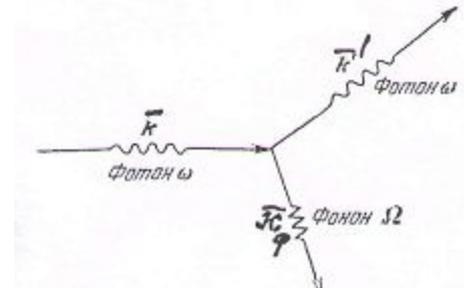


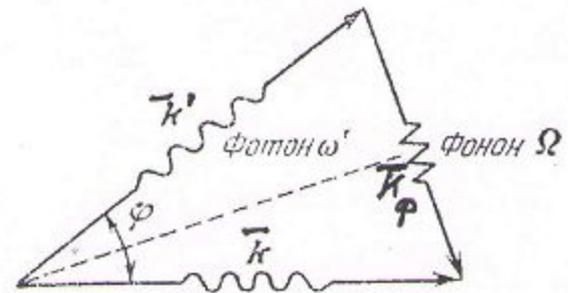
# ФОНОНЫ И КОЛЕБАНИЯ РЕШЕТКИ

## Неупругое рассеяние фотонов на акустических фононах

$$\hbar \omega = \hbar \omega' + \hbar \Omega$$
$$\hbar \vec{k} = \hbar \vec{k}' + \hbar \vec{K}_\phi$$

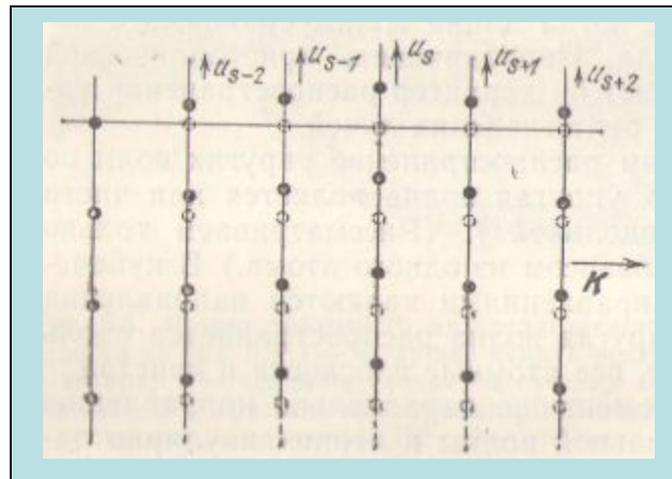
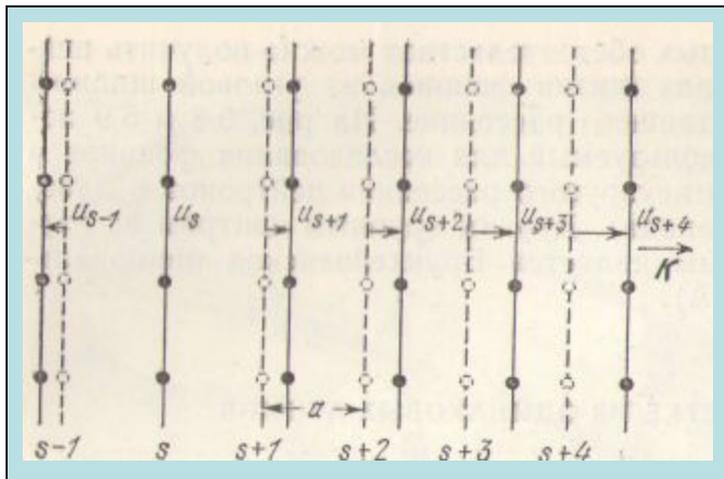


$$\Omega = \mathcal{V}_s K_\phi \approx \frac{2\mathcal{V}_s \omega n}{c} \sin(\varphi / 2)$$



# КОЛЕБАНИЯ В РЕШЕТКЕ ОДИНАКОВЫХ АТОМОВ

## Закон дисперсии



$$F_s = \sum_p C_p (u_{s+p} - u_s), \quad u_{s+p} = u e^{i(s+p)ka} e^{-i\omega t}$$

