

Низкочастотная динамика кубических кристаллов с взаимодействием вторых соседей

Е. В. Манжелей, Е. С. Сыркин

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина 47
E-mail: emanzheli@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 28 апреля 1999 г., после переработки 12 июля 1999 г.

Исследовано влияние взаимодействия со вторыми соседями на дисперсионные характеристики простой кубической, объемно-центрированной и гранецентрированной решеток. Показано, что учет этого взаимодействия существенно влияет на динамические характеристики указанных систем. В скалярной модели, описывающей одномагнитные возмущения в гейзенберговских магнитоупорядоченных системах, учет второй координационной сферы может приводить к возникновению минимума и дополнительного максимума на дисперсионных кривых внутри зоны Бриллюэна и к исчезновению расходимости плотности состояний. В векторных моделях кубических решеток при учете взаимодействия со вторыми соседями «параметр анизотропии» может существенно изменяться: в длинноволновом пределе две поперечные ветви могут совпадать или сильно отличаться друг от друга в зависимости от соотношения силовых констант взаимодействия между первыми и вторыми соседями.

Досліджено вплив взаємодії з другими сусідами на дисперсійні характеристики простої кубічної, об'ємно-центрованої та гранецентрованої ґраток. Показано, що врахування цієї взаємодії суттєво впливає на динамічні характеристики згаданих систем. В скалярній моделі, котра описує одномагнітні збудження у гейзенберґівських магнітоупорядкованих системах, врахування другої координаційної сфери може привести до виникнення мінімуму та додаткового максимуму на дисперсійних кривих усередині зони Бріллюэна та до зникнення розбіжності густини станів. У векторних моделях кубічних ґраток при врахуванні взаємодії з другими сусідами «параметр анізотропії» може суттєво змінюватись: у довгохвильовому випадку дві поперечні вітки можуть збігатися або сильно відрізнятися одна від одної в залежності від співвідношення силових констант взаємодії між першими та другими сусідами.

PACS: 63.20.-e, 63.20.Dj

Введение

При изучении спектров квазичастичных возбуждений чрезвычайно важно оценить эффективный радиус межатомного взаимодействия в исследуемых объектах. Даже при существовании лишь короткодействующих сил (например, описываемых потенциалом Леннарда-Джонса) учет взаимодействия только с ближайшими соседями оказывается в ряде случаев совершенно неудовлетворительным. Так, в динамике решетки векторные модели простого кубического (ПК) и объемно-центрированного кубического (ОЦК) кристаллов с таким взаимодействием являются просто неустойчивыми (см., например, [1]).

Учет следующих за ближайшими соседями позволяет получить целый ряд новых качественных результатов или значительно улучшить согласие с экспериментом. Например, учет вторых соседей позволяет описать волны изгиба в сильно анизотропных кристаллах [2]. Роль вторых соседей велика и при изучении спиновых волн в магнитоупорядоченных системах. Так, экспериментально показано [3], что в магнитных полупроводниках EuO , EuS обменные интегралы взаимодействия между первыми и вторыми соседями примерно одинаковы, в то время как обменные интегралы между третьими и более далекими соседями пренебрежимо малы, причем обменные интегралы между первыми и между вторыми соседями могут быть как одного, так и противоположных знаков.

В работах [4,5] показано, что при наличии взаимодействия, экспоненциально затухающего с расстоянием, важен учет ближайших соседей как при изучении колебательных возбуждений, так и спиновых волн. Роль ближайших соседей подчеркивалась при численных расчетах и экспериментальном изучении законов дисперсии ряда металлов с ОЦК структурой [6,7] и отвердевших инертных газов (гранцентрированная кубическая структура) [8].

В настоящей работе исследованы колебательные характеристики ПК, ОЦК и гранцентрированной (ГЦК) решеток при произвольном соотношении между константами взаимодействия первых и вторых соседей. Известно, что кубической симметрией обладает чрезвычайно широкий класс веществ: молекулярные кристаллы, металлы, сверхпроводники, магнитоупорядоченные системы и т.д.. Нами рассмотрены как векторные, так и скалярные (однокомпонентные) модели кубических решеток. Использование скалярной модели оправдано рядом причин. Так, результаты, полученные для этой модели, при соответствующей замене обозначений могут быть использованы при изучении спиновых волн в магнитоупорядоченных кристаллах. Кроме того, в реальных полуграниченных кристаллах могут существовать однокомпонентные поверхностные волны SH-типа (волны Гуляева—Блюстейна в пьезоэлектриках [9,10], волны Олдриджа—Гельфгата в обычных кристаллах [11,12]). Нами подробно рассмотрены те случаи, в которых учет взаимодействия со вторыми соседями качественно изменяет изучаемые характеристики, например, максимум на дисперсионной кривой смещается внутрь зоны Бриллюэна, расщепляются ветви колебаний, возникает или исчезает устойчивость решетки. Кроме того, проанализированы изменения упругих модулей кубических решеток за счет взаимодействия со вторыми соседями и связанные с этим изменения динамических свойств кубических решеток в длинноволновом пределе.

1. Матрицы силовых постоянных кубических решеток и связь этих постоянных с парным потенциалом

Согласно решеточно-динамической теории Борна—фон Кармана, силы взаимодействия между двумя атомами в одноатомном кристалле в гармоническом приближении имеют вид $\Phi_{ik}(n, n')u_k(n')$, что представляет собой силу, действующую на атом в n -м узле в i -м направлении, в то время как атом в n' -м узле сместился на расстояние $u(n')$ в k -м направлении. Таким образом, матрица Φ_{ik}

размерностью 3×3 представляет собой набор упругих констант взаимодействия между атомами в узлах n и n' . При учете взаимодействия между первыми и вторыми соседями матрицы $\Phi_{ik}^{nn'}$ для кубических решеток можно записать в следующем виде [1,6]:

— в случае ПК для ближайших соседей в узлах типа $a(100)$ и вторых соседей в узлах типа $a(110)$ (a — ребро куба):

$$\Phi_{ik}(0, a(1, 0, 0)) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_1 \end{pmatrix}$$

$$\text{и } \Phi_{ik}(0, a(1, 1, 0)) = \begin{pmatrix} \alpha_2 & \gamma_2 & 0 \\ \gamma_2 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_2 \end{pmatrix}; \quad (1)$$

— в случае ОЦК для ближайших соседей в узлах $\frac{a}{2}(111)$ и вторых соседей в узлах типа $a(100)$:

$$\Phi_{ik}\left(0, \frac{a}{2}(1, 1, 1)\right) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \beta_1 \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_1 \\ \beta_1 & \beta_1 & \alpha_1 \end{pmatrix}$$

$$\text{и } \Phi_{ik}(0, a(1, 0, 0)) = \begin{pmatrix} \alpha_2 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_2 \end{pmatrix}; \quad (2)$$

— в случае ГЦК для ближайших соседей в узлах $\frac{a}{2}(110)$ и вторых соседей в узлах типа $a(100)$:

$$\Phi_{ik}\left(0, \frac{a}{2}(1, 1, 0)\right) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & 0 \\ \gamma_1 & \alpha_1 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_1 \end{pmatrix}$$

$$\text{и } \Phi_{ik}(0, a(1, 0, 0)) = \begin{pmatrix} \alpha_2 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_2 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Анализируя расположение и количество первых и вторых соседей, можно заметить, что влияние вторых соседей в ГЦК кристалле должно быть меньше, чем в ПК или в ОЦК кристаллах. Действительно, хотя в ПК структурах вторые соседи (12 атомов) и расположены дальше, чем первые (6 атомов), но их вдвое больше. Открытая ОЦК структура имеет 6 вторых соседей на расстоянии только на 15% большем, чем 8 первых, тогда как плотноупакованная ГЦК структура имеет 8

вторых соседей, расположенных на 40% дальше, чем 12 первых.

