

سلسلة محاضرات فيزياء الجوامد : مجموعة محاضرات تغطي مقرر فيزياء الجوامد لطلاب الفيزياء ،المستوى الرابع ،ومفردات هذه المحاضرات مرتبة وفق ما ورد في الخطة الفصلية لأغلب الجامعات مع التفاوت من حيث التفصيل وسأأخذ الوسطية في العرض ،وأشير إلى المرجع في حال وجود تفصيلات معقدة لم ترد في الشرح ليستفيد منها من يود الاستزادة أن المرجع الرئيس هو (introduction to solid state physics, Charles Kittel,1996) . والمواقع التالية مفيدة جدا وممتعة (وخصوصا الموقع الثاني لجامعة كامبردج) لكافة المحاضرات كمر اجع باللغة الانجليزية:

http://en.wikipedia.org/wiki/Solid_state_physics
<http://www.msm.cam.ac.uk/doitpoms/index.html>
<http://www.matter.org.uk/diffraction/sitemap.htm>

ذبذبة (اهتزازات) الشبكة البلورية

Lattice Vibrations

1. مقدمة:

عند دراستنا لطاقة الترابط بين الذرات استعرضنا حالة الشبكة في وضع التوازن حيث تكون كل ذرة متموضعة على موضعها الشبكي تماما، ولكن الحقيقة أن الذرة (أيون الذرة) في الشبكة ليست ساكنة في مكانها حتى في الصفر المطلق كما تشير دراسات ميكانيكا الكم ،فالذرات (أيونات الذرات) تهتز حول وضع توازنها تحت تأثير قوى مرونة (قانون هوك) تحاول أن تعيدها إلى وضع التوازن، مما يؤدي إلى اهتزازات الشبكة البلورية بسبب التفاعل بين الذرات، والنتيجة حركة جماعية متزامنة (simultaneously) للذرات (أيونات الذرات)، تفرض دراسة حركة الشبكة بالكامل. وللتبسيط سندرس الظاهرة من خلال النظرية الكلاسيكية في الاهتزاز المترابط ونحاول أن نلقي الضوء بشكل مبسط على وجهة نظر ميكانيكا الكم حول تكيم ذبذبة الشبكة البلورية من خلال مفهوم الفونون والذي يعرف بأنه كم طاقة اهتزاز الشبكة البلورية (phonon).

2. ذبذبة الشبكة في البعد الواحد :

تتم الدراسة من خلال سلسلة خطية مؤلفة من ذرة واحدة في الخلية البدائية وتمثل هذه الحالة كلاسيكيا بكتل متماثلة تحتل عقد الشبكة البلورية ، ويبين الشكل (1) كما لو كانت تلك الكتل متصلة مع بعضها البعض بزنجيركات مرنة مهملة الكتلة ثابت مرونتها C ، وللتبسيط يؤخذ تفاعل الجوار المباشر فقط بين الذرات ويفرض أن الذرة الثانية والثالثة والرابعةتأثيرها مهمل على الذرة الأصل (n)

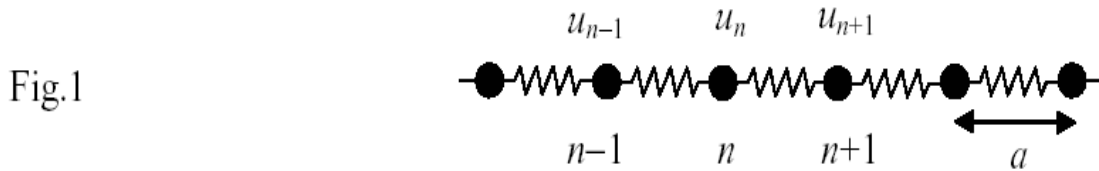


Fig.1

ومن أجل الإزاحات الصغيرة حول وضع التوازن يؤخذ ما يسمى بالتقريب التوافقي (الهزازة التوافقية) وبالتالي فإن القوة المؤثرة على الذرة (n) في الشكل (1) هي عبارة عن محصلة قوتين الأولى في الاتجاه الموجب من خلال تطبيق قانون هوك حيث الأحرف u_n, u_{n+1}, u_{n-1} تمثل الانزياح الموافق لموضع الذرة n, n+1, n-1 وتعطى بالعلاقة:

$$F_1 = -C(u_n - u_{n+1}) \quad (1)$$

والقوة الثانية المؤثرة على الذرة n من قبل الذرة n-1 في الاتجاه السالب تعطى بالعلاقة:

$$F_2 = C(u_n - u_{n-1}) \quad (2)$$

ومحصلة القوى المؤثرة على الذرة n هي مجموع العلاقتين السابقتين:

$$F_n = F_1 - F_2 = -C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \quad (3)$$

وبتطبيق قانون نيوتن الثاني للحركة نجد من العلاقة (3):

$$F_n = m_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = m_n u_n'' = -C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

$$m_n u_n'' + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0 \quad (4)$$

تمثل المعادلة (4) معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية، ويجب الانتباه إلى أن كل ذرة من ذرات الشبكة لها المعادلة (4) فإذا كان عدد الذرات N ذرة فيكون لدينا N معادلة تفاضلية مرتبطة من المرتبة الثانية بحاجة إلى حل متزامن مع تطبيق الشروط الحدية والتي يجب أن تؤخذ بالحسبان وخصوصا الذرة الأخيرة.

ولحل هذا العدد اللانهائي (البلورة المثالية) من المعادلات نأخذ بالحسبان أن معادلة الحل يجب أن لا تتبدل عند الموضع $x_n = na$ حيث a ثابتة الشبكة البلورية (شرط الدورية) ولهذا الغرض نبحت عن حل من الشكل:

$$u_n = A e^{i(qx_n - \omega t)} = A e^{i(qna - \omega t)} \quad (5)$$

المعادلة (5) تمثل معادلة موجة مستوية جارية (مستعرضة) (traveling) حيث كل الذرات تهتز بنفس التردد ω وبفس السعة A ولها العدد الموجي q وذلك لان شرط متجهة الانسحاب محقق.

نعوض المعادلة (5) في المعادلة (4) مع الانتباه أثناء الاشتقاق مرتين ووضع $x_{n+1} = a(n+1)$ وكذلك $x_n = a(n-1)$ ونحصل على المعادلة التالية:

$$m\omega^2 = C(2 - e^{iqa} - e^{-iqa}) \quad (6)$$

وبالاستفادة من العلاقة المثلثية (إذا اعتبرنا أن $\theta = qa$) التالية:

$$\cos\theta = \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \quad (7)$$

نعوض (7) في (6) فنجد :

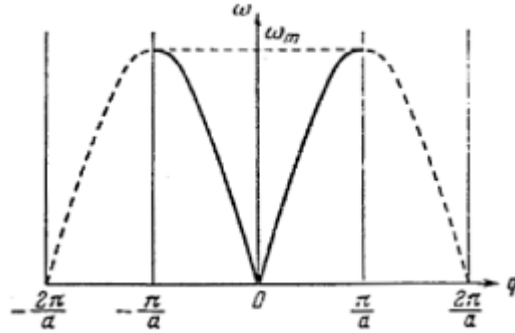
$$\omega^2 = \frac{2C}{m}(1 - \cos qa) = \frac{4C}{m} \sin^2 \frac{qa}{2}$$

$$\omega = \pm 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad (8)$$

تسمى العلاقة (8) علاقة التبدد أو التشتت (dispersion law) وهي تربط بين تردد الاهتزازة ω والعدد الموجي q وتوافق الإشارتان الموجبة والسالبة انتشار الأمواج من اليسار إلى اليمين أو العكس. تتمتع علاقة التبدد (8) بالمميزات التالية:

أ - تتوفر فيها أغلب المعلومات من خلال دراستها في منطقة بريلوان الأولى: بين الشكل (2) تمثيل العلاقة (8) $\omega = f(q)$ ويلاحظ أن التردد ω يتبع لقيم $(\sin\theta = \sin qa/2)$ ويكرر نفسه كلما انتقلنا

بزواوية (π) أي $(\frac{qa}{2} = \pi \Rightarrow q = \frac{2\pi}{a})$ وهذا يعني أننا إذا استبدلنا q بـ $q+2\pi/a$ في العلاقة (5) و (8) فلن تتبدلا والحلول تكون متطابقة فيزيائياً، وبالتالي فإن الحلول جميعها متطابقة في المناطق التي تحقق الشرط $q+2\pi n/a$ ، ولذلك تتم الدراسة في المجال من $-\pi/a$ إلى $+\pi/a$ والتي تمثل منطقة بريلوان الأولى وهذا ما يوضحه الشكل (2).



