

СОЛИТОННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ КОЛЕБАНИЙ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

В. С. Горелик, Т. М. Махвиладзе, М. Е. Саргчев

УДК. 539.2

На основании рассмотрения идеализированных моделей кристаллической решетки показано существование фоновых возбуждений солитонного типа, обусловленных собственным ангармонизмом колебаний решетки и характеризующихся сложной амплитудно-фазовой структурой.

Известно, что ангармонизм колебаний решетки может приводить к ряду интересных эффектов, проявляющихся в спектрах ИК поглощения и комбинационного рассеяния света /1/. Обычно эффекты, связанные с ангармонизмом, рассматриваются в рамках взаимодействия между гармоническими колебаниями решетки. В настоящей работе показано, что собственный ангармонизм решетки способен приводить к существованию в кристаллах специфических ангармонических колебательных возбуждений.

Рассмотрим, например, поперечные оптические колебания одномерной цепочки с двумя атомами в элементарной ячейке. С учетом ангармонизма лагранжиан системы имеет следующий вид:

$$L = \frac{1}{2} \sum_n (M_1 \dot{q}_{2m+1}^2 + M_2 \dot{q}_{2m}^2) - \frac{1}{2} \sum_n \left\{ \frac{1}{2} C_T [(q_{2m+2} - q_{2m+1})^2 + (q_{2m+1} - q_{2m})^2] + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{\lambda_n}{n} [(q_{2m+2} - q_{2m+1})^n + (q_{2m+1} - q_{2m})^n] \right\}, \quad (I)$$

где M_1 , M_2 - массы атомов элементарной ячейки, q_i - смещение i -го атома, C_T и λ_n - константы гармонического и ангармонического взаимодействия. Переходя в уравнения движения для лагран-

жана (I) к длинноволновому пределу (длина волны колебания много больше размера ячейки), можно считать, что все атомы с нечетными номерами движутся как одна подрешетка ($q_{2n+1} = q_1$), а с четными - как другая ($q_{2n} = q_2$). Далее считаем кристалл центросимметричным, оставляя в ангармоническом взаимодействии в (I) только четные члены. Введем нормальную координату $Q = q_1 - q_2$ и соответствующие ей комплексные амплитуды Q^+ и Q^- :

$$Q = \frac{1}{2} \left\{ Q^+ \exp[i(\omega t - kz)] + Q^- \exp[-i(\omega t - kz)] \right\} \equiv \frac{1}{2} (Q^+ + Q^-),$$

где ω и k - частота и волновое число колебательного возбуждения, z - координата его распространения, t - время, $(Q^+)^* = Q^-$. Добавляя теперь в уравнения движения феноменологический член вида $\beta^2 \partial^2 Q / \partial z^2$ (β - скорость звука), описывающий эффекты распространения, и ограничиваясь рассмотрением процессов, не связанных с генерацией высших гармоник за счет ангармонизма, получим, что Q^\pm удовлетворяют уравнению:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \Omega^2 \right) Q^\pm + \sum_{n=1}^{\infty} c_{2n+1}^n \frac{\lambda_{2n+1}}{M} |Q^\pm|^{2n} Q^\pm = 0, \quad (2)$$

где $\Omega = \sqrt{2c_0/M}$ - частота фононов при $k = 0$, $M = M_1 + M_2$. Уравнение (2) описывает оптическое фононое возбуждение с учетом ангармонизма типа самовоздействия. Аналогичное уравнение с заменой $\beta \rightarrow i\beta$ описывает длинноволновые оптические колебания в одноатомной модели кристалла с дополнительными связями /2/. При $\Omega = 0$ и замене $\beta \rightarrow i\beta$ уравнение (2) пригодно для описания ангармонического акустического возбуждения.

Исследуем солитонные решения уравнения (2), т.е. решения, зависящие от переменной $\xi = t - z/V$, где V - групповая скорость солитона (ср. с /3,4/). Отметим, что при $\beta = 0$ (локализованные колебательные возбуждения в молекулярном кристалле) такие решения являются полными решениями (2). Укажем также, что рассматриваемая система в силу выбора потенциала взаимодействия отличается от известной ангармонической модели Тода /5/ и ее обобщений.