Каждая из матриц (1), (2), (3) должна быть дополнена матрицей самодействия $\Phi_{ik}^{0,0}$ (условие трансляционной инвариантности) [1]:

$$\Phi_{ik}^{0,0} = \alpha_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где α_0 для различных решеток имеет следующий вид:

$$\alpha_0 = 2(\alpha_1 + 2\beta_1) + 4(\alpha_2 + 2\beta_2) \text{ в случае ПК; } (4)$$

$$\alpha_0 = 8\alpha_1 + 2(\alpha_2 + 2\beta_2) \text{ в случае ОЦК; } (5)$$

$$\alpha_0 = 4(\beta_1 + 2\alpha_1) + 2(\alpha_2 + 2\beta_2) \text{ в случае ГЦК. } (6)$$

Элементы силовой матрицы Φ_{ik}^{nr} могут быть связаны с производными парного потенциала. Пусть $f(|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}|)$ — потенциал парного взаимодействия между атомами, зависящий только от расстояния между ними (\mathbf{R}_n — радиус-вектор атома узла n). Полная потенциальная энергия решетки U имеет вид

$$U = \frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} f(|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}|). \quad (7)$$

Представим \mathbf{R}_n в виде $\mathbf{R}_n = \mathbf{r}_n + \mathbf{u}_n$, где \mathbf{r}_n — радиус-вектор n -го атома в равновесном состоянии; \mathbf{u}_n — его смещение. Тогда

$$U = \frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} f(|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'} + \mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n'}|) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{D} \neq 0} f(|\mathbf{D} + \mathbf{d}|), \quad (8)$$

где $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_{n'}$; $\mathbf{D} \equiv \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}$, $\mathbf{d} \equiv \mathbf{u}_{\mathbf{r}+\mathbf{D}} - \mathbf{u}_{\mathbf{r}}$. Разложим $f(|\mathbf{D} + \mathbf{d}|)$ в ряд по степеням \mathbf{d} до второго члена:

$$f(\mathbf{D} + \mathbf{d}) = f(\mathbf{D}) + f'(\mathbf{D})(\mathbf{v}\mathbf{d}) + \frac{1}{2} \left(f''(\mathbf{D}) - \frac{f'(\mathbf{D})}{D} \right) (\mathbf{v}\mathbf{d})^2 + \frac{1}{2} \frac{f'(\mathbf{D})}{D} \mathbf{d}^2, \quad (9)$$

где $D = |\mathbf{D}|$, а $\mathbf{v} = \mathbf{D}/D$.

Таким образом, полную энергию решетки можно представить в виде

$$U = U_0 + U_1 + U_2, \quad (10)$$

здесь

$$U_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{D}} f(\mathbf{D}) = N \sum_{\mathbf{D}} f(\mathbf{D}), \quad (11)$$

N — число атомов в кристалле;

$$U_1 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{D}} f'(\mathbf{D})(\mathbf{v}\mathbf{d}) = \sum_{\mathbf{D}} f'(\mathbf{D}) \sum_{\mathbf{r}} (\mathbf{v}\mathbf{d}) = 0; \quad (12)$$

$$U_2 = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{D}} \left\{ \left[f''(\mathbf{D}) - \frac{f'(\mathbf{D})}{D} \right] (\mathbf{v}\mathbf{d})^2 + \frac{f'(\mathbf{D})}{D} \mathbf{d}^2 \right\}. \quad (13)$$

(Отметим, что U_0 не зависит от \mathbf{d} , а обращение в нуль выражения (12) не означает, что $f'(\mathbf{D}) = 0$.)

Элементы силовой матрицы $\Phi_{ik}^{rr'}$ получаются из условия

$$\begin{aligned} \Phi_{ik}^{rr'} &= \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\mathbf{r}}^i \partial u_{\mathbf{r}'}^k} = \frac{\partial^2 U_2}{\partial u_{\mathbf{r}}^i \partial u_{\mathbf{r}'}^k} \\ &= \delta_{rr'} \sum_{\mathbf{D}} \left\{ f''(\mathbf{D}) v_i v_k - \frac{f'(\mathbf{D})}{D} (v_i v_k - \delta_{ik}) \right\} - \\ &- f''(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) v_i^{r-r'} v_k^{r-r'} + \frac{f'(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} (v_i^{r-r'} v_k^{r-r'} - \delta_{ik}). \end{aligned} \quad (14)$$

Итак, например, для ГЦК кристалла из (14) получаем следующие соотношения между силовыми постоянными (3) и производными парного потенциала:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= - \left(f''(\mathbf{D}) - \frac{f'(\mathbf{D})}{2D} \right), \\ \beta_1 &= - \frac{f'(\mathbf{D})}{D}, \quad \gamma_1 = - \left(f'' + \frac{f'(\mathbf{D})}{2D} \right), \\ \alpha_2 &= - f''(2\mathbf{D}), \quad \beta_2 = - \frac{f'(2\mathbf{D})}{2D}. \end{aligned} \quad (15)$$

Прежде чем перейти к конкретным расчетам, обратим внимание на то, что анализ динамических свойств в общем виде представляется довольно громоздким из-за большого количества независимых параметров. В настоящем сообщении ограничимся случаем центральных сил, т.е. будем считать $f'(D) = f'(2D) = 0$. Тогда количество независимых параметров для каждой из структур уменьшается до двух. Проанализируем роль вторых соседей, последовательно усложняя модель.

2. Дисперсионные соотношения для кубических решеток в скалярной модели

Рассмотрим влияние взаимодействия со вторыми соседями на дисперсионные соотношения решеток кубической симметрии в скалярной модели. Эта модель описывает колебания кристаллической ре-

шетки, в которой все атомы смещаются вдоль одного направления и смещение атома из равновесного положения описывается скалярной величиной. Как уже упоминалось, такая модель при соответствующей замене обозначений может описать одномагнитные состояния в магнитоупорядоченной среде [13].

Уравнение движения атомов в узле n кристаллической решетки в гармоническом приближении имеет вид

$$m \frac{\partial^2 u(n, t)}{\partial t^2} = - \sum_{n'} A(n, n') u(n', t). \quad (16)$$

Здесь силовая константа $A(n, n')$ представляет собой силу, действующую на атом, находящийся в узле n , если атом в узле n' смещен на отрезок единичной длины. При учете взаимодействия с двумя координационными сферами уравнение (16) примет вид

$$m \frac{\partial^2 u(n, t)}{\partial t^2} = - \sum_{\delta_1} A(n, n + \delta_1) u(n + \delta_1) - \sum_{\delta_2} A(n, n + \delta_2) u(n + \delta_2). \quad (17)$$

Здесь δ_1 и δ_2 соответствуют первой и второй координационным сферам.

Из условия периодичности кристаллической решетки следует

$$A(n, n') = A(n - n'). \quad (18)$$

А из условия инвариантности энергии кристалла относительно его смещения как целого вытекает

$$\sum_{\delta_i} A(n + \delta_i) = 0, \quad (i = 1, 2). \quad (19)$$

Учитывая периодичность решетки, ищем решение уравнения (17) в виде

$$u(n, t) = u \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)), \quad (20)$$

где $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ — волновой вектор; \mathbf{r} — радиус-вектор узла n . В результате уравнение (16) сведено к линейному уравнению

$$m\omega^2 u - A(\mathbf{k})u = 0, \quad (21)$$

здесь $A(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}} A(n) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$.

Теперь можно непосредственно перейти к рассмотрению дисперсионных соотношений для скалярных моделей кубических решеток. При этом подробно рассмотрим те высокосимметричные направления, вдоль которых максимум на дисперсионной кривой смещается внутрь зоны Бриллюэна, поскольку появление внутри сплошного спектра точки, в которой $\partial\omega/\partial k = 0$, является исключительно важным. Обсудим также те случаи, когда при учете взаимодействия со вторыми соседями решетка теряет устойчивость.