الشكل (2) : اهتزازات الشبكة الخطية ضمن منطقة بريلوان الأولى

ويلاحظ من العلاقة (8) أن أكبر قيمة لجيب الزاوية هو الواحد وعند هذه القيمة يكون التردد الزاوي أكبر ما يمكن أي:

$$\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \quad (9)$$

بسبب المعنى الفيزيائي للتردد ω (طاقة الفونون موجبة في الحالة المستقرة) فإننا نأخذ القيم الموجبة، وهو متناظر بالنسبة لمبدأ الإحداثيات ويتبع قيم q الموجبة والسالبة أي $[w(q)=w(-q)]$ انظر الشكل (2)، وهذا يعني أنه عندما تكون q موجبة فإن الموجة تجري في الشبكة في الاتجاه الموجب، وعندما تكون q سالبة فإن الموجة تجري في الاتجاه السالب للمحور المفروض.

لاحظ أن أكبر تردد ω_{\max} يتوافق مع أكبر قيمة للعدد الموجي $(q_{\max} = \pi/a \rightarrow n=1 \rightarrow q_{\max} = \pi/a)$ ومع أصغر طول موجي $\lambda_{\min} = 2\pi/q_{\max} = 2a$ أي لا يوجد أطوال موجية أصغر من $2a$ حيث a البعد الشبكي. وهذا يتوافق مع معادلة براغ للحيود $2d \sin\theta = n\lambda$ ، فعندما $\theta = \pi/2$ و $d = a$ و $q = 2\pi/\lambda$ و $n=1$ نجد أن $\lambda = 2a$.

وعلى حدود منطقة بريلوان $(q_{\max} = \pm\pi/a)$ فإن المعادلة (5) لا تمثل موجة جارية (مستعرضة) ولكن الحل يمثل موجة موقوفة (standing wave) لها الشكل التالي:

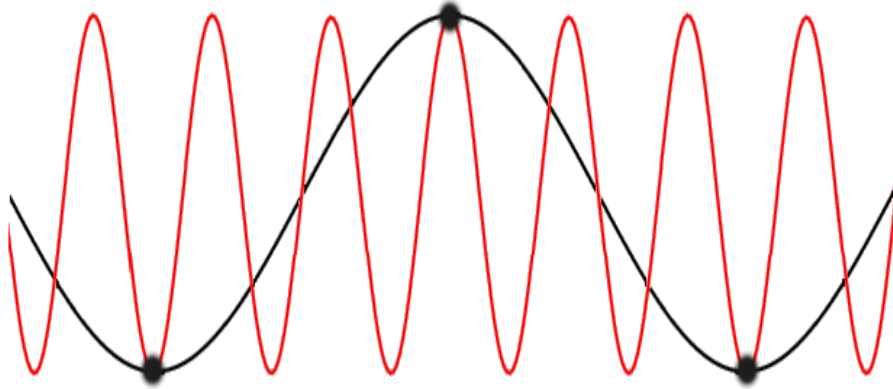
$$u_n = A(-1)^n e^{-i\omega t} \quad (10)$$

وتشير هذه العلاقة إلى أن الذرات المتجاورة تهتز على التعاكس في الاتجاه وذلك حسب قيم n الزوجية والفردية مما يسبب إلى نشوء الموجة الموقوفة، والسبب في ذلك أن الأمواج على حدود منطقة بريلوان تخضع لشرط براغ في الحيود أي يحصل انعكاس للموجة الواردة (الساقطة) مما يؤدي إلى تداخل الأمواج الواردة مع الأمواج المنعكسة ولتشكل أمواج موقوفة (مستقرة) وبمعنى آخر عندما لا تستطيع الموجة الجارية من الانتشار في الشبكة إلا من خلال الانعكاسات المتتالية ذهاباً وإياباً على حدود منطقة بريلوان عندئذ تنشأ الموجة الموقوفة (الأمواج لا تتحرك لا نحو اليمين ولا نحو اليسار، كتشكل المغازل (البطون) والعقد في وتر مشدود يخضع لضرب) انظر الأشكال (3) و (4) و (5) المربوطة مباشرة مع شبكة الانترنت (اضغط

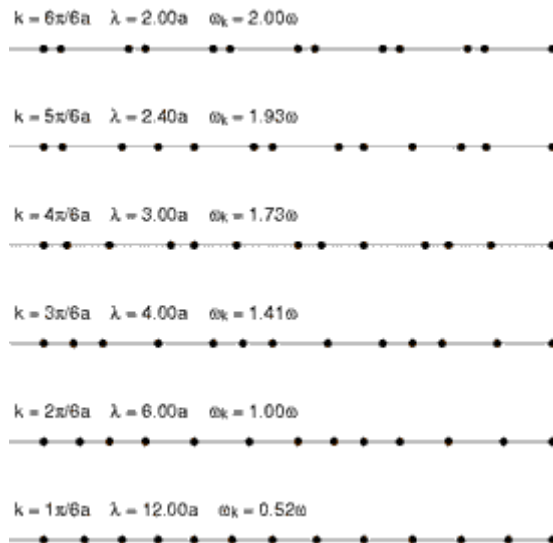
على الشكل ثم يمين الفارة اختر فتح ارتباط تشعبي ستشاهد حركة حية للوصف أعلاه) وكذلك الشكل (6) الذي يمثل منطقة بريلمان الأولى في الشبكة المقلوبة.



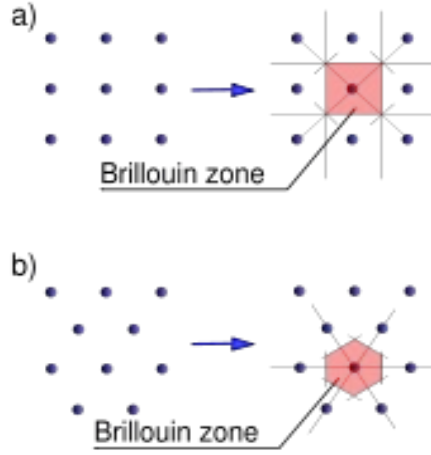
الشكل(3): حركة الذرات المتجاورة على التعاكس (Transverse acoustical standing wave)



الشكل(4): حركة الذرات المتجاورة على التعاكس وخارج حدود منطقة بريلمان الممتدة.



الشكل(5): حركة الذرات المتجاورة على التعاكس وخارج حدود منطقة بريلمان



الشكل (6): لاحظ حدود منطقة بريلوان الأولى حيث الأمواج الموقوفة تكون ضمن حدودها.

ب | سرعة الطور وسرعة المجموعة (phase and group velocity):

تعطى علاقة سرعة الطور والتي تمثل سرعة انتشار الموجة المستوية بالعلاقة التالية:

$$V_p = \frac{\omega}{q} \quad (11)$$

وتعطى سرعة المجموعة والتي تمثل سرعة حزمة الموجة وهي سرعة انتشار الطاقة في الوسط بالعلاقة التالية:

$$V_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} \quad (12)$$

بتعويض العلاقة (8) في (11) وضرب البسط والمقام بـ a وقسمة البسط والمقام على 2 نجد سرعة الطور:

$$V_p = \frac{\omega}{q} = \frac{2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|}{q} = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} \left| \frac{\sin \frac{qa}{2}}{\frac{qa}{2}} \right| \quad (13)$$

وباشتقاق العلاقة (8) بالنسبة لـ q نجد سرعة المجموعة:

$$V_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| \quad (14)$$

تشير العلاقة (14) أنه على حدود منطقة بريلوان $q = \pm \pi/a$ فإن سرعة المجموعة تساوي الصفر ولا يتم

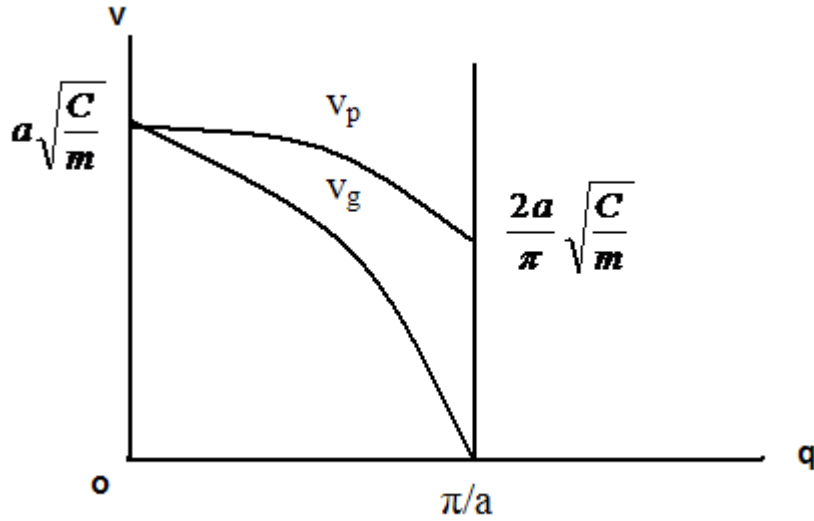
انتشار للطاقة. في حين أن العلاقة (13) تنتهي إلى القيمة $(\frac{2a}{\pi} \sqrt{\frac{C}{m}})$.

