

Лекція 2.

Поздовжні пружні хвилі в простій одновимірній решітці.

Одновимірна модель.

Молекули (атоми), що утворюють кристал, знаходяться у вузлах решітки при температурі $T = 0$ (квантовими ефектами нехтуємо). При $T \neq 0$ частинки коливаються навколо цих положень, які відповідають мінімумам потенціальної енергії. Розглянемо одновимірний випадок, схематично зображений на рисунку. Тут показано конфігурацію, при якій зміщення $u_{n-2}, u_{n-1}, u_{n+2} < 0$. Інші частинки зміщені у позитивному напрямку:

$$u_n, u_{n+1} > 0.$$

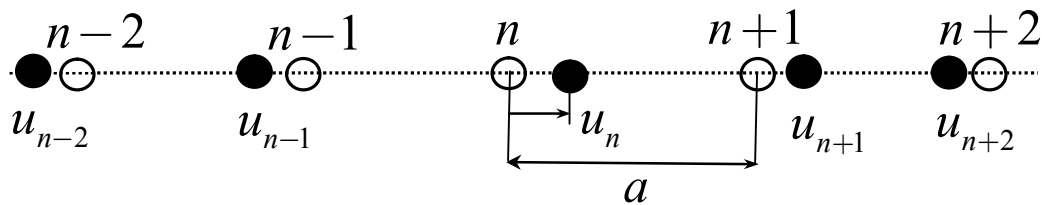


Рис. 1. Незафарбовані кружки показують рівноважні положення частинок. Темні – положення частинок після зміщень на відстані u_i . Позначення вгорі нумерують вузли одновимірної решітки.

Врахуємо взаємодію лише найближчих сусідів. Коли зміщення малі $|u_i| \ll a$, то сили взаємодії можна вважати квазіпружними, тобто пропорційними зміні відстаней між частинками. Тоді сила, з якою $n-1$ -й атом діє на n -й дорівнює

$$f_{n,n-1} = -\beta(u_n - u_{n-1}), \quad \beta > 0. \quad (1)$$

Аналогічно n -й атом діє на $n+1$ -й. Ця ж сила, але із знаком (-) діє з боку $n+1$ атома на n -й. Отже, повна сила, що діє на n -й атом, дорівнює

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

Тоді рівняння Ньютона для n -ї частинки має вигляд:

$$m\ddot{u}_n = -\beta(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}), \quad (3)$$

де m - маса частинки. Співвідношення (3) є рівнянням для функції $u_n \equiv u(x_n)$ від дискретної змінної $x_n \equiv na$. Існує граничний перехід від рівняння (3) до хвильового рівняння з попередньої лекції, яке описує поздовжні коливання в суцільному середовищі:

$$\frac{\partial^2 \vec{u}_l}{\partial t^2} = c_l^2 \Delta \vec{u}_l. \quad (4)$$

Цей перехід здійснюється, коли вважати постійну a малою. Тоді вираз у круглій дужці (3) $2u(x_n) - u(x_{n-1}) - u(x_{n+1})$ переходить в $a^2 \frac{\partial^2 u(x_n)}{\partial x_n^2}$, де ми використали розклад

$$u(x_{n\pm 1}) \equiv u(x_n \pm a) \approx u(x_n) \pm a \frac{\partial u(x_n)}{\partial x_n} + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2 u(x_n)}{\partial x_n^2}. \quad (5)$$

Тоді після заміни x_n на неперервну змінну x рівняння (3) переходить в

$$\frac{\partial^2 u(x)}{\partial t^2} = \frac{\beta}{m} a^2 \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}. \quad (6)$$

Як бачимо, рівняння (6) є аналогом (4) в одновимірному випадку. Параметр $\frac{\beta}{m} a^2$ є одновимірним аналогом c_l^2 .

Дещо загальнішим виглядає підхід, в якому силу F_n визначимо через похідну від потенціальної енергії системи $U\{x_n\}$ по координаті x_n .
Покладаючи

$$U\{x_n\} = \frac{\beta}{2} \sum_n (x_n - x_{n-1})^2, \quad (7)$$

одержимо

$$F(x_n) = -\frac{\partial U\{x_n\}}{\partial x_n} = -\beta(2x_n - x_{n-1} - x_{n+1}), \quad (8)$$

що збігається з виразом (2).

