Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 1 — 1968

УДК 534.2

Г. ОЧИРБАТ

О РАСПРОСТРАНЕНИИ ЗВУКОВЫХ ВОЛН В КРИСТАЛЛЕ ВБЛИЗИ ТОЧКИ ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ—КРИСТАЛЛ ПРИ $T=0$

Распространение звуковых волн в кристалле вблизи точки перехода жидкость—кристалл при $T=0$ исследовано методом самосогласованного поля.

Истолкование перехода жидкость—кристалл как перехода от однородного распределения частиц к периодическому дано в работе [1].

Истолкование кристалла$^+$ как среды со слабо выраженной периодической структурой позволяет решать задачу по схеме теории возмущений. В настоящей работе исследовано распространение звуковых волн в кристалле$^+$ при $T=0$[1]. При этом в качестве нулевого приближения мы будем использовать результаты работ [3—4], в которых исследовано колебание плотности в жидкости.

Исходным в [2—4] является следующее модельное уравнение:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi,\quad \hat{H}=-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2+\int K(|r-r'|)\,\psi^*(r')\,\psi(r')\,dr',\tag{1}$$

где под $\psi^*(r)\,\psi(r)$ понимается плотность числа частиц. В [2] получено для кристалла решение, ответвляющееся от функции $\psi=\psi_0 e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t}$, описывающей однородное распределение частиц с плотностью $\rho_0=\psi_0^*\psi_0$ и с параметром $E_0=\rho_0\int K(|r-r'|)\,dr'$.

Запишем его в виде ряда Фурье:

$$\psi_{\text{точ}}=e^{-i\frac{E_0+\varepsilon}{\hbar}t}\Big[\psi_0+\delta\sum_{\vec{g}\neq 0}a_{\vec{g}}e^{i\vec{g}\vec{r}}\Big],\tag{2}$$

$$a_{\vec{g}}=a^*_{-\vec{g}},$$

где $\varepsilon=E-E_0$, $g=2\pi\vec{b}$, $\vec{b}$ — вектор обратной решетки, δ — параметр, который зависит от ε так, что при $\varepsilon\to 0$ должно быть $\psi_{\text{точ}}\to\psi_0 e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t}$. В данной работе рассматривается случай малых δ.

[1] Символ $^+$ указывает, что речь идет о кристалле вблизи точки перехода жидкость—кристалл при $T=0$.

Вследствие того, что $E_0 = \rho_0 \int K(|\vec{r} - \vec{r}'|)\,d\vec{r}'$, при малом ε можно положить

$$E_0 + \varepsilon \sim \overline{\psi^*_{\text{точ}}\psi_{\text{точ}}} \int K(|\vec{r} - \vec{r}'|)\,d\vec{r}', \tag{3}$$

где $\overline{\psi^*_{\text{точ}}\psi_{\text{точ}}}$ — средняя плотность числа частиц.

Приближенное решение исходного уравнения и его анализ

Нас интересует приближение, удовлетворяющее условию $\psi = \psi_{\text{точ}} + \varphi$, $|\varphi| \ll |\psi_{\text{точ}}|$ и нормированное так, что

$$\langle\rho\rangle = \frac{1}{V}\int\limits_V \langle\psi\psi^*\rangle\,d\vec{r} < \infty. \tag{4}$$

Скобка $<\ >$ указывает, что производится усреднение по времени.

Линеаризуя (1), имеем

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\varphi + \int \psi'_{\text{точ}} K(|\vec{r} - \vec{r}'|\,\psi'_{\text{точ}}dr'\varphi +$$

$$+ \int \psi_{\text{точ}} K(|\vec{r} - \vec{r}'|)\,\varphi' d\vec{r}'\psi_{\text{точ}} + \int \varphi^* K(|\vec{r} - \vec{r}'|)\,\psi_{\text{точ}} d\vec{r}'\psi_{\text{точ}}. \tag{5}$$

Ввиду периодичности поля в кристалле, решение для вариации волновой функции $\varphi(r, t)$ ищем в виде

$$\varphi(r, t) = \sum_g \varphi(\vec{k} + \vec{g}, t)\, e^{i(k+g)\vec{r}}\, e^{-i\frac{E_0+\varepsilon}{\hbar}t}, \tag{6}$$

где k — вектор, ограниченный кубом $-\frac{\pi}{d} \leqslant k_x \leqslant \frac{\pi}{d}$, $-\frac{\pi}{d} \leqslant k_y \leqslant \frac{\pi}{d}$, $-\frac{\pi}{d} \leqslant k_z \leqslant \frac{\pi}{d}$, d — длина основного периода.