وتشير العلاقة (13) و (14) أنه من أجل الأمواج الطويلة جدا فإن العدد الموجي ينتهي إلى الصفر ($q = 2\pi/\lambda \rightarrow 0$) وعندئذ فإن سرعة الطور V_p وسرعة المجموعة V_g يكون لهما نفس القيمة

($a\sqrt{\frac{C}{m}}$) وهذا ما يعادل سرعة الصوت انظر الشكل (7).

ت | حدود الطول الموجي الطويل: في حال الأمواج الطويلة والتي تكون فيها ($a \gg \lambda$) أو ($qa \ll 1$) فإننا ننشر الجيب في العلاقة (8) وفق ما يلي:

$$\sin \frac{qa}{2} = \frac{qa}{2} - \frac{(qa)^3}{3!} + \frac{(qa)^5}{5!} - \dots \approx \frac{qa}{2} \quad (15)$$



الشكل (8): العلاقة بين سرعة الطور وسرعة المجموعة والعدد الموجي

نعوض العلاقة (15) في (8) فنجد:

$$\omega = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \sin \frac{qa}{2} \approx 2\sqrt{\frac{C}{m}} \frac{qa}{2} = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} q \quad (16)$$

تشير العلاقة (16) أن التردد يتناسب طردياً مع العدد الموجي في حال الأمواج طويلة الموجة وثابت التناسب يكافئ سرعة الصوت المستقلة عن التردد عند تلك الحدود:

$$v_p = \frac{\omega}{q} = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} = v_s \quad (17)$$

تشير العلاقة (17) أن سرعة الطور تساوي سرعة الصوت في حال الثابتة الشبكية a تنتهي إلى الصفر ($a \rightarrow 0$) وهذا يعني أن الوسط أصبح مستمراً (الأوتار كوسط مستمر) وتتحرك الذرات التي أصبحت متلاصقة كما لو أنها وتر مهتز ويعرف هذا النوع من الاهتزازات بالاهتزازات الصوتية ذات الطول الموجي الطويل انظر الشكل (9) مربوط مع شبكة الانترنت).



الشكل (9): شكل الاهتزازة عندما ثابتة الشبكة تنهي إلى الصفر ("Long" wavelength acoustical vibrations)

ث - الشروط الحدية الدورية لبورن - فون كارمان Born-von Karmann cyclic boundary conditions: إن الحالة المثالية غير محققة لأننا نتعامل مع بلورة ذات حدود وللتغلب على هذه الحالة نأخذ عدد حقيقي ضخم L من المواقع يوضع على دائرة ذات قطر ضخم، بحيث لا يختلف فيزيائياً عن سلسلة

طويلة جدا، و من خلال أن الذرة الأولى والذرة ذات الرقم L تقعان في نفس حالة الاستقرار يتحقق الشرط:

$$U_{n\pm L} = U_n \quad (18)$$

وفي هذه الحالة فإن العدد الموجي سيأخذ قيم متقطعة أو منفصلة (*discrete*)، بتعويض العلاقة (18) في العلاقة (5) نجد أن:

$$\exp(\pm iqaL) = 1, \quad qaL = 2\pi g \quad (19)$$

حيث g عدد صحيح، ينتج من (19):

$$q = \frac{2\pi g}{aL}, \quad -\frac{L}{2} < g < \frac{L}{2} \quad (20)$$

تشير العلاقة (20) إلى أن العد الموجي يأخذ L قيمة منفصلة في الفاصل $(\pm\pi/a)$ في سلسلة خطية ثابتتها الشبكية a وهذا الفاصل القيم هو القيم الموافقة لخلية ويغرنر - زائيس في الشبكة المقلوبة لحالة البعد الواحد. ويتحقق هنا شرط براغ:

$$\vec{q}' = \vec{q} + \vec{G} \quad (21)$$

وإذا تم تعويض العلاقة (21) بالعلاقة (5) سنحصل على الشرط (18)، والذي يشير إلى تكافؤ الحالات وتكفي الدراسة في منطقة بريلوان الأولى.

ج- كثافة الحالات (**DOS**) : *density of states*

بما أن الحالات منفصلة يمكننا حساب عدد أنماط الاهتزاز z في المجال $(w, w+dw)$ من العلاقة (8) نجد أن :

$$\begin{aligned} d\omega &= a \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| dq \\ dq &= \frac{2\pi}{aL} dg \\ d\omega &= a \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| \frac{2\pi}{aL} dg \end{aligned} \quad (22)$$

فيكون عدد الاهتزازات dz في المجال dw وفي المجال $(q=\pm\pi/a)$ يساوي الى :

$$dz = 2dg \quad (23)$$

وبما أن $\left(\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{C}{m}}\right)$ ومن (22) و (23) و (8) نجد العلاقة (24) مع ملاحظة التحويلات التالية من العلاقة (8) والتي كتبت مباشرة في العلاقة

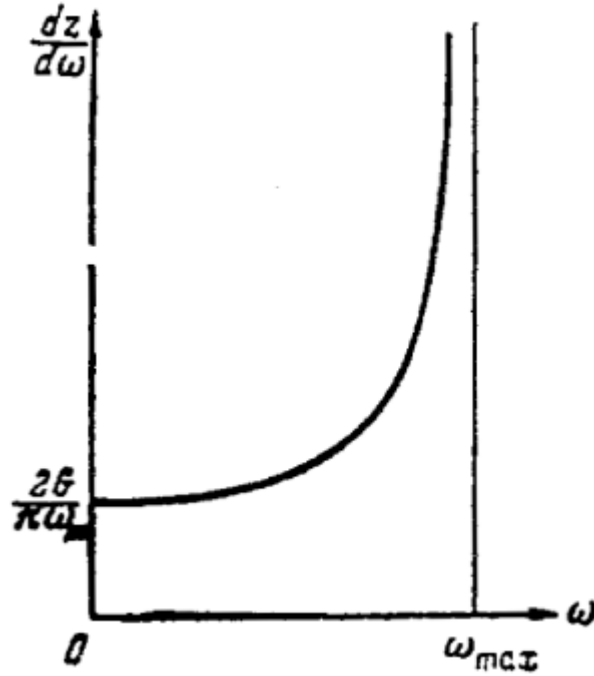
$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{2C}{m} (1 - \cos qa) = \frac{4C}{m} \sin^2 \frac{qa}{2} = \frac{4C}{m} \left(1 - \cos^2 \frac{qa}{2}\right) = \omega_{\max}^2 \left(1 - \cos^2 \frac{qa}{2}\right) = \\ \omega_{\max}^2 - \omega^2 &= \omega_{\max}^2 \cos^2 \frac{qa}{2} \Rightarrow \frac{1}{\cos \frac{qa}{2}} = \frac{\omega_{\max}}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} \end{aligned} \quad (24)$$

$$dz = 2dg = 2 \frac{d\omega}{a \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| \frac{2\pi}{aL}} \Rightarrow \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{m}{C}} \cdot \frac{d\omega}{\left| \cos \frac{qa}{2} \right|} \Rightarrow \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{m}{C}} \cdot \frac{\omega_{\max} d\omega}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}}$$

$$dz = 2 \frac{L}{\pi} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} \Rightarrow$$

$$\frac{dz}{d\omega} = \frac{2L}{\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} \quad (24)$$

تسمى العلاقة (24) بعلاقة كثافة الحالات ويبين الشكل (10) هذه العلاقة.



الشكل (10): كثافة الحالات لسلسلة خطية من ذرة واحدة.

