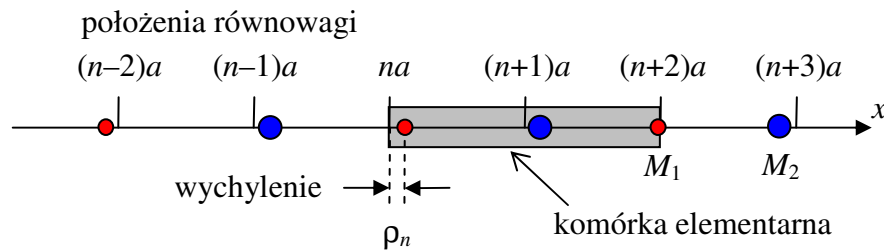


## Temat 9. Dwuatomowy łańcuch liniowy. Drgania sieci trójwymiarowej.

Rozpatrzmy jednowymiarową sieć Bravais'go z dwoma różnymi jonami o masach  $M_1$  i  $M_2$  w prymitywnej komórce elementarnej. Założymy, że rozpatrywany łańcuch jest wycinkiem sieci kryształu regularnego, gdzie płaszczyzny z jonami o masach  $M_1$  i  $M_2$  są ułożone na przemian w równych odległościach  $a$ .



**Rys. 9.1.** Drgający łańcuch liniowy jonów. Chwilowe położenie  $n$ -tego jonu o położeniu równowagi  $na$  opisuje jego wychylenie  $\rho_n$ .

W ogólności współczynniki sprężystości  $K_1$  i  $K_2$  dla oddziaływań między sąsiednimi parami płaszczyzn sieciowych mogą być różne. W kryształach czysto jonowych zachodzi jednak równość  $K_1 = K_2$  i dalej rozważymy ten przypadek. Całkowita energia potencjalna układu w przybliżeniu harmonicznym przy ograniczeniu się do oddziaływań między najbliższymi sąsiadami

$$U^{\text{harm}} = \frac{1}{2} K \sum_n (\rho_{n+1} - \rho_n)^2. \quad (9.1)$$

Równania ruchu dla jonu  $2n$ -tego oraz  $(2n+1)$ -tego można otrzymać analogicznie jak dla rozważonego wcześniej łańcucha monoatomowego

$$M_1 \frac{\partial^2 \rho_{2n}}{\partial t^2} = -K(2\rho_{2n} - \rho_{2n-1} - \rho_{2n+1}). \quad (9.2)$$

$$M_2 \frac{\partial^2 \rho_{2n+1}}{\partial t^2} = -K(2\rho_{2n+1} - \rho_{2n} - \rho_{2n+2}). \quad (9.3)$$

Postulujemy rozwiązania w postaci równań fal płaskich o różnych amplitudach i równych częstościach

$$\rho_{2n}(t) = A_1 \exp[i(2nka - \omega t)], \quad (9.4)$$

$$\rho_{2n+1}(t) = A_2 \exp[i((2n+1)ka - \omega t)]. \quad (9.5)$$

Po podstawieniu funkcji (9.4) i (9.5) do równań ruchu odpowiednio (9.2) i (9.3) otrzymujemy układ równań

$$-M_1 A_1 \omega^2 = -2KA_1 + KA_2 [\exp(-ika) + \exp(+ika)], \quad (9.6)$$

$$-M_2 A_2 \omega^2 = -2KA_2 + KA_1 [\exp(-ika) + \exp(+ika)]. \quad (9.7)$$

Jest to układ jednorodny, który posiada rozwiązanie gdy zeruje się wyznacznik z macierzy współczynników przy  $A_1$  i  $A_2$

$$\det \begin{bmatrix} M_1 \omega^2 - 2K & 2K \cos ka \\ 2K \cos ka & M_2 \omega^2 - 2K \end{bmatrix} = 0. \quad (9.8)$$

Jest to równanie kwadratowe względem  $\omega^2$  o rozwiązaniach

$$\omega^2 = K \left[ \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \pm \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{M_1 M_2}} \right], \quad (9.9)$$

przy czym oba rozwiązania (Rys. 9.2) mają sens fizyczny:

1). *Drgania akustyczne* są opisane przez rozwiązania odpowiadające znakowi „-”. Częstość tych drgań spada do zera dla  $k=0$ , przez co przypominają rozwiązanie znalezione wcześniej dla łańcucha monoatomowego. Dla małych wartości  $k$  prędkość fazowa  $v_f$  tych drgań jest niemal stała i wyraża prędkość dźwięku

$$v_f = \frac{\omega}{k} \approx a \sqrt{\frac{2K}{M_1 + M_2}}. \quad (9.10)$$

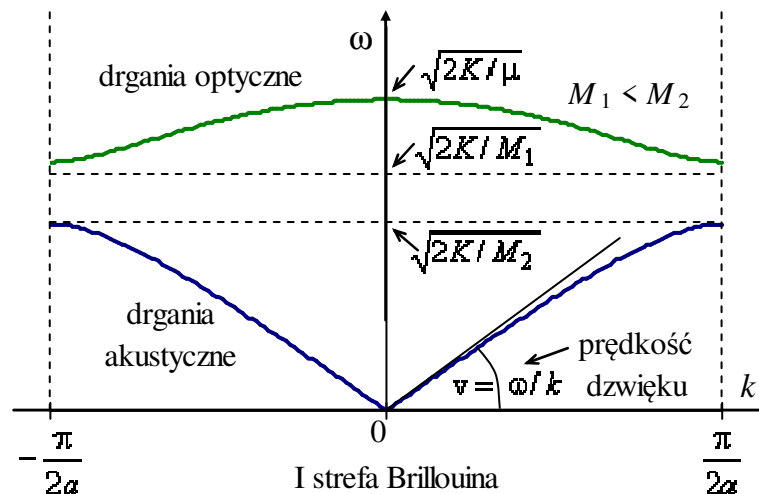
2). *Drgania optyczne* opisane przez rozwiązanie ze znakiem „+” mają największą częstość dla  $k=0$

$$\omega(0) = \sqrt{\frac{2K}{\mu}} = \sqrt{2K \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)}. \quad (9.11)$$

Stosunek amplitud dla drgań optycznych przy  $k=0$  wynosi

$$\frac{A_1}{A_2} = -\frac{M_2}{M_1}, \quad (9.12)$$

co oznacza, że atomy obu podsieci drgają wtedy w przeciwnych fazach (rys. 9.3).



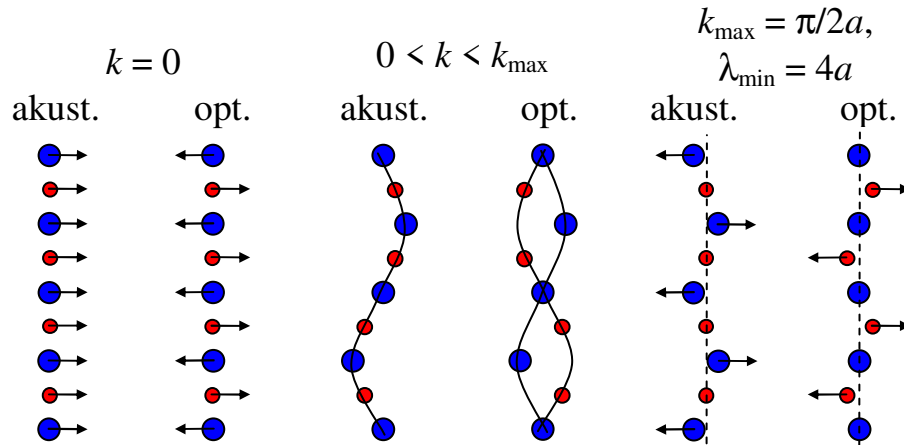
**Rys. 9.2.** Krzywe dyspersji dla diatomowego łańcucha liniowego.

Drgania optyczne można wzbudzić przez absorpcję fal świetlnych w podczerwonej części widma. Zakresy częstości drgań akustycznych i optycznych nie zachodzą na siebie. Istnieje między nimi przerwa

$$\Delta\omega = \sqrt{2K} \left( \sqrt{\frac{1}{M_1} - \frac{1}{M_2}} \right). \quad (9.13)$$

Dla fal o częstościach z tego przedziału kryształ jest przezroczysty.

Można wykazać, że analogiczne wyniki otrzymuje się dla łańcucha atomów o jednakowej masie ale połączonych sprężynami o dwóch różnych stałych sprężystości  $K_1$  i  $K_2$  [1].

