

doi:

А.А. СТУПКА

Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара
(Просп. Гагаріна, 72, Дніпропетровськ 49010; e-mail: antonstupka@mail.ru)

ДОВГОХВИЛЬОВІ ОПТИЧНІ КОЛИВАННЯ У ДВОХАТОМНИХ ІОННИХ КРИСТАЛАХ

УДК 530.1

Розглянуто довгохвильові фонон-поляритони і поздовжні оптичні фонони як власні хвилі електромагнітного поля в іонних кристалах з двома атомами в елементарній комірниці. Використано модель Хуана Куня для опису підґраток точкових зарядів, що осцилюють з частотою ω_0 . Узагальнено закони дисперсії для оптичних коливань в кристалах завдяки врахуванню теплового руху зарядів. У другому порядку по відношенню середньоквадратичного відхилення до довжини хвилі знайдено додатковий поздовжній фонон з частотою $2\omega_0$ та два верхні фонон-поляритони.

Ключові слова: іонний кристал; електромагнітне поле; довгохвильові коливання; фонон-поляритони; поздовжні оптичні фонони; гармоніки.

1. Вступ

Урахування просторової неоднорідності при розгляді оптичних фононів зазвичай провадиться при вивченні обмежених тіл [1, 2] або за наявності надґратки [3]. Для нескінчених кристалів при знаходженні мод оптичних коливань використовується стандартна теорія з урахуванням лише частотної дисперсії діелектричної проникності [4, 5]. Така теорія, з урахуванням електромагнітної взаємодії при розгляді довгохвильових, у порівнянні зі сталою ґратки, оптичних коливань в іонних кристалах, побудована Хуаном Куном [6, 7]. У ній у довгохвильовій границі розглядаються відносні коливання позитивно та негативно заряджених іонних підґраток. При цьому частоту коливань – поперечних оптичних фононів – вважають сталою. Просторову дисперсію та тепловий рух не враховують.

Проте, врахування теплового руху зарядів призводить, наприклад, до циклотронних хвиль у замагніченій плазмі [8]. Розглянемо для зарядів твердого тіла таку саму задачу. У роботі [9], без запровадження ефективних зарядів у протилежність широко відомій моделі Сцигеті [10], ґрунтуючись на теорії Хуана Куна, проведено розгляд оптичних коливань в іонних кристалах з двома атомами в елементарній комірниці без урахування теплового руху зарядів. Подальший розгляд ставить

на меті поширення результатів [9] на випадок урахування теплового руху підґраток та пов'язаної з цим просторової дисперсії.

2. Закон дисперсії для електромагнітного поля, що слабо взаємодіє із середовищем

Розглянемо оптичні коливання у двоатомному іонному кристалі у гармонічному наближенні. Загасання, як прояв ангармонізму, враховувати не будемо. Наслідуючи ідеї Хуана Куна, будемо вважати підґратки позитивно та негативно заряджених іонів нескінченно жорсткими і розглядатимемо лише відносні коливання цих підґраток із заданою сталою частотою ω_0 . При цьому можна записати функцію Лагранжа [11, (13.3)]:

$$L_m = N(\dot{\mathbf{r}}^2 - \omega_0^2 \mathbf{r}^2)m/2, \quad (1)$$

де N – кількість іонних пар (комірок у кристалі), $\mathbf{r} = \mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-$ – відносний зсув підґраток, знак \pm відповідає заряду, $m = \frac{m_+m_-}{m_+ + m_-}$ – зведена маса пари.

Оскільки ми розглядаємо повільні для електронів частоти, рух електронних оболонок (електронну поляризуємість) врахуємо через високочастотну діелектричну проникність ϵ_∞ , яку вважати мемо сталою величиною [12, (13.1)]. Гамільтоніан системи можна представити у вигляді суми гамільтоніана зарядів без електромагнітного поля \hat{H}_m та

доданків із полем:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_f + \hat{H}_m, \\ \hat{H}_1 &\equiv - \int d^3x \frac{\hat{A}_\alpha(x) \hat{j}_\alpha(x)}{c}, \quad \hat{H}_2 \equiv \int d^3x \frac{\hat{\Omega}^2(x) \hat{A}(x)^2}{8\pi c^2}, \\ \hat{H}_f &= \int d^3x (\varepsilon_\infty \hat{\mathbf{E}}^2 + (\text{rot } \hat{\mathbf{A}})^2) / 8\pi. \end{aligned} \quad (2)$$

Тут введено позначення для оператора плазмової частоти іонів із зарядами $\pm e$:

$$\Omega^2 = 4\pi e^2 n / m \quad (3)$$

та оператор густини електричного струму за відсутності електромагнітного поля для нерелятивістського випадку $\hat{j}_\alpha(x)$ (див., наприклад, [13, §5.3.2]).

Фонон-поляритони та поздовжні оптичні фонони математично є розв'язками рівнянь Максвелла в іонному кристалі. Тому запишемо операторні рівняння руху для електромагнітного поля у картині Гейзенберга. Для цього візьмемо часові похідні від напруженості поля $\hat{E}_\alpha(x, t) = e^{itH/\hbar} \hat{E}_\alpha(x) e^{-itH/\hbar}$ та векторного потенціалу поля $\hat{A}_\alpha(x, t) = e^{itH/\hbar} \hat{A}_\alpha(x) e^{-itH/\hbar}$ і обчислимо отримані комутатори. Узагальнений імпульс, спряжений векторному потенціалу, визначається виразом $\mathbf{P} = \frac{\varepsilon_\infty}{4\pi c^2} \dot{\mathbf{A}}$ [12, (13.5)]. Операторні рівняння для електромагнітного поля такі:

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{A}_\alpha(x, t) &= -c \hat{E}_\alpha(x, t), \\ \varepsilon_\infty \partial_t \hat{E}_\alpha(x, t) &= c \text{rot}_\alpha \text{rot } \hat{\mathbf{A}}(x, t) - 4\pi \hat{j}_\alpha(x, t). \end{aligned} \quad (4)$$