Простая кубическая решетка

В скалярной модели дисперсионное соотношение для ПК решетки с учетом первой и второй координационных сфер имеет вид

$$\lambda \equiv \frac{m\omega^2}{A_s} = 2(3 - \cos ak_x - \cos ak_y - \cos ak_z) + 4\theta_s(3 - \cos ak_x \cos ak_y - \cos ak_x \cos ak_z - \cos ak_y \cos ak_z), \quad (22)$$

где A_s — силовая константа взаимодействия с первыми соседями; $\theta_s = B_s/A_s$ — отношение силовой константы взаимодействия со вторыми соседями B_s к силовой константе взаимодействия с первыми соседями.

Исследуем устойчивость ПК решетки в скалярной модели при учете взаимодействия со вторыми соседями. Из приведенного выше дисперсионного соотношения (22) видно, что при $A_s > 0$ скалярная модель ПК решетки в отличие от векторной модели является устойчивой ($\omega^2 > 0$) уже при учете взаимодействия только с первыми соседями. Если константа взаимодействия со вторыми соседями отрицательна, то собственные частоты колебаний ПК решетки могут оказаться мнимыми, т.е. решетка в этом случае неустойчива. Покажем, что ПК решетка становится неустойчивой при $\theta_s < -1/4$. Считая θ_s параметром, определим значения волнового вектора, при которых разность между вкладами в квадрат частоты, обусловленными взаимодействием между первыми и вторыми соседями, максимальна. С этой целью найдем все стационарные точки функции $\lambda(k_x, k_y, k_z)$, т.е. точки, в которых обращаются в нуль все частные производные функции $\lambda(k_x, k_y, k_z)$. Далее определим, при каком минимальном значении $|\theta_s|$ в этих точках частота колебаний меньше нуля. Таким образом, необходимо решить систему трех тригонометрических уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial \lambda}{\partial k_x} = 2a \sin ak_x + 4\theta_s a \sin ak_x (\cos ak_y + \cos ak_z) = 0 \\ \frac{\partial \lambda}{\partial k_y} = 2a \sin ak_y + 4\theta_s a \sin ak_y (\cos ak_x + \cos ak_z) = 0 \\ \frac{\partial \lambda}{\partial k_z} = 2a \sin ak_z + 4\theta_s a \sin ak_z (\cos ak_x + \cos ak_y) = 0 \end{cases} \quad (23)$$

совместно с неравенством

$$\lambda(k_x, k_y, k_z) < 0. \quad (24)$$

В качестве примера определим несколько точек, удовлетворяющих системе уравнений (23), и найдем соответствующие им значения θ_s , при которых верно неравенство (24).

1. Пусть $\sin ak_x = 0$, $\cos ak_x = 1$, $\sin ak_y = 0$, $\cos ak_y = -1$, $\sin ak_z = 0$, $\cos ak_z = -1$.

В этом случае $\theta_s < -1/2$.

2. Пусть $\sin ak_x = 0$, $\cos ak_x = 1$, $\sin ak_y = 0$, $\cos ak_y = 1$, $\sin ak_z = 0$, $\cos ak_z = -1$.

Для этого случая $\theta_s < -1$.

3. Если $\sin ak_x = 0$, $\cos ak_x = 1$, $\sin ak_y \neq 0$, $\sin ak_z \neq 0$, то система уравнений (23) сводится к системе уравнений

$$\begin{cases} \sin ak_y + 2\theta_s \sin ak_y (1 + \cos ak_z) = 0 \\ \sin ak_z + 2\theta_s \sin ak_z (1 + \cos ak_y) = 0 \end{cases}$$

Решения этой системы уравнений имеют вид

$$\cos ak_y = \cos ak_z = \frac{1 + 2\theta_s}{2\theta_s}.$$

Из условий $\cos ak_y > -1$ и $\cos ak_z > -1$ получаем $\theta_s < -1/4$. Для приведенных в этом случае решений системы уравнений (23) и $\theta_s < -1/4$ функция $\lambda(k_x, k_y, k_z)$ меньше нуля.

Рассмотрев аналогичным образом все совместные решения системы уравнений (23) и неравенства (24) и выбрав наименьшее значение $|\theta_s|$, можно показать, что ПК решетка становится неустойчивой при $\theta_s < -1/4$.

Положение максимума на дисперсионной кривой и его величина могут зависеть от соотношения констант взаимодействия с первыми и вторыми соседями. Исследуем законы дисперсии ПК решетки вдоль высокосимметричных направлений в зависимости от параметра θ_s , при этом отметим направление, вдоль которого максимум на дисперсионной кривой смещается от границы зоны Бриллюэна.

Вдоль направления $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ закон дисперсии описывается выражением

$$\lambda = 2(1 - \cos ak) + 8\theta_s(1 - \cos ak). \quad (25)$$

Из соотношения (25) видно, что учет взаимодействия со вторыми соседями не нарушает монотонности закона дисперсии. Максимальная частота достигается на границе зоны. Для этого направления $\lambda_{m,k(1,0,0)} = 4 + 16\theta_s$. Здесь и везде в дальнейшем $\lambda_{m,k}$ — максимальное значение λ вдоль рассматриваемого направления.

Для направления $\mathbf{k} = k/\sqrt{2}(1, 1, 0)$ закон дисперсии имеет вид

$$\lambda = 4(1 - \cos ak) + 4\theta_s(3 - \cos^2 ak - 2 \cos ak). \quad (26)$$

В данном направлении максимум на дисперсионной кривой может смещаться внутрь зоны Бриллюэна только при тех значениях θ_s ($\theta_s < -1/4$), при которых, как показано выше, решетка становится неустойчивой. Таким образом, и для данного направления учет взаимодействия со вторыми соседями не нарушает монотонности закона дисперсии. В этом случае

$$\lambda_{m,k/\sqrt{2}(1,1,0)} = 8 + 16\theta_s.$$

Для $\mathbf{k} = k/\sqrt{3}(1, 1, 1)$ имеем

$$\lambda = 6(1 - \cos ak) + 6\theta_s(1 - \cos 2ak). \quad (27)$$

Если $\theta_s > 1/4$, то максимум на дисперсионной кривой смещается внутрь зоны Бриллюэна и достигается в точке $k_0 = (1/a) \arccos(-1/4\theta_s)$ и

$$\lambda_{m,k/\sqrt{3}(1,1,1)} = \frac{3 + 24\theta_s + 48\theta_s^2}{4\theta_s},$$

при $\theta_s < 1/4$ максимум на дисперсионной кривой находится на границе зоны Бриллюэна ($k_0 = \pi/a$) и $\lambda_{m,k/\sqrt{3}(1,1,1)} = 12$.

Таким образом, в направлении $\mathbf{k} = k/\sqrt{3}(1, 1, 1)$, в отличие от направлений $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ и $\mathbf{k} = k/\sqrt{2}(1, 1, 0)$, учет взаимодействия со вторыми соседями приводит к смещению максимума на дисперсионной кривой внутрь зоны Бриллюэна.

Объемноцентрированная кубическая решетка

Закон дисперсии ОЦК решетки в скалярной модели описывается выражением

$$\lambda \equiv \frac{m\omega^2}{A_b} = 8 \left(1 - \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} \right) + 2\theta_b(3 - \cos ak_x - \cos ak_y - \cos ak_z), \quad (28)$$

где A_b — силовая константа взаимодействия с первыми соседями; $\theta_b = B_b/A_b$ — отношение силовой константы взаимодействия со вторыми соседями B_b к силовой константе взаимодействия с первыми соседями.

Скалярная модель ОЦК решетки со взаимодействием только между ближайшими соседями в отличие от векторной модели является устойчивой. Неустойчивость этой модели может возникнуть при учете взаимодействия со вторыми соседями. Проведя анализ устойчивости ОЦК решетки аналогично анализу устойчивости ПК решетки, можно показать, что ОЦК решетка становится неустойчивой при $\theta_b < -2/3$.