Сначала найдем эти решения в приближении оггибающих (ПО), записывая Q^+ в виде $Q^+ = \tilde{Q}^+(z, t) \exp[i(\omega_v t - k_v z)]$, где ω_v и k_v удовлетворяют закону дисперсии: $\omega_v^2 = \Omega^2 - \beta^2 k_v^2$. Используя ПО ($\partial^2 \tilde{Q}^+ / \partial t^2 \ll \omega_v \partial \tilde{Q}^+ / \partial t \ll \omega_v^2 \tilde{Q}^+$, $\partial^2 \tilde{Q}^+ / \partial z^2 \ll k_v \partial \tilde{Q}^+ / \partial z \ll k_v \tilde{Q}^+$) и записывая решения уравнения (2) в виде $\tilde{Q}^+(\xi) = Q_0(\xi) \exp[i\Phi(\xi)]$, где Q_0 и Φ - действительные амплитуда и фаза, получим

$$\frac{\partial Q_0}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} = \frac{1}{2\gamma} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{2n+1} Q_0^{2n}, \quad (3)$$

где

$$\gamma = \omega_v \left(1 + \frac{\beta^2 k_v}{v \omega_v}\right) \left(1 + \frac{\beta^2}{v^2}\right)^{-1}, \quad \bar{\lambda}_{2n+1} = \lambda_{2n+1} C_{2n+1}^n \left[M \left(1 + \frac{\beta^2}{v^2}\right)\right]^{-1}.$$

Решая (3), находим, что солитонное возбуждение имеет вид:

$$Q^+ = a \exp[i(\omega_v t - k_v z)] \exp\left[i \frac{1}{2\gamma} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{2n+1} a^{2n} (t - z/v) + ib\right], \quad (4)$$

где a и b - постоянные. Из (4) ясно, что в рамках справедливости ПО ангармонизм приводит просто к сдвигу частоты и волнового числа гармонической волны. Отметим, что необходимыми условиями применимости ПО является требование малости ангармонизма

$(1/2\gamma) \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{2n+1} a^{2n} \ll \omega_v, k_v v$. Однако даже в условиях малого ангармонизма решения (4) могут оказаться несправедливыми.

Покажем теперь, что точные решения уравнения (2), в отличие от солитонов (4), описывают не только фазовую модуляцию гармонических возбуждений.

Согласно (2), точные солитонные решения удовлетворяют уравнениям:

$$\ddot{Q}_0 - 2\gamma Q_0 \dot{\Phi} - \dot{\Phi}^2 Q_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{2n+1} Q_0^{2n+1} = 0,$$

$$2\dot{Q}_0 \dot{\Phi} + Q_0 \ddot{\Phi} + 2\gamma \dot{Q}_0 = 0.$$

Эти уравнения сводятся к квадратурам, позволяющим найти Q_0 и Φ :

$$2\xi + \delta = \int_p^{Q_0^2} dx \left[Ax - \gamma^2 x^2 - \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\lambda}_{2n+1} \frac{1}{n+1} x^{n+2} - C^4 \right]^{-1/2}, \quad (5)$$

$$\Phi = \pm \int (C^2/Q_0^2) d\xi - \gamma\xi + \delta', \quad (6)$$

где знак плюс берется при $\dot{\Phi} + \gamma > 0$, а знак минус - при $\dot{\Phi} + \gamma < 0$; A, C, p, δ и δ' - постоянные интегрирования, $A > 0$.

