

А. А. ВЛАСОВ, Н. Г. ИНОЗЕМЦЕВА

О НОВОМ ТИПЕ УПРУГИХ ВОЛН, ПЕРЕНОСЯЩИХ АКУСТИЧЕСКИЙ СПИН В КРИСТАЛЛАХ

(Представлено академиком А. Н. Тихоновым 3 VII 1975)

1. Вопрос о распространении акустических волн в статистической модели кристалла ⁽¹⁻³⁾ изучался ранее в работах ^(4, 5). В работе ⁽⁵⁾ содержится решение для акустического поля в виде волн, модулированных периодической структурой кристалла; указано, что эта модуляция может привести к возникновению момента сил, действующих на атомы в элементарной ячейке (существование акустического спина), однако исследовался лишь случай продольных волн.

Последовательный учет свойств симметрии кристаллической решетки, исходного статистического уравнения и нелокальных особенностей его решений позволяет сделать вывод о существовании в данной модели 4 типов акустических волн, причем 4-й тип представляет собой распространяющийся в направлении волнового вектора акустический спин.

2. В случае распространения акустических волн малой амплитуды (линейное приближение) уравнение, описывающее статистическое акустическое поле, имеет вид ^(1, 2, 4, 5)

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{m} \frac{\partial V\{\Phi\}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} = 0, \quad (1)$$

$$V\{\Phi\} = \int K(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \Phi(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t) d\mathbf{r}' d\mathbf{v}',$$

где $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ — статистическая амплитуда акустического поля; $K(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ — потенциал парного взаимодействия атомов, имеющий яму; m — масса атома кристалла; $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \rho(\mathbf{r}) f_M(\mathbf{v}^2)$ — функция распределения в отсутствие звуковых волн ⁽¹⁾,

$$f_M(\mathbf{v}^2) = (m/2\pi\theta)^{3/2} \exp(-m\mathbf{v}^2/2\theta),$$

θ — температура кристалла;

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_n \exp(i\mathbf{n}\mathbf{r}) a_n, \quad \mathbf{n}\mathbf{a} = \left(\frac{2\pi}{d_1} n_x, \frac{2\pi}{d_2} n_y, \frac{2\pi}{d_3} n_z \right),$$

d_1, d_2, d_3 — периоды кристаллической решетки, n_x, n_y, n_z пробегают все целочисленные значения;

$$a_n = \left(\int_{(d_1 d_2 d_3)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \exp \left\{ -2\pi^2 \theta \left[\frac{n_x^2}{d_1^2 V_{11}} + \frac{n_y^2}{d_2^2 V_{22}} + \frac{n_z^2}{d_3^2 V_{33}} \right] \right\},$$

$$V_{ii} = \left(\int_{(d_1 d_2 d_3)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) \sum_n' K_{ii}(\mathbf{n}\mathbf{d}), \quad \mathbf{n}\mathbf{d} = (n_x d_1, n_y d_2, n_z d_3),$$

$$K_{ii}(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2 K(\mathbf{r})}{\partial x_i^2}.$$

3. Решения уравнения (1), соответствующие распространению акустических волн, имеют

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \exp(-i\mathbf{K}\mathbf{r}) \sum_n \exp(i\mathbf{n}\mathbf{r}) b_n(\mathbf{v}, t). \quad (2)$$

Подставляя (2) в (1), получим систему уравнений для функций $b_n(\mathbf{v}, t)$:

$$\frac{\partial b_n}{\partial t} + i(\mathbf{n}\mathbf{a} - \mathbf{k})\mathbf{v}b_n - \frac{i}{m} \sum_{\mathbf{l}} a_{n-\mathbf{l}}\sigma(\mathbf{l}\mathbf{a} - \mathbf{k})(\mathbf{l}\mathbf{a} - \mathbf{k}) \frac{\partial f_M}{\partial \mathbf{v}} \int b_{\mathbf{l}} d\mathbf{v}' = 0, \quad (3)$$

где

$$\sigma(\mathbf{s}) = \int K(|\mathbf{r}|) \exp(i\mathbf{r}\mathbf{s}) d\mathbf{r}.$$