3. ذبذبة (اهتزازات) الشبكة الخطية المولفة من ذرتين في الخلية البدائية (انظر الفقرة 6) في نهاية هذا الفصل.

4. ذبذبة (اهتزازات) الذرات في الشبكة البلورية الفضائية (انظر الفقرة 6) في نهاية هذا الفصل.

5. تكميم اهتزازات الشبكة البلورية - الفونونات (phonons):

حتى الآن ناقشنا التقريب الكلاسيكي لذبذبات الشبكة ، ولكن كما نعلم من ميكانيكا الكم فان مستويات الطاقة للمذبذب التوافقي مكتمة، والتقريب الذي وضع للشبكة يفرض أن تكون مستويات الطاقة لذبذبات الشبكة مكتمة ، يدعى كم طاقة الذبذبة (الاهتزاز) بالفونون (phonon) ، بالمقارنة مع الفوتون (photon) والذي يمثل كم طاقة الموجة الكهرومغناطيسية. تعطي حلول معادلة شرودينجر مستويات الطاقة المسموحة للمذبذب التوافقي بالعلاقة:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (25)$$

حيث n العدد الكمي (عدد الانشغال) ويساوي عدد صحيح أو صفر وفي حال مساواته للصفر فان الطاقة الناتجة تسمى الطاقة الصفرية ($E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$) أي أن الشبكة تتذبذب حتى في نقطة الصفر المطلق. والطاقة الكلية للطراز البلوري المدروس يساوي الى مجموع طاقات ذبذبة كافة المذبذبات في البلورة أي:

$$E_{tot} = \sum_i E_i^n \quad (26)$$

تتفاعل الفونونات مع الجسيمات مثل الفوتونات، النيوترونات، الالكترونات... الخ. وتسمى عادة بأشباه الجسيمات (quasi-particles) لأنها لا تحمل كمية حركة فيزيائية حقيقية وسبب ذلك أن مركز كتلة البلورة لا يغير موضعه أثناء الذبذبة وهذا يتوافق فقط مع ($q=0$) وبالتالي كمية حركة البلورة تساوي الصفر وضمن هذا الطراز الذي يمثل انسحاب دوري لكامل البلورة فان الناتج لا يعطي تغير في كمية الحركة.

وفي البلورات توجد قواعد الاختيار من أجل الانتقالات المسموحة بين الحالات المكتمة، وقد وجدنا أن حيود (تبعثر scattering) أشعة اكس بواسطة البلورة محكوم بقانون اختيار متجهة الموجة:

$$\vec{K}' = \vec{K} + \vec{G} \quad (27)$$

تعني هذه العلاقة أنه أثناء عملية الحيود فان كامل البلورة سوف يرتد بكمية حركة ($-\hbar\vec{G}$) وهو شرط حفظ (conservation) كمية الحركة للجملة ككل، وان متجهة الموجة الكلية للأمواج المتفاعلة محفوظة في شبكة دورية.

عندما يكون تبعثر (انتثار) الفوتونات عن البلورة ليس مرنا فان ذلك سيؤدي إلى إحداث (creation) أو امتصاص (absorption) فونون ويصبح قانون اصطفاء متجهة الموجة بالشكل:

$$\vec{K}' = \vec{K} + \vec{G} \pm \vec{q} \quad (28)$$

تعني إشارة الموجب امتصاص فونون ، وإشارة السالب إحداث فونون. وفي حالة الحيود اللامرنة نحتاج أيضا إلى قانون حفظ الطاقة ويلزم هنا استخدام النيوترونات للحصول على نتائج أدق.

6. ملحق كامل باهتزازات الشبكة البلورية بالانجليزية:

Lattice Vibrations

For small displacement on an atom from its equilibrium position one can expand the potential energy near its minimal value (see Fig. 1)

$$V(R) = V(R_0) + \left(\frac{dV}{dR}\right)_{R_0} (R - R_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dR^2}\right)_{R_0} (R - R_0)^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{d^3V}{dR^3}\right)_{R_0} (R - R_0)^3 + \dots \quad (5)$$

If we expand the energy near the equilibrium point and denote

$$\left(\frac{d^2V}{dR^2}\right)_{R_0} \equiv C > 0, \quad \left(\frac{d^3V}{dR^3}\right)_{R_0} \equiv -2\gamma > 0$$

we get the following expression for the restoring force for a given displacement $x \equiv R - R_0$

$$F = -\frac{dV}{dx} = -Cx + \gamma x^2 \quad (6)$$

The force under the limit $F = -Cx$ is called *quasi elastic*.

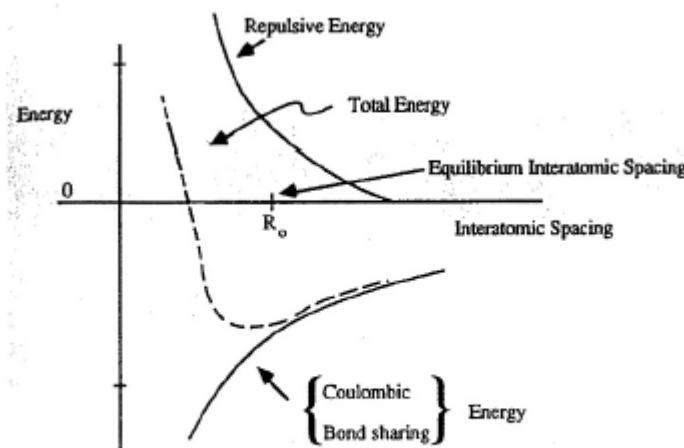


Figure 2.1: General form of binding energy.

One-Atomic Linear Chain

Dispersion relation

We start with the simplest case of one-atomic linear chain with nearest neighbor interaction (see Fig. 2)

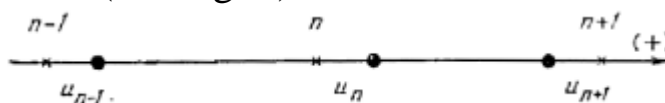


Fig 2. Vibrations of a linear one-atomic chain (displacements).

If one expands the energy near the equilibrium point for the n th atom and use quasi elastic approximation (6) he comes to the Newton equation

$$m\ddot{u}_n + C(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) = 0. \quad (7)$$

To solve this *infinite* set of equations let us take into account that the equation does not change if we shift the system *as a whole* by the quantity a times an integer. We can fulfill this condition automatically by searching the solution as

$$u_n = Ae^{i(qan - \omega t)}. \quad (8)$$

It is just a plane wave but for the *discrete co-ordinate* na . Immediately we get (see *Problem 2.1*)

$$\omega = \omega_m \left| \sin \frac{qa}{2} \right|, \quad \omega_m = 2\sqrt{\frac{C}{m}}. \quad (9)$$

The expression (9) is called the *dispersion law*. It differs from the dispersion relation for an homogeneous string, $\omega = sq$. Another important feature is that if we replace the wave number q as

$$q \rightarrow q' = q + \frac{2\pi g}{a},$$

where g is an integer, the solution (8) does not change (because $\exp(2\pi i \times \text{integer}) = 1$). Consequently, it is impossible to discriminate between q and q' and it is natural to choose the region

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a} \quad (10)$$

to represent the dispersion law in the whole q -space. This law is shown in Fig. 3.

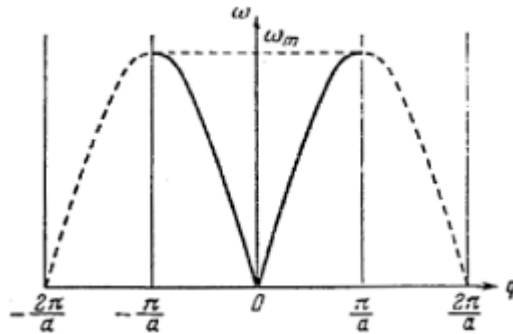


Fig 3. Vibrations of a linear one-atomic chain (spectrum).

Note that there is the *maximal frequency* ω_m that corresponds to the *minimal* wave length $\lambda_{\min} = 2\pi/q_{\max} = 2a$. The maximal frequency is a typical feature of discrete systems vibrations.