Приведем явный вид Q_0 в случае, когда в (5) учитывается только первый ангармонический член ($n = 1$). Тогда, если C таково, что все три корня a_1, a_2, a_3 подкоренного выражения в (5) действительны, то решение (5) существует и выражается через эллиптические функции:

$$Q_0^2 = \frac{a_2 + a_3}{2} + \frac{a_3 - a_2}{2} \frac{(m' + m'') \operatorname{sn}(2m\xi + \bar{\delta}) + m' - m''}{(m' - m'') \operatorname{sn}(2m\xi + \bar{\delta}) + m' + m''}, \quad (7)$$

где $\bar{\delta} = \operatorname{const}$, $m' = \sqrt{a_3 - a_2}$, $m'' = \sqrt{a_3 - a_1}$, $m = (1/2)(m' + m'')\sqrt{\bar{\lambda}_3/2}$, $a_1 < a_2 < a_3$, $a_2 > 0$, $a_3 > 0$. Величина Q_0^2 является периодической функцией ξ , изменяющейся с периодом $2K/m$, где $K = F(k, \pi/2)$ - полный эллиптический интеграл I-го рода, $k = (m' - m'')/(m' + m'')$. Результаты (5)-(7), в отличие от ПО, указывают на сложную периодическую пространственно-временную структуру солитонных возбуждений.

Для иллюстрации рассмотрим подробнее случай слабого ангармонизма ($A\bar{\lambda}_3/4\gamma^4 \ll 1$), считая также, что $A^2 - 4\gamma^2 C^4 = d\bar{\lambda}_3$, где $d = \operatorname{const} > 0$. В силу (5)-(7) солитонные решения, отвечающие знакам плюс и минус в (6), имеют вид

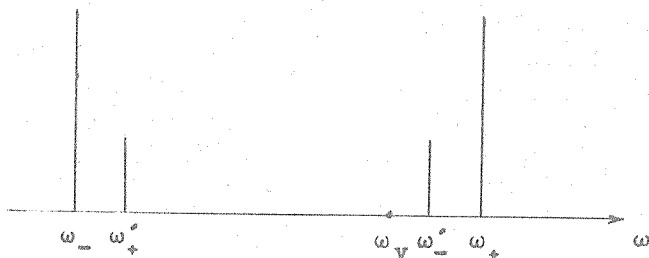
$$Q_{\pm}^{\pm} = \sqrt{A/2\gamma^2} \exp[i(\omega_v t - k_v z)] \left\{ \exp \left[-i(\gamma\xi \mp (\gamma - G\bar{\lambda}_3)\xi - \delta_{\pm}) \right] + (B/2A)\bar{\lambda}_3^{-1/2} \exp \left[-i(\gamma\xi \pm (\gamma + G\bar{\lambda}_3 + 2\alpha\bar{\lambda}_3)\xi \pm (\bar{\delta} - \pi/2 + \delta_{\pm})) \right] \right\}, \quad (8)$$

где

$$B = \sqrt{d} \left(1 - \frac{A^3}{4d\gamma^4} \right)^{1/2}, \quad C = \frac{\gamma d}{4A^2} \left(1 - \frac{3}{4} \frac{A^3}{d\gamma^4} \right),$$

$$\delta_{\pm} = \delta^0 \pm \frac{C^2 \gamma}{A} \delta, \quad \alpha = \frac{A^3}{8\gamma^3}.$$

Солитоны (8) представляют собой сумму двух гармонических волн — основной с амплитудой $(A/2)^{1/2}/\gamma$ и спутников с малой амплитудой $(B/2\gamma\sqrt{2A})\bar{\lambda}_3^{1/2}$ (рис. 1). Частоты основных волн равны $\omega_+ = \omega_v - G\bar{\lambda}_3$ и $\omega_- = \omega_v - 2\gamma + G\bar{\lambda}_3$ для Q_+^- и Q_-^+ соответственно. Частоты спутников равны $\omega_+^0 = \omega_v - 2\gamma - (2\alpha + G)\bar{\lambda}_3$ и $\omega_-^0 = \omega_v + (2\alpha + G)\bar{\lambda}_3$. Отметим, что решения (8) отличаются от решений (4), во-первых, наличием двух основных волн на разных частотах, а, во-вторых, наличием спутников. Можно показать, что решению (4) соответствует волна Q_+^+ , переходящая в (4) лишь при специальном подборе параметра d : $d = A^3/4\gamma^4$. Укажем также, что в следующих по параметру d приближениях к точному решению (5)–(7) будут получаться новые спутники с уменьшающимися пропорционально степеням $\bar{\lambda}_3$ амплитудами.