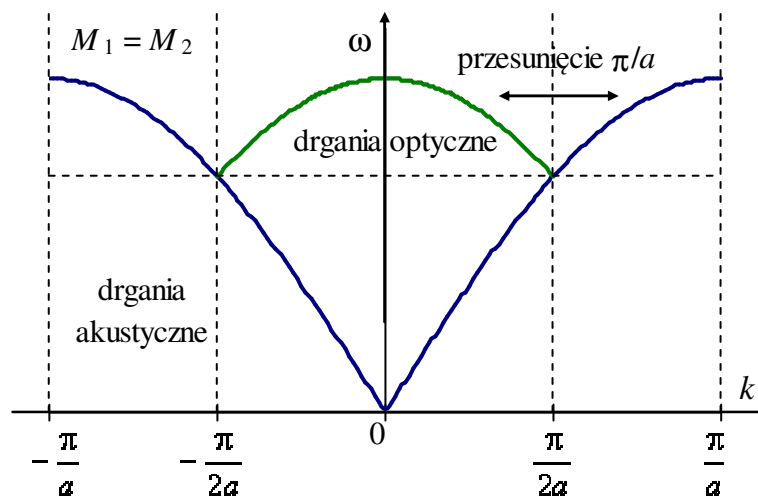


**Rys. 9.3.** Porównanie drgań akustycznych i optycznych na przykładzie fal poprzecznych. Analogiczne wychylenia występują w przypadku drgań podłużnych.

W przypadku  $M_1 = M_2$  przerwa w paśmie częstotliwości  $\Delta\omega$  znika i powinniśmy otrzymać wyniki pokrywające się z wynikami dla łańcucha monoatomowego. Rozbieżność w ilości rozwiązań jest tylko pozorna i wynika z innych rozmiarów komórki elementarnej w porównywanych łańcuchach i w konsekwencji innych rozmiarów I strefy Brillouina:

- $-\pi/2a \dots +\pi/2a$  w łańcuchu dwuatomowym,
- $-\pi/a \dots +\pi/a$  w łańcuchu monoatomowym.

Gałąz optyczną można więc uważać za część gałęzi akustycznej przesuniętej o  $\pi/a$  z przedziałów leżących poza I strefą Brillouina łańcucha dwuatomowego do wnętrza tej strefy (rys. 9.4).



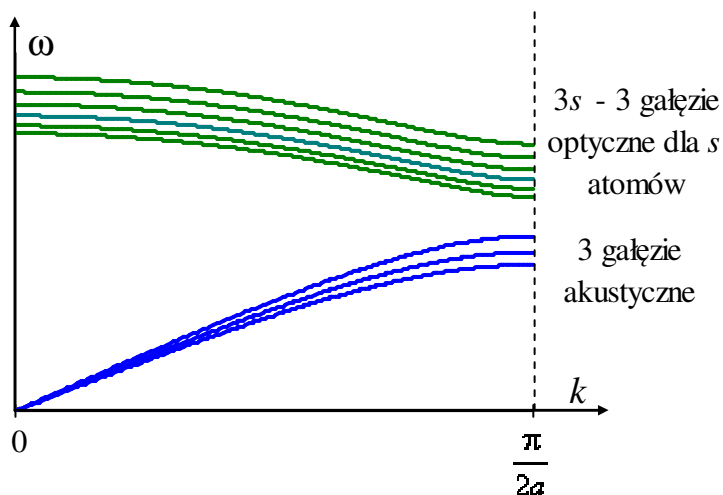
**Rys. 9.4.** Redukcja krzywej dyspersji dla łańcucha monoatomowego (krzywa granatowa) do I strefy Brillouina łańcucha dwuatomowego (przedział  $-\pi/2a \dots +\pi/2a$ ).

Do tej pory rozważaliśmy tylko drgania podłużne. Drgania poprzeczne (rys. 9.3) można opisać analogicznymi zależnościami ale odpowiadają im inne wartości współczynnika sprężystości.

W rzeczywistych kryształach o dwóch atomach w komórce elementarnej każdemu wektorowi falowemu  $\mathbf{k}$  odpowiadają trzy niezależne fale płaskie o wzajemnie prostopadłych kierunkach polaryzacji: jedna podłużna i dwie poprzeczne w gałęzi akustycznej i analogiczne trzy fale w gałęzi optycznej. Jeżeli komórka elementarna składa się z  $s$  atomów, to w widmie drgań kryształu występują trzy gałęzie drgań akustycznych i  $3s - 3$  gałęzie optyczne (Rys. 9.5). W strukturach

regularnych gałęzie drgań poprzecznych nakładają się na siebie (stają się zdegenerowane) dla fal rozchodzących się w kierunkach [001] i [111].

Kryształy o strukturze BCC i FCC tworzone przez pierwiastki mają tylko 1 atom w najprostszej komórce. W takich kryształach nie występują akustyczne mody drgań.



**Rys. 9.5.** Krzywe dyspersji drgań podłużnych i poprzecznych w kryształ trójwymiarowym zawierającym  $s$  atomów w komórce elementarnej.

Drgania optyczne sieci złożonej z jonów są przyczyną powstawania oscylujących elektrycznych momentów dipolowych. Momenty te mogą się sprzęgać z zewnętrznym polem elektromagnetycznym.