

takže rovnica (43) nadobudne tvar

$$\left( \rho w^2 - c_{44} - \frac{b}{3} \right) e' = 0. \quad (27.45)$$

Teda všetky priečne vlny šíriace sa v smeroch [1, 1, 1] majú rovnaké rýchlosťi a ľubovoľnú polarizáciu v rovine kolmej na smer šírenia.

Rýchlosťi vln dostaneme jednoducho z rovníc (40), resp. (43), ak ich vynásobíme skalárne príslušným vektorom polarizácie.

## 28. Optické kmity a dielektrické vlastnosti kryštálov

V tejto stati budeme vyšetrovať dlhovlnné optické kmity iónových mriežok s kubickou symetriou typu NaCl, CsCl, a ZnS. Takéto kryštály majú skalárnu dielektrickú permitivitu, a teda sú opticky izotropné. Dlhovlnné akustické kmity sme vyšetrovali v predchádzajúcej stati na báze makroskopickej teórie pružnosti (nevzťahuje sa to na látky typu ZnS, ktoré sú piezoelektrické). Pri akustických kmítach sa atómy oboch typov vychylujú takmer súhlasne a pohybuje sa hmotný stred bunky, preto na opis vlnenia sme použili vektor posunutia, ktorý udával pohyb hmotného stredu. Naproti tomu pri optických kmítach ľažisko zostáva takmer v pokoji a atómy tej istej elementárnej bunky sa pohybujú opačným smerom, teda optické kmity treba opisovať veličinou charakterizujúcou relatívne posunutia atómov bunky. Pokiaľ sú atómy v rovnovážnych polohách, polarizácia (elektrický dipolový moment pripadajúci na objemovú jednotku) i intenzita elektrického poľa v uzloch mriežky sa vo vyšetrovaných štruktúrach vysokej symetrie rovnajú nule. Avšak, ak sa ióny bunky vzájomne vysunú, dôjde k polarizácii a vzniku nenulového elektrického poľa i v miestach iónov. Pre dlhovlnné optické kmity možno sformulovať makroskopickú teóriu. V dlhovlnnej oblasti  $q \cdot a \ll 1$  kladné ióny v makroskopicky malom objeme (ale značne väčšom než objem elementárnej bunky) budú mať tú istú výchylku  $u_+$ . Podobne záporné ióny v mikroskopicky veľkom okolí toho istého bodu budú mať rovnaké výchylky  $u_-$ . V limite  $q = 0$  to znamená, že obe podmriežky sa proti sebe pohybujú, ale pritom každá z podmriežok zostáva nedeformovaná.

Pri vyšetrovaní kmítov iónových kryštálov máme dočinenia s ďalekodosahujúcimi coulombickými interakciami. Ako sme v predchádzajúcej stati spomenuli, v takomto prípade postupujeme tak, že z celkovej interakcie vydelíme coulombickú časť a nahradíme ju lokálnym elektrickým poľom  $\mathbf{E}_l$ . Zvyšujúca časť interakcie už je krátkeho dosahu. Ak sa ión vychýli z rovnovážnej polohy, pôsobia naň sily, ktoré sa ho snažia vrátiť do rovnovážnej polohy. Tieto sily pri malých výchylkách sú úmerne relatívnym výchylkám vybraného iónu proti ostatným. V limite  $qa \ll 1$  pre

sily krátkeho dosahu to značí, že sú úmerné  $u_+ - u_-$ , pretože relatívne výchylky iónov toho istého druhu, z blízkeho okolia vybraného iónu, sa rovnajú nule. Pohybové rovnice oboch typov atómov potom majú tvar

$$\begin{aligned} M_+ \ddot{u}_+ &= -k(u_+ - u_-) + e\mathbf{E}_l, \\ M_- \ddot{u}_- &= -k(u_- - u_+) - e\mathbf{E}_l, \end{aligned} \quad (28.1)$$

kde  $M_+$  a  $M_-$  sú hmotnosti kladného, resp. záporného iónu,  $e$  je náboj kladného iónu a z elektrickej neutrality elementárnej bunky vyplýva, že náboj záporného iónu je  $-e$ . Rovnosť elastickej koeficientov  $k$  v oboch rovniciach vyplýva zo zákona akcie a reakcie. Koeficient  $k$  možno určiť z repulzívnych sôl pôsobiacich medzi iónmi, resp. pomocou koeficientu stlačiteľnosti.