Тут запроваджено оператор густини електричного струму $\hat{J}_n(x) = \hat{j}_n(x) - \frac{1}{4\pi c} \hat{A}_n(x) \hat{\Omega}^2(x)$. Тепер треба усереднити рівняння (4) зі статистичним оператором системи кристала із полем. Для знаходження явного вигляду середнього струму в іонному кристалі виокремимо слабку взаємодію із полем підсистеми зарядів. Подальші розрахунки проведемо в загальних позначеннях. Наслідуючи [13, §4.1.1], на початку (t_0) маємо вільні підсистеми із рівноважним статистичним оператором Гіббса для зарядів w_m й певним статистичним оператором для електромагнітного поля ρ_f (це можна записати завдяки принципу ослаблення кореляцій):

$$\rho(t_0) = \rho_f(t_0) w_m(t_0), \quad \text{Sp} \rho = 1. \quad (5)$$

За тривалий час початковий статистичний оператор (5) завдяки слабкій взаємодії між підсистемами

$$\hat{H}_{fm} = \hat{H} - \hat{H}_0 \quad (6)$$

зміниться – стане реальним. Тут позначено основний внесок у гамільтоніан:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{1}{8\pi} \int d^3x \hat{\mathbf{E}}(x)^2 + \frac{1}{8\pi c^2} \int d^3x \times \\ &\times \int d^3x' \hat{A}_\alpha(x) \omega_\alpha^2(x-x') \hat{A}_\alpha(x') + \hat{H}_m, \end{aligned} \quad (7)$$

при цьому частота $\omega_\alpha(x)$ дає поки що невідомий закон дисперсії. Розпишемо статистичний оператор у представленні взаємодії:

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \exp(itH_0/\hbar) \times \\ &\times \exp(-itH/\hbar) \rho \exp(itH/\hbar) \exp(-itH_0/\hbar). \end{aligned} \quad (8)$$

Розкладемо (8) згідно з термодинамічною теорією збурень [13, §3.1.2], маючи на увазі, що оператор $S(\lambda) = \exp(\lambda H_0) \exp(-\lambda H)$:

$$S(\lambda) = 1 - \int_0^\lambda d\lambda' \hat{H}_{fm}(\lambda') S(\lambda'), \quad (9)$$

де позначено $\hat{H}_{fm}(\lambda) = \exp(\lambda \hat{H}_0) \hat{H}_{fm} \exp(-\lambda \hat{H}_0)$, отже оператор $T(\lambda) = \exp(\lambda H) \exp(-\lambda H_0)$

$$T(\lambda) = 1 + \int_0^\lambda d\lambda' T(\lambda') \hat{H}_{fm}(\lambda'). \quad (10)$$

Тобто можна переписати статистичний оператор (8) так:

$$\rho(t) = S(it/\hbar) \rho T(it/\hbar). \quad (11)$$

Для простоти візьмемо поточний момент за початок відліку часу $t = 0$ і використаємо початкову умову (5). Тоді для досить великих за модулем t_0 (при цьому $t_0 < 0$, оскільки початок еволюції був у минулому):

$$\rho(t = 0) = S(it_0/\hbar) w_m \rho_f T(it_0/\hbar). \quad (12)$$

Розпишемо (12) з точністю до першого порядку теорії збурень. Підставимо (9), (10):

$$\begin{aligned} \rho(t = 0) &= \left(1 - \int_0^{it_0/\hbar} d\lambda' \hat{H}_{fm}(\lambda') S(\lambda') \right) \times \\ &\times w_m \rho_f \left(1 + \int_0^{it_0/\hbar} d\lambda' T(\lambda') \hat{H}_{fm}(\lambda') \right) \end{aligned} \quad (13)$$

і врахуємо, що в нульовому порядку $S_0(it/\hbar) = T_0(it/\hbar) = 1$, тоді маємо

$$\rho(t=0) \approx w_m \rho_f - \int_0^{it_0/\hbar} d\lambda' [\hat{H}_{fm}(\lambda'), w_m \rho_f]. \quad (14)$$

Перепозначимо змінну інтегрування $\lambda' = i\tau/\hbar$, тоді

$$\rho(t=0) \approx w_m \rho_f - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t_0} d\tau [\hat{H}_{fm}(\tau), w_m \rho_f], \quad (15)$$

де введено вже звичайне для представлення взаємодії позначення для довільного оператора $\hat{O}(\tau) \equiv e^{i\tau\hat{H}_0/\hbar} \hat{O} e^{-i\tau\hat{H}_0/\hbar}$. Отже основний та перший порядки статистичного оператора виглядають таким чином:

$$\rho_0 \approx w_m \rho_f, \quad \rho_1 \approx -\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_0} d\tau [\hat{H}_{fm}(\tau), w_m \rho_f]. \quad (16)$$

Тепер, враховуючи збігання представлень Гейзенберга та взаємодії при $t=0$, треба усереднювати операторні рівняння Максвелла (4). Для спрощення записів середні від операторів поля позначимо просто $E_\alpha(x) = \text{Sp} \hat{E}_\alpha(x) \rho$, а при усередненні поля з малими множниками у $\hat{J}_\alpha(x)$ нам вистачить лише основного порядку $E_\alpha(x) \approx \text{Sp} \hat{E}_\alpha(x) \rho_0$. Зауважимо, що в цьому підході (на відміну від методу скороченого опису [13, §4.2.]) $E_\alpha(x) \neq \text{Sp} \hat{E}_\alpha(x) \rho_0$ в загальному випадку. З (4) маємо

$$\partial_t A_\alpha(x, t) = -c E_\alpha(x, t), \quad (17)$$

$$\varepsilon_\infty \partial_t E_\alpha(x, t) = c \text{rot}_\alpha \text{rot} \mathbf{A}(x, t) - 4\pi J_\alpha(x, t). \quad (18)$$

Далі потрібно усереднити $\hat{J}_\alpha(x)$ зі статистичним оператором (15). Малість доданків стандартно будемо визначати за степенем електромагнітного поля. Тоді

$$\rho_1 = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_0} d\tau \left[-\int d^3x \hat{A}_\alpha(\tau, x) \hat{j}_\alpha(\tau, x) / c, w_m \rho_f \right]. \quad (19)$$

Узагальнений імпульс, спряжений з векторним потенціалом, тепер визначається виразом виходячи з (7) $\mathbf{P} = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{\mathbf{A}}$. Як легко перекопати, після просторового перетворення Фур'є, маємо

$$\hat{A}_{\alpha k}(\tau) = \hat{A}_{\alpha k} \cos(\omega_\alpha(k)\tau) -$$

$$-c \hat{E}_{\alpha k} \sin(\omega_\alpha(k)\tau) / \omega_\alpha(k). \quad (20)$$