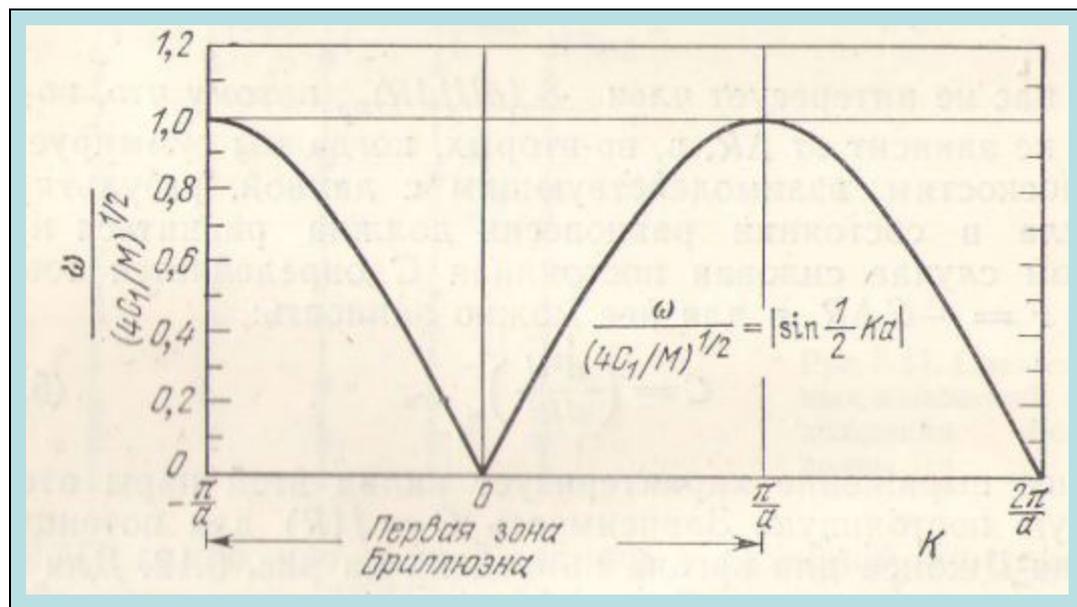
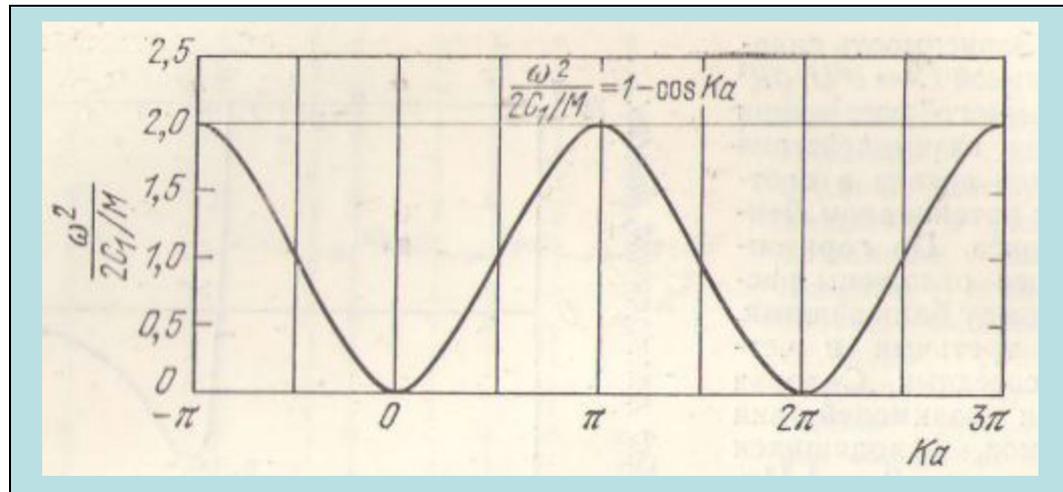
$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{p>0} C_p (1 - \cos pka)$$