Р и с. 1. Спектр солитонов (8): ω_- , ω_+ , ω_-^0 , ω_+^0 — частоты спектральных компонент солитона; точкой обозначено положение частоты гармонического колебания. Высоты спектральных компонент отвечают их относительным интенсивностям в соответствии с формулой (8)

В типичных случаях $\Omega = 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $k_v \approx 10^5 \text{ см}^{-1}$, $\beta \approx 10^5 \text{ см/с}$. Тогда при $v = 0, 1v_{\Phi}$, где $v_{\Phi} = \beta^2 k_v / \omega_v$ — групповая скорость оп-

тического фонона, имеем $\omega_v = \sqrt{\Omega^2 - k_v^2 \beta^2} \approx 10^{13} \text{ с}^{-1}$ и $\chi \approx 10^6 \text{ с}^{-1}$.

В условиях применимости решения (8) отношение ангармонического вклада ($N_{\text{анг}}$) в гамильтониан к гармоническому ($N_{\text{гarm}}$) должно составлять величину $\mu = N_{\text{анг}}/N_{\text{гarm}} \leq 10^{-8}$, что соответствует частотному сдвигу $\leq 10^{-6} \%$. При $\mu = 10^{-8}$ и отношении амплитуды спутника к амплитуде основной волны $v\lambda_3^{1/2}/2\Delta = 0,1$ имеем:

$$\omega_+ - \omega_- = 2\chi - 2G\bar{\lambda}_3 \approx (2 \cdot 10^6 + 0,6 \cdot 10^5) \text{ с}^{-1},$$

$$\omega_+^* - \omega_- = \omega_+ - \omega_-^* = -2(\alpha + G)\bar{\lambda}_3 \approx 10^4 \text{ с}^{-1},$$

$$\omega_+ - \omega_+^* = \omega_-^* - \omega_- = 2\chi + 2\alpha\bar{\lambda}_3 \approx (2 \cdot 10^6 + 0,5 \cdot 10^5) \text{ с}^{-1}.$$

Проведенное рассмотрение нетрудно распространить на случай акустических фононов ($\Omega = 0$, $\beta \rightarrow i\beta$). В условиях применимости решений (8) спектр возбуждений аналогичен показанному на рис. I.

При $k_v \approx 10^5 \text{ см}^{-1}$, $\beta \approx 10^5 \text{ см/с}$ имеем $\omega_v = 10^{10} \text{ с}^{-1}$, $\chi = 10^9 \text{ с}^{-1}$. Считая $\mu = 10^{-2}$ (частотный сдвиг 0,2%) и $v\lambda_3^{1/2}/2\Delta = 0,1$, получим $\omega_+ + \omega_- \approx 2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$, $\omega_+^* - \omega_- = \omega_+ - \omega_-^* \approx 10^7 \text{ с}^{-1}$.

Таким образом, даже в условиях очень слабого ангармонизма в колебательных спектрах кристаллов, в частности, в области низкочастотных акустических волн, можно ожидать проявления отмеченных эффектов. Экспериментальное исследование такого рода эффектов может быть выполнено путем неупругого рассеяния света при низких температурах кристаллов.

Поступила в редакцию
II февраля 1982 г.

Л и т е р а т у р а

- I. В. М. Агранович, Дополнение к книге А. Пуле, Ж.-П. Матье "Колебательные спектры и симметрия кристаллов", "Мир", М., 1973 г., с. 408.

2. В. С. Горелки, Препринт ФИАН № 193, М., 1976 г.
3. Т. М. Махвиладзе, М. Е. Сарычев, ФТТ, 20, 1062 (1978).
4. Т. М. Махвиладзе, М. Е. Сарычев, ЭСТФ, 71, 896 (1976).
5. M. Toda, J. Phys. Soc. Japan, 23, 501 (1967).