Тобто у (18) електричний струм такий:

$$J_n(x, t) = \text{Sp} \left(w_m \rho_f - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t_0} d\tau [\hat{H}_{fm}(\tau), w_m \rho_f] \right) \times \hat{j}_n(x) - \text{Sp} w_m \rho_f \frac{1}{4\pi c} \hat{A}_n(x) \hat{\Omega}^2(x). \quad (21)$$

Оскільки струм у рівновазі відсутній $\text{Sp} w_m \hat{j}_n(x) = 0$, можна переписати

$$J_n(x, t=0) = -\frac{i}{c\hbar} \int_0^{t_0} d\tau \int d^3x' A_\alpha(\tau, x') \times \text{Sp} [\hat{j}_\alpha(\tau, x'), \hat{j}_n(x)] w_m - \frac{1}{4\pi c} A_n(x, t=0) \Omega^2. \quad (22)$$

Отже, маємо коефіцієнт $\text{Sp} [\hat{j}_\alpha(\tau, x'), \hat{j}_n(x)] w_m$ при середньому полі, який має швидко спадати з часом, тому використаємо звичайний для електродинаміки прийом – спрямуємо $t_0 \rightarrow -\infty$, що дасть

$$J_n(x, t=0) = \frac{i}{c\hbar} \int_{-\infty}^0 d\tau \int d^3x' A_\alpha(\tau, x') \times \text{Sp} [\hat{j}_\alpha(\tau, x' - x), \hat{j}_n(0)] w_m - \frac{1}{4\pi c} A_n(x, t=0) \Omega^2. \quad (23)$$

Подальші дії для розв'язання системи (17)–(18) стандартні: робиться фур'є-перетворення по координаті, береться похідна за часом та підставляється $A_{k\alpha}$ з (17) у (18). Отже, (18) має вигляд

$$\varepsilon_\infty \partial_t E_{kn} = -c [\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{A}_k]]_n + \frac{1}{c} A_{kn} \Omega^2 + 4\pi \frac{i}{c\hbar} \int_{-\infty}^0 d\tau (A_{\alpha k} \cos(\omega_\alpha(k)\tau) - c E_{\alpha k} \sin(\omega_\alpha(k)\tau) / \omega_\alpha(k)) \text{Sp} [\hat{j}_\alpha(\tau, k), \hat{j}_n(0)] w_m. \quad (24)$$

Беремо похідну і підставляємо з (17):

$$\varepsilon_\infty \partial_t^2 E_{kn} = c^2 [\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_k]]_n - E_{kn} \Omega^2 - 4\pi i / \hbar \times \int_{-\infty}^0 d\tau (E_{\alpha k} \cos(\omega_\alpha(k)\tau) + \partial_t E_{\alpha k} \times \sin(\omega_\alpha(k)\tau) / \omega_\alpha(k)) \text{Sp} [\hat{j}_\alpha(\tau, k), \hat{j}_n(0)] w_m. \quad (25)$$

Маємо однорідне диференціальне рівняння другого порядку. Будемо шукати розв'язок у вигляді $E_{kn}(t) = E_{kn} \exp(-it\omega_\alpha(k))$, бо саме ця частота фігурує в H_0 як частота осциляторів поля. Тоді отримаємо рівняння

$$\begin{aligned} -\omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_\infty E_{kn} &= c^2 [\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_k]]_n - E_{kn} \Omega^2 - \\ &- 4\pi \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 d\tau \text{Sp} [\hat{j}_\alpha(\tau, k), \hat{j}_n(0)] w_m \times \\ &\times (E_{\alpha k} \cos(\omega_\alpha(k)\tau) - i\omega_\alpha(k) E_{\alpha k} \sin(\omega_\alpha(k)\tau) / \omega_\alpha(k)). \end{aligned} \quad (26)$$

Вираз в останніх дужках можна спростити по формулі Ейлера:

$$\begin{aligned} \cos(\omega_\alpha(k)\tau) - i \sin(\omega_\alpha(k)\tau) &= \exp(-i\omega_\alpha(k)\tau), \\ -\omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_\infty E_{kn} &= c^2 [\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_k]]_n - E_{kn} \Omega^2 - \\ &- 4\pi \frac{i}{\hbar} E_{\alpha k} \int_{-\infty}^0 d\tau \exp(-i\omega_\alpha(k)\tau) \theta(-\tau) \times \\ &\times \text{Sp} [\hat{j}_\alpha(\tau, k), \hat{j}_n(0)] w_m. \end{aligned} \quad (27)$$

Тепер зручно запровадити функцію Гріна ([13, с. 169]):

$$G_{n\alpha}^{(+)}(\tau, k) = i\theta(-\tau) \text{Sp} [\hat{j}_\alpha(\tau, k), \hat{j}_n(0)] w_m / \hbar. \quad (28)$$

У (27) маємо її фур'є-образ:

$$\begin{aligned} -\omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_\infty E_{kn} &= c^2 [\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_k]]_n - E_{kn} \Omega^2 - \\ &- \frac{4\pi}{\hbar} E_{\alpha k} G_{n\alpha}^{(+)}(\omega_\alpha(k), k). \end{aligned} \quad (29)$$

Рівняння (29) дасть відоме дисперсійне рівняння для електромагнітного поля у середовищі (див., наприклад, [14, (16)]):

$$\begin{aligned} c^2 (\delta_{n\alpha} k^2 - k_n k_\alpha) + \delta_{n\alpha} \Omega^2 + \\ + 4\pi G_{n\alpha}^{(+)}(\omega_\alpha(k), k) - \omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_\infty \delta_{n\alpha} = 0. \end{aligned} \quad (30)$$

В однорідному ізотропному середовищі можна розділити функцію Гріна струмів на поздовжню і поперечну частини:

$$G_{ml}^{(+)}(\omega_\alpha(k), k) = G^{(+)}(\omega_\alpha(k), k)^\perp (\delta_{ml} - \hat{k}_m \hat{k}_l) +$$

$$+ G^{(+)}(\omega_\alpha(k), k)^\parallel \hat{k}_m \hat{k}_l, \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \text{де} \\ G^{(+)}(\omega_\alpha(k), k)^\perp &= (\delta_{ml} - \hat{k}_m \hat{k}_l) G_{ml}^{(+)}(\omega_\alpha(k), k) / 2, \\ G^{(+)}(\omega_\alpha(k), k)^\parallel &= G_{ml}^{(+)}(\omega_\alpha(k), k) \hat{k}_m \hat{k}_l, \end{aligned}$$

та $\hat{k}_m = k_m / k$.