Now we should recall that any crystal is *finite* and the translation symmetry we have used fails. The usual way to overcome the problem is to take into account that actual number L of sites is large and to introduce *Born-von Karman* cyclic boundary conditions

$$u_{n\pm L} = u_n. \quad (11)$$

This condition make a sort of ring of a very big radius that physically does not differ from the long chain.¹ Immediately, we get that the wave number q should be *discrete*. Indeed, substituting the condition (11) into the solution (8) we get $\exp(\pm iqaL) = 1$, $qaL = 2\pi g$ with an integer g . Consequently,

$$q = \frac{2\pi g}{aL}, \quad -\frac{L}{2} < g < \frac{L}{2} \quad (12)$$

(it is convenient to consider L as a large even number). So, for a linear chain, the wave number q takes L discrete values in the interval $(-\pi/a, \pi/a)$. Note that this interval is just the same as the Wigner-Zeit cell of the one-dimensional reciprocal lattice.

Density of States

Because of the discrete character of the vibration states one can calculate the number of states, z , with different q in the frequency interval $\omega, \omega + d\omega$. One easily obtains (see Problem 2.2)

$$\frac{dz}{d\omega} = \frac{2L}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}. \quad (13)$$

This function is called the *density of states* (DOS). It is plotted in Fig. 4.

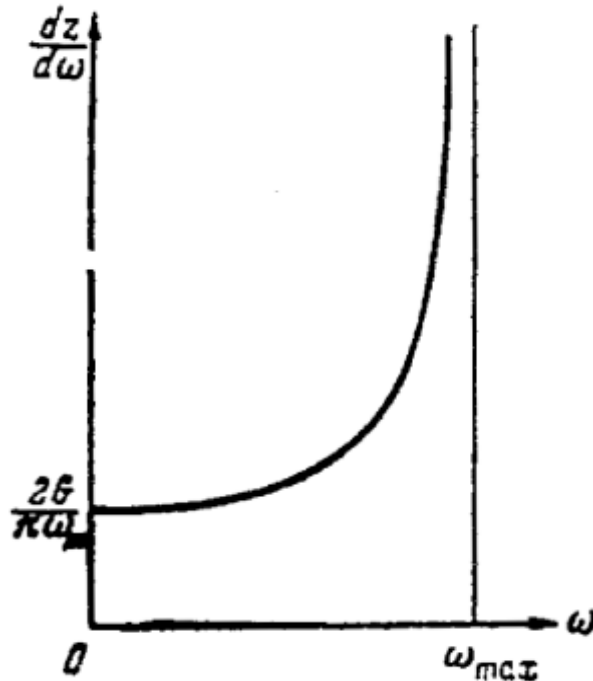


Fig 4. Density of states for a linear one-atomic chain.

We shall see that DOS is strongly dependent on the dimensionality of the structure.

Phase and Group Velocity

Now we discuss the properties of long wave vibrations. At small q we get from Eq. (9)

$$\omega = sq, \quad (14)$$

where

$$s = a\sqrt{\frac{C}{m}} \quad (15)$$

is the sound velocity in a homogeneous elastic medium. In a general case, the sound velocity becomes q -dependent, i. e. there is the dispersion of the waves. One can discriminate between the phase (s_p) and group (s_g) velocities. The first is

responsible for the propagation of the equal phase planes while the last one describes the energy transfer. We have

$$\begin{aligned} s_p &= \frac{\omega}{|q|} = s \left| \frac{\sin(aq/2)}{aq/2} \right| , \\ s_g &= \left| \frac{d\omega}{dq} \right| = s |\cos(aq/2)|. \end{aligned} \quad (16)$$

At the boundaries of the interval we get $s_p = (2/\pi)s$ while $s_g = 0$ (boundary modes cannot transfer energy).

Diatomic Chain. Acoustic and Optical branches.

We use this case to discuss vibrations of compound lattices. Let us consider the chain shown in Fig. 5

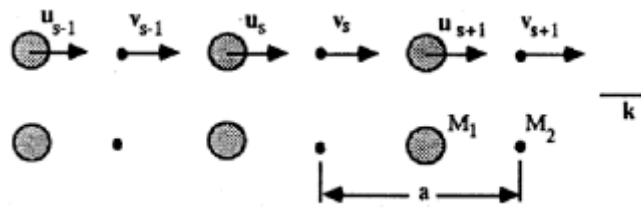


Fig 5. Linear diatomic chain.

One can see that the elementary cell contains 2 atoms. If we assume the elastic constants to be $C_{1,2}$ we come to the following equations of motion:

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{u}_n &= -C_1 (u_n - v_n) - C_2 (u_n - v_{n-1}) , \\ m_2 \ddot{v}_n &= -C_1 (v_n - u_n) - C_2 (v_n - u_{n-1}) . \end{aligned} \quad (17)$$

It is natural to use once more the translation symmetry condition and search the solution as

$$u_n = A_u e^{i(qan - \omega t)} , \quad v_n = A_v e^{i(qan - \omega t)} . \quad (18)$$

After substitution to Eqs. (17) we get the set of equations for the constants A_i . To formulate these equations it is convenient to express these equations in a matrix form introducing the vector $\mathbf{A} \equiv (A_u \ A_v)$ and the so-called *dynamic matrix*

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} \frac{C_1 + C_2}{m_1} & -\frac{C_1 + C_2 e^{-iaq}}{m_1} \\ -\frac{C_1 + C_2 e^{iaq}}{m_2} & \frac{C_1 + C_2}{m_1} \end{pmatrix} \quad (19)$$

The equation for \mathbf{A} has the form (see matrix notations in Appendix B)

$$\omega^2 \mathbf{A} - \hat{D} \mathbf{A} = \hat{0} . \quad (20)$$

This is homogeneous equation; it has a solution only if

$$\det (\omega^2 \hat{1} - \hat{D}) = 0 . \quad (21)$$

This is just the equation which determines the eigenfrequencies. We get

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{\omega_0^2}{2} \left[1 \mp \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{aq}{2}} \right] \quad (22)$$

where

$$\omega^2 = \frac{(C_1 + C_2)(m_1 + m_2)}{m_1 m_2}, \quad \gamma^2 = 16 \left[\frac{C_1 C_2}{(C_1 + C_2)^2} \right] \left[\frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \right].$$

The frequencies $\omega_{1,2}$ are real because $|\gamma| \leq 1$.

We see a very important difference with the case of monoatomic chain: there are 2 branches $\omega_{1,2}$ for a given value of q . The branches are shown in Fig. 6

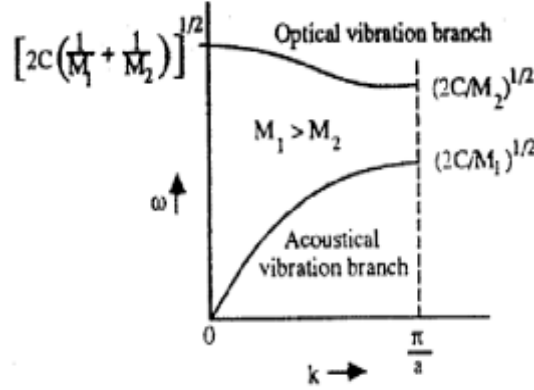


Fig 6. Optical and acoustic vibration branches.

The lower branch is called the *acoustic branch* while the upper one is called the *optical branch*. To understand the physical reason for these names let us consider the limits of zero and maximal q . We get

$$\begin{aligned} \omega_{ac}(0) = 0, \quad \omega_{ac}(\pi/a) &= \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \gamma} \sqrt{1 - \gamma^2}, \\ \omega_{opt}(0) = \omega_0, \quad \omega_{opt}(\pi/a) &= \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \gamma} \sqrt{1 - \gamma^2}. \end{aligned} \quad (23)$$

So, we have the inequality chain

$$\omega_{opt}(0) = \omega_0 > \omega_{opt}(\pi/a) > \omega_{ac}(\pi/a) > \omega_{ac}(0) = 0.$$

What happens in the degenerate case when $C_1 = C_2$, $m_1 = m_2$? This situation is illustrated in Fig. 7

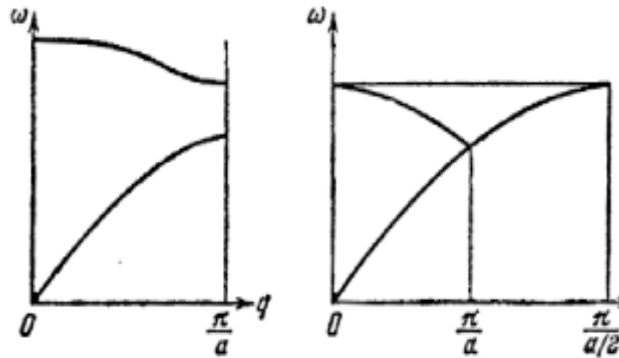


Fig 7. Degenerate case.

