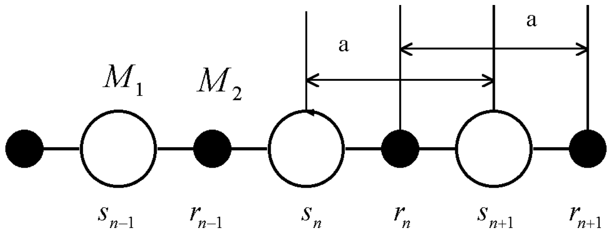
Dviatomės grandinėlės svyravimai

Šiame skyrelyje nagrinėsime vienmatės grandinėlės svyravimus tuo atveju, kai turime gardelę su baze, kurioje yra du skirtingi atomai. Tarkime jų masės M_1 ir M_2 yra tarpusavyje nelygios. Atomų poslinkius nuo pusiausvyros padėties žymėsime s_n ir r_n atitinkamai. Indeksas n žymi n-tojo narvelio mazgą, tad gardelės konstanta a bus atstumas tarp tos pačios rūšies atomų, o ne tarp gretimų skirtingų. Paprastumo dėliai naudosimės taip vadinamu artimiausių kaimynų modeliu, t.y. įskaitysime jėgos konstantas tik tarp artimiausių atomų $C_1 = C$. Kiekvienas atomas bus apsuptas priešingos rūšies atomais, tad jėgos išraišką artimiausių kaimynų modelyje galime užrašyti taip



$$F_n^s = -C(2s_n - r_{n-1} - r_n) \qquad (6.\mathbf{1})$$

vienos rūšies atomams ir

$$F_n^r = -C(2r_n - s_n - s_{n+1}) \qquad (6.\mathbf{2})$$

kitos rūšies atomams, esantiems n-tame narvelyje. Niutono judėjimo lygtys taip pat bus skirtingos kiekvienos rūšies atomams

$$\begin{aligned} M_1 \frac{d^2 s_n}{dt^2} &= -C(2s_n - r_{n-1} - r_n) \\ M_2 \frac{d^2 r_n}{dt^2} &= -C(2r_n - s_n - s_{n+1}) \end{aligned} \qquad (6.\mathbf{3})$$

Sprendinio vėl gi ieškosime harmoninės bangos pavidale, tik su skirtingomis amplitudėmis

$$\begin{aligned} s_n &= Ae^{ikna}e^{-i\omega t} \\ r_n &= Be^{ikna}e^{-i\omega t} \end{aligned} \qquad (6.\mathbf{4})$$

Amplitudės A ir B tarpusavyje bendru atveju nelygios. Jos gali būti netgi kompleksinės, t.y. turėti kažkokią fazę $A = |A|e^{i\varphi}$.

Įstatę išraišką (6.4) į lygtį (6.3), gausime tokią dviejų algebrinių lygčių sistemą

$$\begin{aligned} -\omega^2 M_1 A &= -C(2A - Be^{-ika} - B) \\ -\omega^2 M_2 B &= -C(2B - A - Ae^{ika}) \end{aligned} \qquad (6.\mathbf{5})$$

Čia mes nuprastinome eksponentes, kadangi jos niekuomet nelygios nuliui. Tvarkingai perrašykime šią lygčių sistemą, perkeldami narius į vieną pusę

$$\begin{aligned} &\left(2C - \omega^2 M_1\right)A - C\left(1 + e^{-ika}\right)B = 0 \\ &-C\left(1 + e^{ika}\right)A + \left(2C - \omega^2 M_2\right)B = 0 \end{aligned} \qquad (6.\mathbf{6})$$

Turime homogeninę (vienlytę) lygčių sistemą. Ji turi netrivialų (t.y. nelygų nuliui) sprendinį tik tada kai jos determinantas lygus nuliui

$$\left(2C - \omega^2 M_1\right)\left(2C - \omega^2 M_2\right) - C^2\left(1 + e^{ika}\right)\left(1 + e^{-ika}\right) = 0 \qquad (6.\mathbf{7})$$