Z rovníc (1) vyplýva nasledujúca rovnica pre relatívnu výchylku  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$

$$M\ddot{\mathbf{u}} = -k\mathbf{u} + e\mathbf{E}_l, \quad (28.2)$$

kde  $M = M_+ M_- / (M_+ + M_-)$  je redukovaná hmotnosť. Rovnica (2) však stále ešte nie je makroskopická, pretože v nej vystupuje mikroskopické lokálne pole  $\mathbf{E}_l$ . Lokálne elektrické pole, ktoré pôsobí na vybraný ión, je tvorené všetkými iónmi mriežky okrem vybraného. Toto pole sa na vzdialenosťach rovnajúcich sa mriežkovej konštannte mení. Makroskopické pole, ktoré zahŕňa aj pole uvažovaného iónu, sa rovná strednému poľu v makroskopicky malom objeme, ale väčšom ako objem elementárnej bunky. Toto pole sa na vzdialenosťach porovnateľných s mriežkovou konštantou nemení. Avšak rozdiel medzi lokálnym poľom, ktoré pôsobí na ión, a makroskopickým poľom v mieste iónu je určený iba rozdielom týchto polí v blízkom okolí tohto iónu. K tomuto výsledku môžeme prísť takto: Opíšme okolo vybraného iónu guľu polomeru  $r \gg a$  a rozdeľme obe polia na dve časti

$$\mathbf{E}_l = \mathbf{E}_l^< + \mathbf{E}_l^>, \quad (28.3)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^< + \mathbf{E}^>, \quad (28.4)$$

kde  $\mathbf{E}^<$ ,  $\mathbf{E}_l^<$  sú polia tvorené nábojmi z interiéru gule a  $\mathbf{E}^>$ ,  $\mathbf{E}_l^>$  z exteriéru.

Pole  $\mathbf{E}_l$  v strede gule, tvorené nábojmi zvonku gule, bude sa iba málo meniť na vzdialenosťi porovnateľnej s mriežkovou konštantou, pretože je tvorené nábojmi na vzdialenosť väčšej než  $r$  a  $r \gg a$ . Potom však pole  $\mathbf{E}_l^>$  v strede gule sa rovná strednému poľu  $\mathbf{E}^>$ . Ak teraz odčítame obidve rovnice (3) a (4), dostaneme

$$\mathbf{E}_l - \mathbf{E} = \mathbf{E}_l^< - \mathbf{E}^<. \quad (28.5)$$

Kedže stredná hustota náboja vo vnútri gule sa rovná nule, elektrické pole  $\mathbf{E}^<$  je určené vektorom polarizácie  $\mathbf{P}$ . Pre homogénne polarizovanú guľu makroskopické pole  $\mathbf{E}^<$  sa rovná Lorentzovmu poľu

$$\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0}. \quad (28.6)$$

Intenzita poľa  $\mathbf{E}_l$  v mriežkových bodoch kryštálu s tetraedrickou a vyššou symetriou sa rovná nule (Born a Huang 1954). Teda intenzita elektrického poľa  $\mathbf{E}_l$  v homogénne polarizovaných kryštáloch uvažovaného typu je

$$\mathbf{E}_l = \mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0}, \quad (28.7)$$

kde  $\epsilon_0$  je dielektrická permitivita vakuu a makroskopické elektrické pole  $\mathbf{E}$  je riešením Maxwellových rovníc s príslušnými okrajovými podmienkami a materiálovými vzťahmi.

Uvažované iónové kryštály majú relatívnu magnetickú permeabilitu prakticky rovnajúcu sa jednej, a teda jeden z materiálových vzťahov je preste

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}, \quad (28.8)$$

kde  $\mathbf{B}$  je vektor magnetickej indukcie a  $\mu_0$  je permeabilita vakuu. Druhý materiálový vzťah sa týka vektora elektrickej indukcie  $\mathbf{D}$

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (28.9)$$

resp. vektora polarizácie  $\mathbf{P}$ , ktorý môžeme vyjadriť takto: Pôsobením lokálneho elektrického poľa sa elektrónový obal pôvodne centrálnie symetrického iónu deforme, čím ión získa dipólový moment  $\mathbf{p}_J$ . Pri nie príliš silných poliach je tento dipólový moment úmerný poľu:

$$\mathbf{p}_J = \epsilon_0 \alpha_J \mathbf{E}_l, \quad (28.10)$$

kde koeficient úmernosti  $\alpha_J$  sa nazýva polarizovateľnosť  $J$ -tého iónu. Polarizovateľnosť iónu je konštantná, pokým frekvencia poľa je dostatočne nízka, takže pole nespôsobí prechody medzi elektrónovými stavmi iónu. V uvažovaných iónových kryštáloch k takýmto prechodom dochádza až v ultrafialovej oblasti.

