КОМПОЗИЦІЙНІ ОСОБЛИВОСТІ СКЛАДНИХ КРИСТАЛІВ ТА ЇХ ПРОЯВ У ДИНАМІЦІ ГРАТКИ

І.І. Небола

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

Виходячи з концепції надпросторової симетрії проаналізовані композиційні особливості складних кристалів. Встановлено алгоритм побудови матриці подібності, що зводить матричне рівняння для узагальненої матриці до матричного рівняння на власні значення. Показана можливість розрахунку дисперсійних кривих вздовж високосиметричних напрямків зони Брилюєна для складних кристалів кубічної сингонії через суперпозицію фрагментів узагальненої динамічної матриці, компоновка яких аналогічна матриці амплітуд масових модуляційних функцій..

Композиційні особливості реалізації складних кристалів по механізму заповнення трансляційно інваріантних позицій, що задаються базисом протокристала, атомами різного сорту, включаючи вакансії, логічно охоплюються концепцією надпросторової симетрії. При цьому можуть бути враховані різні комбінації співвідношень базисів протокристала та складного кристала, а також всі можливі варіанти композиційного заповнення. Використання повної сукупності векторів модуляції дозволяє визначити амплітуди масових (окупаційних) функцій модуляції та на їх основі побудувати узагальнену динамічну матрицю складного кристала. Узагальнена динамічна матриця визначається через суперпозицію динамічних матриць протокристала, вибраних у різних точках зони Брилюена, які пов'язані векторами модуляції, та матриці збурення, описану через амплітуди масових функцій. Роз'язок матричного рівняння відносно $\omega^2(\kappa)$ дозволяє отримати дисперсійні залежності фононних спектрів, а врахування різних механізмів композиційного заповнення – прослідкувати за відповідним генезисом дисперсійних залежностей.

Дисперсійні криві фононних спектрів складних кристалів визначаються як розв'язки матричного рівняння при умові рівності нулю визначника [1]:

$$\left| D_{\alpha\beta}(k-s\Delta^* b^*)\delta_{ss'} - \omega^2 \rho_{ss'}\delta_{\alpha\beta} \right| = \left| D - \omega^2 \rho_{ll'} \right| = 0 \text{ ,} \quad (1)$$

де $D_{\alpha\beta}(k-s\Delta^* b^*)$ динамічні матриці одноатомного протокристала, які визначені в точках зони Брилюєна, що пов'язані векторами модуляції $s\Delta^* b^*$. Власні значення цієї матриці визначають енергетично вироджений стан протокристала. Матриця $\rho_{ss'}$ визначає збурення, що реалізується у складному кристалі і визначається амплітудами модуляційних масових (окупаційних) функцій, заданих у позиціях складного кристала в залежності від векторів модуляції $s\Delta^* b^*$.

Повна сукупність векторів модуляцій знаходиться як комбінація трьох-вимірних компонент *(3+d)*-вимірних векторів оберненого базису , причому прямий і обернений базиси визначаються виходячи із співвідношень

$$a_i = (a_i - \sigma_{ij} b_j);$$
$$a_{3+j} = (0, b_j) \quad (2)$$

та

$$a_i^* = (a_i^*, 0);$$
$$a_{3+j}^* = (\sigma_{ji} a_i^*, b_{ij}) \quad (3)$$

де - σ_{ij} -матриця порядка *(3xd)*.

В якості приклада розглянемо сімейство кристалів *Ge, ZnS, NaTl*, BiF_3, CaF_2, яке характеризується гранецентрованою (ГЦК) а в якості протокристалла вибирається одноатомний (ОЦК), (3+d) - мірні прямий і обернений базиси в такому випадку можна записати у вигляді [2]:

$$a_1 = (\bar{a}, a, a, -\frac{b}{4});$$
$$a_2 = (a, \bar{a}, a, -\frac{b}{4});$$
$$a_3 = (a, a, \bar{a}, -\frac{b}{4}); \quad (4)$$
$$a_4 = (0,0,0,b);$$

та

$$a_1^* = (0, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0);$$
$$a_2^* = (\frac{\pi}{a}, 0, \frac{\pi}{a}, 0);$$
$$a_3^* = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0, 0); \quad (5)$$
$$a_4^* = (\frac{\pi}{4a}, \frac{\pi}{4a}, \frac{\pi}{4a}, \frac{2\pi}{ba}).$$

Повна сукупність векторів модуляції $(s\Delta^* b^*)$ містить 4 вектори *(0,0,0)* , *(π/2a, π/2a, π/2a), (π/a, π/a, π/a), (3π/2a, 3π/2a, 3π/2a)*, а повна сукупність незалежних позицій - *(0,0,0), (a,a,a), (2a,2a,2a)* та *(3a,3a,3a)*.