Toliau mums belieka sutvarkyti šią lygtį sudauginant visus skliaustus ir surenkant narius prie vienodų ω laipsnių. Gausime ketvirto laipsnio lygtį dėl ω (arba antro laipsnio dėl ω^2)

$$\omega^4 - 2C\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\omega^2 + \frac{4C^2}{M_1 M_2}\sin^2\frac{ka}{2} = 0 \qquad (6.\mathbf{8})$$

Galime užrašyti du sprendinius

$$\begin{aligned} \omega_A^2 &= C\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\left\{1 - \sqrt{1 - 4\frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}\sin^2\frac{ka}{2}}\right\} \\ \omega_O^2 &= C\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\left\{1 + \sqrt{1 - 4\frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}\sin^2\frac{ka}{2}}\right\} \end{aligned} \qquad (6.\mathbf{9})$$

Ištraukę šaknį turėsime dvi priklausomybes $\omega_A = \omega_A(k)$ ir $\omega_O = \omega_O(k)$.

<u>Akustinės ir optinės modos</u>. Priklausomybę (6.9) naudinga nusipiešti, bet prieš tai ištirkime jų elgesį kai $ka \to 0$ ir $ka \to \pm\pi$. Mažiems *k*, bus maža ir sinuso vertė, tad galime pasinaudoti šia formule

$$\sin x \underset{x\to 0}{\approx} x \text{ ir } \sqrt{1-x} \underset{x\to 0}{\approx} 1 - \frac{1}{2}x \qquad (6.\mathbf{10})$$

Tada, kai $ka \to 0$, turėsime

$$\sqrt{1 - 4\frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}\sin^2\frac{ka}{2}} \approx 1 - 2\frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}\cdot\left(\frac{ka}{2}\right)^2 \qquad (6.\mathbf{11})$$

Taigi

$$\begin{aligned} \omega_A^2(ka \to 0) &= \frac{C}{2(M_1 + M_2)}\cdot(ka)^2 \to 0 \\ \omega_O^2(ka \to 0) &= 2C\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} = 2C\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \end{aligned} \qquad (6.\mathbf{12})$$

Matome, kad vienas dažnis artėja į nulį, o kitas lieka konstanta, kuri niekada nelygi nuliui.

Imant kitą ribinę vertę ant Briliueno zonos krašto, t.y. kai $ka \to \pm\pi$; sinusas atėja į vienetą $\sin(\pm\frac{\pi}{2}) = \pm 1$ ir galime užrašyti, kad

$$\sqrt{1-4\frac{M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}} = \frac{\sqrt{(M_1-M_2)^2}}{M_1+M_2} = \frac{|M_1-M_2|}{M_1+M_2} \tag{6.13}$$

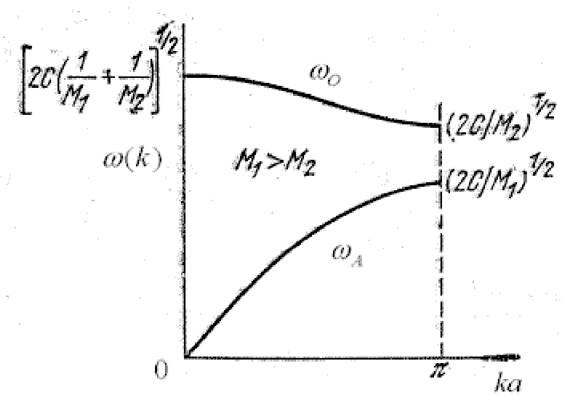
Mūsų dažnių išraiškos tuo atveju kai $M_1 > M_2$ bus

$$\begin{aligned} \omega_A^2(ka \to \pi) &= C\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}\cdot\frac{2M_2}{M_1+M_2} = \frac{2C}{M_1} \\ \omega_O^2(ka \to \pi) &= C\frac{M_1+M_2}{M_1M_2}\cdot\frac{2M_1}{M_1+M_2} = \frac{2C}{M_2} \end{aligned} \tag{6.14}$$