Применяя к (3) преобразование Лапласа по времени, получим для величин $B_n(p) = \int \exp(pt) \int b_n(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v} dt$ систему алгебраических уравнений

$$B_n(p) = \frac{2}{\theta} \sum_{\mathbf{l}} a_{n-\mathbf{l}}\sigma(\mathbf{l}\mathbf{a} - \mathbf{k}) \frac{(\mathbf{n}\mathbf{a} - \mathbf{k})(\mathbf{l}\mathbf{a} - \mathbf{k})}{(\mathbf{n}\mathbf{a} - \mathbf{k})^2} I\left(\frac{\Omega}{|\mathbf{n}\mathbf{a} - \mathbf{k}|}\right) B_{\mathbf{l}}(p), \quad (4)$$

$$I(\mathbf{v}) = - \int_0^{\infty} x \exp(-x^2) \cos(\mathbf{v}x) dx, \quad \Omega = (2m/\theta)^{1/2} \omega, \quad p = i\omega + \gamma, \quad \gamma \ll \omega.$$

Объектом дальнейшего рассмотрения будут свойства решений системы (4). Нетривиальное решение имеет место лишь при обращении в нуль определителя системы

$$\Delta(\mathbf{k}, \omega) = \left| \delta_{n\mathbf{l}} - \frac{2}{\theta} a_{n-\mathbf{l}} \frac{(\mathbf{l}\mathbf{a} - \mathbf{k})(\mathbf{n}\mathbf{a} - \mathbf{k})}{(\mathbf{n}\mathbf{a} - \mathbf{k})^2} \sigma(\mathbf{l}\mathbf{a} - \mathbf{k}) I\left(\frac{\Omega}{|\mathbf{n}\mathbf{a} - \mathbf{k}|}\right) \right| = 0. \quad (5)$$

4. Характерными свойствами статистического акустического поля являются нелокальность — рассредоточенность атомов по всему объему ячейки кристалла; анизотропия структуры облака вероятности местоположения атомов, описывающего акустическое поле внутри ячейки. Эту анизотропную структуру облака вероятности естественно описывать первыми моментами от функции распределения $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$:

$$\int_{(d_1 d_2 d_3)} d\mathbf{r} \int d\mathbf{v} A \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad A = \{1; \mathbf{r}; m\mathbf{v}; m[\mathbf{r}\mathbf{v}]\}. \quad (6)$$

Пусть акустическая волна распространяется вдоль одного из ребер ячейки кристалла (например, оси x). Простейшие случаи анизотропии облака могут быть представлены пространственными моментами

$$\Delta X(t) = \int_{(d_1 d_2 d_3)} x d\mathbf{r} \int \varphi d\mathbf{v} \neq 0; \quad \Delta Y(t) = \Delta Z(t) = 0; \quad (7a)$$

$$\Delta Y(t) \neq 0, \quad \Delta X(t) = \Delta Z(t) = 0; \quad (7б)$$

$$\Delta Z(t) \neq 0, \quad \Delta X(t) = \Delta Y(t) = 0; \quad (7в)$$

$$\Delta X(t) = \Delta Y(t) = \Delta Z(t) = 0, \quad \int d\mathbf{r} \int [\mathbf{r}\mathbf{v}]_{x\varphi} d\mathbf{v} \neq 0. \quad (7г)$$

Требуется доказательство, что 4 возмущения (7а)–(7г) отображают упругие степени свободы кристалла.

5. Покажем, что осуществление указанных случаев структуры акустического поля вытекает из вида решений (4).

Исходное уравнение (1) инвариантно относительно преобразований из группы симметрии кристалла в плоскости, перпендикулярной волновому вектору, направленному по ребру решетки. Выясним следствия этой симметрии для системы (4) и дисперсионного уравнения (5).