Now we can discuss the structure of vibrations in both modes. From the dispersion equation (20) we get

$$\mathcal{P}_{ac,opt} = \frac{u_n}{v_n^{ac,opt}} = \frac{A_u}{A_v} = \frac{C_1 + C_2 e^{-iqa}}{(C_1 + C_2) - m_1 \omega_{ac,opt}^2}. \quad (24)$$

At very long waves ($q \rightarrow 0$) we get (Problem 2.3)

$$\mathcal{P}_{ac} = 1, \quad \mathcal{P}_{opt} = -\frac{m_2}{m_1} \quad (25)$$

So, we see that in the acoustic mode all the atoms move next to synchronously, like in an acoustic wave in homogeneous medium. Contrary, in the optical mode; the gravity center remains unperturbed. In an ionic crystal such a vibration produce alternating *dipole moment*. Consequently, the mode is *optical active*. The situation is illustrated in Fig. 8.

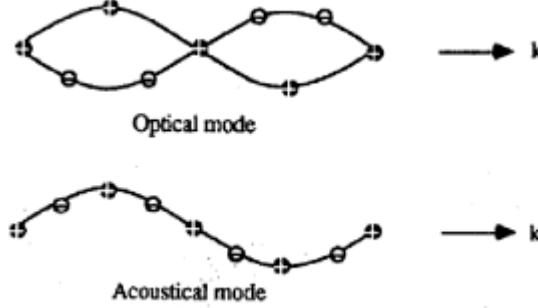


Fig 8. Transverse optical and acoustic waves.

Vibration modes of 3D lattices

Now we are prepared to describe the general case of 3D lattice. Assume an elementary cell with s different atoms having masses m_k . We also introduce the *main region* of the crystal as a body restricted by the rims La_i , the volume being $\mathcal{O} = L^3 \mathcal{O}_0$ while the number of sites $N = L^3$. The position of each atom is

$$\mathbf{R}_n^k = \mathbf{a}_n + \mathbf{R}^k \quad (26)$$

Here \mathbf{R}^k determines the atom's position within the cell. Similarly, we introduce displacements \mathbf{u}_n^k . The displacement-induced change of the potential energy Φ of the crystal is a function of all the displacements with a minimum at $\mathbf{u}_n^k = 0$. So, we can expand it as

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{all} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} k & k' \\ \mathbf{n} & \mathbf{n}' \end{pmatrix} u_{n\alpha}^k u_{n'\beta}^{k'} + \frac{1}{6} \sum_{all} \Phi_{\alpha\beta\gamma} \begin{pmatrix} k & k' & k'' \\ \mathbf{n} & \mathbf{n}' & \mathbf{n}'' \end{pmatrix} u_{n\alpha}^k u_{n'\beta}^{k'} u_{n''\gamma}^{k''} \quad (27)$$

(Greek letters mean Cartesian projections). There are important relations between the coefficients Φ in Eq. (27) because the energy should not change if one shifts the crystal *as a whole*.

1. The coefficients are dependent only on the differences $\mathbf{n}-\mathbf{n}'$, $\mathbf{n}-\mathbf{n}''$, etc.

$$\Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} k & k' \\ \mathbf{n} & \mathbf{n}' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} k & k' \\ \mathbf{n}-\mathbf{n}' \end{pmatrix} \quad (28)$$

2. The coefficient do not change if one changes the order of columns in their arguments

$$\Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} k & k' \\ \mathbf{n} & \mathbf{n}' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} k' & k \\ \mathbf{n}' & \mathbf{n} \end{pmatrix} \quad (29)$$

3. The sums of the coefficients over all the subscripts vanish.

$$\sum_{n'k'} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} kk' \\ nn' \end{pmatrix} = 0, \quad \sum_{n''k''} \Phi_{\alpha\beta\gamma} \begin{pmatrix} kk'k'' \\ nn'n'' \end{pmatrix} = 0. \quad (30)$$

Now we can formulate the Newton equations

$$m_k \ddot{u}_{n\alpha}^k = \sum_{n'k'\beta} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} kk' \\ nn' \end{pmatrix} u_{n'\beta}^{k'} \quad (31)$$

As in 1D case, we search the solution as (it is more convenient to use symmetric form)

$$\tilde{u}_{n\alpha}^k = \frac{1}{\sqrt{m_k}} A_{\alpha}^k(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q}\mathbf{a}_n - \omega t)}. \quad (32)$$

Here we introduce wave vector \mathbf{q} . Just as in 1D case, we can consider it in a restricted region

$$-\pi < \mathbf{q}\mathbf{a}_i < \pi \quad (33)$$

that coincides with the definition of the first Brillouin zone (or the Wigner-Seitz cell). The wave vector \mathbf{q} is defined with the accuracy of an arbitrary reciprocal vector \mathbf{G} , the \mathbf{q} -space is the same as the reciprocal lattice one.

Finally, we come to the equation (20) with

$$D_{\alpha\beta}^{kk'}(\mathbf{q}) = \sum_n \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} kk' \\ nn \end{pmatrix} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_n)} \quad (34)$$

This matrix equation is in fact the same as the set of $3s$ equations for $3s$ complex unknowns A_{α}^k . Now we come exactly to the same procedure as was described in the previous subsection. In fact, the dispersion equation has the form (21).

Let us discuss general properties of this equation. One can show (see *Problem 2.5*) that

$$D_{\alpha\beta}^{kk'} = \left[D_{\beta\alpha}^{k'k} \right]^*, \quad (35)$$

i. e. the matrix \hat{D} is *Hermitian*. Consequently, its eigenvalues are *real* (see Appendix B). One can show that they are also *positive* using the request of the potential energy to be minimal in the equilibrium.

The general way is as follows. One should determine $3s$ eigenvalues of the matrix \hat{D} for a given \mathbf{q} to get the values of $\omega_j(\mathbf{q})$. These values have to be substituted into Eq. (20) to find corresponding complex amplitudes $A_{j\alpha}^k(\mathbf{q})$ which are proportional to the eigenvectors of the dynamic matrix \hat{D} . One can show from its definition that in general case

$$\hat{D}(-\mathbf{q}) = \left[\hat{D}(\mathbf{q}) \right]^*. \quad (36)$$

That means important properties of solutions:

$$\omega_j(-\mathbf{q}) = \omega_j(\mathbf{q}), \quad A_{j\alpha}^k(-\mathbf{q}) = \left[A_{j\alpha}^k(\mathbf{q}) \right]^*. \quad (37)$$

These properties are in fact the consequences of the *time reversibility* of the mechanical problem we discuss.

Finally, one can construct a set of iso-frequency curves $\omega_j(\mathbf{q}) = \text{const}$ which are periodic in \mathbf{q} -space the period being the reciprocal lattice vector \mathbf{G} . The symmetry of those curves are determined by the lattice symmetry.

In the end of this subsection, we analyze the long wave properties of 3D lattice. It is clear, that at $\mathbf{q} = 0$ the component of \hat{D} -matrix are *real*. If we put the real displacement $A_{j\beta}^k / \sqrt{m_k}$ to be k -independent and use the property (30) we readily get $\omega_j(0) = 0$ for all the 3 components $\alpha = 1, 2, 3$. So, there are 3 acoustic branches and $3s-3$ optical ones. To describe their behavior we should write down the dynamic equation for real displacements for $\mathbf{q} = 0$ as

$$\omega^2(0) m_k \frac{A_{\alpha}^k(0)}{\sqrt{m_k}} = \sum_{k' \beta n'} \frac{1}{\sqrt{m_{k'}}} \Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{matrix} k & k' \\ n & n' \end{matrix} \right) A_{\beta}^{k'}(0) \quad (38)$$

and then sum over k (over the atoms in the primitive cell). Using the property (30)

$$\sum_{n' k'} \Phi_{\alpha\beta} \left(\begin{matrix} k & k' \\ n & n' \end{matrix} \right) = 0$$

we get

$$\sum_k m_k u_{n\alpha}^k = 0, \quad (39)$$

i. e. the center of gravity for optical modes remains constant. A typical vibration spectrum is shown in Fig. 9

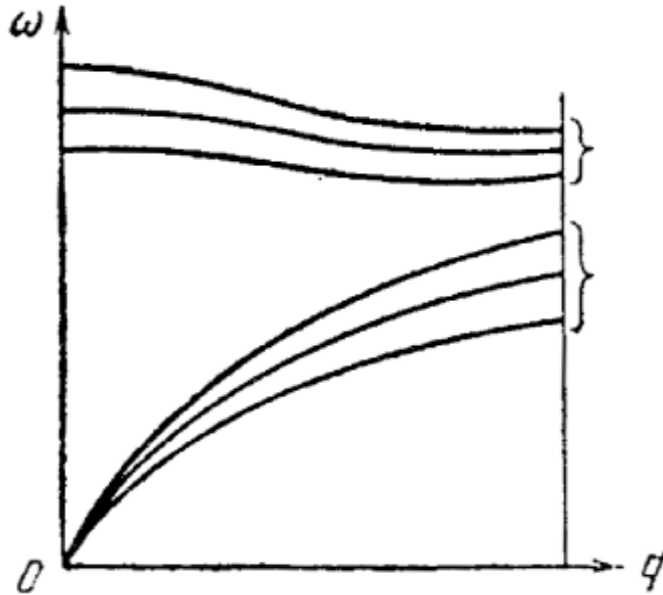


Fig 9. Typical vibration spectrum in 3D case.