Обратим также внимание на тот факт, что учет второй координационной сферы для ОЦК кристалла приводит к исчезновению расходимости плотности колебаний в середине спектра. Если учесть только взаимодействие между ближайшими соседями, то из (28) видно, что при $ak_x = \pi$ и любых значениях k_y и k_z (а также при циклической перестановке компонент волнового вектора) $\lambda = 8 = \lambda_{\max}/2$, где λ_{\max} — максимальное значение функции $\lambda(k)$ в случае учета только взаимодействия с первыми соседями. Следовательно, середине частотного спектра соответствует бесконечное множество состояний, что приводит к расходимости плотности состояний при $\lambda = \lambda_{\max}/2$ [13,14]. Из закона дисперсии (28) видно, что при учете взаимодействия со вторыми соседями эта нефизическая расходимость исчезает.

Учет взаимодействия со вторыми соседями может также существенно изменить вид дисперсионной кривой. Покажем это на примере высокосимметричных направлений.

В направлении $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ закон дисперсии описывается выражением

$$\lambda = 8 \left(1 - \cos \frac{ak}{2} \right) + 2\theta_b(1 - \cos ak). \quad (29)$$

В данном направлении при $\theta_b < 1$ величина $\lambda(k)$ достигает своего максимального значения на границе зоны Бриллюэна и $\lambda_{m,k(1,0,0)} = 16$. Если $\theta_b > 1$, то максимум на дисперсионной кривой

смещается внутрь зоны Бриллюэна и достигается в точке $k_0 = (2/a) \arccos(-1/\theta_b)$, а

$$\lambda_{m,k(1,0,0)} = 4 \frac{(1 + \theta_b)^2}{\theta_b}.$$

Для направления $\mathbf{k} = k/\sqrt{2} (1,1,0)$ закон дисперсии имеет вид

$$\lambda = 4(1 - \cos ak) + 4\theta_b(1 - \cos ak) \quad (30)$$

и $\lambda_{m,k/\sqrt{2}(1,1,0)} = 8 + 8\theta_b$. Видно, что для этого направления взаимодействие со вторыми соседями не нарушает монотонности закона дисперсии.

Вдоль направления $\mathbf{k} = k/\sqrt{3} (1,1,1)$ дисперсионное соотношение имеет вид

$$\lambda = 8(1 - \cos^3 ak/2) + 6\theta_b(1 - \cos ak). \quad (31)$$

В данном направлении $\partial\lambda/\partial k = 0$ в точках $k_1 = \pi/a$ и $\cos ak_2/2 = \theta_b$, а также на границах зоны Бриллюэна ($k_3 = 0, k_4 = 2\pi/a$). В точке k_1 функция $\lambda(k)$ принимает значение $\lambda(k_1) = 8 + 12\theta_b$, в точке k_2 $\lambda(k_2) = 8 + 12\theta_b - 4\theta^3$.

На верхней границе зоны Бриллюэна функция $\lambda(k)$ принимает значение $\lambda(k_4) = 16$.

Видно, что в области значений $-2/3 < \theta_b < 0$ дисперсионное соотношение (31) имеет максимум в точке k_2 и минимум в точке k_1 . Если $0 < \theta_b < 1$, то максимум на дисперсионной кривой находится внутри зоны Бриллюэна в точке k_1 , а минимум в

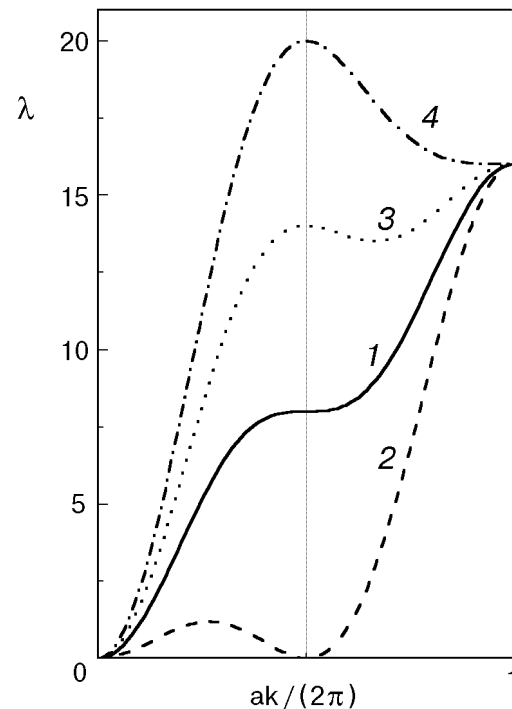


Рис. 1. Дисперсионные кривые ОЦК решетки, полученные в скалярной модели, вдоль направления [111] при различных значениях параметра θ_b : 0 (1); $-2/3$ (2); 0,5 (3); 1 (4).

точке k_2 . При $\theta_b > 1$ функция $\lambda(k)$ имеет максимум в точке k_1 и минимум на границе зоны Бриллюэна (см. рис. 1).

Таким образом, видно, что в ОЦК решетке, в отличие от ПК решетки, в направлении $\mathbf{k} = k\sqrt{3}(1,1,1)$ в области устойчивости решетки при учете как угодно малого взаимодействия со вторыми соседями может возникать не только дополнительный максимум, но и дополнительный минимум внутри зоны Бриллюэна. Кроме того, учет как угодно малого взаимодействия со вторыми соседями приводит к исчезновению расходимости плотности колебаний в середине фононного спектра.

Гранецентрированная кубическая решетка

Дисперсионное соотношение для ГЦК решетки имеет вид

$$\lambda \equiv \frac{m\omega^2}{A_f} = 4 \left(3 - \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} - \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_z}{2} - \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} \right) + 2\theta_f(3 - \cos ak_x - \cos ak_y - \cos ak_z), \quad (32)$$

где A_f — силовая константа взаимодействия с первыми соседями; $\theta_f = B_f/A_f$ — отношение силовой константы взаимодействия со вторыми соседями B_f к константе взаимодействия с первыми соседями.

При учете взаимодействия только с ближайшими соседями ГЦК решетка является устойчивой. При учете взаимодействия со вторыми соседями устойчивость скалярной модели ГЦК решетки может нарушаться. Проведя анализ устойчивости ГЦК решетки аналогично анализу устойчивости ПК решетки, можно показать, что ГЦК решетка становится неустойчивой при $\theta_f < -1$.

Также легко видеть, что положение максимума на дисперсионной кривой и его величина могут зависеть от соотношения констант взаимодействия с первыми и вторыми соседями. Проанализируем законы дисперсии ГЦК решетки (32) вдоль высокосимметричных направлений и покажем, что максимум на дисперсионной кривой при учете даже сколь угодно малого взаимодействия со вторыми соседями может смещаться внутрь зоны Бриллюэна.

В направлении $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ закон дисперсии описывается выражением

$$\lambda = 4 \left(1 - \cos \frac{ak}{2} \right) + 2\theta_f(1 - \cos ak). \quad (33)$$

Если $\theta_f > 1$, то максимальная частота смещается от границы зоны Бриллюэна и достигается в точке $k_0 = (2/a) \arccos(-1/\theta_f)$, при этом

$$\lambda_{m,k(1,0,0)} = \frac{4(1 + \theta_f)^2}{\theta_f^2}.$$

Если $\theta_f < 1$, то $\lambda_{m,k(1,0,0)} = 8\theta_f$.

