А.А. СТУПКА

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

УДК 530.1

ВИСОКОЧАСТОТНІ ДОВГОХВИЛЬОВІ КОЛИВАННЯ В ІОННИХ КРИСТАЛАХ З ДВОМА АТОМАМИ В ЕЛЕМЕНТАРНІЙ КОМІРЦІ

Розглянуто довгохвильові високочастотні електромагнітні коливання в іонному кристалі з двома атомами в елементарній комірці. Використано модель вільних точкових зарядів у самоузгодженому електромагнітному полі у діелектричному середовищі. Показано шляхом порівняння з табличними даними, що частота поздовжніх фононів є відношенням іонної плазмової частоти до кореня з високочастотної діелектричної проникності. Також отримано стандартний закон дисперсії верхньої гілки фонон-поляритонів.

Ключові слова: довгохвильові коливання, фонон-поляритон, іонна плазмова частота.

Важливість урахування електромагнітної взаємодії при розгляді довгохвильових акустичних коливань у твердому тілі показано у [1] (також див. [2]). Оптичні коливання також виникають за участю електромагнітної взаємодії. Розглянемо довгохвильові коливання в іонному кристалі з двома атомами в елементарній комірці. Як відомо [3], в такому діелектрику можливі акустичні та оптичні коливання, причому останні можуть взаємодіяти з електромагнітним полем (поперечні), породжуючи поляритони. Оптичні коливання є високочастотними для іонів (характерна частота – плазмова іонна), що дозволяє вважати останні вільними зарядами. Сили пружності пропорційні градієнтам зміщень, чим у довгохвильовому наближенні нехтується. Тепловим рухом іонів тим більше можна знехтувати, оскільки швидкість теплового руху менша від швидкості акустичних хвиль. Загасання враховувати не будемо. Вивчатимемо малі коливання в немагнітних середовищах, тоді можна відразу опустити нелінійну магнітну частину сили Лоренца. Запишемо лінеаризовані рівняння руху для іонів [4] у вказаній моделі:

$$\partial \mathbf{v}_+/\partial t = Ze\mathbf{E}/M_+, \tag{1}$$

$$\partial \mathbf{v}_-/\partial t = -Ze\mathbf{E}/M_-. \tag{2}$$

Тут знак $\pm$ відповідає заряду, $M_\pm$ – маси відповідно позитивно і негативно заряджених іонів, Ze – заряд. Після лінеаризації повна похідна за часом збігається з частинною. Самоузгоджене електромагнітне поле повинне задовольняти рівняння Максвелла в діелектрику:

$$\partial \mathbf{D}/\partial t = c \operatorname{rot} \mathbf{B} - 4\pi \mathbf{j}, \tag{3}$$

$$\partial \mathbf{B}/\partial t = -c \operatorname{rot} \mathbf{E}. \tag{4}$$

Тут запроваджено діелектричну індукцію [5]:

$$D_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta} E_\beta, \tag{5}$$

яка у наближенні малих коливань лінійно пов'язана з напруженістю електричного поля $\mathbf{E}$. Для простоти розглянемо ізотропний діелектрик без дисперсії, тоді тензор діелектричної проникності $\varepsilon_{\alpha\beta}$ редукується в скаляр. У викладеному наближенні густина струму іонів певного знака виражається через середні швидкості так:

$$\mathbf{j}_\pm = \pm Zen_0 \mathbf{v}_\pm, \tag{6}$$

де n_0 – рівноважна густина іонів. Під час вивчення високочастотних коливань природно використати високочастотну діелектричну проникність ε_∞, яка описує електронну поляризацію. Тоді рівняння Максвелла для самоузгодженого електромагнітного поля (3), (4) виглядатимуть таким чином:

$$\partial \varepsilon_\infty \mathbf{E}/\partial t = c \operatorname{rot} \mathbf{B} - 4\pi Zen_0 (\mathbf{v}_+ - \mathbf{v}_-), \tag{7}$$

$$\partial \mathbf{B}/\partial t = -c \operatorname{rot} \mathbf{E}. \tag{8}$$

Ми отримали замкнену систему рівнянь (1), (2), (7) і (8) для пов'язаних високочастотних довгохвильових коливань іонної ґратки і самоузгодженого електромагнітного поля. Продиференціюємо за часом рівняння (7) і підставимо часові похідні з (1), (2) і (8):

$$\partial^2 \varepsilon_\infty \mathbf{E}/\partial t^2 = -c^2 \operatorname{rotrot} \mathbf{E} - 4\pi Z^2 e^2 n_0 \mathbf{E}/M. \tag{9}$$

Тут запроваджено зведену масу комірки кристала $M = \frac{M_+ M_-}{M_+ + M_-}$. Маємо хвильове рівняння для напруженості електричного поля. У (9) зручно перейти до фур'є-компонент за правилом

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \int d^3k d\omega \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{kx} - i\omega t}/(2\pi)^4. \tag{10}$$