Ak lokálne elektrické pole je rovnaké pre ióny z tej istej elementárnej bunky, potom elektrónová polarizácia  $\mathbf{P}_e$ , t. j. elektrický dipólový moment objemovej jednotky, pochádzajúci od polarizácie samotných iónov, sa rovná

$$\mathbf{P}_e = \frac{\epsilon_0}{\Omega_b} (\alpha_- + \alpha_+) \mathbf{E}_l, \quad (28.11)$$

protože na objemovú jednotku padá  $1/\Omega_b$  iónových párov, kde  $\Omega_b$  je objem elementárnej bunky a  $\alpha_-$ , resp.  $\alpha_+$  je polarizovateľnosť záporných, resp. kladných iónov. Avšak elektrické pole nespôsobí iba elektrónovú polarizáciu, ale i tzv. polarizáciu iónovú, pri ktorej sa kladné a záporné ióny ako celky vychýlia zo svojich rovnovážnych polôh. Ak výchylky tohto istého typu sa málo menia na vzdialenosť rovnajúcej sa mriežkovej konštannte, iónová polarizácia  $\mathbf{P}_i$  sa rovná

$$\mathbf{P}_i = \frac{e}{\Omega_b} \mathbf{u}, \quad (28.12)$$

kde  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$  je vyššie zavedená relatívna výchylka iónov.

Polarizácie  $\mathbf{P}_e$  a  $\mathbf{P}_i$  majú už význam makroskopických veličín a ich súčet dáva celkovú polarizáciu

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_i. \quad (28.13)$$

Ak do vzťahu (11) dosadíme za  $\mathbf{E}_i$  zo (7) a tento výraz spolu s  $\mathbf{P}_i$  dosadíme do (13), dostaneme rovnicu pre  $\mathbf{P}$ , ktorej riešením je

$$\mathbf{P} = b_{21}\mathbf{w} + b_{22}\mathbf{E}, \quad (28.14)$$

kde

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} \sqrt{\frac{M}{\Omega_b}}, \quad (28.15)$$

$$b_{21} = \frac{e}{\sqrt{M\Omega_b}} \left(1 - \frac{\alpha}{3\Omega_b}\right)^{-1}, \quad b_{22} = \frac{\epsilon_0 \alpha}{\Omega_b} \left(1 - \frac{\alpha}{3\Omega_b}\right)^{-1}, \\ \alpha = \alpha_+ + \alpha_-. \quad (28.16)$$

Ďalej, ak dosadíme za  $\mathbf{E}_i$  v rovnici (2) a použijeme vzťah (14), rovnica (2) bude mať tvar

$$\ddot{\mathbf{w}} = b_{11}\mathbf{w} + b_{12}\mathbf{E}, \quad (28.17)$$

kde

$$b_{11} = -\frac{k}{M} + \frac{e^2}{M\Omega_b 3\epsilon_0} \left(1 - \frac{\alpha}{3\Omega_b}\right)^{-1}, \quad b_{12} = b_{21}. \quad (28.18)$$

Rovnice (14) a (17) predstavujú druhý „materiálový vzťah“. Veličiny  $\alpha$  a  $k$  nie sú priamo merateľné, preto koeficienty  $b$  nemôžeme z nich určiť. Avšak parametre  $b$  možno vyjadriť pomocou iných merateľných veličín. Hľadajme riešenie rovnice (17) v tvare rovinnej vlny, t. j.

$$\mathbf{w} = w_0 e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R} - \omega t)}. \quad (28.19)$$

Z rovnice (17) potom dostaneme

$$\mathbf{w} = \frac{b_{12}}{-b_{11} - \omega^2} \mathbf{E}. \quad (28.20)$$

Ak tento výraz dosadíme do rovnice (14), dostaneme

$$\mathbf{P} = \left( b_{22} + \frac{b_{12}b_{21}}{-b_{11} - \omega^2} \right) \mathbf{E}. \quad (28.21)$$