Вдоль направления $\mathbf{k} = k\sqrt{2}(1,1,0)$ дисперсионное соотношение имеет вид

$$\lambda = 4 \left(3 - \cos^2 \frac{ak}{2} - 2\cos \frac{ak}{2} \right) + 2\theta_f(1 - \cos ak). \quad (34)$$

При любом как угодно малом θ_f максимум на дисперсионной кривой смещается внутрь зоны Бриллюэна и достигается в точке $k_0 = (2/a) \arccos(-1/(2\theta_f + 1))$. В этом случае

$$\lambda_{m,k/\sqrt{2}(1,1,0)} = \frac{16(1 + \theta_f)^2}{1 + 2\theta_f}.$$

Для направления $\mathbf{k} = k\sqrt{3}(1,1,1)$ закон дисперсии может быть записан в виде

$$\lambda = 6(1 - \cos ak) + 6\theta_f(1 - \cos ak). \quad (35)$$

В данном направлении учет взаимодействия со вторыми соседями не нарушает монотонности $\lambda(k)$ и

$$\lambda_{m,k/\sqrt{3}(1,1,1)} = 12 + 12\theta_f.$$

Подчеркнем еще раз, что в ГЦК решетке имеется высокосимметричное направление $\mathbf{k} = k\sqrt{2}(1,1,0)$, вдоль которого максимум закона дисперсии смещается внутрь зоны Бриллюэна при любом как угодно малом значении константы взаимодействия со вторыми соседями.

Таким образом, видно, что в случае положительных силовых констант учет взаимодействия со вторыми соседями может приводить к смещению максимума на дисперсионной кривой кубических решеток внутрь зоны Бриллюэна и к возникновению дополнительного минимума на дисперсионной кривой внутри зоны Бриллюэна. Кроме того, учет второй координационной сферы приводит к изменению максимальной частоты колебаний. В случае же отрицательных силовых констант взаимодействия со вторыми соседями (обменный интеграл в магнитоупорядоченных системах) показано, что ПК решетка остается устойчивой при $\theta_s > -1/4$, а ОЦК и ГЦК решетки остаются устойчивыми при $\theta_b > -2/3$ и $\theta_f > -1$ соответственно. Выше мы показали, что учет взаимодействия со вторыми соседями в скалярной модели снимает

расходимость плотности колебаний ОЦК кристалла в середине частотного спектра. Влияние взаимодействия со вторыми соседями на динамические свойства кубических решеток этим не ограничивается. Так, закон дисперсии ГЦК кристалла вдоль линии $k_x + k_y = \pi/a$ не зависит от k_z . Это приводит к возникновению особенности плотности колебаний на верхней границе фононного спектра. При учете взаимодействия со вторыми соседями эта особенность исчезает и плотность состояний обращается в нуль на верхней границе спектра [15]. Взаимодействие со вторыми соседями также существенно влияет на свойства поверхностных волн. Например, в ПК решетке с плоскостью поверхности типа (1,0,0) при учете взаимодействия со вторыми соседями возникают поверхностные волны в отличие от модели ближайших соседей. Если записать смещение n -го слоя атомов в виде $u_n = u_0 q^n$, то легко показать, что в модели ближайших соседей $q = 1$, а с учетом взаимодействия со вторыми соседями

$$q = \frac{1 + 2\theta_s(\cos ak_x + \cos ak_y)}{1 + 4\theta_s} < 1 .$$

Для ГЦК и ОЦК решеток учет взаимодействия со вторыми соседями превращает однопарциальные поверхностные волны в дупарциальные, т.е. поверхностные волны имеют вид $u_n = u_1 q^n + u_2 q^n$ [16].

3. Дисперсионные соотношения для кубических решеток в векторной модели

Рассмотрим модели, в которых смещение $\mathbf{u}(n)$ атома из узла n является векторной величиной. Уравнение движения атома кристаллической решетки в узле n в гармоническом приближении имеет вид

$$m \frac{\partial^2 u_i(n, t)}{\partial t^2} = - \sum_{n'k} \Phi_{ik}(n, n') u_k(n', t) , \quad (36)$$

где $\Phi_{ik}(n, n')$ — матрица силовых постоянных, координатные индексы $i, k = 1, 2, 3$. При учете взаимодействия со вторыми соседями уравнение движения (36) принимает вид

$$m \frac{\partial^2 u_i(n, t)}{\partial t^2} = - \sum_{\delta_1 k} \Phi_{ik}(n, n + \delta_1) u_k(n + \delta_1) -$$

$$- \sum_{\delta_2 k} \Phi_{ik}(n, n + \delta_2) u_k(n + \delta_2) . \quad (37)$$

Здесь δ_1 и δ_2 соответствуют первой и второй координационным сферам. Из условия периодичности кристаллической решетки аналогично (18) следует

$$\Phi_{ik}(n, n') = \Phi_{ik}(n - n') . \quad (38)$$

Решение уравнения (36) ищем в виде

$$u_i(n, t) = u_i \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)) , \quad (39)$$

где $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ — волновой вектор; \mathbf{r} — радиус-вектор узла n . В результате получаем систему уравнений

$$(m\omega^2 \delta_{ik} - L_{ik}(\mathbf{k})) u_k = 0 . \quad (40)$$

Здесь динамическая матрица

$$L_{ik}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}} \Phi_{ik}(n) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) . \quad (41)$$

Ниже мы рассмотрим дисперсионные соотношения, полученные при решении системы уравнений (40), для решеток кубической симметрии вдоль высокосимметричных направлений.

Простая кубическая решетка

Структурой ПК решетки обладает большой класс веществ. Среди них, например, TlBr, TlI, NH_4Cl , CuPd, CuZn (β -латунь) и одна из фаз C_{60} . Воспользуемся матрицами (1) в случае центрального взаимодействия с первыми и вторыми соседями. Обозначим силовые константы центрального взаимодействия между первыми и вторыми соседями ϵ_s и δ_s соответственно. Тогда для матриц (1) имеем $\alpha_1 = \epsilon_s$, $\alpha_2 = \delta_s$, $\beta_1 = 0$, $\beta_2 = 0$ и $\alpha_2 = \gamma_2$.

Динамическая матрица взаимодействия с первыми соседями $L_{ik}^{(1)}(\mathbf{k})$ при этом имеет вид

$$L_{ik}^{(1)} = 2\epsilon_s \begin{pmatrix} 1 - \cos ak_x & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \cos ak_y & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \cos ak_z \end{pmatrix} . \quad (42)$$

Динамическую матрицу взаимодействия со вторыми соседями $L_{ik}^{(2)}(\mathbf{k})$ можно записать в виде

$$L_{ik}^{(2)}(\mathbf{k}) = 4\delta_s \begin{pmatrix} 2 - \cos ak_x(\cos ak_y + \cos ak_z) & \sin ak_x \sin ak_y & \sin ak_x \sin ak_z \\ \sin ak_x \sin ak_y & 2 - \cos ak_y(\cos ak_x + \cos ak_z) & \sin ak_y \sin ak_z \\ \sin ak_x \sin ak_z & \sin ak_y \sin ak_z & 2 - \cos ak_z(\cos ak_y + \cos ak_x) \end{pmatrix}. \quad (43)$$

Проанализируем вид законов дисперсии для различных направлений \mathbf{k} .

Вдоль направления $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ закон дисперсии имеет вид

$$\lambda_l = (2 + 8\mu_s)(1 - \cos ak),$$

$$\lambda_{t1} = \lambda_{t2} = 4\mu_s(1 - \cos ak),$$

где λ_l соответствует продольным колебаниям с частотой ω_l , а $\lambda_{t,i}$ ($i = 1, 2$) — поперечным колебаниям с частотой ω_t ; a — постоянная решетки; $\lambda_{l(t)} \equiv m\omega_{l(t)}^2/\epsilon_s$, а $\mu_s = \delta_s/\epsilon_s$. Видно, что поперечные колебания определяются только взаимодействием со вторыми соседями. Таким образом, рассматриваемая модель становится устойчивой за счет учета взаимодействия со вторыми соседями.

В направлении $\mathbf{k} = \frac{k}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)$ дисперсионные кривые описываются выражениями

$$\lambda_l = 2(1 - \cos ak) + 4\mu_s(2 - \cos 2ak - \cos ak),$$

$$\lambda_{t1} = 2(1 - \cos ak) + 4\mu_s(1 - \cos ak),$$

$$\lambda_{t,2} = 8\mu_s(1 - \cos ak).$$

В данном случае одна из ветвей поперечных колебаний определяется взаимодействием с первыми и вторыми соседями, другая — только взаимодействием со второй координационной сферой.