Подставляя (2) и (6) в уравнение (5) и учитывая (3), приходим к бесконечной системе уравнений вида

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(\vec{k}', t)}{\partial t} = w(k')\,\varphi(k', t) + \rho\sigma(\vec{k}')\,\varphi^*(-\vec{k}', t) +$$

$$+ \delta\sum_{\vec{h}\neq 0}(b_{\vec{h}}a_{-\vec{h}}\varphi(\vec{k}' + \vec{h}, t) + c_{\vec{h}}a_{-h}\varphi(\vec{k}' + \vec{h}, t) + \tag{7}$$

$$+ c_{\vec{h}}a_{\vec{h}}\varphi(-\vec{k}' - \vec{h}, t) + 0(\delta^2).$$

Здесь и далее для краткости обозначено

$$\sigma(\vec{k}') = 4\pi\int\limits_0^\infty K(s)\frac{\sin ks}{ks}s^2ds, \qquad w(k') = \frac{\hbar^2}{2m}k'^2 + \rho_0\sigma(k'),$$

$$b_{\vec{h}} = \psi_0[2\sigma(h) + \sigma(\vec{k}') + \sigma(\vec{k}' + h)],$$

$$c_{\vec{h}} = \psi_0[\sigma(\vec{k}') + \sigma(\vec{k} - h)], \quad \vec{k}' = \vec{k} + g.$$

Эту систему уравнений необходимо решать с ее сопряженной системой, так как первая из них содержит все функции $\varphi(k' + h, t)$ вместе со всеми функциями $\varphi^*(-k'-h,\ t)$. Из общей теории системы линейных дифференциальных уравнений следует, что такая система допускает решение вида

$$\varphi(\vec{k}',\ t) = \varphi(\vec{k}')\, e^{-i\omega(\vec{k})t},$$

$$\varphi^*(-\vec{k}',\ t) = \varphi^*(-\vec{k}')\, e^{-i\omega(k)t}, \quad \omega(\vec{k}) = \omega(\vec{k}'). \tag{8}$$

Причем $\omega(\vec{k})$ и $\varphi(\vec{k})$ и $\varphi^*(-\vec{k})$ будут определяться как собственные значения и собственные векторы оператора, представляющего бесконечную дискретную матрицу. Следовательно, заранее ясно, что спектр частоты $\omega(\vec{k})$ должен состоять из отдельных зон.

Однако определение $\omega(\vec{k})$ в общем виде из решения задачи на собственные значения представляется практически безнадежным.

Мы будем решать систему приближенным методом. Для этого разложим искомую функцию (8) в ряд, по малому параметру который содержится в уравнениях вида (7)

$$\varphi(\vec{k}',\ t) = \varphi^{\circ}(\vec{k}',\ t) + \delta\varphi^{I}(\vec{k},\ t) + \ldots$$

соответствующее решение нулевого приближения будет иметь вид [2]

$$\varphi^{\circ}_{\vec{g}}(\vec{k}+\vec{h},\ t) = u e^{-i\omega_{\vec{g}}(\vec{k})t}, \quad \varphi^{\circ}_{\vec{g}}(-\vec{k}-\vec{h},\ t) = L u^* e^{-i\omega_{\vec{g}}(\vec{k})t}, \tag{9}$$

где

$$\omega_{\vec{g}}(\vec{k}) = \sqrt{\frac{\vec{k}'^2}{2m}\left(\frac{\hbar^2\vec{k}'^2}{2m} + 2\rho_0\sigma(\vec{k}')\right)}\ (*),$$

$$L = \frac{1}{\rho_0\sigma(\vec{k}')}\left[\hbar\omega_{\vec{g}} - \left(\frac{\hbar^2\vec{k}'^2}{2m} + \rho_0\sigma(\vec{k}')\right)\right],$$

$$u = u(\vec{k}+\vec{h}) = \begin{cases} \text{произвольная функция от } \vec{k}, & \text{если } \vec{h} = \vec{g} \\ 0, & \text{если } \vec{h} \neq \vec{g}. \end{cases}$$

Выражение (*) для $\omega_{\vec{g}}(\vec{k})$ получено Н. Н. Боголюбовым [4], в предельном случае $\hbar \to 0$ оно переходит в результат А. А. Власова [1] при $T = 0$ [1].