Z rovnice (20) a (21) vyplýva, že  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{P}$  majú tiež tvar rovinných vĺn a že sú

rovnobežné s vektorom  $w$ ,  $E \parallel P \parallel w$ . Ak porovnáme teraz rovnicu (21) s definičou rovnicou relatívnej dielektrickej permitivity  $\epsilon_r$ ,

$$P = (\epsilon_r - 1) \epsilon_0 E, \quad (28.22)$$

dostaneme

$$\epsilon_r = 1 + \frac{1}{\epsilon_0} \left( b_{22} + \frac{b_{12}^2}{-b_{11} - \omega^2} \right). \quad (28.23)$$

Tento vzťah udáva relatívnu dielektrickú permitivitu ako funkciu frekvencie  $\omega$ , preto sa nazýva disperzná formula. Disperznú formulu možno vyjadriť pomocou experimentálne merateľných veličín. Pre frekvenciu  $\omega = 0$  veličina  $\epsilon_r$  má význam statickej permitivity, ktorú označíme  $\epsilon_r(0)$  a rovná sa

$$\epsilon_r(0) = 1 + \frac{1}{\epsilon_0} \left( b_{22} - \frac{b_{12}^2}{b_{11}} \right). \quad (28.24)$$

Naopak v limite vysokých frekvencií, prakticky z oblasti viditeľného spektra,  $\epsilon_r(\infty) = n^2$ , kde  $n$  je index lomu svetla extrapolovaný na nekonečnú frekvenciu

$$b_{22} = \epsilon_0 (\epsilon_r(\infty) - 1). \quad (28.25)$$

Ak  $\omega^2 = -b_{11}$ , permitivita rastie nad všetky medze. Frekvencia

$$\omega_t^2 = -b_{11} \quad (28.26)$$

sa nazýva disperzná kruhová frekvencia a často tiež s prívlastkom infračervená, pretože  $\omega_t$  väčšiny iónových kryštálov leží v infračervenej oblasti, napr. pre NaCl  $\omega_t = 3,09 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ . Frekvencia  $\omega_t$  sa experimentálne určuje ako frekvencia, pri ktorej je maximálna absorpcia infračerveného žiarenia v tenkých vrstvách. Označenie disperznej frekvencie symbolom  $\omega_t$  nie je náhodné. Transverzálné optické kmity s vlnovou dĺžkou značne menšou, než sú rozmery vzorky, avšak dlhou v porovnaní s medziatómovými vzdialenosťami, negenerujú makroskopické pole  $E$ , takže (17) nadobudne tvar  $\ddot{w} = b_{11}w$ . Táto rovnica musí byť identická s pohybovou rovnicou transverzálnych optických kmítov,  $\ddot{w} = -\omega_t^2 w$ , t. j.  $-b_{11}$  rovná sa štvorcu charakteristickej frekvencii dlhovlnných transverzálnych optických kmítov  $\omega_t^2$ . Ak teraz prepíšeme rovnicu (23) pomocou koeficientov  $\epsilon_r(0)$ ,  $\epsilon_r(\infty)$  a  $\omega_t$ , dostaneme

$$\epsilon_r = \epsilon_r(\infty) + \frac{\epsilon_r(0) - \epsilon_r(\infty)}{1 - \left( \frac{\omega}{\omega_t} \right)^2}. \quad (28.27)$$

Z tohto vzťahu vidíme, že pokiaľ je  $\omega \ll \omega_t \sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$ , môžeme  $\omega^2/\omega_t^2$  zanedbať vzhľadom na jednotku a platí  $\epsilon_r \approx \epsilon_r(0)$ , t. j. pri nízkych frekvenciach je  $\epsilon_r$  konštantná a rovná sa statickej dielektrickej konštante. Naopak pre  $\omega \gg \omega_t$

môžeme v (27) zanedbať druhý člen a  $\epsilon_r = \epsilon_r(\infty) = n^2 = \text{konšt.}$  Vidíme, vzhľadom na vzťahy (25) a (16), že pri vysokých frekvenciach sa uplatňuje iba elektrónová polarizácia. Pri nízkych frekvenciach, keď ióny stačili sledovať zmeny elektrického poľa, uplatnila sa i iónová polarizácia. To je príčinou toho, že dielektrická permitivita iónových kryštálov pri nízkych frekvenciach je väčšia než pri vysokých. Zaujímavý je interval frekvencií blízkych k hodnote  $\omega_t$ . Ak sa k hodnote  $\omega_t$  priblížime od nižších frekvencií,  $\epsilon_r$  rastie od hodnoty  $\epsilon_r(0)$  do  $+\infty$ , ak sa k  $\omega_t$  blížime od vyšších frekvencií,  $\epsilon_r$  sa mení od  $\epsilon_r(\infty)$  do  $-\infty$ . Permitivita  $\epsilon_r$  nadobúda nulovú hodnotu pri frekvencii  $\omega_t$ .