Обчислимо функцію Гріна (28) для рівноважного середовища з температурою $T = 1/\beta$. Тоді замість комутатора маємо ([15, (1.49)], [13, (4.1.22)]):

$$\begin{aligned} G_{n\alpha}^{(+)}(\omega, k) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\varpi (1 - \exp(\hbar\varpi\beta)) \times \\ &\times \frac{\text{Sp} \hat{j}_\alpha(\varpi, k) \hat{j}_n(0) w_m}{\varpi - \omega - i0}. \end{aligned} \quad (32)$$

Різницю в дужках (32) для класичного випадку можна замінити на множник $\beta\hbar\varpi$:

$$\begin{aligned} G_{n\alpha}^{(+)}(\omega, k) &= \frac{1}{2\pi T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varpi \text{Sp} \hat{j}_\alpha(\varpi, k) \hat{j}_n(0) w_m \times \\ &\times \left(-1 - \frac{\omega}{\varpi - \omega - i0} \right). \end{aligned} \quad (33)$$

Для спрощення записів надалі позначатимемо кореляцію струмів таким чином:

$$\text{Sp} \hat{j}_\alpha(\varpi, k) \hat{j}_n(0) w_m = \langle \hat{j}_\alpha(\varpi, k) \hat{j}_n(0) \rangle.$$

3. Наближення Хуана Куна для діелектрика

Тепер конкретизуємо функцію Гріна струмів у представленні взаємодії для випадку оптичних фонових. Для цього розглянемо рух зарядів без взаємодії з полем. Треба перейти до координати центра мас $\mathbf{R} = (m_+ \mathbf{r}_+ + m_- \mathbf{r}_-) / M$ ($M = m_+ + m_-$) та різниці координат. Випадкові величини тепер амплітуда та фаза гармонічних коливань, тобто відносні координата та швидкість. Використаємо наближення Хуана Куна з незалежними одновимірними коливаннями. Будемо вважати швидкість центра мас нульовою. Діємо як для одного ступеня вільності. Вільні коливання описуються такою часовою залежністю радіуса-вектора ([11, (21.7)], [16, (5.1.1)]):

$$\begin{aligned} r_{an}(t) &= r_{an} \cos(\omega_0 t) + v_{an} \sin(\omega_0 t) / \omega_0, \\ v_{an}(t) &= v_{an} \cos(\omega_0 t) - r_{an} \sin(\omega_0 t) \omega_0. \end{aligned} \quad (34)$$

Запишемо функцію розподілу для осцилятора. Нормувати будемо на число пар в об'ємі, тобто $N = \int d^3v d^3r_a d^3V d^3R \delta(\mathbf{V}) f(v, r_a)$. Оскільки розглядається макроскопічна теорія, то центри мас "розкидані" довільно – структура кристала неважлива – наслідок однорідності та ізотропії. Але центри мас фіксовані, коливання лише у кожній парі. Уважаємо, що значення швидкості та координати осцилятора мають нормальний розподіл:

$$f(v, r) = \frac{n}{(2\pi)^3 v_s^3 r_s^3} \exp\left(-\left(v^2/2v_s^2 + r^2/2r_s^2\right)\right), \quad (35)$$

де $v_s = 1/\sqrt{m\beta}$ та $r_s = 1/\sqrt{m\beta\omega_0}$ – середньоквадратичні відхилення швидкості та координати осцилятора. Різні сорти частинок відображені лише у зведених масі m .

Оператор струму пари виглядає так [16, (2.3.4)]:

$$\hat{j}_m(r, t) = ev_m (m_-/M \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R} - m_- \mathbf{r}_a(t)/M) + m_+/M \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R} + m_+ \mathbf{r}_a(t)/M)).$$

Струм складається із суми струмів позитивно зарядженого та негативно зарядженого іонів. Отже, запишемо потрібну в (33) кореляційну функцію струмів:

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_m(r, t) \hat{j}_l(0) \rangle &= e^2 \int d^3r_a d^3v d^3R v_m(t) v_l f(v, r_a) \times \\ &\times (m_-/M \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R} - m_- \mathbf{r}_a(t)/M) + \\ &+ m_+/M \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R} + m_+ \mathbf{r}_a(t)/M)) \times \\ &\times (m_-/M \delta(\mathbf{R} + m_- \mathbf{r}_{0a}/M) + \\ &+ m_+/M \delta(m_+ \mathbf{r}_{0a}/M - \mathbf{R})). \end{aligned} \quad (36)$$

Інтеграл по координаті центра мас тривіальний і дає чотири доданки:

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_m(r, t) \hat{j}_l(0) \rangle &= e^2 \int d^3r_a d^3v v_m(t) v_l f(v, r_a) \times \\ &\times (m_-^2 \delta(\mathbf{r} + m_- \mathbf{r}_{0a}/M - m_- \mathbf{r}_a(t)/M) + \\ &+ m_- m_+ \delta(\mathbf{r} - m_+ \mathbf{r}_{0a}/M - m_- \mathbf{r}_a(t)/M) + \\ &+ m_- m_+ \delta(\mathbf{r} + m_- \mathbf{r}_{0a}/M + m_+ \mathbf{r}_a(t)/M) + \\ &+ m_+^2 \delta(\mathbf{r} - m_+ \mathbf{r}_{0a}/M + m_+ \mathbf{r}_a(t)/M))/M^2. \end{aligned} \quad (37)$$

Зручно перейти до фур'є-компонентів в отриманих виразах за таким правилом:

$$O(\mathbf{x}, t) = \int d^3k d\omega O(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t} / (2\pi)^4. \quad (38)$$

Тоді фур'є-перетворення по різниці координат та по часу для кореляційної функції (37) таке:

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle &= e^2 \int d^3v d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-it\omega) \times \\ &\times (m_-^2 \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}(\cos(\omega_0 t) - 1) + \\ &+ \mathbf{v} \sin(\omega_0 t)/\omega_0) m_-/M) + \\ &+ m_- m_+ \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}(\cos(\omega_0 t) + m_+/m_-) + \\ &+ \mathbf{v} \sin(\omega_0 t)/\omega_0) m_-/M) + \\ &+ m_+ m_- \exp(-i\mathbf{k}(\mathbf{r}(\cos(\omega_0 t) + m_-/m_+) + \\ &+ \mathbf{v} \sin(\omega_0 t)/\omega_0) m_+/M) + \\ &+ m_+^2 \exp(-i\mathbf{k}(\mathbf{r}(\cos(\omega_0 t) - 1) + \\ &+ \mathbf{v} \sin(\omega_0 t)/\omega_0) m_+/M)) \times \\ &\times v_m(v_l \cos(\omega_0 t) - r_l \sin(\omega_0 t) \omega_0) f(v, r) / M^2. \end{aligned} \quad (39)$$

Наявні експоненти можна, як стандартно робиться для замагніченої плазми, розкласти по функціях Бесселя [8, с. 104], [17, (39)] за правилом

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{v} \sin(\omega_0 t)/\omega_0} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\mathbf{k}\mathbf{v}/\omega_0) \exp(in\omega_0 t). \quad (40)$$

При цьому для макроскопічної довгохвильової теорії Хуана Куня треба оцінювати $\mathbf{k}\mathbf{v}/\omega_0 \ll 1$. Отже, аналогічно до мод Бернштейна [17], виникають моди через ненульове середньоквадратичне теплове відхилення від рівноваги на характерну відстань $r_s = 1/\sqrt{\beta m \omega_0} \sim 10^{-9}$ см.

Але простіше використати розвинення експоненти по малому аргументу, зберігши три доданки:

$$e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{O}} \approx 1 \pm i\mathbf{k}\mathbf{O} - (\mathbf{k}\mathbf{O})^2/2. \quad (41)$$

Непарні степені зникають після усереднення з (35) при інтегруванні в симетричних межах.

Розглянемо перший доданок у розвиненні (41), що еквівалентно добре вивченій границі $k = 0$

(див., наприклад, [9, 12]), тоді M^2 у (39) скоротиться і отримаємо

$$\langle \hat{j}_m(k=0, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle = e^2 \int d^3v d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-it\omega} \times \\ \times v_m (v_l \cos(\omega_0 t) - r_l \sin(\omega_0 t) \omega_0) f(v, r). \quad (42)$$

Інтеграл з добутком $v_m r_l$ дасть нуль як від непарної функції і врешті маємо

$$\langle \hat{j}_m(k=0, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle = \\ = e^2 \pi (\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)) \int d^3v d^3r v_m v_l f(v, r). \quad (43)$$

Тепер можна записати функцію Гріна з (33):

$$G_{n\alpha}^{(+)}(\omega, k=0) = \frac{1}{2\pi T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varpi \delta_{n\alpha}(m\beta)^{-1} e^2 n\pi \times \\ \times (\delta(\varpi - \omega_0) + \delta(\varpi + \omega_0)) \left(-1 - \frac{\omega}{\varpi - \omega - i0} \right), \quad (44)$$

і після тривіального інтегрування з дельта-функцією буде

$$G_{n\alpha}^{(+)}(\omega, k=0) = \frac{1}{4\pi} \delta_{n\alpha} \Omega^2 \left(-1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \right). \quad (45)$$

Тут використано позначення (3). Підставимо отримане (45) в дисперсійне рівняння (30):

$$c^2 (\delta_{n\alpha} k^2 - k_n k_\alpha) - \frac{\omega_\alpha(k)^2}{\omega_0^2 - \omega_\alpha(k)^2} \delta_{n\alpha} \Omega^2 - \\ - \varepsilon_\infty \omega_\alpha(k)^2 \delta_{n\alpha} = 0. \quad (46)$$

Дисперсійне рівняння (46) збігається з відомим (див., наприклад, [9, (17), (18)]), тобто дає стандартні розв'язки для фонон-поляритонів.

У цьому ж наближенні знайдемо частоту ω_0 порівнявши для квазістаціонарної границі $\omega \rightarrow 0$ рівняння Максвелла з використанням статичного значення діелектричної проникності ε_0 . Підставимо у (29) функцію Гріна (45):

$$-\omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_\infty E_{kn} = c^2 [\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_k]]_n - E_{kn} \Omega^2 - \\ - \frac{4\pi}{\hbar} E_{\alpha k} G_{n\alpha}^{(+)}(\omega_\alpha(k), k=0). \quad (47)$$

З іншого боку, квазістаціонарне наближення для рівнянь Максвелла дає

$$-\omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_0 E_{kn} = c^2 [\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_k]]_n,$$

що дасть

$$\omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_0 E_{kn} = \omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_\infty E_{kn} - E_{kn} \Omega^2 - \\ - \frac{4\pi}{\hbar} E_{\alpha k} G_{n\alpha}^{(+)}(\omega_\alpha(k), k=0). \quad (48)$$

І використовуючи для функції Гріна вираз (45), отримуємо

$$\omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_0 = \omega_\alpha(k)^2 \varepsilon_\infty + \frac{\omega_\alpha(k)^2}{\omega_0^2 - \omega_\alpha(k)^2} \Omega^2. \quad (49)$$

Тобто при $\omega_\alpha(k) \rightarrow 0$ маємо співвідношення Ліддана-Сакса-Теллера [18]:

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_\infty + \frac{\Omega^2}{\omega_0^2}, \quad (50)$$

що і визначить ω_0 стандартним чином [9]. Далі врахуємо наявність теплового руху. Розглянемо доданок у розвиненні виразу (39), що пропорційний квадрату показника:

$$\langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2 = -e^2 \int d^3v d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-it\omega) \times \\ \times (m_-^2 (i\mathbf{k}(\mathbf{r}(\cos(\omega_0 t) - 1) + \mathbf{v} \sin(\omega_0 t) / \omega_0) m_- / M)^2 + \\ + m_- m_+ (i\mathbf{k}(\mathbf{r}(\cos(\omega_0 t) + m_+ / m_-) + \\ + \mathbf{v} \sin(\omega_0 t) / \omega_0) m_- / M)^2 + \\ + m_- m_+ (-i\mathbf{k}(\mathbf{r}(\cos(\omega_0 t) + m_- / m_+) + \\ + \mathbf{v} \sin(\omega_0 t) / \omega_0) m_+ / M)^2 + \\ + m_+^2 (-i\mathbf{k}(\mathbf{r}(\cos(\omega_0 t) - 1) + \mathbf{v} \sin(\omega_0 t) / \omega_0) m_+ / M)^2) \times \\ \times v_m (v_l \cos(\omega_0 t) - r_l \sin(\omega_0 t) \omega_0) f(v, r) / 2M^2. \quad (51)$$