# КОЛЕБАНИЯ В РЕШЕТКЕ ОДИНАКОВЫХ АТОМОВ

## Закон дисперсии

$$\omega^2 = \frac{4C_1}{M} \sin^2 \frac{ka}{2}$$

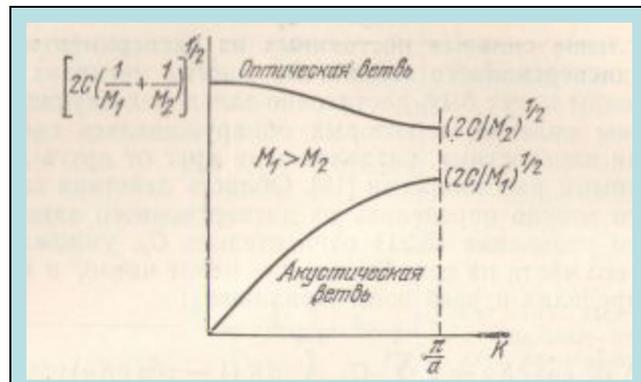
$$\omega = \left( \frac{4C_1}{M} \right)^{1/2} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$



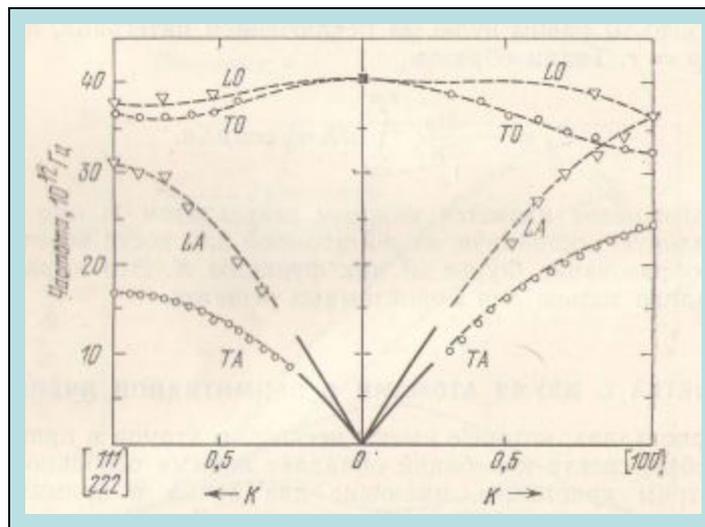
# РЕШЕТКА С ДВУМЯ АТОМАМИ В ПРИМИТИВНОЙ ЯЧЕЙКЕ

## Двухатомная решетка

Для каждого вида смещений (продольных и поперечных) при данном направлении распространения возникают две волны: *акустическая и оптическая*.



Экспериментальные дисперсионные кривые для алмаза в направлениях [100] и [110].



# РЕШЕТКА С ДВУМЯ АТОМАМИ В ПРИМИТИВНОЙ ЯЧЕЙКЕ

## Двухатомная кристаллическая структура

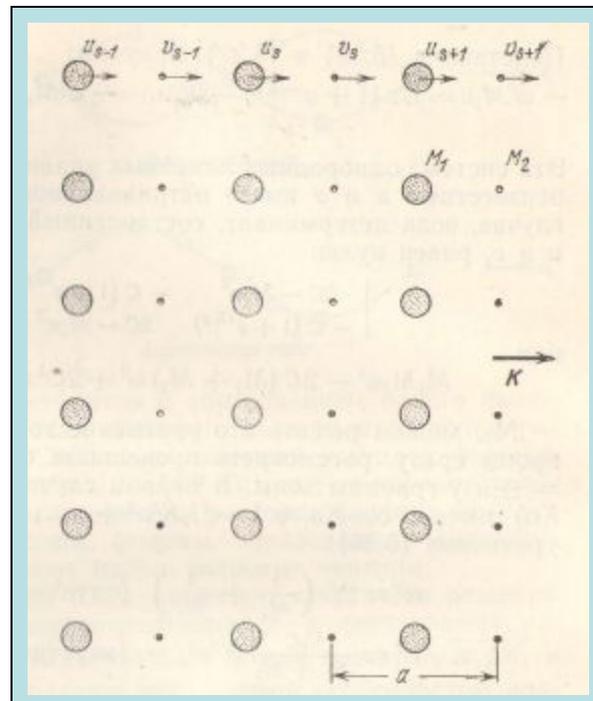
Уравнения движения

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s),$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_s - 2v_s)$$