У випадку нескінченного ланцюга рівняння (3) задовольняється функцією

$$u(x_n, t) = \alpha e^{i(qx_n - \omega t)}, \quad (9)$$

де a є константою, а значення q і ω повинні задовольняти співвідношення

$$-m\omega^2 + \beta(2 - e^{iqa} - e^{-iqa}) = 0, \quad (10)$$

яке зводиться до наступного

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m} (1 - \cos(qa)) = \frac{4\beta}{m} \sin^2 \frac{qa}{2}. \quad (11)$$

З останнього виразу знаходимо величину модуля частоти

$$\omega = \sqrt{\frac{2\beta}{m} (1 - \cos(qa))} = \omega_m \left| \sin \frac{qa}{2} \right|. \quad (12)$$

Її максимальне значення ($\omega = \omega_m$) дорівнює $2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$. Зазначимо, що закон дисперсії пружних коливань у дискретній структурі виявився істотно відмінним від лінійного, який властивий суцільному середовищу.

В розв'язку (9) координата x набуває лише дискретних значень:

$x = na$. Якщо замінити в q на $q' = q + \frac{2\pi g}{a}$, де g - ціле число, то новий розв'язок

$$u'(x_n) = \alpha e^{i[(q+2\pi g/a)x_n - \omega t]} = \alpha e^{i[qx_n - \omega t]}, \quad (13)$$

дорівнює старому $u'(x_n) = u(x_n)$. При одержанні (13) враховано, що для

цілих значень g експонента $e^{i2\pi g x_n / a} = e^{i2\pi g n}$ дорівнює одиниці. Це

означає, що розв'язки для різних значень q і q' не відрізняються один від одного. Отже, для опису стану системи досить обмежитись лише тими

значеннями q , що знаходяться в інтервалі $\left[0, \frac{2\pi}{a}\right]$. Цих значень досить, щоб

описати всі можливі хвильові процеси в одновимірному випадку. На практиці використовують інтервал, який за розміром такий же, як і попередній, проте зсунутий наліво на π/a . Отже, всі нееквівалентні значення q знаходяться в одному інтервалі

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}. \quad (14)$$

Цю область q називають першою зоною Бріллюена. На рис. 2 схематично показано залежність $\omega(q)$.

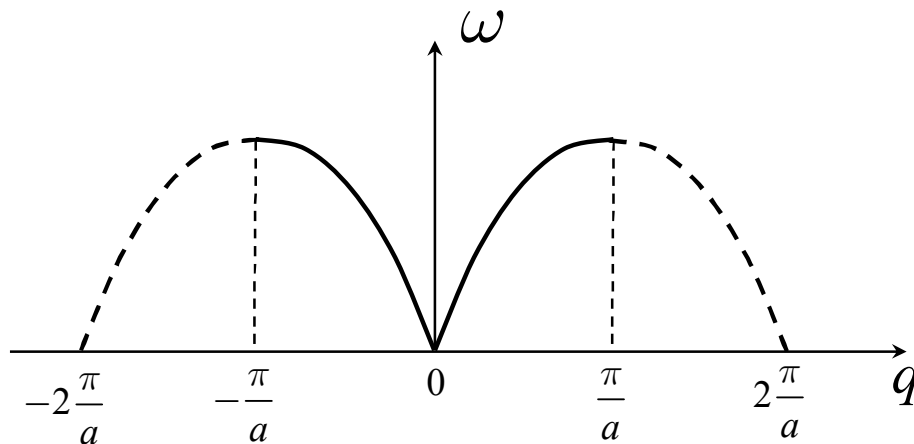


Рис. 2. Залежність частоти ω від хвильового вектора q . Жирна лінія показує залежність $\omega(q)$ в першій зоні Бріллюена, пунктирна – в другій.

В межах першої зони Бріллюена хвильовий вектор може змінюватись не більше, ніж на величину $\frac{2\pi}{a} = q_{\max}$. Максимальному значенню q_{\max} можна

співставити мінімальне значення довжини хвилі $\lambda_{\min} = \frac{2\pi}{q_{\max}} = a$. Як

бачимо, в дискретній структурі не можуть поширюватись пружні хвилі, довжина яких менша за якесь значення λ_{\min} (у нашому випадку $\lambda_{\min} = a$). У цьому полягає принципова відмінність між хвильовими процесами в дискретному та суцільному середовищах. В останньому випадку не існує обмежень на можливу довжину пружної хвилі.