1) Разобьем совокупность величин $B_n(p)$, $-\infty < n_x, n_y, n_z < \infty$, на 4 непересекающиеся группы:

$$\begin{aligned} B_{n_1}, \quad n_1 &= (n_x, n_y, n_z), \quad n_y \geq 0, \quad n_z \geq 0; \\ B_{n_2}, \quad n_2 &= (n_x, -n_y, n_z), \quad n_y > 0, \quad n_z \geq 0; \\ B_{n_3}, \quad n_3 &= (n_x, n_y, -n_z), \quad n_y \geq 0, \quad n_z > 0; \\ B_{n_4}, \quad n_4 &= (n_x, -n_y, -n_z), \quad n_y > 0, \quad n_z > 0. \end{aligned}$$

Перейдем к новым неизвестным $C_n^{ss}, C_n^{as}, C_n^{sa}, C_n^{aa}$:

$$\begin{aligned} C_n^{ss} &= B_{n_1} + B_{n_2} + B_{n_3} + B_{n_4}, & n_y \geq 0, & & n_z \geq 0, \\ C_n^{as} &= B_{n_1} - B_{n_2} + B_{n_3} - B_{n_4}, & n_y > 0, & & n_z \geq 0, \\ C_n^{sa} &= B_{n_1} + B_{n_2} - B_{n_3} - B_{n_4}, & n_y \geq 0, & & n_z > 0, \\ C_n^{aa} &= B_{n_1} - B_{n_2} - B_{n_3} + B_{n_4}, & n_y > 0, & & n_z > 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Если либо n_y , либо n_z равны нулю, то те из $B_{n_2}, B_{n_3}, B_{n_4}$, которые не определены при таких значениях n_y и n_z , в суммы (8) не входят.

Используя свойства симметрии коэффициентов системы (4), вытекающие из симметрии исходного уравнения (1), легко показать, что она сводится к четырем независимым подсистемам для величин $C_n^{ss}, C_n^{as}, C_n^{sa}, C_n^{aa}$, т. е. преобразование (8) приводит ее к квазидиагональному виду.

2) Введем обозначения:

$$h(n, l) = \frac{2}{\hbar} \sigma(la - k) I \left(\frac{\Omega}{|na - k|} \right) \frac{(la - k)}{(na - k)^2}, \quad f(n, l) = a_{n-l}(na - k).$$

Тогда явные выражения для 4 независимых систем таковы:

$$C_n^{ss} = \sum_l A(n, l) C_l^{ss},$$

$$A(n, l) = h(n, l) [f(n_1, l) + f(n_2, l) + f(n_3, l) + f(n_4, l)]; \quad (9a)$$

$$C_n^{as} = \sum_l D(n, l) C_l^{as},$$

$$D(n, l) = h(n, l) [f(n_1, l) - f(n_2, l) + f(n_3, l) - f(n_4, l)]; \quad (9б)$$

$$C_n^{sa} = \sum_l E(n, l) C_l^{sa},$$

$$E(n, l) = h(n, l) [f(n_1, l) + f(n_2, l) - f(n_3, l) - f(n_4, l)]; \quad (9в)$$

$$C_n^{aa} = \sum_l F(n, l) C_l^{aa},$$

$$F(n, l) = h(n, l) [f(n_1, l) - f(n_2, l) - f(n_3, l) + f(n_4, l)]. \quad (9г)$$

Условие существования решения (4), отличного от 0, может быть представлено в виде

$$|\delta_{nl} - A(n, l)| \times |\delta_{nl} - D(n, l)| \times |\delta_{nl} - E(n, l)| \times |\delta_{nl} - F(n, l)| = 0$$

и выполняется при равенстве нуля хотя бы одного из четырех сомножителей.