Для направления $\mathbf{k} = \frac{k}{\sqrt{3}}(1, 1, 1)$ имеем

$$\lambda_l = 2(1 - \cos ak) + 8\mu_s(1 - \cos 2ak),$$

$$\lambda_{t1} = \lambda_{t2} = 2(1 - \cos ak) + 2\mu_s(1 - \cos 2ak).$$

Легко видеть, что учет взаимодействия со второй координационной сферой приводит к расщеплению трехкратновырожденной моды на продольную и двукратновырожденную поперечную моды, а также может приводить к смещению максимума $\lambda_l(k)$ от границы зоны Бриллюэна. При $\mu_s > 1/16$ максимум на кривой $\lambda_l(k)$ смещается внутрь зоны Бриллюэна (см. рис. 2), а на $\lambda_t(k)$ аналогичное смещение происходит при $\mu_s > 1/4$.

Для анализа упругой устойчивости выразим упругие модули $C_{xxxx} = C_{11}$, $C_{xxyy} = C_{12}$, $C_{xyxy} = C_{44}$ (обозначения Фойгта [17]) через силовые константы. Для ПК решетки имеем

$$C_{11} = \frac{\epsilon_s + 4\delta_s}{a}, \quad C_{12} = \frac{2\delta_s}{a}, \quad C_{44} = \frac{2\delta_s}{a}. \quad (44)$$

Естественно, что для ПК решетки, также как и для двух других рассматриваемых случаев, выполняется условие Коши (учет только центральных сил):

$$C_{12} = C_{44}. \quad (45)$$

Кроме того, из условия упругой устойчивости [17]

$$C_{44} > 0 \quad (46)$$

следует, что $\delta_s > 0$.

Параметр анизотропии кристалла кубической симметрии имеет вид

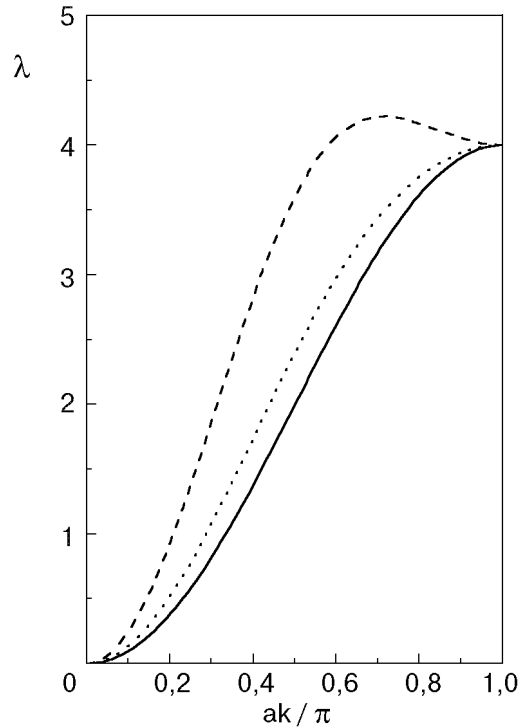


Рис. 2. Дисперсионные кривые ПК решетки вдоль направления [111]. Сплошной линией обозначена трехкратновырожденная дисперсионная кривая, полученная при учете взаимодействия только с первыми соседями ($\mu_s = 0$). Пунктирная линия — ветвь продольных колебаний, полученная с учетом взаимодействия со вторыми соседями ($\mu_s = 0,1$). Точечной линией соответствует двукратновырожденная поперечная ветвь колебаний ($\mu_s = 0,1$).

$$\eta = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} = \frac{C_{t1}^2}{C_{t2}^2}, \quad (47)$$

где $C_{t1} = \sqrt{(C_{11} - C_{12})/2\rho}$, $C_{t2} = \sqrt{C_{44}/\rho}$ — поперечные скорости звука в кубическом кристалле; ρ — плотность кристалла. Для ПК решетки параметр анизотропии η имеет вид

$$\eta = \frac{\epsilon_s + 2\delta_s}{4\delta_s}. \quad (48)$$

Из (48) следует, что при слабом взаимодействии со вторыми соседями $\eta \gg 1$, т.е. ПК решетка в длинноволновом пределе соответствует сильно анизотропной среде. Если $\delta_s = 1/2 \epsilon_s$, то ПК решетка в длинноволновом пределе будет соответствовать изотропной среде ($\eta = 1$). Ранее [18] в рамках теории упругости было показано, что из-

$$L_{ik}^{(1)} = \epsilon_b \begin{pmatrix} 1 - \cos \frac{ak_x}{2} & \cos \frac{ak_y}{2} & \cos \frac{ak_z}{2} & \cos \frac{ak_z}{2} \sin \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} & \cos \frac{ak_y}{2} \sin \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_z}{2} \\ \cos \frac{ak_z}{2} \sin \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} & 1 - \cos \frac{ak_x}{2} & \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} \sin \frac{ak_z}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} \sin \frac{ak_z}{2} \\ \cos \frac{ak_y}{2} \sin \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_z}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} \sin \frac{ak_z}{2} & 1 - \cos \frac{ak_x}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} \\ \cos \frac{ak_z}{2} \sin \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} \sin \frac{ak_z}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} & 1 - \cos \frac{ak_x}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} \\ \cos \frac{ak_y}{2} \sin \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_z}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} \sin \frac{ak_z}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} & \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} & 1 - \cos \frac{ak_x}{2} \end{pmatrix}. \quad (49)$$

Динамическая матрица взаимодействия со вторыми соседями может быть записана в виде

$$L_{ik}^{(2)} = 2\delta_b \begin{pmatrix} 1 - \cos ak_x & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \cos ak_y & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \cos ak_z \end{pmatrix}. \quad (50)$$

Проанализируем дисперсионные соотношения для ОЦК решетки с учетом взаимодействия с первыми и вторыми соседями.

Вдоль направления $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ дисперсионные соотношения имеют вид

$$\lambda_l = 8 \left(1 - \cos \frac{ak}{2} \right) + 2\mu_b(1 - \cos ak),$$

$$\lambda_{t1} = \lambda_{t2} = 8 \left(1 - \cos \frac{ak}{2} \right).$$

Здесь $\lambda_{l(t)} \equiv m\omega_{l(t)}^2/\epsilon_b$, $\mu_b = \delta_b/\epsilon_b$. Видно, что учет взаимодействия со вторыми соседями приводит к расщеплению трехкратно вырожденной моды на продольную и двукратно вырожденную поперечную моды. При $\mu_b > 1$ максимум на кривой продольных колебаний смещается внутрь зоны Бриллюэна.

Изменение параметра анизотропии в таких широких пределах приводит к существенному изменению свойств поверхностных волн в кристаллах кубической симметрии, а именно, изменяется глубина проникновения, скорость распространения и происходит переход из обычной рэлеевской волны в обобщенную.

Объемно-центрированная кубическая решетка

Объемно-центрированную кубическую решетку имеет очень широкий класс веществ, например, Fe, Nb, V, Mo, SF₆, Na, Ta, Nb, Cr и одна из фаз твердого ³He. Для рассматриваемого нами случая центрального взаимодействия в силовых матрицах ОЦК кристалла (2) $\alpha_1 = \beta_1 = \epsilon_b$, $\alpha_2 = \delta_b$, $\beta_2 = 0$. При таком соотношении параметров динамическая матрица взаимодействия с ближайшими соседями имеет вид

Экспериментально определенные дисперсионные кривые Fe, Nb, V, Mo, Cr имеют максимум на продольной ветви колебаний в направлении $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ внутри зоны Бриллюэна, тогда как, например, для Na и Ta максимум на продольной ветви достигается на краю зоны [6,7].