Jei $M_1 < M_2$, tai (6.14) išraiškoje M_1 ir M_2 reikia sukeisti vietomis. Abiejų dažnių vertės nelygios nuliui ir nelygios viena kitai. Atstumas tarp abiejų dažnių bus

$$\omega_O - \omega_A = \sqrt{\frac{2C}{M_2}} - \sqrt{\frac{2C}{M_1}} = \sqrt{2C}\left(\sqrt{\frac{1}{M_2}} - \sqrt{\frac{1}{M_1}}\right) \tag{6.15}$$

Dabar nusipieškime dažnių priklausomybes nuo bangos vektoriaus.



Matome, kad dažniai sudaro dvi baigtinio pločio nesikertančias juostas. Tarp tų juostų yra sritis, kurioje jokių dažnių nėra. Ši sritis vadinama draustine dažnių (energijų) juosta. Abi dažnių juostos vadinamos *šakomis* arba *modomis*. ω_A vadinama akustine, o ω_O optine moda (šaka). Iš paveikslėlio matome, kad akustinės šakos svyravimai panašūs į mūsų anksčiau nagrinėtus vienmatės grandinėlės virpesius (garso bangas), todėl jie ir vadinami akustiniais. Optinė šaka nepanaši į jokius anksčiau nagrinėtus virpesius. Jos dispersijos dėsnio kreivė turi maksimumą kai $ka = 0$. Taigi turime kokybiškai naują rezultatą. Ir iš tikruju naudojantis (6.6) pirma lygtimi, kai $ka = 0$ galime užrašyti

$$\frac{A}{B} = \frac{2C}{2C - \omega^2(0)M_1} \tag{6.16}$$

Akustiniams svyravimams $\omega(0) = 0$ ir galime užrašyti

$$\frac{A_A}{B_A} = 1, \tag{6.17}$$

t.y. abiejų rūšių atomai juda ta pačia faze (sinfaziškai), tuo jie panašūs į ilgabangius svyravimus. Optiniams svyravimams rezultatas visiškai kitoks

$$\frac{A_O}{B_O} = \frac{2CM_2}{2CM_2 - 2C(M_1 + M_2)} = -\frac{M_2}{M_1} \tag{6.18}$$

Taigi gretimi atomai juda nevienodimis amplitudėmis ir svarbiausia priešingomis fazėmis, kai $ka = 0$. Jei šie atomai yra priešingų ženklų jonai, tai tokie svyravimai galėtų būti efektyviai žadinami išoriniu elektriniu lauku. Todėl šie svyravimai vadinami optiniais. Draustinių dažnių juostos plotis apibrėžiamas (6.15) formule.

Svyravimai gali būti tiek skersiniai, tiek išilginiai. Jiems naudojami tokie pažymėjimai: TA – skersiniai akustiniai, TO – skersiniai optiniai, LA – išilginiai akustiniai ir LO – išilginiai optiniai svyravimai. Galima pastebėti, kad trimačiuose kristaluose visada yra trys akustinės šakos: dvi skersinės ir viena išilginė. Optinių šakų skaičius priklauso nuo to kiek atomų yra elentariame narvelyje. Jei jų yra *r*, tai optinių šakų bus *3(r-1)*. Viso bus *3r* svyravimų šakų, iš kurių trečdalis išilginės. Jei nusipieštume visas kreives, tai pamatytume, kad skersiniams ir išilginiams svyravimamas jos nevienodai pasvirę. Taip yra dėl to, kad skersiniai svyravimai susiję su šlyties moduliu, o išilginiai – su tamprumo moduliu. Tamprumo modulis didesnis už šlyties modulį, todėl skersiniai virpesiai sklinda lėčiau už išilginius.