Потрібно зазначити, що використаний нами розв'язок (9) для зміщень атомів є справедливим лише для ланцюжка нескінченної довжини (у тривимірному випадку для нескінченного кристала). Це впливає з того факту, що при одержанні (9) не враховувались граничні умови. Очевидно, що такий підхід є прийнятним, коли загальна кількість частинок у ланцюжку є великою ($G \gg 1$). У цьому випадку ланцюжок можна плавно деформувати так, щоб останній його елемент став найближчим сусідом першого. У такій конфігурації $G + n$ -й елемент одночасно є і n -м елементом з тим же самим значенням зміщення:

$$u_{G+n} = u_n. \quad (15)$$

Умову (15) в літературі називають умовою періодичності Борна-Кармана. Коли вона виконується, то лінійний ланцюг, утворений G частинками, можна доповнити його повторенням нескінченною кількістю разів і вважати систему і нескінченною, і періодичною.

Співвідношенням (15) задовольняються граничні умови для окремого ланцюга. В той же час цим співвідношенням визначається повна кількість незалежних розв'язків задачі, яка дорівнює кількості різних значень q в першій зоні Бріллюена. Для знаходження цієї кількості врахуємо, що умова періодичності (15) виконується тоді, коли, згідно з (9),

$$e^{iqx_{G+n}} = e^{iqx_n}. \quad (16)$$

Рівність виконується, коли $qx_G = qGa = 2\pi g$, де $g = \pm 1, \pm 2, \dots$.

Отже,

$$q = \frac{2\pi g}{Ga}, \quad (17)$$

де $Ga = L$ є довжиною ланцюга. Оскільки величина хвильового вектора q обмежена умовою (14), то кількість різних значень g дорівнює G . Отже, кількість незалежних розв'язків також дорівнює кількості частинок у ланцюжку.

З формули (17) випливає, що дискретність значень q (Δq) дорівнює $\frac{2\pi}{L}$ і зменшується, коли L зростає. Якщо спрямувати значення Δq до нуля, то його можна замінити диференціалом dq . Подібним чином дискретність частоти $\Delta\omega$ можна замінити диференціалом $d\omega$. Тоді, враховуючи закон дисперсії (12), взаємозв'язок між двома диференціалами задається виразом

$$d\omega = \frac{d\omega}{dq} dq = \omega_m \frac{a}{2} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) dq. \quad (18)$$

З нього легко знаходиться величина групової швидкості

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dq} = \omega_m \frac{a}{2} \cos\left(\frac{qa}{2}\right). \quad (19)$$

З формули (19) видно, що короткохвильові пакети рухаються повільніше, ніж довгохвильові. На межах зони Бріллюена, де $q = \pm \frac{\pi}{a}$, їх швидкість дорівнює нулю, тоді як мінімальне значення фазової швидкості $v_{ph} = \omega/q$ має скінченну величину $v_{ph} = \omega_m a / \pi$.

Перехід до нормальних координат.

Замість зміщень частинок від положень рівноваги u_n , доцільно використовувати інші величини, що характеризують весь колектив. Наступні міркування пояснюють суть такої заміни.

Якщо функція (9) є розв'язком рівнянь Ньютона (3), то сума двох різних розв'язків також задовольняє ці рівняння. В загальному випадку можна записати розв'язок (9) у вигляді суперпозиції хвиль

$$u(x_n, t) = \sum_q \left(\alpha_q e^{i(qx_n - \omega t)} + \alpha_q^* e^{-i(qx_n - \omega t)} \right). \quad (20)$$

Тут другим членом у правій частині враховано ту обставину, що величина будь-яких зміщень має лише дійсну складову. Коефіцієнти α_q є амплітудами окремих хвиль. Далі замість амплітуд введемо нові змінні

$$\alpha_q e^{-i\omega_q t} = \frac{a_q(t)}{\sqrt{G}}, \quad \alpha_q^* e^{i\omega_q t} = \frac{a_q^*(t)}{\sqrt{G}}, \quad (21)$$

де $a_q(t) = a_q(0) e^{-i\omega_q t}$, $a_q^*(t) = a_q^*(0) e^{i\omega_q t}$. Використання нових змінних, залежність яких від часу описується гармонічним законом, значно спрощує аналіз систем з міжчастинковою

взаємодією. Такі змінні називають нормальними координатами. Далі переконаємось, що енергія системи виражається через квадратичну форму

від a_q та a_q^* , в якій окремі члени є пропорційними $|a_q|^2$ (складові, де $q \neq q'$, не входять у квадратичну форму).