Отметим, что зависимость функции $\varphi^{\circ}_{\vec{g}}(\vec{k}+\vec{h},\ t)$ от одного дискретного вектора $\vec{g}$ и от одного непрерывного вектора $\vec{k}$ является только выражением периодического граничного условия и в пределах данного приближения никакого иного смысла не имеет.

Воспользовавшись (9), нетрудно вычислить $\varphi^{I}_{\vec{g}}(\vec{k},\ \vec{r},\ t)$ и $\varphi^{I}_{\vec{g}}(-\vec{k},\vec{r},t)$.

Они имеют вид

$$\varphi^{I}_{\vec{g}}(\vec{k},\ r,\ t) = \sum_{\vec{h}\neq\vec{g}} \varphi^{I}_{\vec{g}}(\vec{k}+h)\, e^{i(\vec{k}+\vec{h})\vec{r}} e^{-i\omega_{\vec{g}}t},$$

$$\varphi^{I*}_{\vec{g}}(-\vec{k},\ \vec{r},\ t) = \sum_{\vec{h}\neq\vec{g}} \varphi^{I*}_{\vec{g}}(-\vec{k}-\vec{h})\, e^{i(\vec{k}+\vec{h})\vec{r}} e^{-i\omega_{\vec{g}}t}, \tag{10}$$

[1] Квантовое обобщение дисперсного уравнения и для $T \neq 0$ до сих пор не получено.

где

$$\varphi^{I}_{\vec g}(\vec k+\vec h)=$$

$$=\frac{a_{g+h}u}{\hbar^2(\omega_{\vec h}-\omega_{\vec g})}\,\frac{\rho\sigma(\vec k+\vec h)(C_{-\vec g+\vec h}+Lb_{\vec g-\vec h})-(w(\vec k+\vec h)+\hbar\omega_{\vec g}(\vec k))(b_{\vec g-\vec h}+C_{-\vec g+\vec h}L)}{\omega_{\vec h}+\omega_{\vec g}},$$

$$\varphi^{I}_{\vec g}(-k-h)=$$

$$=\frac{a_{-\vec g+\vec h}u^*}{\hbar^2(\omega_{\vec h}-\omega_{\vec g})}\,\frac{\rho\sigma(\vec k+\vec h)(b_{\vec g-\vec h}+C_{-g+h}L)-((w(\vec k+\vec h)-\hbar\omega_g(\vec k))(C_{-\vec g+\vec h}+b_{\vec g-\vec h}L)}{\omega_{\vec h}+\omega_{\vec g}}.$$

Функции (10) имеют смысл в случае, если не выполняется равенство $\omega_{\vec g}(\vec k)=\omega_{\vec h}(\vec k)$, из которого вытекает условие Брэгга

$$\vec k'^2=(\vec k'+\vec h)^2. \tag{11}$$

Для анализа характера состояния, описываемого найденной волновой функцией, рассмотрим плотность и ток частиц, вычисленных для этого состояния.

Можно придать функции $\varphi_{\vec g}(\vec k,\vec r,t)=\overset{\circ}{\varphi}_{\vec g}(\vec k,\vec r,t)+\varphi^{I}_{\vec g}(\vec k,\vec r,t)$ следующий вид:

$$\varphi_{\vec g}(\vec k,\vec r,t)=(Fu)\,e^{i(\vec k'\vec r-\omega_{\vec g}t)}+(Gu)^*\,e^{i(\omega_{\vec g}t-\vec k'r)}, \tag{12}$$

где F и G — периодические функции.

Тогда выражение плотности числа частиц $\psi^*\psi$ будет состоять из следующих членов: $\psi^*_{\text{точ}}\psi_{\text{точ}}$ — плотность числа частиц в невозмущенной структуре; $\psi_{\text{точ}}[(F+G)\,ue^{i(\vec k'\vec r-\omega_{\vec g}t)}+(F^*+G^*)\,u^*e^{i(\omega_{\vec g}t-\vec k'r)}$ — волны плотности с волновым вектором $\vec k'$ и с частотой $\omega_{\vec g}(\vec k)$; $(F^*F+G^*G)\,u^*u$ — стационарный член и вторые гармоники волн. Для амплитуды волны плотности получается периодическая функция в соответствии с периодичностью структуры.