6. Таким образом, свойства симметрии уравнения (1) и нелокальный характер его решений позволяют сделать вывод о существовании в данной модели 4 типов акустических волн, соответствующих решениям систем (9а)–(9г). Величины B_n (и следовательно, акустическое поле ϕ) могут быть получены из этих решений преобразованием, обратным (8), и удовлетворяют соотношениям

$$B_{n_1} = B_{n_2} = B_{n_3} = B_{n_4}; \quad (10a)$$

$$B_{n_1} = -B_{n_2} = B_{n_3} = -B_{n_4}, \quad B_{n_x 0 n_z} = 0; \quad (10б)$$

$$B_{n_1} = B_{n_2} = -B_{n_3} = -B_{n_4}, \quad B_{n_x n_y 0} = 0; \quad (10в)$$

$$B_{n_1} = -B_{n_2} = -B_{n_3} = B_{n_4}, \quad B_{n_x 0 n_z} = B_{n_x n_y 0} = 0, \quad (10г)$$

если существуют решения систем (9а)–(9г) соответственно.

7. Свойства симметрии (10а)–(10г) позволяют определить некоторые физические характеристики описанных выше 4 типов волн: нормировку, смещение, импульс и момент импульса ячеек кристалла.

а) Нормировка вероятности местоположения атомов в ячейке есть

$$\Delta N(t) = \int_{(d_1 d_2 d_3)} dr \int \varphi dv = 2d_1 d_2 d_3 \int \exp(pt) dp \sum_{n_x} \frac{(-1)^{n_x+1} B_{n_x,00}(p)}{2\pi n_x - d_1 k} \sin\left(\frac{d_1 k}{2}\right).$$

Из (10а)–(10г) видим, что $\Delta N(t)$ отлично от нуля лишь для волн с симметрией (10а).

б) Смещение центра тяжести ячейки и ее импульс определяются формулой (6) при $A=r$, mv и направлены вдоль волнового вектора в случае (10а), перпендикулярны ему при выполнении (10б)–(10в) и равны нулю для (10г) в соответствии с (7а)–(7г). Эти свойства позволяют отождествить волны (10а) с продольными, а (10б)–(10в) – с поперечными волнами в кристалле.

в) Момент импульса ячейки $M(t) = m \int dr \int [rv] \varphi dv$ равен нулю в случае (10а), направлен перпендикулярно волновому вектору и импульсу для (10б), (10в) и параллелен волновому вектору в случае (10г), что соответствует распространению акустического спина.

В классической теории 4-й тип волн отсутствует ввиду локализации акустических смещений атомов в этой теории и как следствие иных свойств локальных функций распределения

$$f_{кл}(r, v, t) = \sum_n \delta(r - r_n(t)) \delta(v - v_n(t))$$

по сравнению с нелокальными (2), что приводит к качественной разнице в поведении величин

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dr \int f_{кл} dv, \quad \int dr \int [rv] f_{кл} dv,$$

с одной стороны, и

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dr \int (f_0 + \varphi) dv, \quad \int dr \int [rv] (f_0 + \varphi) dv,$$

с другой.

8. В заключение отметим, что существует реальная экспериментальная возможность наблюдения указанного 4-го типа волн. Для этого можно использовать метод Эндрюса и Страндберга (6) применительно к кристаллам кубической сингонии. В табл. 1 приведены числа дополнительных мод,

Кристалл	W	K	GaAs	CsCl	InSb	FeS ₂	MgO	NaF	LiBr	LiCl	ZnS	NaCl	KCl	Ne	Xe	Kr
Число мод	0	2	2	0	2	0	2	0	2	2	2	0	0	2	2	2

предсказываемые теорией упругости для различных кристаллов (расчеты проводились нами на ЭВМ); согласно нашей модели, во всех этих кристаллах должна присутствовать лишь одна дополнительная мода, связанная с распространением акустического спина.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
26 VI 1975

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ А. А. Власов, Теория многих частиц, Гостехиздат, 1950. ² А. А. Власов, Статистические функции распределения, «Наука», 1966. ³ А. А. Власов, Теоретич. и матем. физ., т. 5, 388 (1970). ⁴ А. А. Власов, К. И. Волянский, Вестн. МГУ, физ., астр., т. 14, № 3, 467 (1973). ⁵ А. А. Власов, К. И. Волянский, А. Е. Мозольков, VIII Всесоюз. акустич. конфер. Реф. докл., т. 2, 1973, стр. 134. ⁶ I. M. Andrews, M. W. P. Strandberg, Proc. IEEE, v. 54, 523 (1966).