Для визначення $\rho_s(n, \Delta n)$ використаємо рівняння:

$$M_l(n_{s'}, \Delta n_{s'}) = \sum_{s=1}^{4} \rho_s(n_{s'}, \Delta n_{s'}) e^{i(s-1)(\Delta^* b^* n_{s'} - b^* \Delta n_{s'})} \quad (6)$$

яке характеризується узагальненою *(3+d)*-вимірною трансляційною інваріантністю. Для спрощення подальших викладок скористаємося трьох-вимірною проекцією *(3+d)*-вимірного розгляду, тобто $\Delta n=0$.

Запишемо явний вигляд системи рівнянь (6):

$$M_1(0,0,0) = \rho_1+\rho_2+\rho_3+\rho_4;$$
$$M_2(a,a,a) = \rho_1-i\rho_2-\rho_3+i\rho_4;$$
$$M_3(2a,2a,2a) = \rho_1-\rho_2+\rho_3-\rho_4;$$
$$M_4(3a,3a,3a) = \rho_1+i\rho_2-\rho_3-i\rho_4 \quad (7)$$

або в матричному вигляді:

$$M_{s'} = G_{s's}\rho_s$$

де $G_{s's} = e^{i(s-2)'\Delta^* b^* n_s}$.

Відмітимо, що рядки (стовпчики) цієї матриці є незвідними зображеннями абстрактної групи *Ф(4)*.

Зрозуміло, що існує обернена матриця $G^{-1}_{ll'}$, яка дозволяє описати розв'язки $\rho_{l'}$ у вигляді:

$$G_{ll'}^{-1} M_{l'} = G_{ll'}^{-1} G_{l'l} \rho_{s'} = \rho_{s'l} \quad (10)$$

де $M_{l'}$ та ρ_{sl} – вектори-стовпчики.

Знаючи значення ρ випишемо у явному вигляді $\rho_{ll'}$, врахувавши, що

$$\rho(-s\Delta^* b^*) = \rho(4 - s\Delta^* b^*) \quad (11)$$

$$\rho_{ll''} = \begin{bmatrix} \rho_1 & \rho_2 & \rho_3 & \rho_4 \\ \rho_4 & \rho_1 & \rho_2 & \rho_3 \\ \rho_3 & \rho_4 & \rho_1 & \rho_2 \\ \rho_2 & \rho_3 & \rho_4 & \rho_1 \end{bmatrix} \times E(3) = \rho_{ss''} \times E(3) \quad (12)$$

де *E(3)* – одинична матриця 3-го порядку.

Записавши $G_{ll'} = G_{ss'}$ x *E(3)*, легко показати, що

$$G_{ln}^{-1} \rho_{nm} G_{ml'} = M_l \delta_{ll'}, \quad (13)$$

тобто, матриці G та G^{-1} є матрицями подібності, що діагоналізують матрицю $\rho_{ll'}$. Оскільки матриці D і $\rho_{ll'}$ можуть розглядатися як багаторівневі [3], то для них дозволені різні композиційні представлення, включаючи

$$D_h = \sum_{s=1}^{4} D_{\alpha\beta}^{s} \otimes O_s(4) \text{ та } \rho_{ll'}^{h} = E(3) \otimes \rho_{ss'}, \quad (13)$$

де $O_s(4)$ матриці виду

$$O_1(4) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

а отже можна записати матриці подібності

$$G_h = \tilde{E}(3) \times G_{ss'} \text{ та } G_h^{-1} = E(3) \times G_{ss'} . \quad (14)$$

Матриці G та G^{-1} діагоналізують матрицю $\rho_{ll'}^{h}$, а задача (1) зводиться до задачі на власні значення матриці (13) і записується у вигляді:

$$D_h' = \frac{1}{\sqrt{M_{ll}}} G_h^{-1} D_h G_h \frac{1}{\sqrt{M_{ll}}} \delta_{ss'} . \quad (15)$$

де M_{ll} і M_{ll} – відповідно, матриця-рядок, матриця-стовпчик.