Спочатку запишемо через нові змінні кінетичну енергію ланцюга:

$$T\{x_n\} = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^G \dot{x}_n^2 = -\frac{m}{2G} \sum_{n,q,q'} \omega_q (a_q e^{iqx_n} - a_q^* e^{-iqx_n}) \omega_{q'} (a_{q'} e^{iq'x_n} - a_{q'}^* e^{-iq'x_n}). \quad (22)$$

Вираз (22) істотно спрощується, якщо використати тотожність

$$\sum_{n=1}^G e^{iqx_n} e^{iq'x_n} = G \delta_{q,-q'}, \quad (23)$$

при одержанні якої використана умова періодичності (16). Враховуючи (23), можна просумувати по n та q' , після чого одержимо

$$T\{x_n\} = \frac{m}{2} \sum_q \omega_q^2 \left(2|a_q|^2 - a_q a_{-q} - a_q^* a_{-q}^* \right). \quad (24)$$

Подібним чином знаходиться потенціальна енергія:

$$U\{x_n\} = \frac{\beta}{2} \sum_n (x_n - x_{n-1})^2. \quad (25)$$

Тут доречно врахувати, що

$$u(x_n) - u(x_{n-1}) = \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_q \left[a_q e^{iqan} (1 - e^{-iqa}) + a_q^* e^{-iqan} (1 - e^{iqa}) \right], \quad (26)$$

і використати тригонометричне співвідношення

$$(1 - e^{-iqa})(1 - e^{iqa}) = 4 \sin^2 \frac{qa}{2}. \quad (27)$$

В результаті одержимо

$$U\{x_n\} = \frac{m}{2} \sum_q \omega_q^2 \left(2|a_q|^2 + a_q a_{-q} + a_q^* a_{-q}^* \right). \quad (28)$$

Повна енергія системи E дорівнює

$$E = T + U = 2m \sum_q \omega_q^2 |a_q|^2. \quad (29)$$

Її можна інтерпретувати як суму енергій незалежних коливань. Енергія q -го коливання дорівнює

$$E_q = 2m \omega_q^2 |a_q|^2 \quad (30)$$

і рівномірно розподілена вздовж ланцюжка. Можна виразити E_q через інші змінні, а саме: X_q і P_q . Вони вводяться як лінійна комбінація від a_q та a_q^* :

$$X_q = a_q + a_q^*, \quad P_q = -im\omega_q(a_q - a_q^*). \quad (31)$$

З рівностей (31) видно, що обидві змінні X_q та P_q є дійсними величинами.

Амплітуди a_q і a_q^* виражаються через X_q і P_q :

$$a_q = \frac{1}{2} \left(X_q + i \frac{P_q}{m\omega_q} \right), \quad a_q^* = \frac{1}{2} \left(X_q - i \frac{P_q}{m\omega_q} \right). \quad (32)$$

Якщо підставити значення амплітуд (32) у вираз (30), то одержимо

$$E_q = \frac{P_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2 X_q^2}{2}. \quad (33)$$

Вираз у правій частині (33) нагадує енергію гармонічного осцилятора. В тому, що змінні X_q і P_q , дійсно, є координатою та імпульсом якогось осцилятора, можна переконатись, якщо врахувати залежність від часу значень a_q і a_q^* (див. “рівняння руху” (21)). З них випливає, що

$$P_q = m\dot{X}_q, \quad \dot{P}_q = -m\omega_q^2 X_q. \quad (34)$$

Ці вирази є такими ж, як і в класичного осцилятора, частота коливань якого дорівнює ω_q , маса - m , а коефіцієнт пружності - $m\omega_q^2$. Отже, повна енергія пружних коливань ланцюга E є сумою енергій коливань окремих гармонічних осциляторів. Для нашої задачі вона є такою ж, як і гамільтоніан $H = \sum_q H_q = \sum_q E_q$. Цю обставину потрібно враховувати при квантово-механічному описі. В Додатку коротко розглянемо квантову теорію коливань в ланцюжку.