Ток частиц, вычисленный по формуле

$$\vec J=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi), \tag{13}$$

будет состоять из двух частей:

$$\vec J_{\text{волн}}=\frac{\hbar}{m}\,Im\{u^*Re^{i(\omega_{\vec g}t-\vec k\vec r)}\}+\ldots \tag{14}$$

и

$$\vec J_{\text{стац}}=\frac{\hbar}{m}\{k(F^*F-G^*G)+Im(F^*\nabla F+G\nabla G^*)\}\,u^*u, \tag{15}$$

где

$$R^*=[(i\vec k+\nabla)(G-F)-(G-F)\nabla]\,\psi_{\text{точ}}.$$

Уравнение (14) указывает на существование волн в среде, а (15) — на существование стационарного тока при наличии волн.

Усредняя (15) по объему элементарной ячейки и используя (9—10), можно написать его в более явном виде:

$$\vec{J}_{\text{стац}} = \frac{\hbar}{m}\left\{\left[(1-L^2)\overset{*}{u}u + 2\delta^2\sum_{h\neq g}\varphi^{l^2}(k+h) - \varphi^{l^2}(-k-h)\right]\vec{k}' + \right.$$

$$\left. + 2\delta^2\sum_{h\neq g}\vec{h}\left(\varphi^{l^2}(k+h) - \varphi^{l^2}(-k-h)\right)\right\}. \qquad (16)$$

Необходимо отметить, что перенос частиц волнами плотности с сохранением периодической структуры является с точки зрения динамической теории твердых тел абсурдом. Однако в данной модели кристалла это явление выступает как нелинейный эффект и обеспечивается специфичностью законов самосогласованного движения частиц, аналогично тому как это имеет место в неквантовой статистической теории кристалла [6]. При $\delta \to 0$ формула (16) переходит в результат Андреева [3].

Брэгговское рассеяние

Как было указано выше, при условии (11) теряет силу прежнее решение (10). Исследуем случай, когда выполняется равенство (11). В уравнения нулевого приближения включим те члены первого порядка, которые приведут к (11).

Тогда имеем

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(\vec{k}',t)}{\partial t} = \omega(\vec{k}')\varphi(\vec{k}',t) + \rho_0\sigma(\vec{k}',t) + \delta\,[b_{\vec{h}}a^*_{\vec{h}}\varphi(\vec{k}'+\vec{h},t) +$$

$$+ C_{\vec{h}}a_{-\vec{h}}\varphi^*(-\vec{k}'-h,t)] \qquad (17а)$$

и

$$-i\hbar\frac{\partial\varphi^*(-\vec{k}',t)}{\partial t} = \omega(\vec{k}')\varphi^*(-\vec{k}',t) + \rho_0\sigma(\vec{k}')\varphi(\vec{k}',t) +$$

$$+ \delta\,[b_{\vec{h}}a'_{\vec{h}}\varphi^*(-\vec{k}'-h,t) + C_{\vec{h}}a_{-h}\varphi(\vec{k}'+h,t)]. \qquad (17б)$$

Так как число неизвестных функций вдвое больше числа уравнений, необходимо привлечь еще пару уравнений. Их можно получить из аналогичных уравнений, написанных для функций $\varphi(k'+h,t)$ и $^*\varphi(-k'-h,t)$ с включением упомянутых членов первого порядка.

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(\vec{k}'+h,t)}{\partial t} = \omega(\vec{k}'+h)\varphi(\vec{k}'+h,t) + \rho_0\sigma(\vec{k}'+h)\varphi^*(-\vec{k}'-h,t) +$$

$$+ \delta\,(b_{\vec{h}}a_{\vec{h}}\varphi(\vec{k},t) + c_{\vec{h}}a_{\vec{h}}\varphi^*(-k',t) \qquad (18а)$$

и

$$-i\hbar\frac{\partial\varphi^*(-\vec{k}'h,t)}{\partial t} = \omega(\vec{k}'+h)\varphi(-\vec{k}-h,t) + \rho_0\sigma(\vec{k}'+h)\varphi(\vec{k}'+h,t) +$$

$$+\delta\left(b_{\vec{h}}a_{\vec{h}}\varphi^{*}(-\vec{k}';t)+c_{\vec{h}}a^{*}_{\vec{h}}\varphi(\vec{k}',t)\right). \tag{18б}$$

