

А.А. СТУПКА

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

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

УДК 530.1

Розглянуто довгохвильові високочастотні електромагнітні коливання в іонному кристалі з двома атомами в елементарній комірниці. 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 комірниці. 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:

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

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

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 електро-

магнітне поле повинне задовольняти рівняння Максвелла в діелектрику:

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

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

Тут запроваджено діелектричну індукцію [5]:

$$D_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha\beta} E_{\beta}, \quad (5)$$

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:

$$\mathbf{j}_{\pm} = \pm Z e n_0 \mathbf{v}_{\pm}, \quad (6)$$

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:

$$\partial \varepsilon_{\infty} \mathbf{E} / \partial t = c \operatorname{rot} \mathbf{B} - 4\pi Z e n_0 (\mathbf{v}_+ - \mathbf{v}_-), \quad (7)$$

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

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):

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

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

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

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

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

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

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

$$\omega^2 = c^2 k^2 / \varepsilon_\infty + 4\pi Z^2 e^2 n_0 / \varepsilon_\infty M. \quad (13)$$

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

$$\omega_L^2 = 4\pi Z^2 e^2 n_0 / \varepsilon_\infty M, \quad (14)$$

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

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

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

Як видно з таблиці, маємо добру відповідність значень, отриманих по формулі (15), з відомими

Поздовжні оптичні частоти деяких іонних кристалів

Кристал	$\rho, \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$	ε_∞	$\omega_L^{\text{tabl}}, 10^{13} \text{ c}^{-1}$	$\omega_L, 10^{13} \text{ c}^{-1}$
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

[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.

1. Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах* (Мир, Москва, 1965).
2. А.А. 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. А.І. Sokolovsky, А.А. 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

Резюме

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.

А.А. Stupka

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

Summary

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.