В направлении $\mathbf{k} = k/\sqrt{2} (1, 1, 0)$ дисперсионные соотношения описываются выражениями

$$\lambda_l = 8 \left(1 - \cos \frac{ak}{2} \right) + 2\mu_b(1 - \cos ak),$$

$$\lambda_{t1} = 4(1 - \cos ak), \quad \lambda_{t2} = 2\mu_b(1 - \cos ak).$$

Видно, что как и в случае ПК, одна из ветвей поперечных колебаний определяется слабым взаимодействием со вторыми соседями, а вторая сильным взаимодействием с первыми соседями (см. рис.3).

Для направления $\mathbf{k} = k/\sqrt{3} (1, 1, 1)$ дисперсионные соотношения имеют вид

$$\lambda_l = 2 \left(4 - \cos \frac{ak}{2} - 3\cos \frac{3ak}{2} \right) + 2\mu_b(1 - \cos ak),$$

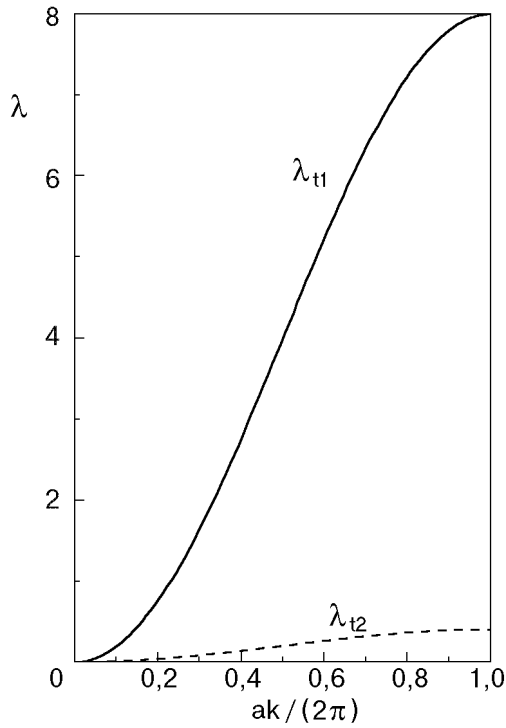


Рис. 3. Поперечные ветви колебаний ОЦК решетки вдоль направления [110] при $\mu_b = 0,1$ (сильно анизотропная среда).

$$\lambda_{t1} = \lambda_{t2} = 8 \left(1 - \cos \frac{ak}{2} \right) + 2\mu_b(1 - \cos ak) .$$

Для этого направления учет взаимодействия со вторыми соседями не приводит к качественным изменениям закона дисперсии. Отметим, что при $\mu_b > 1$ максимум на кривой поперечных колебаний смещается внутрь зоны Бриллюэна.

Проанализируем параметр анизотропии ОЦК решетки.

Упругие модули ОЦК кристалла имеют вид

$$C_{11} = \frac{2(\epsilon_b + \delta_b)}{a}, \quad C_{12} = \frac{2\epsilon_b}{a}, \quad C_{44} = \frac{2\epsilon_b}{a} . \quad (51)$$

Параметр анизотропии ОЦК кристалла можно выразить через силовые константы:

$$\eta = \delta_b / 2\epsilon_b . \quad (52)$$

В пренебрежении роли вторых соседей $C_{11} - C_{12}$ обращается в нуль (упругая неустойчивость), а варьируя соотношение δ_b / ϵ_b , можно изменять (в длинноволновом пределе) степень анизотропии кристалла от сильно анизотропного до изотропного. Из формулы (52) видно, что при $\delta_b \ll \epsilon_b$ ОЦК кристалл в длинноволновом пределе является сильно анизотропной средой ($\eta \ll 1$). При $\delta_b = 2\epsilon_b$ параметр анизотропии $\eta = 1$ (изотропная среда), т.е., как и в случае ПК решетки параметр η может

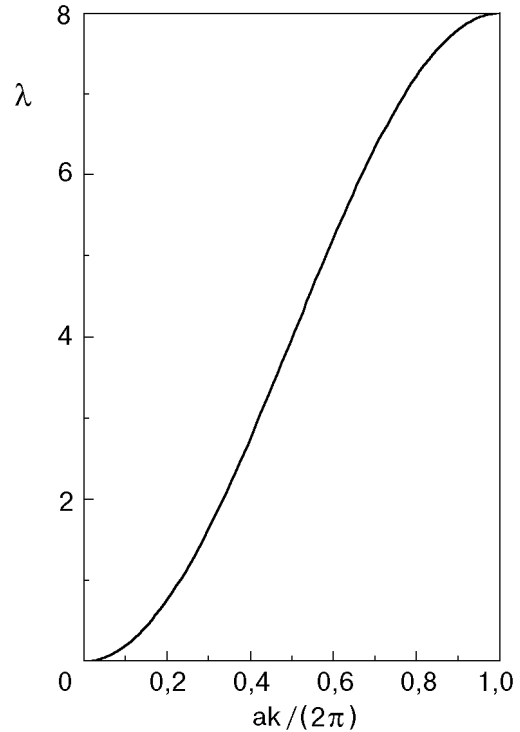


Рис. 4. Двукратно вырожденная поперечная ветвь колебаний ОЦК кристалла вдоль направления [110] при $\mu_b = 2$ (изотропная среда).

изменяться в широких пределах в зависимости от соотношения констант взаимодействия между первыми и вторыми соседями (см. рис 3, 4). В работах [6,7] показано, что для ряда ОЦК металлов константы взаимодействия со вторыми соседями могут оказаться больше констант взаимодействия с первыми соседями более чем в два раза.

Гранецентрированная кубическая решетка

Также как и рассмотренные ранее структуры, ГЦК структура является весьма распространенной. Такую решетку имеют отвердевшие инертные газы, Ag, Ni, Cu, Pa. При центральном взаимодействии между первыми и вторыми соседями в силовых матрицах ГЦК кристалла (3) $\beta_1 = 0$, $\alpha_1 = \gamma_1 \equiv \epsilon_f$, $\beta_2 = 0$ и $\alpha_2 \equiv \delta_f$. Взаимодействие со вторыми соседями не оказывает существенного влияния на спектр ГЦК решетки. Отметим только, что в направлении $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ максимум на кривой продольных колебаний смещается от границы зоны Бриллюэна при $\delta_f > \epsilon_f$. В направлении же $\mathbf{k} = \frac{k}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)$ максимум на одной из ветвей поперечных колебаний смещается внутрь зоны Бриллюэна, если $\delta_f > 0,5\epsilon_f$. Таким образом, видно, что при $\delta_f \ll \epsilon_f$ дисперсионные соотношения для ГЦК кристалла с достаточной точностью могут быть описаны с учетом взаимодействия только с ближайшими соседями.

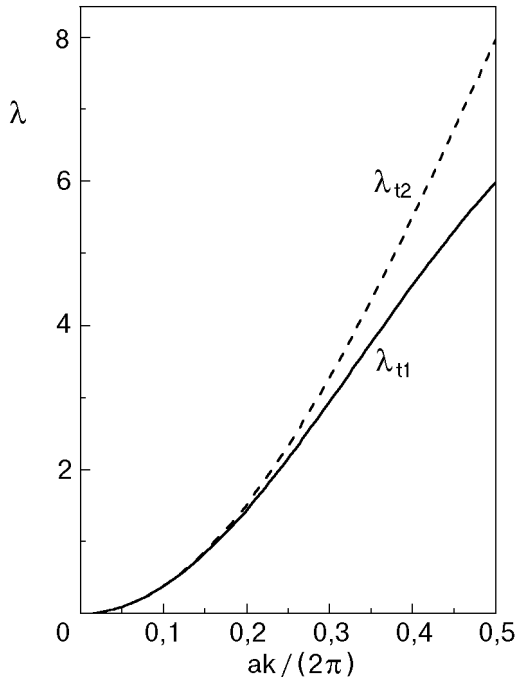


Рис. 5. Поперечные ветви колебаний ГЦК решетки вдоль направления [110] при $\mu_f = 0,5$ (изотропная среда).