Решение ищем в виде  
бегущих плоских волн

$$u_s = u e^{i s k a} e^{-i \omega t}, \quad v_s = v e^{i s k a} e^{-i \omega t}$$



# РЕШЕТКА С ДВУМЯ АТОМАМИ В ПРИМИТИВНОЙ ЯЧЕЙКЕ

## Двухатомная кристаллическая структура

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1\omega^2 & -C(1 + e^{-ika}) \\ -C(1 + e^{ika}) & 2C - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$M_1M_2\omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos ka) = 0$$

**Предельные случаи:**

$$ka \ll 1$$

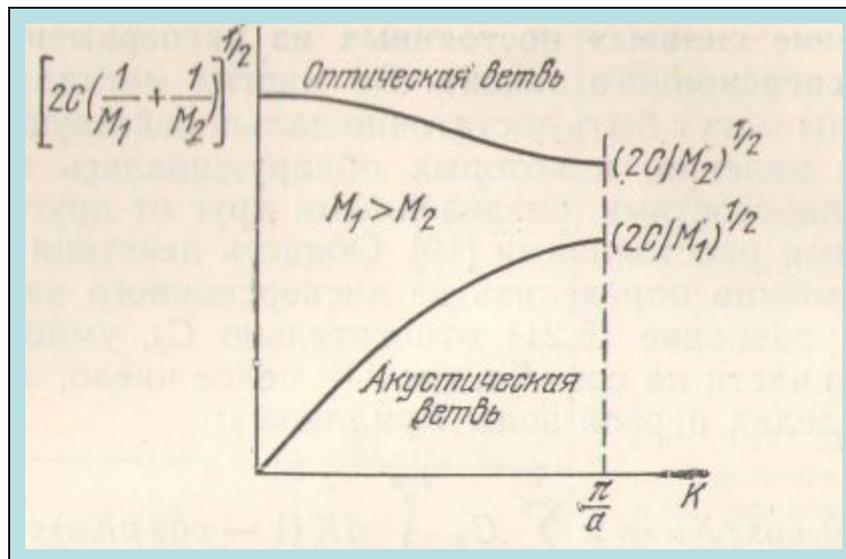
$$\omega^2 \approx 2C \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{оптическая ветвь})$$

$$\omega^2 \approx \frac{(1/2)C}{M_1 + M_2} k^2 a^2 \quad (\text{акустическая ветвь})$$

$$k_{\max} = \pm \pi / a$$

$$\omega^2 = 2C / M_1, \quad \omega^2 = 2C / M_2$$

# РЕШЕТКА С ДВУМЯ АТОМАМИ В ПРИМИТИВНОЙ ЯЧЕЙКЕ



$$ka \ll 1$$

$$\omega^2 \approx 2C \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{оптическая ветвь})$$

$$\omega^2 \approx \frac{(1/2)C}{M_1 + M_2} k^2 a^2 \quad (\text{акустическая ветвь})$$

$$k_{\max} = \pm \pi / a$$

$$\omega^2 = 2C / M_1, \quad \omega^2 = 2C / M_2$$

# ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА В ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

Дипольный момент единицы объема

$$P = Ne(u - v) = \frac{Ne^2 / \mu}{\omega_T^2 - \omega^2} E$$

Частотная зависимость диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2} [\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)]$$

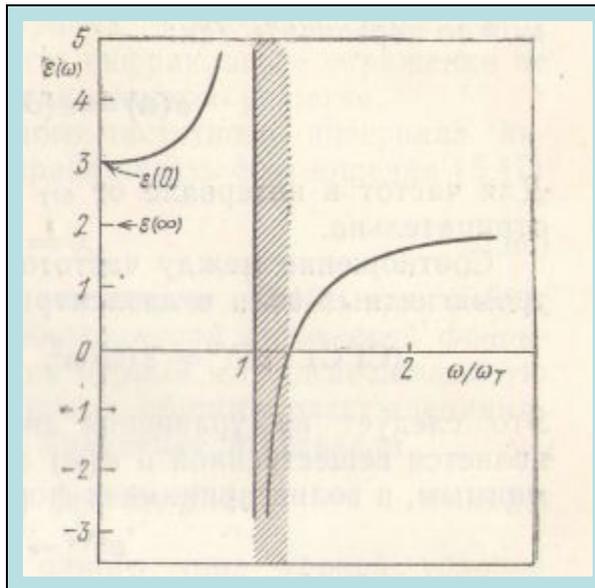


График зависимости  $\varepsilon(\omega)$

$\varepsilon(\omega) < 0$  в интервале частот между полюсом функции  $\varepsilon(\omega)$  и нулем этой функции.

