

ГЕНЕЗИС СТРУКТУРИ ТА ОСОБЛИВОСТІ ДИСПЕРСІЇ ФОНОННОГО СПЕКТРУ ДЛЯ РЯДУ: NaTl, BiF₃, CaF₂, ZnS, Ge

О.Ф. Іваняс, Б.М.Коперльос

Ужгородський державний університет, 294000, Ужгород, вул.Волошина, 54

Проведено дослідження генезису структури для кристалів ряду NaTl, BiF₃, CaF₂, ZnS, Ge, Cu₂O, що відносяться до сімейства з (4a×4a×4a)-надграткою. Записані амплітуди модуляційних функцій таких кристалів. Проаналізовано особливості динамічної матриці для високосиметричних напрямків зони Брилюена з використанням наслідків концепції надпросторої симетрії.

Використання концепції надпросторової симетрії базується на збільшенні розмірності фазового простору для опису структури складних кристалічних утворень та введенні виродженого основного стану, який визначається енергетичним станом протокристала. Складні кристали розглядаються як фізичне збурення основного стану – протокристала. Розгляд складних кристалів кубічної сингонії в концепції надпросторової симетрії дозволяє провести їх об'єднання в сімейства, що мають один порядок *s* природної надгратки (saxsa×sa) і проводити з єдиної точки зору опис фізичних властивостей кристалів цих сімейств. Проведений аналіз показав, що кристали NaTl, BiF₃, CaF₂, ZnS, Ge, Cu₂O

можуть бути віднесені до (4a×4a×4a)-сімейства. В якості протокристала звичайно використовується проста одноатомна гратка. Фізично вироджений стан протокристала розглядається шляхом моделювання силового поля, що враховує усереднену електронну підсистему. Таким чином, модель протокристала еквівалентна одноатомним кристалічним граткам з мотивом протокристала.

Складний кристал розглядається як фізичне збурення основного стану – протокристала [1]. Для опису структури протокристала слід визначити (3+d)-вимірні базисні вектори у прямому та оберненому просторах у вигляді [2]:

$$a_i = (\vec{a}_i, -\sum_{l=1}^3 \sigma_{ij} b_l) = (\vec{a}_i, -\Delta \vec{a}_i); a_{3+j} = (0, b_j) \quad (1)$$

та

$$a^*_i = (a^*_i, 0); a^*_{3+j} = (\sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} \vec{a}_i, \vec{b}_j) = (\Delta^* \vec{b}_j, b^*_j) \quad (2)$$

де a_i, a^*_i, b_j, b^*_j – базисні вектори в прямому та оберненому тривимірному та додатковому *d*-вимірному просторі; σ_{ij} – тензор другого рангу, що визначає співвідношення між тривимірним та додатковим *d*-вимірним просторами.

Кристалічні сполуки NaTl, BiF₃, CaF₂, ZnS та Ge реалізуються як гранеценторовані гратки (ГЦК) з композиційними особливостями розміщення атомів різного сорту, включаючи і вакансії в об'ємо-центрованій кубічній гратці (ОЦК). Виберемо базис протокристала як комбінацію базису ОЦК та додаткового одновимірного базисів:

$$\begin{aligned} a_1 &= (\vec{a}, \vec{a}, \vec{a}, -\frac{b}{4}); a^*_1 = (0, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0); \\ a_2 &= (\vec{a}, \vec{a}, \vec{a}, -\frac{b}{4}); a^*_2 = (\frac{\pi}{a}, 0, \frac{\pi}{a}, 0); \\ a_3 &= (\vec{a}, \vec{a}, \vec{a}, -\frac{b}{4}); a^*_3 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0, 0); \\ a_4 &= (0, 0, 0, b); a^*_4 = (\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}, \frac{2\pi}{b}). \end{aligned}$$

$$\text{та } \sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}.$$

Чотири вектори модуляції розщеплюються на три зірки: одновекторні $\{0,0,0\}$ та $\{\pi/a, \pi/a, \pi/a\}$ і двовекторну $\{\pi/2a, \pi/2a, \pi/2a\}$. Двовекторна зірка для класу O розщеплюється на дві одновекторні зірки $\{\pi/2a, \pi/2a, \pi/2a\}$ та $\{-\pi/2a, -\pi/2a, -\pi/2a\}$. Композиційні можливості реалізації реальних структур пов'язані з трьома

генераторами орбіт для кристалічного класу $O_h - ((0,0,0); (a,a,a); (2a,2a,2a))$, а для класу O з чотирма генераторами, а саме, $((0,0,0); (a,a,a); (-a,-a,-a); (2a,2a,2a))$. Дійсно, можемо записати систему рівнянь для визначення амплітуд функцій модуляції у вигляді:

Клас O	$(0,0,0)$	$M_1 = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \rho_4;$
	(a,a,a)	$M_2 = \rho_1 - 3\rho_2 - 3\rho_3 + i\rho_4;$
	$(2a,2a,2a)$	$M_3 = \rho_1 - \rho_2 + \rho_3 - \rho_4;$
	$(3a,3a,3a)$	$M_4 = \rho_1 + 3\rho_2 - \rho_3 - i\rho_4;$
Клас O_h	$(0,0,0)$	$M_1 = \rho_1 + 2\rho_2 + \rho_3;$
	(a,a,a)	$M_2 = \rho_1 - \rho_3;$
	$(2a,2a,2a)$	$M_3 = \rho_1 - 2\rho_2 + \rho_3$

У явному вигляді амплітуди модуляційних функцій записуються у формі:

Клас O

$$\rho(0) = \frac{M_1 + M_2 + M_3 + M_4}{4},$$

$$\rho(\Delta^* b^*) = \frac{M_1 - iM_2 - M_3 + iM_4}{4}$$

$$\rho(2\Delta^* b^*) = \frac{M_1 - M_2 + M_3 - M_4}{4}$$

$$\rho(3\Delta^* b^*) = \frac{M_1 + iM_2 - M_3 - iM_4}{4}$$

Клас O_h

$$\rho(0) = \frac{M_1 + 2M_2 + M_3}{4}$$

$$\rho(\Delta^* b^*) = \frac{M_1 - M_3}{4}$$

$$\rho(2\Delta^* b^*) = \frac{M_1 - 2M_2 + M_3}{4}$$

Реалізація дійсно існуючих кристалічних структур описується умовами: $NaCl - M_1 = M_3 = M_{Na}; M^2 = M^4 = M_{Ti}; BiF_3 - M_1 = M_3 = M_4 = M_F; M_2 = M_{Bi}; ZnS - M_1 = M_{Zn}; M_2 = M_S; M_3 = M_4 = 0; Ge - M_1 = M_2 = M_{Ge}; M_3 = M_4 = 0$.

Розглянемо особливості фононного спектру складних кристалів, враховуючи можливість розщеплення коливних гілок у високосиметричних напрямках зони Брилюена.

Динамічну матрицю, що моделює

особливості дисперсійних кривих виберемо у формі:

$$D_{\alpha\beta}^{(n)} = \sum_{n=0} A_n \frac{n_\alpha n_\beta}{n^2} (1 - e^{i(n - \rho \Delta^* b^*)}),$$

де A_n - компонента квазіпружного зв'язку, що залежить між відстані між атомами, n_α та n_β - проекції вектора n на осі α і β [4].

Розглянемо високосиметрійний напрямок $\Gamma - R(\lambda)$, для якого $k_x = k_y = k_z$ та $D_{xx} = D_{yy} = D_{zz}; D_{xy} = D_{xz} = D_{yz}$. Використовуючи матрицю подібності GP

$$GP = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ одержуємо}$$

$$\Omega^2(k \square s \Delta^* b^*) = \begin{pmatrix} D_{xx}(k-s\Delta^*b^*) & 2D_{xy}(k-s\Delta^*b^*) & 0 & 0 \\ 0 & D_{xx}(k-s\Delta^*b^*) & -D_{xy}(k-s\Delta^*b^*) & 0 \\ 0 & 0 & D_{xx}(k-s\Delta^*b^*) & -D_{xy}(k-s\Delta^*b^*) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_1^2(k-s\Delta^*b^*) & 0 & 0 \\ 0 & \omega_2^2(k-s\Delta^*b^*) & 0 \\ 0 & 0 & \omega_2^2(k-s\Delta^*b^*) \end{pmatrix}$$

Після цих перетворень детермінант набуває вигляду:

$$\prod_{i=1}^3 |\omega_i^2(k-s\Delta^*b^*)\delta_{ss'} - \omega^2 F| = 0.$$

Таким чином, для напрямку $\Gamma - R$ (λ) рівняння руху може бути записане для власних значень динамічної матриці $\omega_i^2(k-s\Delta^*b^*)\delta_{ss'}$, тому маємо повне розділення коливних гілок на поперечні

та повздовжні. Аналогічним чином можна одержати повне розділення для напрямків $\Gamma - X$ та $\Gamma - M$, розглядаючи точки зони Брилюена, форма якої наведена на рис.1, пов'язані векторами модуляції $(k-s\Delta^*b^*)$.

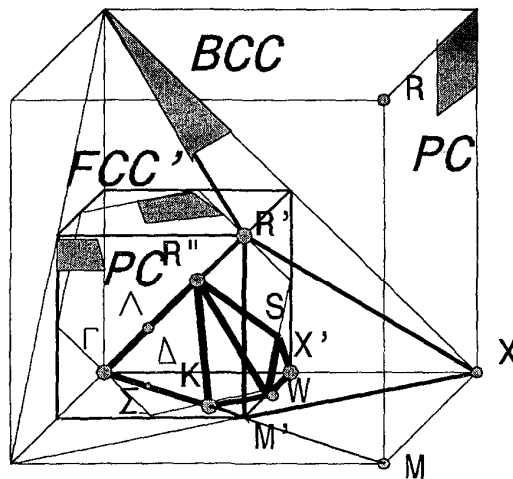


Рис.1. Трансформація зони Брилюена від простої кубічної ґратки до гранецентрованої кубічної.

ЛІТЕРАТУРА

1. И.И. Небола, Н.Р. Хархалис, В.А. Копцик, ФТТ. 29, 3223 (1987).
2. Т. Janssen, J.Phys.: Sol.St.Phys., 12, 5381 (1979).
3. И.И. Небола, А.Ф. Иваняс, В.Я. Киндрат, ФТТ. 35, 1852 (1993)
4. А.И. Ансельм, Введение в теорию полупроводников (Наука, Москва, 1978).

**STRUCTURE GENESIS AND PECULIARITIES OF PHONON SPECTRA
DISPERSION FOR STRUCTURES OF THE ROW:
NaTl, BiF₃, CaF₂, ZnS, Ge**

A.F. Ivanyas, B.M. Koperlos

Uzhgorod State University, 294000, Uzhgorod, Voloshin, 54

The research of the structure genesis структури for crystals of a row NaTl, BiF₃, CaF₂, ZnS, Ge, Cu₂O concerning to the family with (4a×4a×4a)-superlattice is carried out. Are written down the amplitudes of modulation functions of such crystals. The dynamic matrix features for the high symmetry directions of a zone Brillouin with use of conclusions of the concept of superspatial symmetry are analysed.