Додаток.

Квантова теорія пружних коливань в лінійному ланцюжку.

Перехід до квантового опису здійснюється заміною фізичних величин відповідними операторами. Отже, замість виразу (33) запишемо

$$\hat{H}_q = \frac{\hat{P}_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2 \hat{X}_q^2}{2}. \quad (35)$$

Позначення \hat{B} означає, що якась фізична величина B замінена відповідним оператором \hat{B} . Дві канонічно спряжені величини \hat{P}_q та \hat{X}_q не комутують між собою. З курсу квантової механіки відоме значення комутатора цих величин:

$$[\hat{P}_q, \hat{X}_q] = -i\hbar, \quad (36)$$

де \hbar - постійна Планка, а квадратні дужки $[\hat{P}_q, \hat{X}_q]$ означають різницю добутків операторів: $[\hat{P}_q, \hat{X}_q] \equiv \hat{P}_q \hat{X}_q - \hat{X}_q \hat{P}_q$. Комутатори операторів, що стосуються різних осциляторів, дорівнюють нулю. У цьому випадку їх можна записувати у будь-якому порядку.

Очевидно, що амплітуди a_q і a_q^* також стають операторними величинами \hat{a}_q і \hat{a}_q^+ . Їх комутатор знайдемо, використовуючи вирази (32) та (36). Він дорівнює $[\hat{a}_q, \hat{a}_q^+] = \hbar / 2m\omega_q$. На практиці замість операторів \hat{a}_q і \hat{a}_q^+ використовують дещо інші, а саме:

$$\hat{A}_q = \hat{a}_q (2m\omega_q / \hbar)^{1/2}, \quad \hat{A}_q^+ = \hat{a}_q^+ (2m\omega_q / \hbar)^{1/2}. \quad (37)$$

Їх комутатор дорівнює одиниці $[\hat{A}_q, \hat{A}_q^+] = 1$, а гамільтоніан окремого осцилятора, записаний через нові змінні, дорівнює

$$\hat{H}_q = \hbar\omega_q \left(\hat{A}_q^+ \hat{A}_q + \frac{1}{2} \right). \quad (38)$$

Величини \hat{A}_q^+ і \hat{A}_q є операторами народження і знищення фононів. В англійській літературі їх називають “generation and annihilation operators” або ж “raising and lowering operators”. При дії цих операторів на хвильову функцію енергія системи відповідно збільшується або зменшується на енергію кванта $\hbar\omega_q$.

Добуток операторів $\hat{A}_q^+ \hat{A}_q$ називають оператором кількості квантів \hat{n}_q q -го осцилятора. У стані теплової рівноваги середнє значення $\langle \hat{n}_q \rangle$ задається відомою формулою Планка

$$\langle \hat{n}_q \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega_q / kT} - 1}, \quad (39)$$

де k - постійна Больцмана, а T - температура. Вираз (39) є таким же, як і для рівноважного розподілу фотонів.

Коли відомий розподіл фононів по станах, то можна знайти середню енергію ланцюжка. Використовуючи вираз (39), можна пересвідчитись що при переході до класичного опису (формально спрямувавши \hbar до нуля) значення середньої енергії коливач $\hbar\omega_q \langle \hat{n}_q \rangle$ стає рівним kT . Саме таке значення дає класична рівноважна термодинаміка, одним з фундаментальних результатів якої є те, що на одну степінь свободи (коливного типу) припадає

енергія kT . Коли ж енергія $\hbar\omega_q$ значно перевищує kT , то реалізується так званий ультраквантовий режим коливань, коли середня кількість квантів q -типу значно менша одиниці: $\langle \hat{n}_q \rangle \approx e^{-\hbar\omega_q/kT} \ll 1$. Внесок таких осциляторів у повну енергію ланцюга стає експоненціально малим і в багатьох задачах ним можна знехтувати.

На завершення, зазначимо, що використаний нами опис коливань у лінійному ланцюгу на якісному рівні дуже подібний до опису в більш складних структурах, наприклад, тривимірних.

Література

А.И. Ансельм, “**Введение в теорию полупроводников**”, Москва, “Наука”, 1978 г., 615 с.