Розділимо поле на потенціальну і вихрову частини $\mathbf{E} = \mathbf{E}^\perp + \mathbf{E}^\parallel$. Тоді з (9) отримаємо лінійні однорідні алгебраїчні рівняння

$$-\omega^2 \varepsilon_\infty \mathbf{E}^\perp = -c^2 k^2 \mathbf{E}^\perp - 4\pi Z^2 e^2 n_0 \mathbf{E}^\perp / M, \tag{11}$$

$$-\omega^2 \varepsilon_\infty \mathbf{E}^\parallel = -4\pi Z^2 e^2 n_0 \mathbf{E}^\parallel / M. \tag{12}$$

З рівняння (11) отримуємо закон дисперсії високочастотних фонон-поляритонів:

$$\omega^2 = c^2 k^2 / \varepsilon_\infty + 4\pi Z^2 e^2 n_0 / \varepsilon_\infty M. \tag{13}$$

Рівняння (13) переходить у фотонну гілку для великих k. Цей розв'язок збігається із загальновідомим (див., наприклад, [3] (12.8)). Низькочастотні фонон-поляритони не потрапляють у рамки нашого наближення. З (12) отримана частота поздовжніх коливань

$$\omega_L^2 = 4\pi Z^2 e^2 n_0 / \varepsilon_\infty M, \tag{14}$$

яка відноситься до поздовжніх фононів. Для зіставлення з табличним значенням частоти $\omega_L^{\rm tabl}$ зручно перейти у виразі (14) від густини іонів одного знака до густини маси кристала ρ: $\frac{n_0}{M} = \frac{\rho}{M_+ M_-}$. Тоді можна записати

$$\omega_L = 1{,}70156\, Z \sqrt{\frac{\rho}{\varepsilon_\infty M_+ M_-}}\, 10^{-9}\ \text{с}^{-1}. \tag{15}$$

Для порівняння використаємо дані табл. 5.1 з [6] для діелектричної проникності на оптичних частотах ε_∞ і значення частоти поздовжніх коливань $\omega_L^{\rm tabl}$. Значення густини ρ відповідних іонних кристалів узято з роботи [7].

Як видно з таблиці, маємо добру відповідність значень, отриманих по формулі (15), з відомими [6]. Звичайно, для іонів більшого радіуса модель точкових зарядів працює гірше. Таким чином, показано, що верхні гілки фонон-поляритонів і поздовжні фонони за своєю природою є плазмовими коливаннями [4, 8] в середовищі.

Поздовжні оптичні частоти деяких іонних кристалів

Кристал	ρ, г·см$^{-3}$	ε_∞	$\omega_L^{\rm tabl}$, 10^{13} с$^{-1}$	ω_L, 10^{13} с$^{-1}$
LiH	0,78	3,6	21	18,1
LiF	2,64	1,9	12	10,5
LiCl	2,07	2,7	7,5	5,72
NaF	2,79	1,7	7,8	6,28
MgO	3,58	2,95	14	11,5

1. Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах* (Мир, Москва, 1965).
2. A.A. Stupka, Metallofizika i Noveishie Tekhnologii **34**, 605 (2012).
3. А.С. Давыдов, *Теория твёрдого тела* (Наука, Москва, 1986).
4. *Электродинамика плазмы*, под ред. А.И. Ахиезера (Наука, Москва, 1974).
5. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред* (Наука, Москва, 1982).
6. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела* (Наука, Москва, 1978).
7. В.А. Рабинович, З.Я. Хавин, *Краткий химический справочник* (Химия, Ленинград, 1978).
8. A.I. Sokolovsky, A.A. Stupka and Z.Y. Chelbaevsky, Ukr. Fiz. Zh. **55**, 20 (2010).

Одержано 14.11.12

А.А. Ступка

ВЫСОКОЧАСТОТНЫЕ ДЛИННОВОЛНОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ С ДВУМЯ АТОМАМИ В ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКЕ

Р е з ю м е

Рассмотрены длинноволновые высокочастотные электромагнитные колебания в ионном кристалле с двумя атомами в элементарной ячейке. Использована модель свободных точечных зарядов в самосогласованном электромагнитном поле в диэлектрической среде. Показано путем сравнения с табличными данными, что частота продольных фононов является отношением ионной плазменной частоты к корню из высокочастотной диэлектрической проницаемости. Также получен стандартный закон дисперсии верхней ветви фонон-поляритонов.

A.A. Stupka

LONG-WAVE HIGH-FREQUENCY OSCILLATIONS IN IONIC CRYSTALS WITH TWO ATOMS IN ELEMENTARY CELL

S u m m a r y

Long-wave high-frequency electromagnetic oscillations in an ionic crystal with two atoms in an elementary cell have been considered in the framework of a self-consistent model for free point charges in the electromagnetic field in a dielectric medium. The frequency of longitudinal phonons is shown to equal the ionic plasma frequency divided by the square root of the high-frequency dielectric permittivity. The standard dispersion law for the upper phonon-polariton branch is obtained.