$$\omega_t^2 = \frac{\epsilon_r(0)}{\epsilon_r(\infty)} \omega_i^2. \quad (28.28)$$

Tento vzťah, ktorého zmysel si objasníme ďalej, sa nazýva Lyddanov—Sachsov—Tellerov vzťah.

V intervale od  $\omega_i$  do  $\omega_t$  je  $\epsilon_r(\omega)$  záporné a index lomu  $n = \sqrt{\epsilon_r(\omega)}$  rýdzo imaginárny, to znamená, že elektromagnetické žiarenie s frekvenciou z intervalu  $(\omega_i, \omega_t)$  sa bude od kryštálu úplne odrážať.<sup>5</sup> Frekvencia  $\omega_t$  pre NaCl má hodnotu  $\omega_t = 4,87 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$  [ $\epsilon_r(0) = 5,02$  a  $\epsilon_r(\infty) = 2,25$ ], čiže tento interval je pomerne úzky.

Zmysel frekvencie  $\omega_t$  danej vzťahom (28) a disperzný vzťah  $\omega(\mathbf{q})$  elektromagnetických vln nájdeme riešením Maxwellových rovnic

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{D} &= 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \end{aligned} \quad (28.29)$$

spolu so vzťahmi (8), (9), (14) a (17). Riešenie budeme hľadať v tvare rovinnej vlny (19). Zo vzťahov (20), (21) a z Maxwellových rovnic potom vyplýva, že i  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{P}$  a  $\mathbf{H}$  majú tvar rovinných vln. Z prvej Maxwellovej rovnice dostaneme

$$i\mathbf{q} \cdot (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) = 0. \quad (28.30)$$

Táto rovnica má dve nenulové riešenia:

$$\text{I.} \quad \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = 0, \quad (28.31)$$

$$\text{II.} \quad (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) \perp \mathbf{q}. \quad (28.32)$$

Uvažujme najprv prípad I. Pre tento prípad z tretej a štvrtnej Maxwellovej rovnice dostaneme

---

<sup>5</sup> Koeficient reflexie  $R$  pre kolmo dopadajúce žiarenie na povrchu kryštálu je  $R = \left| \frac{n-1}{n+1} \right|^2$ .

$$iq \cdot \mathbf{H} = 0, \quad iq \times \mathbf{H} = 0, \quad (28.33)$$

z čoho vyplýva, že  $\mathbf{H} = 0$  v celom priestore. Pre  $\mathbf{H} = 0$  druhá Maxwellova rovnica dáva

$$iq \times \mathbf{E} = 0. \quad (28.34)$$

Zo vzťahov (20), (21) a (34) vyplýva, že  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{P}$  a  $\mathbf{u}$  sú rovnobežné s vlnovým vektorom  $\mathbf{q}$ , čiže prípad I predstavuje pozdĺžne vlny. Disperzný vzťah  $\omega(\mathbf{q})$  určíme z rovnosti (31) tak, že v nej  $\mathbf{P}$  vyjadrieme prostredníctvom  $\mathbf{E}$  pomocou vzťahu (21)

$$\left( \epsilon_0 + b_{22} + \frac{b_{12}b_{21}}{-b_{11} - \omega^2} \right) \mathbf{E} = 0. \quad (28.35)$$

Aby mala táto rovnica nenulové riešenie, musí sa výraz v zátvorke rovnať nule. Táto podmienka je však ekvivalentná rovnosti  $\epsilon_r(\omega) = 0$ . Teda rovnica (35) bude mať netriviálne riešenie iba pre  $\omega = \omega_l$ , teda  $\omega_l$  je dané vzťahom (28). Frekvencia  $\omega_l$  má teda význam vlastných frekvencií pozdĺžnych optických kmitov. Z Lyddanovho—Sachsovho—Tellerovho vzťahu (28) vyplýva, že  $\omega_l$  nezávisí od vlnového vektora  $\mathbf{q}$ , a teda grupová rýchlosť  $\partial\omega/\partial\mathbf{q}$  pozdĺžnych vln sa rovná nule. Vzhľadom na to, že pre pozdĺžne vlny sa  $\mathbf{H} = 0$ , nule sa rovná i Poytingov vektor  $\mathbf{E} \times \mathbf{H}$ , a teda pozdĺžne vlny nenesú elektromagnetickú energiu.