Запровадимо позначення $a = (m_-^2 - m_- m_+ + m_+^2) / 2M^2$ та $b = (m_-^2 - m_+^2) / M^4$; отже, враховуючи парність функцій під інтегралом, маємо три доданки:

$$\langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^1 = -e^2 \int d^3v d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-it\omega) \times \\ \times (\mathbf{k}\mathbf{r})^2 a v_m v_l \cos(\omega_0 t) f(v, r), \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^2 &= -e^2 \int d^3v d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-it\omega) \times \\ &\times (((\mathbf{k}\mathbf{r})^2 \cos^2(\omega_0 t) + (\mathbf{k}\mathbf{v})^2 \sin^2(\omega_0 t) / \omega_0^2) \times \\ &\times v_m v_l \cos(\omega_0 t) - 2v_m r_l \sin^2(\omega_0 t) (\mathbf{k}\mathbf{r})(\mathbf{k}\mathbf{v}) \times \\ &\times \cos(\omega_0 t)) a f(v, r), \end{aligned} \quad (53)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^3 &= -e^2 \int d^3v d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-it\omega) \times \\ &\times ((\mathbf{k}\mathbf{r})^2 v_m v_l \cos^2(\omega_0 t) - (\mathbf{k}\mathbf{r})(\mathbf{k}\mathbf{v}) v_m r_l \sin^2(\omega_0 t)) \times \\ &\times (-1) b f(v, r). \end{aligned} \quad (54)$$

Інтеграл Пуассона з розподілом Максвелла легко обчислюються. Запишемо їх для швидкості, для координати або симетричних проєкцій швидкості будуть такі самі значення. Направимо третю вісь (z) системи уздовж хвильового вектора

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dv_z v_z^2 \int_{-\infty}^{\infty} dv_x v_x^2 \int_{-\infty}^{\infty} dv_y f(v_z^2 + v_x^2 + v_y^2) &= \\ = n(m\beta)^{-2} = n v_s^4, \end{aligned} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dv_z v_z^4 \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y f(v_z^2 + v_x^2 + v_y^2) &= \\ = 3n(m\beta)^{-2} = 3n v_s^4. \end{aligned} \quad (56)$$

Ураховуючи це, з (52)–(54) маємо

$$\begin{aligned} k_m k_l \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^3 &= k^4 n (v_s r_s)^2 e^2 \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-it\omega) (\cos^2(\omega_0 t) - \sin^2(\omega_0 t)) b, \end{aligned} \quad (57)$$

$$\begin{aligned} (\delta_{ml} k^2 - k_m k_l) \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^3 &= 2k^4 n (v_s r_s)^2 e^2 \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-it\omega) \cos^2(\omega_0 t) b, \end{aligned} \quad (58)$$

$$\begin{aligned} k_m k_l \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^1 &= \\ = (\delta_{ml} k^2 - k_m k_l) \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^1 / 2 &= \\ = -k^4 n (v_s r_s)^{-2} e^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-it\omega) \cos(\omega_0 t) a. \end{aligned} \quad (59)$$

При цьому

$$\begin{aligned} k_m k_l \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^1 &= k_m k_l \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^2 = \\ = (\delta_{ml} k^2 - k_m k_l) \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^2 / 2, \end{aligned} \quad (60)$$

бо $\cos^2(\omega_0 t) + \sin^2(\omega_0 t) = 1$. Отже, третьої гармоніки в цьому наближенні не буде. А якщо маси іонів у парі рівні, то коефіцієнт $b = 0$ і другої гармоніки не буде також. Але для реальних хімічних сполук цей варіант мало ймовірний.

Запровадимо дельта-функцію за правилом

$$\delta(\omega) = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-it\omega),$$

тоді з (57)–(59) маємо

$$\begin{aligned} k_m k_l \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^1 &= (\delta_{ml} k^2 - k_m k_l) \times \\ &\times \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^1 / 2 = -k^4 \pi n (v_s r_s)^{-2} e^2 \times \\ &\times (\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)) a, \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned} k_m k_l \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^3 &= k^4 \pi n (v_s r_s)^2 e^2 \times \\ &\times (\delta(\omega - 2\omega_0) + \delta(\omega + 2\omega_0)) b, \end{aligned} \quad (62)$$

$$\begin{aligned} (\delta_{ml} k^2 - k_m k_l) \langle \hat{j}_m(k, \omega) \hat{j}_l(0) \rangle_2^3 &= 2k^4 \pi n (v_s r_s)^2 e^2 \times \\ &\times (2\delta(\omega) + \delta(\omega - 2\omega_0) + \delta(\omega + 2\omega_0)) b / 2. \end{aligned} \quad (63)$$

Тепер можна повернутися до суми (41), що після складання результатів дасть поздовжню і поперечну функції Гріна.

