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right]})} = \frac{1}{a_1}$$

$$b_\alpha = \frac{1}{a_\alpha} \quad ;\text{ т.о. } -\frac{\pi}{a_\alpha} < f_\alpha \le \frac{\pi}{a_\alpha}$$

a_α - линейный размер ячейки вдоль $\alpha - \textit{той}$ оси.

$\vec{G}$ - вектора обратной решетки : все обратное пространство разбивается на блоки в виде ячеек с базисными векторами:



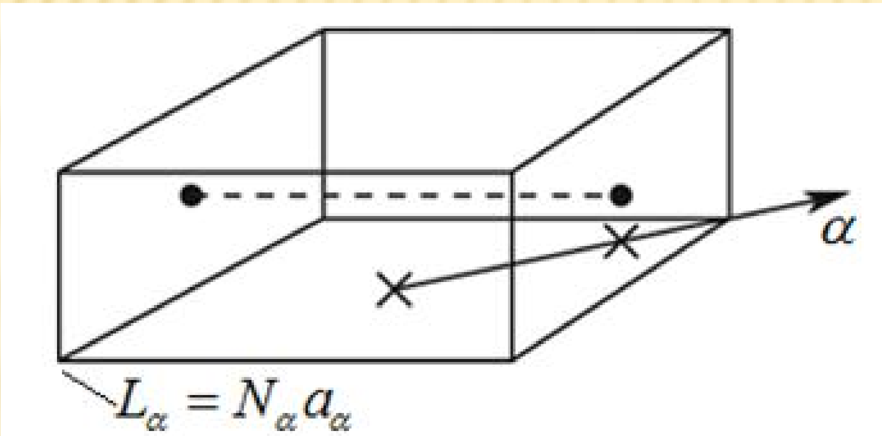


$$u_{j\vec{n}}^{\alpha} = \frac{l_j^{\alpha}}{\sqrt{M_j}} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_s(\vec{f})t}$$

$$\frac{1}{\sqrt{M_j}} l_j^{\alpha} e^{i\left(\vec{f}_{\perp\alpha}\vec{n}_{\alpha} + f_{\alpha} n_{\alpha} a_{\alpha}\right)} \cdot 1 - \text{слева}$$

$$\frac{l_j^{\alpha}}{\sqrt{M_j}} e^{i\left(\vec{f}_{\perp\alpha}\vec{n}_{\alpha} + f_{\alpha}(a_{\alpha} n_{\alpha} + a_{\alpha} N_{\alpha})\right)} \cdot 1 - \text{справа}$$

$$1 = e^{i f_{\alpha} a_{\alpha} N_{\alpha}} = e^{i f_{\alpha} L_{\alpha}}$$



предполагаем, что ячейка, следующая за N_{α}, повторяет первую…

$$f_\alpha L_\alpha = 2\pi m_\alpha$$

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\pi}{a_\alpha} < f_\alpha = \frac{2\pi}{a_\alpha}\cdot\frac{m}{N_\alpha} \le \frac{\pi}{a_\alpha} \\ -\frac{N_\alpha}{2} < m_\alpha \le \frac{N_\alpha}{2} \end{aligned}\right\} \left\{ f_\alpha \right\} = \left\{ m_\alpha \right\} = N_\alpha$$

Из периодических граничных условий $\rightarrow$ f_α принимает ровно столько разных значений, сколько ячеек $\left(N_\alpha \right)$.