V II. prípade, ako vidieť zo vzťahov (32), (20) a (21), je

$$\mathbf{q} \perp (\mathbf{w} \parallel \mathbf{E} \parallel \mathbf{P}). \quad (28.36)$$

Zvyšujúce Maxwellove rovnice majú tvar

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{H} = 0, \quad (28.37)$$

$$\mathbf{q} \times \mathbf{E} = \omega \mu_0 \mathbf{H}, \quad (28.38)$$

$$\mathbf{q} \times \mathbf{H} = -\omega (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}). \quad (28.39)$$

Z týchto rovníc okamžite vyplýva, že vektori  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{H}$  sú vzájomne ortogonálne a že tvoria pravotočivý systém. Teda prípad II<sup>o</sup> predstavuje priečne vlnenia. K danému  $\mathbf{q}$  a  $\mathbf{E}$  vektor  $\mathbf{H}$  je rovnicou (38) jednoznačne určený. Avšak k danému  $\mathbf{q}$  vektor  $\mathbf{E}$  môže byť ešte ľubovoľne orientovaný v rovine kolmej na vektor  $\mathbf{q}$ . V rovine však možno ľubovoľný vektor vyjadriť lineárhou kombináciou dvoch nekolineárnych vektorov, teda ku každému  $\mathbf{q}$  máme dve nezávislé riešenia napr. vzájomne ortogonálne. Dvom nezávislým riešeniam zodpovedá dvojnásobná degenerácia priečnych vlnení. Disperzný vzťah pre priečne vlny nájdeme takto: Orientujme súradný systém tak, aby  $\mathbf{q}$  bol rovnobežný s osou  $x$  a  $\mathbf{E}$  s osou  $y$ , potom  $\mathbf{H}$  bude v smere osi  $z$ . Potom rovnice (38) a (39) nadobudnú tvar

$$qE = \omega \mu_0 H, \quad (28.40)$$

$$qH = \omega \epsilon_0 \epsilon_r E, \quad (28.41)$$

kde rovnica (41) vznikla z rovnice (39) s použitím vzťahu (22). Rovnice (40) a (41) majú nenulové riešenia, ak determinant z koeficientov pri  $E$  a  $H$  sa bude rovnať nule,

$$\begin{vmatrix} q, & -\omega\mu_0 \\ -\omega\epsilon_0\epsilon_r, & q \end{vmatrix} = 0. \quad (28.42)$$

Z tohto determinantu s použitím (27) dostaneme rovnicu

$$\omega^4\epsilon_r(\infty) - \omega^2[\omega_t^2\epsilon_r(0) + c^2q^2] + \omega_t^2c^2q^2 = 0. \quad (28.43)$$

Táto rovnica pre malé hodnoty vlnového vektora  $q$ ,  $q \ll \frac{\omega_t}{c}\sqrt{\epsilon_r(0)}$ , ( $q \ll 10^3 \text{ cm}^{-1}$ )

má dve dvojnásobne degenerované riešenia

$$\omega_1^2 = \omega_t^2 \frac{\epsilon_r(0)}{\epsilon_r(\infty)} = \omega_t^2, \quad (28.44)$$

$$\omega_2^2 = \frac{c^2q^2}{\epsilon_r(0)}. \quad (28.45)$$

Pre veľké hodnoty  $q \gg \frac{\omega_t}{c}\sqrt{\epsilon_r(0)}$  riešenia sú

$$\omega_3^2 = \frac{c^2q^2}{\epsilon_r(\infty)} \quad (28.46)$$

a

$$\omega_4^2 = \omega_t^2. \quad (28.47)$$

Rovnicu (43) môžeme prepísať takto:

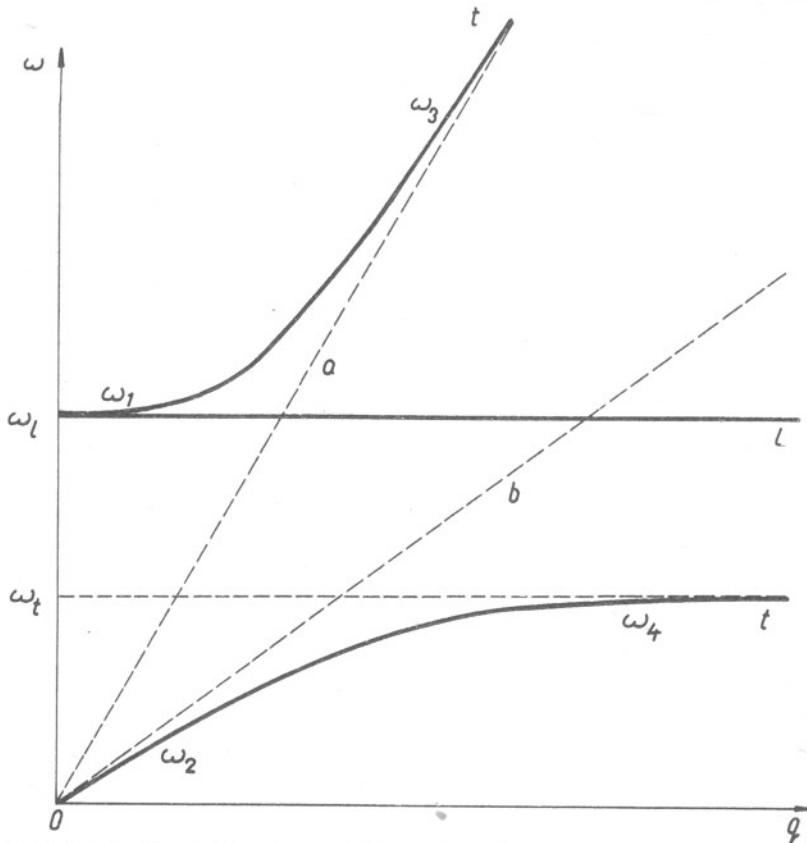
$$\frac{c^2q^2}{\omega^2\epsilon_r(\infty)} = \frac{\omega^2 - \omega_t^2}{\omega^2 - \omega_t^2}. \quad (28.48)$$

Pretože  $q^2 > 0$  a v stabilných mriežkach tiež  $\omega^2 > 0$ , z rovnice (48) vyplýva, že v intervalu  $(\omega_t, \omega_l)$  rovnica (43) nemá riešenie. Riešenia pre priečne i pozdĺžne vlny schematicky znázorňuje obr. 28.1.

Pretože nie je možné oddeliť optické kmity iónovej mriežky od elektromagnetického vlnenia, nemožno ani rozdeliť frekvenčné spektrum na čisto kmitové vetvy a čisto elektromagnetické vetvy. Riešenia  $\omega_1$  a  $\omega_2$  predstavujú „zmes“ kmitov mriežky a elektromagnetického vlnenia s porovnateľným zastúpením.<sup>6</sup> Riešenie  $\omega_1$

<sup>6</sup> V poslednom čase sa čoraz častejšie zjavuje v literatúre spoločné pomenovanie polarítón pre fotón viazaný s elementárnymi excitáciami kryštálov (takými, ako sú fonóny, excitóny, plazmóny a magnóny). Preto riešenie rovnice (43), ktoré je schematicky znázornené na obr. 28.1 plnými čiarami s indexom  $t$ , predstavuje disperzný vzťah polarítónu.

je zhodné s vlastnou frekvenciou longitudinálnych vĺn (ktoré nenesú elektromagnetickú energiu) a má teda charakter optických kmitov mriežky. Riešenie  $\omega_2$  má charakter elektromagnetických vĺn s rýchlosťou  $v = c/\sqrt{\epsilon_r(0)}$ , ktorým zodpovedá priamka  $b$  na obr. 28.1. Riešenie  $\omega_3$  má charakter elektromagnetických vĺn



Obr. 28.1. Dlhovlnné disperzné krivky optických modov a elektromagnetickej vlny v dvojatómovom iónovom kryštáli.

$s v = c/\sqrt{\epsilon_r(\infty)}$  (priamka  $a$ ). Pri vysokých frekvenciách ióny nestačia sledovať elektromagnetické pole a  $\omega_3$  predstavuje takmer čisté elektromagnetické vlnenia v prostredí s indexom lomu  $n = \sqrt{\epsilon_r(\infty)}$ . Konečne i zo vzťahu (20) vidieť, že výchylky  $u$  budú pri vysokých frekvenciách značne menšie než  $E$ . Riešenie  $\omega_4$  naproti tomu má zase charakter čistých transverzálnych optických kmitov mriežky. Pri  $\omega \approx \omega_l$  amplitúdy  $u$  budú značne väčšie než  $E$  [pozri (20)].