Решение уравнений (17а) — (18б) имеет вид

$$\varphi(\vec{k}',t)=\varphi(k')e^{-i\omega t},\quad \varphi^{*}(-\vec{k}',t)=\varphi^{*}(-\vec{k}')e^{-i\omega t},$$

$$\varphi(k'+\vec{h},t)=\varphi(\vec{k}'+h)e^{-i\omega t},\quad \varphi^{*}(-\vec{k}'-\vec{h},t)=\varphi^{*}(-k'-h)e^{-i\omega t}. \tag{19}$$

При этом

$$\omega=\pm\left(\omega_{\vec{g}}\pm\frac{\delta|\sigma(h)|}{\hbar\omega_{\vec{g}}}\,\frac{(\rho_0 a^{*}_{\vec{h}}a_{\vec{h}})^{1/2}}{N}\right), \tag{20}$$

где

$$\frac{1}{N^2}=\frac{2}{\hbar^2}\left[1+\frac{\sigma(\vec{k}')}{\sigma(\vec{h})}+\frac{\sigma(\vec{k}'+\vec{h})}{\sigma(\vec{h})}+\ldots\right].$$

Получилось четыре различных значения ω вместо двух значений $\pm\,\omega_{\vec{g}}$. Как видно из (10), поправка первого приближения ко всем остальным значениям $\omega_{\vec{g}}(\vec{k})$, не удовлетворяющим уравнению (11), равна нулю. Значит, по аналогии с обычной теорией возмущений мы можем утверждать, что спектр частот обрывается на критических плоскостях Бриллюэна.

Величина обрыва, как видно из (20), зависит от Фурье — амплитуды плотности структуры, от характера взаимодействия между частицами и от номера плоскости Бриллюэна. Наличие подобных щелей в спектре возбуждения при $T=0$ было указано в работе [5].

Волновые функции при различных значениях (20) для ω представляют собой стоячие волны. Например, одна из них

$$\psi=a\cos\left(\frac{\vec{g}\vec{r}}{2}\right)\cos\left(\vec{k}+\frac{\vec{g}}{2}\right)re^{-i\omega t}. \tag{21}$$

Для получения (21) нет необходимости вычислять все коэффициенты при экспонентах в (19), а достаточно учесть симметрию коэффициентов уравнений (17а) и (18б) при указанных значениях ω.

Ток частиц в состоянии, описываемом волновой функцией подобной (21), всегда равен нулю.

Таким образом, для волн плотности числа частиц в кристалле проявляется типичная картина Брэгговского отражения.

Однако вдали от критических плоскостей Бриллюэна все величины не будут сильно отличаться от соответствующих величин для жидкости. В частности $\omega_0(\vec{k})$ при малых $|\vec{k}|$ соответствует звуковым колебаниям.

Для звуковых волн имеет место (*): $\omega_0(\vec{k})=v_{зв}k$, где $v_{зв}=\left(\frac{m\sigma(0)}{\rho_0}\right)^{1/2}$.

В силу этого, выражение (16) принимает вид

$$\vec{J}_{стац}=\frac{v_{зв}}{2}\frac{(\delta\rho_0)^2}{\rho_0}\left\{\frac{\vec{v}_{зв}}{v_{зв}}+\frac{\delta^2 v_{зв}}{\hbar k u^{*} u}\sum_{h\neq g}(\varphi_0^{I^2}(-k-h)-\varphi_0^{I^2}(k+h)\left(\frac{\vec{v}_{зв}}{v_{зв}}+\frac{\vec{h}}{k}\right)\right\}. \tag{22}$$

В выражении (22) первый член — волновой ветер в однородной фазе вещества [3]. Второй член — дополнительный ток, возникший за счет рассеяния волн плотности на периодических неоднородностях. Отметим, что формула (22) перестает быть верной вблизи границ зон Бриллюэна, где дополнительный ток становится сравнимым по величине и противоположным по направлению с первым током.

В заключение автор выражает глубокую благодарность проф. А. А. Власову за предложенную тему и систематические указания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Власов А. А. «Изв. АН СССР», сер. физич., **8**, № 5, 248, 1944.
2. Очирбат Г. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астрон., № 3, 7, 1967.
3. Андреев А. Н. Диссертация. МОПИ, 1955.
4. Боголюбов Н. Н. «Изв. АН СССР», сер. физич., **11**, 1947.
5. Gross E. P. Phys. Rev. Lett., **4**, No. 12, 599, 1960.
6. Головко В. А. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астрон., № 2, **85**, 1967.

Поступила в редакцию
28.10 1966 г.

Кафедра
теоретической физики