4. Закони дисперсії оптичних коливань

Поперечна частина функції Гріна вийде після підстановки у (33) кореляційної функції струмів, що складається з доданків (43), (61), (60) та (63):

$$\begin{aligned} 2G^{(+)}(\omega_\alpha(k), k)^\perp &= (\delta_{n\alpha} - \hat{k}_n \hat{k}_\alpha) G_{n\alpha}^{(+)}(\omega, k) = \\ &= \frac{1}{2\pi T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varpi e^2 n \pi v_s^2 \times \\ &\times ((\delta(\varpi - \omega_0) + \delta(\varpi + \omega_0)) - 2k^2 r_s^2 \times \\ &\times (\delta(\varpi - \omega_0) + \delta(\varpi + \omega_0))) 2a + k^2 r_s^2 \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times (\delta(\varpi - 2\omega_0) + \delta(\varpi + 2\omega_0) + 2\delta(\varpi)) b \times \\ & \times \left(-1 - \frac{\omega}{\varpi - \omega - i0} \right). \end{aligned} \quad (64)$$

Після інтегрування бачимо – уявна частина нульова:

$$\begin{aligned} G^{(+)}(\omega_\alpha(k), k)^\perp &= \frac{\Omega^2}{4\pi} \left(\left(-1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \right) - 2ak^2r_s^2 \times \right. \\ & \times \left. \left(-1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \right) + bk^2r_s^2 \left(-2 - \frac{\omega^2}{4\omega_0^2 - \omega^2} \right) / 2 \right). \end{aligned} \quad (65)$$

Підставимо (65) у поперечну частину дисперсійного рівняння (30):

$$\begin{aligned} & c^2k^2 + \Omega^2k^2r_s^2 \times \\ & \times \left(2a \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega_\perp(k)^2} - b/2 - b/2 \frac{4\omega_0^2}{4\omega_0^2 - \omega_\perp(k)^2} \right) - \\ & - \frac{\omega_\perp(k)^2}{\omega_0^2 - \omega_\perp(k)^2} \Omega^2 - \varepsilon_\infty \omega_\perp(k)^2 = 0. \end{aligned} \quad (66)$$

Добуток $k^2r_s^2 \ll 1$ у межах застосовності континуальної теорії Хуана Куня. Однак саме $k^2r_s^2 \neq 0$ приводить до появи нової моди фонов-поляритона.

Найбільш характерні представники двохатомних іонних кристалів – ллоїди лужних металів. Для сполук літію фонов другої гармоніки не взаємодіє з фотоном, бо $2\omega_0 < \omega_L$, хоча, можливо, зливається з верхнім фонов-поляритоном; а, наприклад, для NaF ми отримали ще одну гілку фонов-поляритона.

Для фториду натрію $\varepsilon_\infty = 1,7$, $\omega_0 = 45$ ТГц (дані табл. 5.1 з [19]) та $\Omega/\sqrt{\varepsilon_\infty} = 63$ ТГц (дані табл. 1 [20]). Запроваджено залежні від мас сталі $a \approx 0,13$ та $b \approx 0,01$. Ми будемо оцінювати $r_s \sim 10^{-9}$ см $^{-1}$.

Графік верхнього фонов-поляритона перетинає всі можливі резонанси, тобто наявна серія фонов-поляритонів, які йдуть за правилом “фонов-фотон-наступний фонов” та не перетинаються між собою. З розглянутою точністю для фториду натрію (див. рис. 1) фонов-поляритон переходить у другу гармоніку поперечного фонуна при збільшенні хвильового числа – на графіку суцільна лінія. А друга гармоніка поперечного фонуна в той самий час стає фонов-поляритоном – короткий пунктир. Нижня гілка фонов-поляритона залишається стандартною – довгий пунктир.

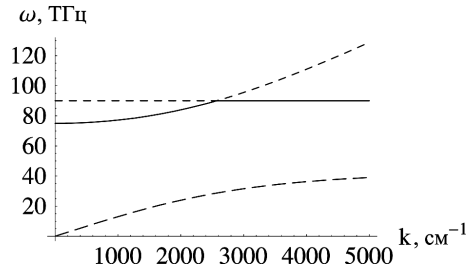


Рис. 1. Низькочастотні поперечні моди для NaF

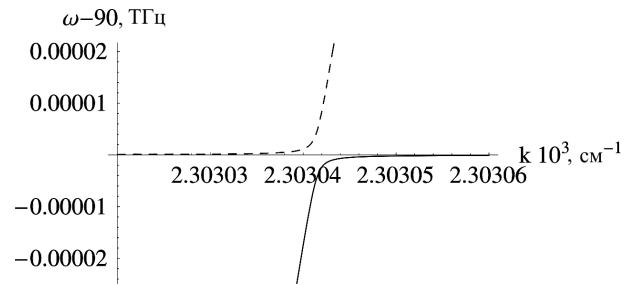


Рис. 2. Зближення верхніх фонов-поляритонів для NaF

На рис. 2 наведено збільшений графік місця наближення верхніх фонов-поляритонів NaF, який підтверджує відсутність перетину між ними.

Аналогічно до рис. 1, циклотронні резонанси у замагніченій плазмі перетинає незвичайна хвиля [21, с. 247] за тим самим правилом. Тобто наведений графік подібний до графіка мод Бернштейна. Також, аналогічний графік мають поперечні фонов-поляритони на п'єзоелектричній надгратці [3].

Поздовжня частина функції Гріна складається з (43) (61), (60) та (62):

$$\begin{aligned} G^{(+)}(\omega, k)^\parallel &= \hat{k}_n \hat{k}_\alpha G_{n\alpha}^{(+)}(\omega, k) = \frac{1}{2\pi T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varpi e^{2n\pi v_s^2} \times \\ & \times \left((\delta(\varpi - \omega_0) + \delta(\varpi + \omega_0)) - k^2 r_s^2 \times \right. \\ & \times (\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)) 2a + k^2 r_s^2 \times \\ & \times (\delta(\omega - 2\omega_0) + \delta(\omega + 2\omega_0)) b \left. \left(-1 - \frac{\omega}{\varpi - \omega - i0} \right) \right). \end{aligned} \quad (67)$$

Після інтегрування по частотах ϖ маємо вираз

$$\begin{aligned} G^{(+)}(\omega, k)^\parallel &= \frac{\Omega^2}{4\pi} \left(\left(-1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \right) - 2ak^2r_s^2 \times \right. \\ & \times \left. \left(-1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \right) + bk^2r_s^2 \left(-1 - \frac{\omega^2}{4\omega_0^2 - \omega^2} \right) \right), \end{aligned} \quad (68)$$

що призведе до дисперсійного рівняння

$$k^2 \Omega^2 r_s^2 \left(2a \left(\frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega_{\parallel}(k)^2} \right) - b \left(\frac{4\omega_0^2}{4\omega_0^2 - \omega_{\parallel}(k)^2} \right) \right) - \frac{\omega_{\parallel}(k)^2}{\omega_0^2 - \omega_{\parallel}(k)^2} \Omega^2 - \varepsilon_{\infty} \omega_{\parallel}(k)^2 = 0. \quad (69)$$

Розв'язок (69) має три гілки

$$\omega_{\parallel 1}(k) = 0, \omega_{\parallel 2}(k) = \pm \sqrt{\omega_0^2 + \Omega^2}, \omega_{\parallel 3}(k) = \pm 2\omega_0. \quad (70)$$

Головний результат (70) – окрім стандартного догхвильового поздовжнього фонуна $\omega_{\parallel 2}(k) = \sqrt{\omega_0^2 + \Omega^2}$, з'являється нескінченна серія гармонік (при врахуванні всіх членів суми (40)), починаючи з подвоєної частоти ґратки $\omega_{\parallel 3}(k) = 2\omega_0$.