Interval  $\langle \omega_l, \omega_t \rangle$  predstavuje pás nedovolených frekvencií, v ktorom nemožno prenášať energiu kryštálom. V tomto páse, ako sme už uviedli, nastane úplný odraz elektromagnetického žiarenia.

Ideálny odraz v intervale frekvencií  $\langle \omega_i, \omega_l \rangle$  je však iba dôsledkom približnej teórie. V uvedenej teórii sme sa obmedzili iba na malé relatívne výchylky atómov. Použili sme harmonické približenie, v rámci ktorého sily sú úmerné výchylkám a mriežkové vlny sa pohybujú nezávisle. Avšak pri frekvenciach  $\omega \approx \omega_i$ , i malé polia  $\mathbf{E}$  sú schopné vyvolať veľké výchylky [pozri (20)]. Teda sme nútení teóriu rozšíriť a uvážiť i anharmonizmus medziatómových sín. Potom už mriežkové vlny nebudú nezávislé, budú interagovať a budú si vzájomne odovzdávať energiu. Vďaka tejto interakcii, energia optických kmitov, získaná od vonkajšieho poľa  $\mathbf{E}$ , bude postupne prechádzať na ostatné kmity mriežok, čo sa nakoniec prejaví ako zvýšenie teploty kryštálu. V ustálenom stave strata energie kmitov mriežky musí byť vyrovnaná tokom elektromagnetickej energie, čo sa makroskopicky prejaví ako absorpcia elektromagnetických vln. Keďže s elektromagnetickým žiareniom interagujú iba priečne kmity (pozdĺžne kmity nemajú zložku polarizácie do smeru elektrického poľa elektromagnetického vlnenia) a majú maximálne amplitúdy pri  $\omega = \omega_i$ , najsilnejšia absorpcia žiarenia bude pri tejto frekvencii. V dôsledku prenikania elektromagnetického vlnenia do kryštálu, samozrejme, poklesne jeho reflexia.

Už sme spomenuli, že kryštály s dvoma atómami na primitívnu bunku majú 3 akustické a 3 optické vetvy. Natíska sa teraz otázka, ktoré sú to tie 3 optické vetvy. Počet vetiev závisí od počtu stupňov voľnosti atómov primitívnej bunky. Na optické kmity pripadajú 3 stupne voľnosti. Avšak elektrické, resp. magnetické pole elektromagnetickej vlny dáva ďalšie „stupne voľnosti“. Dvom nezávislým riešeniam pre  $\mathbf{E}$  zodpovedajú ďalšie dva stupne voľnosti. Preto sme dostali (pozri obr. 28.1) 5 vetiev; transverzálne vetvy sú 2-krát degenerované. Keďže pre veľké  $q$  vetvy priečnych vlnení možno už považovať za čisto elektromagnetické ( $\omega_3$ ) a čisto mechanické ( $\omega_4$ ), vetvy  $\omega_1$  a 2-krát degenerovaná  $\omega_4 = \omega_i$  sú hľadané 3 optické vetvy. Hodnota  $q$ , od ktorej toto rozdelenie možno urobiť, je približne  $10^3 \text{ cm}^{-1}$ . Hraničný impulz Brillouinovej zóny je približne  $10^8 \text{ cm}^{-1}$ , a teda riešenia  $\omega_1$  a  $\omega_2$  pokrývajú iba malú časť zóny. Preto v niektorých prípadoch, ako napr. pri výpočte merných tepiel, možno príspevky od  $\omega_1$  a  $\omega_2$  zanedbať. Keďže v tejto stati sme sa obmedzili na dlhovlnné fonóny  $qa \ll 1$ , grupové rýchlosť optických vln sa rovnajú nule. Všeobecne to však tak nie je a optické vetvy majú tiež disperziu.

## 29. Fonóny

V stati 26 sme videli, že vlastné riešenia pohybovej rovnice atómov kryštalickej mriežky v harmonickom približení sú

$$Q^\mu(\mathbf{q}, \lambda) e^{i\omega(\mathbf{q}, \lambda)t - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{m}}. \quad (29.1)$$

Ďalej tieto riešenia podľa state 23 musia byť ortogonálne a splňovať vzťah úplnosti, t. j.