Как и для ПК и ОЦК решеток, проанализируем условие упругой устойчивости ГЦК решетки (соотношение констант взаимодействия между первыми и вторыми соседями произвольно). Упругие модули ГЦК кристалла имеют вид

$$C_{11} = \frac{4(\epsilon_f + \delta_f)}{a}, \quad C_{12} = \frac{2\epsilon_f}{a}, \quad C_{44} = \frac{2\epsilon_f}{a}. \quad (53)$$

Из соотношений (53) видно, что при $\epsilon_f > 0$ ГЦК решетка остается устойчивой, если $\delta_f > -\epsilon_f$. Параметр анизотропии ГЦК кристалла имеет вид

$$\eta = \frac{\epsilon_f + 2\delta_f}{2\epsilon_f}. \quad (54)$$

Из формулы (54) видно, что в длинноволновом пределе ГЦК кристалл при $\delta_f \neq \frac{1}{2}\epsilon_f$ анизотропен, а при $\delta_f = \frac{1}{2}\epsilon_f$ является изотропной средой.

В качестве иллюстрации приведем дисперсионные соотношения для поперечных колебаний вдоль направления $\mathbf{k} = \frac{k}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)$:

$$\lambda_{t1} = 4 \left(1 - \cos \frac{ak}{2} \right) + 2\mu_f (1 - \cos ak),$$

$$\lambda_{t,2} = 8 \left(1 - \cos \frac{ak}{2} \right).$$

Здесь $\mu_f = \delta_f/\epsilon_f$. Видно, что в длинноволновом пределе ($ak \ll 1$) при $\delta_f = \frac{1}{2}\epsilon_f$ законы дисперсии поперечных ветвей совпадают (см. рис. 5), а при

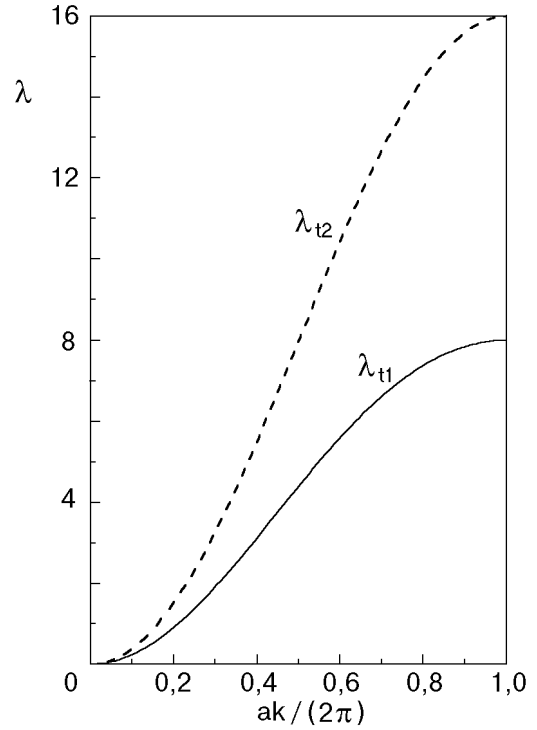


Рис. 6. Поперечные ветви колебаний ГЦК решетки вдоль направления [110] при $\mu_f = 0,1$ (сильно анизотропная среда).

$ak \gg 1$ отличаются друг от друга. В случае же ПК и ОЦК решеток при выполнении условий, соответствующих изотропной среде, поперечные ветви совпадают при всех значениях k (см. рис. 4). На рис. 6 приведены законы дисперсии ГЦК кристалла для случая $\delta_f = 0,1\epsilon_f$ (такое соотношение между силовыми константами соответствует отвердевшим инертным газам [19]).

Выводы

Роль вторых соседей оказывается чрезвычайно важной при изучении колебательного спектра кубических решеток.

В скалярных моделях учет второй координационной сферы может проявиться в смещении максимума на дисперсионных кривых внутрь зоны Бриллюэна, а также привести к исчезновению «нефизических» сингулярностей в плотности колебаний: в ГЦК кристаллах на верхней границе сплошного спектра, а в ОЦК кристаллах в середине спектра.

В векторных моделях кубических решеток при учете взаимодействия со вторыми соседями «параметр анизотропии» может изменяться в очень широких пределах: в длинноволновом пределе две поперечные ветви могут совпадать (изотропная среда) или сильно отличаться друг от друга (сильно анизотропная среда) в зависимости от

соотношения силовых констант взаимодействия между первыми и вторыми соседями. Этот результат позволяет, в частности, по таким микроскопическим характеристикам как силовые постоянные взаимодействия между первыми и вторыми соседями сделать заключение о характере распространения поверхностных акустических волн в кубических кристаллах в длинноволновом пределе. Из рассмотрения в рамках теории упругости известно, что в сильно анизотропных кристаллах увеличивается глубина проникновения рэлеевской волны, уменьшается скорость ее распространения и ее поляризация становится почти линейной, а не эллиптической, как в слабо анизотропных кристаллах.

Кроме того, вторые соседи могут обеспечить устойчивость решетки или, наоборот, сделать ее нестабильной. Из приведенного в статье анализа следует также, что учет третьих и более далеких соседей к таким радикальным изменениям в фоновом спектре привести не может.

Авторы выражают благодарность А. М. Косевичу за полезные критические замечания к первоначальному тексту статьи.

1. Г. Лейбфрид, *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов*, Гос. изд. физ.-мат. лит. Москва (1963).
2. А. М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вища школа, Харьков (1988).
3. H. G. Bohn, A. Kollmar, and W. Zinn, *Phys. Rev.* **B30**, 6504 (1984).
4. Т. Г. Петрова, Е. С. Сыркин, *ФНТ* **17**, 411 (1991).
5. T. G. Petrova and E. S. Syркин, *Phys. Status Solidi* **104**, 375 (1981).
6. W. R. Tyson, *Appl. Phys.* **47**, 459 (1976).
7. И. А. Господарев, Е. С. Сыркин, *Поверхность* **4**, 8 (1987).
8. G. K. Horton and J.W. Leech, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 816 (1963).
9. Ю. В. Гуляев, *Письма в ЖЭТФ* **9**, 63 (1969).

10. J. L. Bleustein, *Appl. Phys. Lett.* **13**, 412 (1968).
11. G. P. Alldredge, *Phys. Lett.* **41A**, 281(1972).
12. И. М. Гельфгат, *ФТТ* **19**, 1711 (1977).
13. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, *Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями*, Наука, Москва (1970).
14. В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, В. С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975).
15. А. М. Косевич, М. Л. Поляков, Е. С. Сыркин, *ФНТ* **15**, 1194 (1989).
16. A. M. Kosevich, E. S. Syркин, and A. V. Tutov, *Acoustical Imaging* (in press).
17. Ф. И. Федоров, *Теория упругих волн в кристаллах*, Наука, Москва (1965).
18. А. М. Косевич, Ю. А. Косевич, Е. С. Сыркин, *ЖЭТФ* **88**, 1089 (1985).
19. A. I. Karasevskii and V. V. Lubashenko *Phys. Status Solidi* **B194**, 483 (1996).

Low frequency dynamics of cubic crystals with the next-nearest neighbor interaction

E. V. Manzhelii and E. S. Syркин

The influence of the next-nearest neighbor interaction upon the dispersion characteristics of simple cubic, bcc and fcc lattices has been studied. It is shown that allowance for this interaction affects significantly the dynamic characteristics of the above systems. In the scalar model describing one-magnon perturbation in the magnetically ordered Geisenberg systems, the allowance for the second coordination sphere can lead to a minimum and an extra maximum in the dispersion curves inside the Brillouin zone, and to disappearance of the divergency of the density of states. In vector models of cubic lattices, the allowance for the next-nearest neighbor interaction can lead to wide-range variations of the «anisotropy parameter»: in the long wavelength limit two transverse branches can either coincide or differ considerably depending on the relation between the force constants characterizing the nearest neighbor and next-nearest neighbor interactions.