Окремо треба сказати, що отримані нові моди схожі на другу гармоніку, тобто на нелінійний ефект, що зазвичай впливає з нелінійних рівнянь руху, але рівняння (26) лінійне.

Якщо розглянути граничний випадок, коли період коливань ґратки значно перевершує характерний час процесу, що вивчається, тобто $\omega_0 \ll \omega$, то слід розкласти тригонометричні функції у залежностях (34) і ми отримуємо

$$r_{an}(t) = r_{an} + v_{an} \omega_0 t / \omega_0, v_{an}(t) = v_{an}, \quad (71)$$

що поверне нас до відомої картини максвеллівської плазми із загасанням [8, 22].

5. Висновки

Таким чином, узагальнено закони дисперсії для фонон-поляритонів і поздовжніх оптичних фононів у макроскопічній моделі двохатомного іонного кристала. Так, у наближенні, що враховує другий доданок розвинення по середньоквадратичному відхиленню гармонічного осцилятора від рівноваги, отримано нову гілку поздовжнього оптичного фонуна з частотою, що збігається з другою гармонікою осциляцій ґратки, а для поперечного випадку знайдено два верхні фонон-поляритони. Передбачено наявність нескінченної серії фонон-поляритонів і поздовжніх оптичних фононів, що виникають аналогічно модам Бернштейна у замагніченій плазмі. Поперечна частота оптичних коливань ґратки знайдена в основному наближенні з

умови електростатичної рівноваги. Наведений розгляд узагальнив роботу [9], де не враховувався тепловий рух ґратки.

1. В.А. Володин, В.А. Сачков, ЖЭТФ **143**, 100 (2013). DOI: 10.7868/S0044451013010100.
2. V. Conti Nibali, G. D'Angelo, and M. Tarek, Phys. Rev. E **89**, 050301(R) (2014). DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.89.050301>.
3. Xue-jin Zhang, Ran-qi Zhu, Jun Zhao, Yan-feng Chen, and Yong-yuan Zhu, Phys. Rev. B **69**, 085118 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevB.69.085118.
4. S.-O. Katterwe, H. Motzkau, A. Rydh, and V.M. Krasnov, Phys. Rev. B **83**, 100510(R) (2011). DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.83.100510>.
5. Е.А. Виноградов, Б.Н. Маврин, Н.Н. Новикова, В.А. Яковлев, УФН **179**, 313 (2009). DOI: 10.3367/UFNr.0179.2009031.0313.
6. K. Huang, Proc. Roy. Soc. A **208**, 352 (1951).
7. M. Born and K. Huang, *Dynamical theory of crystal lattices* (Clarendon, Oxford, 1958).
8. А.Ф. Александров, Л.С. Богданкевич, А.А. Рухадзе, *Основы электродинамики плазмы* (Высшая школа, Москва, 1988).
9. А.А. Ступка, УФЖ **59**, 793 (2014).
10. B. Szigeti, Trans. Far. Soc. **45**, 155 (1949).
11. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Механика* (Наука, Москва, 1988).
12. А.С. Давыдов, *Теория твердого тела* (Наука, Москва, 1986).
13. А.И. Akhiezer, and S.V. Peletminsky, *Methods of Statistical Physics* (Pergamon Press, New York, 1981).
14. A. Sokolovsky and A. Stupka, in *Proceedings of the 12-th International Conference on Mathematical Methods of Electromagnetic Theory (MMET'12)* (Odesa, 2008), p. 262.
15. А.Г. Ситенко, *Электромагнитные флуктуации в плазме* (Харьков: Изд. ХГУ, 1965).
16. Ю.Л. Климонтович, *Кинетическая теория электромагнитных процессов* (Наука, Москва, 1980).
17. I.V. Bernstein, Phys. Rev. **109**, No. 1, 10 (1958).
18. R.A. Lyddane, R.G. Sachs, and E. Teller, Phys. Rev. **59**, 673 (1941).
19. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела* (Наука, Москва, 1978).
20. А.А. Ступка, УФЖ **58**, 865 (2013).
21. R. Fitzpatrick, *Introduction to Plasma Physics: A graduate level course* [http://plasma.fisica.unimi.it/matplasmidi/dispense_Fitz.pdf].
22. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Физическая кинетика* (Наука, Москва, 1979).

Одержано 25.12.14

A. A. Stupka

ДЛИННОВОЛНОВЫЕ
ОПТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ
В ДВУХАТОМНЫХ ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Резюме

Рассмотрены длинноволновые фононы-поляритоны и продольные оптические фононы как собственные волны электромагнитного поля в ионных кристаллах с двумя атомами в элементарной ячейке. Использована модель Хуана Куня для описания подрешеток точечных зарядов, которые осциллируют с частотой ω_0 . Обобщены законы дисперсии для оптических колебаний в кристаллах благодаря учету теплового движения зарядов. Во втором порядке по отношению среднеквадратичного отклонения к длине волны найдены дополнительный продольный фонон с частотой $2\omega_0$ и два верхних фонон-поляритона.

A. A. Stupka

LONG-WAVE OPTICAL
VIBRATIONS IN DIATOMIC
IONIC CRYSTALS

Summary

Long-wave phonon-polaritons and longitudinal optical phonons have been considered as eigenwaves of the electromagnetic field in ionic crystals with two atoms per unit cell. The Kun Huang model is used to describe the sublattices of point charges vibrating with the frequency ω_0 . The dispersion laws for optical vibrations in crystals are generalized, by considering the thermal motion of charges. An additional longitudinal phonon with the frequency $2\omega_0$ and two upper phonon-polaritons are found in the second-order approximation with respect to the ratio between the standard deviation and the wavelength.