Continual Approximation for Lattice Vibrations

To elucidate the difference between acoustic and optical vibrations we discuss here the long wave limit in continual approximation.

Acoustic vibrations

According to the theory of elasticity, one can write equations of motion as

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = (\Upsilon + \Lambda) \text{grad div } \mathbf{u} + \Upsilon \nabla^2 \mathbf{u} \quad (40)$$

where ρ is the mass density while Υ , Λ are elastic constants. It is known that $\vartheta = \text{div } \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ is the relative *volume change* while $\varphi = \frac{1}{2} \text{curl } \mathbf{u}$ is the rotation angle. Taking into account that

$$\text{curl grad } \psi(\mathbf{r}) = 0, \text{div curl } \mathbf{k}(\mathbf{r}) = 0, \nabla^2 \equiv \text{div grad},$$

we can obtain the equations for the quantities ϑ , φ :

$$\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial t^2} = s_l^2 \nabla^2 \vartheta, \quad (41)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = s_t^2 \nabla^2 \varphi, \quad (42)$$

where

$$s_l = \sqrt{\frac{2\Upsilon + \Lambda}{\rho}}, \quad s_t = \sqrt{\frac{\Upsilon}{\rho}}. \quad (43)$$

If $\mathbf{u} = \mathbf{A} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r} - i\omega t)$ we get

$$\begin{aligned} \vartheta &= \text{div } \mathbf{u} = i\mathbf{q}\mathbf{u}, \\ \varphi &= \frac{1}{2}[\mathbf{q}\mathbf{u}]. \end{aligned} \quad (44)$$

So, we see that the compression ϑ wave is *longitudinal* while the φ rotation wave is transversal. These wave are the analogs of 3 acoustic modes in a crystal. We can also calculate the number of the vibrations if we restrict ourselves with a cube with the rim L and put zero boundary conditions. We get $\vartheta = A \sin(\omega t) \sin(q_x x) \sin(q_y y) \sin(q_z z)$ for each mode with $q_i = n_i \frac{\pi}{L}$. We have $\omega = qs = s \sqrt{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2}$ for each branch. Consequently, the number of vibrations

in the region R , $R+dR$ where $R = \sqrt{\sum_i n_i^2}$ is

$$g(\omega) d\omega = \sum_{l,i} \frac{4\pi R^2 dR}{8} = \frac{\mathcal{O}}{2\pi^2} \left(\frac{1}{s_l^3} + \frac{2}{s_t^3} \right) \omega^2 d\omega. \quad (45)$$

Optical vibrations

Consider a ionic crystal with 2 ions in a primitive cell with effective charges $\pm e^*$. Denoting the corresponding displacements as \mathbf{u}_\pm and the force constant as κ we get the following equations of motion

$$\begin{aligned} M_+ \frac{d^2 \mathbf{u}_+}{dt^2} &= -\kappa (\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + e^* \mathbf{E}_e, \\ M_- \frac{d^2 \mathbf{u}_-}{dt^2} &= -\kappa (\mathbf{u}_- - \mathbf{u}_+) - e^* \mathbf{E}_e \end{aligned} \quad (46)$$

where \mathbf{E}_e is the effective electric field acting from the external sources and from other ions. Then, let us introduce reduced mass

$$\frac{1}{M_r} = \frac{1}{M_+} + \frac{1}{M_-}$$

and relative displacement $\mathbf{s} = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$. Combining Eqs. (46) we obtain

$$M_r \frac{d^2 \mathbf{s}}{dt^2} = -\kappa \mathbf{s} + e^* \mathbf{E}_e . \quad (47)$$

Now one should express the effective field \mathbf{E}_e through \mathbf{s} to make all the set of equations complete. The effective field differs from *average* field, \mathbf{E} , by the contribution of the polarization, \mathbf{P} . In this way, we get the following set of equations for the normalized displacement $\mathbf{w} = \sqrt{N_0 M_r} \mathbf{s}$

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{w}} + \gamma_{11} \mathbf{w} - \gamma_{12} \mathbf{E} &= 0 \\ \gamma_{12} \mathbf{w} + \gamma_{22} \mathbf{E} - \mathbf{P} &= 0 , \\ \nabla(\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) &= 0 . \end{aligned} \quad (48)$$

The coefficients γ_{ik} can be expressed through dielectric parameters of the crystal (see derivation below)

$$\gamma_{11} = \omega_0^2 , \gamma_{12} = \omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi}} , \gamma_{22} = \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} . \quad (49)$$

Here

$$\omega_0^2 = \frac{\kappa}{M_r} - \frac{4\pi N_0 e^{*2} (\epsilon_\infty + 2)}{9M_r} , \quad (50)$$

While $\epsilon_{0(\infty)}$ are, respectively, static and high-frequency dielectric constants. Finally, we come to the set of equations

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mathbf{w}}{dt^2} &= -\omega_0^2 \mathbf{w} + \omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi}} \mathbf{E} , \\ \mathbf{P} &= \omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi}} \mathbf{w} + \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} \mathbf{E} . \end{aligned} \quad (51)$$

This is the final set of equation we should analyze. To do it we split the displacement \mathbf{w} into the potential \mathbf{w}_l ($\text{curl } \mathbf{w}_l = 0$) and solenoidal \mathbf{w}_t ($\text{div } \mathbf{w}_t = 0$) parts. In the absence of free charges

$$\text{div } \mathbf{D} = 0 \rightarrow \text{div } \mathbf{E} = -4\pi \text{div } \mathbf{P} .$$

Using (51) we get

$$\mathbf{E} = -\frac{\omega_0}{\epsilon_\infty} \sqrt{4\pi(\epsilon_0 - \epsilon_\infty)} \mathbf{w}_l .$$

Substituting this relation into the equations (51) and separating potential and solenoidal parts we get

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mathbf{w}_t}{dt^2} &= -\omega_0^2 \mathbf{w}_t , \\ \frac{d^2 \mathbf{w}_l}{dt^2} &= -\omega_0^2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \mathbf{w}_l . \end{aligned} \quad (52)$$

Consequently, we come to the picture of longitudinal and transversal optical modes with

$$\frac{\omega_l}{\omega_t} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty}} \quad (53)$$

(the *Lyddane-Sax-Teller relation*).

The ion motion in the transversal and longitudinal modes is shown in Fig. 10 taken from the book [4].

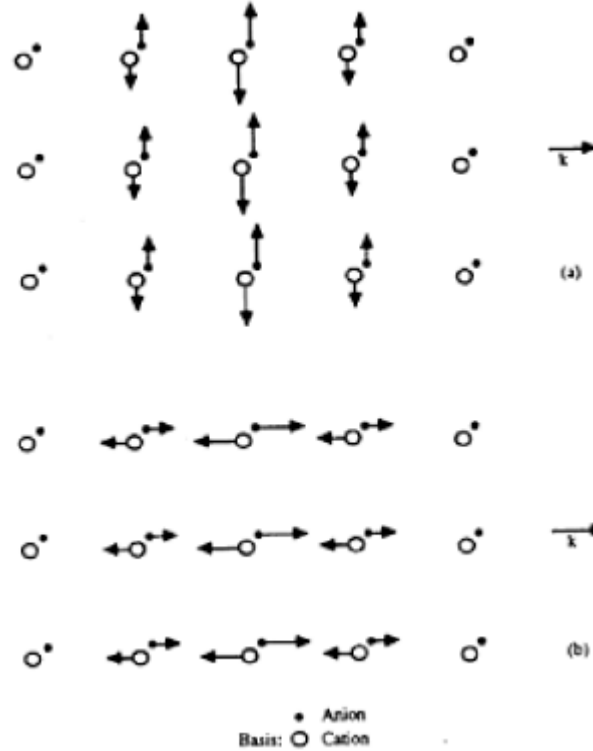


Fig 10. Optical modes of vibration of a ion crystal.