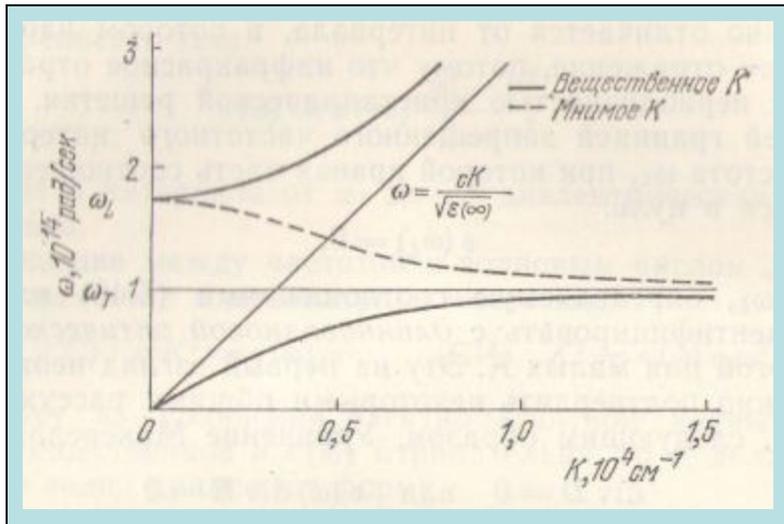
# НУЛИ И ПОЛЮСЫ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ

Электромагнитные волны не могут распространяться в запрещенной области частот

$$\omega_T^2 < \omega^2 < \omega_L^2 = \omega_T^2 \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)}$$

Соотношение Лиддейна-Сакса-Теллера

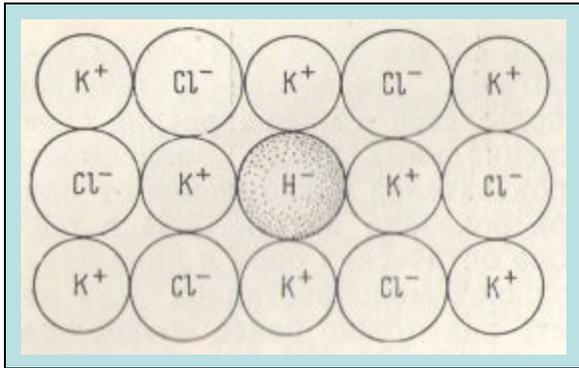
$$\frac{\omega_T^2}{\omega_L^2} = \frac{\varepsilon(\infty)}{\varepsilon(0)}$$



Связанные колебания фотонов и поперечных оптических фононов в ионном кристалле.

Тонкая горизонтальная линия – колебания частоты  $\omega_T$ . Тонкая линия с  $\omega = cK / \sqrt{\varepsilon(\infty)}$  соответствует электромагнитным волнам в кристалле.

# ЛОКАЛЬНЫЕ ФОНОННЫЕ КОЛЕБАНИЯ



Уравнения движения для решетки

$$M' \frac{d^2 u_0}{dt^2} = C(u_1 + u_{-1} - 2u_0),$$

$$M \frac{d^2 u_1}{dt^2} = C(u_2 + u_0 - 2u_1), \text{ и т.д.}$$

Смещение у границы зоны  
для невозмущенной решетки

$$u_s = u \cos s\pi e^{-i\omega t} = u(-1)^s e^{-i\omega t}$$

Смещение у границы зоны  
для нарушенной решетки

$$u_s = u_0 (-1)^s e^{-i\omega t} e^{-|s|\alpha}$$

Частота локальных колебаний

$$\omega^2 = \omega_{\max}^2 \frac{M^2}{2MM' - M'^2}, \quad \text{где } \omega_{\max} = (4C/M)^{1/2}$$