Композиційні закономірності реалізації певної кристалічної структури таким чином зводяться до упорядкування масових характеристик в M_{ll} і M_{ll}. Відмітимо один загальний висновок із такого розгляду. Виберемо напрямок $\Gamma - R$ $(k_x = k_y = k_z)$ зони Брилюена, для якого матриця $D_{\alpha\beta}(k-s\Delta^*b^*)$ має вигляд

$$\begin{pmatrix} D_{xx}(k-s\Delta^*b^*) & D_{xy}(k-s\Delta^*b^*) & D_{xy}(k-s\Delta^*b^*) \\ D_{xy}(k-s\Delta^*b^*) & D_{xx}(k-s\Delta^*b^*) & D_{xy}(k-s\Delta^*b^*) \\ D_{xy}(k-s\Delta^*b^*) & D_{xy}(k-s\Delta^*b^*) & D_{xx}(k-s\Delta^*b^*) \end{pmatrix} \tag{16}$$

тобто існує матриця подібності $G3$, що діагоналізує

$$\Omega^2 = G3D_{\alpha\beta}G3^{-1} = \begin{pmatrix} D_{xx}+2D_{xy} & 0 & 0 \\ 0 & D_{xx}-D_{xy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{xx}-D_{xy} \end{pmatrix} \qquad (17),$$

а отже матриця (15) розпадається на три блочні матриці 4-го порядку виду:

$$\begin{bmatrix} \Omega_i^2(k-s\Delta^*b^*)-\omega^2\rho_1 & -\omega^2\rho_2 & -\omega^2\rho_3 & -\omega^2\rho_4 \\ -\omega^2\rho_4 & \Omega_i^2(k-s\Delta^*b^*)-\omega^2\rho_1 & -\omega^2\rho_2 & -\omega^2\rho_3 \\ -\omega^2\rho_3 & -\omega^2\rho_4 & \Omega_i^2(k-s\Delta^*b^*)-\omega^2\rho_1 & -\omega^2\rho_2 \\ -\omega^2\rho_2 & -\omega^2\rho_3 & -\omega^2\rho_4 & \Omega_i^2(k-s\Delta^*b^*)-\omega^2\rho_1 \end{bmatrix}, \tag{18}$$

кожна з яких перетворенням G та G^{-1} дозволяє звести блок узагальненої динамічної матриці до виду:

$$\left| G^{-1}\Omega^2 G - \tilde{M}_{ll'}\omega^2 \right| = 0, \tag{19}$$

де $G^{-1}\Omega^2 G = G_{ll'}\Omega^2_{l'l}$, (20)

якщо Ω^2 – діагональна матриця.

Таким чином, ми можемо вважати, що трансформована узагальнена динамічна матриця буде мати вигляд циркулянта з таким рядком:

$$G_{ll'}\Omega^2_{l'} = \tilde{\Omega}^2_{ll}, \tag{21}$$

що дозволяє явно переписати (18):

$$\begin{bmatrix} \Omega_1^2 - M_1\omega^2 & \Omega_2^2 & \Omega_3^2 & \Omega_4^2 \\ \Omega_4^2 & \Omega_1^2 - M_2\omega^2 & \Omega_2^2 & \Omega_3^2 \\ \Omega_3^2 & \Omega_4^2 & \Omega_1^2 - M_3\omega^2 & \Omega_2^2 \\ \Omega_2^2 & \Omega_3^2 & \Omega_4^2 & \Omega_1^2 - M_4\omega^2 \end{bmatrix} \tag{22}$$

Отже, композиційні закономірності компоновки складних кристалів, що реалізуються при визначенні системи рівнянь (7) і відображені у явному вигляді $\rho_{ll'}$ (12) однозначно визначають виляд блочної матриці (22).

Список литературы

1. И.И.Небола, А.Ф.Иваняс, В.Я. Киндрат, ФТТ, 35, 852 (1993).
2. A.Janner, T.Janssen, Acta Cryst., A36, 338, (1980).
3. В.В. Воеводин, Е.Е. Тыртишников, Вычислительые процессы с теплицивыми матрицами (Наука, Москва,1987), 320.

COMPOSITIONAL REGULARITIES OF COMPLEX CRYSTALS AND THEIR APPEARANCE FOR LATTICE DYNAMICS PECULIARITIES

I. I. Nebola

Uzhgorod State University, Uzhgorod, Ukraine

Proceeding from the concept of superspacel symmetry the composite laws of complex crystals are analysed. The algorithm of construction of a matrix of the similarity bringing the matrix equation for a generalized dynamic matrix the matrix equation on eigen values is established. The opportunity of account dispesrsion curves along high symmetry directions of Brillouin through a superposition of fragments of the generalized dynamic matrix is shown, which configuration is similar to a matrix of modulation mass function amplitudes.