We see that the two types of optical vibrations differ because of the long-range electric forces which are produced only by *longitudinal* modes. Consequently, they are called *polar*. The difference between the frequencies of polar and non-polar modes depends on the crystal ionicity and allows one to estimate the latter.

Derivation of the constants γ_{ik}

In a cubic crystal, where polarizability is a scalar, we have

$$\mathbf{P} = N_0 \frac{e^* \mathbf{s} + a \mathbf{E}}{1 - (4N_0 \pi / 3) a} \quad (54)$$

and introduce the dielectric function ϵ according to the electrostatic equation for the displacement vector

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4 \pi \mathbf{P} = \epsilon \mathbf{E} \quad (55)$$

This function is dependent on the vibration frequency ω . We get

$$\mathbf{P} = \frac{\epsilon - 1}{4\pi} \mathbf{E} \quad (56)$$

Actually, ϵ is frequency dependent and at high frequencies ions cannot react on the a.c. electric field. Let us denote this limit as ϵ_∞ and put for this limit $\mathbf{s} = 0$ in Eq. (54). Combining (54) for $\mathbf{s} = 0$ with (56) we get

$$\alpha = \frac{\epsilon_\infty - 1}{(4\pi N_0/3)(\epsilon_\infty + 2)} . \quad (57)$$

Then we can substitute it once more in Eq. (54) and get

$$\mathbf{P} = N_0 \frac{e^*(\epsilon_\infty + 2)}{3} \mathbf{s} + \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} \mathbf{E} . \quad (58)$$

Making use of this equation we get

$$M_r \frac{d^2 \mathbf{s}}{dt^2} = -M_r \omega_0^2 \mathbf{s} + \frac{e^*(\epsilon_\infty + 2)}{4\pi} \mathbf{E} \quad (59)$$

where

$$\omega_0^2 = \frac{\kappa}{M_r} - \frac{4\pi N_0 e^{*2} (\epsilon_\infty + 2)}{9M_r} . \quad (60)$$

Usually the normalized displacement $\mathbf{w} = \sqrt{N_0 M_r} \mathbf{s}$ is introduced, so finally we come to the set of equations

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mathbf{w}}{dt^2} &= -\omega_0^2 \mathbf{w} + \sqrt{\frac{N_0}{M_r}} e^* \frac{\epsilon_\infty + 2}{3} \mathbf{E} , \\ \mathbf{P} &= \sqrt{\frac{N_0}{M_r}} e^* \frac{\epsilon_\infty + 2}{3} \mathbf{w} + \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} \mathbf{E} . \end{aligned} \quad (61)$$

It is reasonable to introduce the *static* dielectric constant ϵ_0 from the request of vanishing of the right-hand side of Eq. (59):

$$\epsilon_0 - \epsilon_\infty = \frac{N_0 e^{*2} 4\pi (\epsilon_\infty + 2)^2}{9\omega_0^2} . \quad (62)$$

Thus we arrive to the set of equations to be analyzed.

Optical Vibration–Light Interaction

It is clear that optical vibrations in ionic compounds should interact with electromagnetic waves. To take this interaction into account one should add the Maxwell equations to the complete set of equations for the vibrations. We have²

$$\begin{aligned} [\nabla \times \mathbf{B}] &= \frac{1}{c} \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \right) , \\ [\nabla \times \mathbf{E}] &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} , \\ (\nabla \cdot \mathbf{B}) &= 0 , \\ \nabla \cdot (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) &= 0 , \\ \ddot{\mathbf{w}} + \gamma_{11} \dot{\mathbf{w}} - \gamma_{12} \mathbf{E} &= 0 , \\ \mathbf{P} &= \gamma_{12} \mathbf{w} + \gamma_{22} \mathbf{E} . \end{aligned} \quad (63)$$

Here \mathbf{B} is magnetic induction,

$$\gamma_{11} = \omega_0^2, \gamma_{12} = \omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi}}, \gamma_{22} = \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi}. \quad (64)$$

We are interested in the transversal modes, so we search solutions proportional to $\exp(iqr - i\omega t)$ with

$$\mathbf{E} \parallel \mathbf{P} \parallel \mathbf{w} \parallel \mathbf{x}, \quad \mathbf{B} \parallel \mathbf{y}, \quad \mathbf{q} \parallel \mathbf{z}. \quad (65)$$

The equations for the complex amplitudes are (Check!)

$$\begin{aligned} \frac{i\omega}{c} \mathbf{E} - iq\mathbf{B} + \frac{4\pi i\omega}{c} \mathbf{P} &= 0, \\ iq\mathbf{E} - \frac{i\omega}{c} \mathbf{B} &= 0, \\ \gamma_{12} \mathbf{E} + (\omega^2 - \gamma_{11}) \mathbf{w} &= 0, \\ \gamma_{22} \mathbf{E} - \mathbf{P} + \gamma_{12} \mathbf{w} &= 0. \end{aligned} \quad (66)$$

Consequently, to get eigenfrequencies one should request

$$\det \begin{vmatrix} \omega/c & 4\pi \omega/c & -q & 0 \\ q & 0 & -\omega/c & 0 \\ \gamma_{12} & 0 & 0 & \omega^2 - \gamma_{11} \\ \gamma_{22} & -1 & 0 & \gamma_{12} \end{vmatrix} = 0. \quad (67)$$

After the substitution of all the values of γ_{ik} we get

$$\omega^4 \epsilon_\infty - \omega^2 (\omega_t^2 + c^2 q^2) + \omega_t^2 c^2 q^2 = 0. \quad (68)$$

This equation is quadratic in ω^2 the roots being

$$\omega_{1,2} = \frac{1}{2 \epsilon_\infty} (\omega_t^2 \epsilon_0 + c^2 q^2) \pm \sqrt{\frac{1}{4 \epsilon_0^2} (\omega_t^2 \epsilon_0 + c^2 q^2)^2 - \omega_t^2 q^2 \left(\frac{c^2}{\epsilon_\infty} \right)}. \quad (69)$$

This spectrum is shown in Fig. 11.

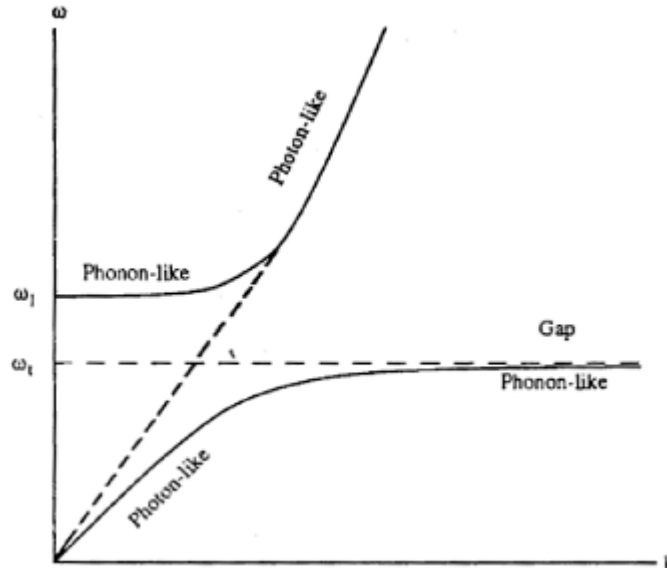


Fig 11. Coupled TO-photon modes. The broken lines – spectra without interaction.

It is important that there is no possibility for the light with the frequencies between ω_t and ω_1 to penetrate the crystal, it is completely reflected. The coupled

TO-vibration-photon modes are often called the *polaritons*. One can easily understand that longitudinal model do not couple to the light.

¹Note that for small structures of modern electronics this assumption need revision. Violation of this assumption leads to the specific interface modes.

²We use the so-called Gaussian system of units.

URL: <http://link.edu.ioffe.ru/galperin/l2pdf2>

© Educational Centre at Ioffe Institute

(Search>About) Images: 114; Size: 63486; TeX size: 30477; Update: 25 Feb 2002; Converted: 26 May 2005 01:05:06; elapsed time: 0.519 sec.

