

ДИСПЕРСИЯ ИЗГИБНЫХ МОД В МЯГКИХ ДВУМЕРНЫХ РЕШЕТКАХ

А. Н. Ипатов ^{a,b*}, Д. А. Паршин ^{b**}, Д. А. Конюх ^{c***}

^a Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия

^b Академический университет им. Ж. И. Алфёрова
194021, Санкт-Петербург, Россия

^c Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 18 июля 2021 г.,
после переработки 18 августа 2021 г.
Принята к публикации 20 августа 2021 г.

Построена последовательная теория спектров изгибных фононных мод в простых двумерных кристаллических решетках. Получены аналитические выражения для дисперсионных соотношений двумерных решеток различной конфигурации. Показано, что распространение изгибных мод, имеющих квадратичный закон дисперсии, становится возможным при взаимодействии каждого атома не только с ближайшими соседями, но и с более дальними атомами. При этом оказалось необходимым, чтобы знаки эффективных силовых констант различались, сохраняя при этом устойчивость системы. Продемонстрировано, что существует соотношение силовых констант решетки, зависящее от ее геометрической конфигурации, при котором учет влияния более дальних координационных сфер воспроизводит квадрат дисперсионного соотношения первой сферы, сохраняя его угловую изотропию в широком диапазоне волновых векторов.

DOI: 10.31857/S0044451022010047

1. ВВЕДЕНИЕ

Двумерные кристаллические материалы и структуры в последние десятилетия являются объектом исследований многих научных лабораторий, занимающихся разработкой и внедрением наноразмерной элементной базы [1]. В начальный период проводившихся исследований, в особенности после первых экспериментов с графеном [2, 3], основной интерес был в первую очередь направлен на электронные свойства подобных систем. В дальнейшем внимание исследователей было обращено на колебательные процессы как в двумерных углеродных решетках [4, 5], так и в других низкоразмерных кристаллических структурах [6]. Интерес к низкочастотным колебательным модам объясняется их определяющим влиянием на теплопроводность

материалов при низких температурах. Хорошо известно, что низкочастотные колебательные моды в газах, жидкостях и твердых телах как кристаллических, так и аморфных, носят акустический характер. Дисперсионная зависимость для плоских акустических волн является линейной и может быть представлена в виде $\omega = v_s k$, где ω — частота колебаний, а k — волновой вектор. Здесь важно отметить, что при малых k скорость звука v_s не зависит от частоты ω , в результате чего передача информации акустическими волнами может осуществляться практически без искажений.

Распространение упругих волн в среде описывается волновым уравнением [7],

$$\nabla^2 u = \frac{1}{v_s^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad (1)$$

где $u(\mathbf{r}, t)$ — смещение элемента системы относительно положения равновесия. Его решение в виде плоской бегущей волны

$$u(\mathbf{r}, t) \propto \exp(i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}))$$

определяет закон дисперсии $\omega(\mathbf{k})$.

* E-mail: andrei_ipatov@mail.ru

** E-mail: dmitry.a.parshin@gmail.com

*** E-mail: conyuh.dmitrij@yandex.ru

В общем случае дисперсионное соотношение следует из уравнения движения, описывающего процесс распространения колебаний. Так, в случае изгибных волн в тонких макроскопических пластинках уравнение движения принимает вид [7]

$$\frac{\rho h}{D} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nabla^4 u, \quad (2)$$

где ρ — плотность материала пластинки, D — ее жесткость на изгиб и h — толщина. Этому уравнению соответствует уже не линейный, а квадратичный закон дисперсии $\omega \propto k^2$:

$$\omega = k^2 D / \rho h. \quad (3)$$

Несмотря на большое количество проведенных экспериментальных и теоретических исследований, вопрос о том, какой именно закон дисперсии будет реализован в двумерной системе с данными параметрами кристаллической решетки, остается открытым. В частности, в ряде работ [4, 5] было высказано предположение, что в случае решетки графена в пределе $k \rightarrow 0$ для изгибных волн должна выполняться дисперсионная зависимость $\omega \propto k^2$, характерная для тонких макроскопических мембран. Другие авторы, например [8–11], предполагают более сложный вид $\omega(\mathbf{k})$, сочетающий в себе как линейный, так и квадратичный члены, в зависимости от соотношения между упругими константами взаимодействия между атомами из различных координационных сфер. Проблема дисперсии изгибных мод для линейной цепочки атомов была детально проанализирована в книге [12], где также было продемонстрировано, что в общем случае дисперсионная зависимость $\omega(k)$ атомной цепочки в длинноволновом пределе $ka \ll 1$ содержит как линейное, так и квадратичное слагаемое.

В данной работе представлен теоретический анализ дисперсии упругих волн в двумерном кристаллическом материале. Основное внимание мы концентрируем на изгибных колебательных модах, для описания которых оказалось необходимым выйти за рамки приближения ближайших соседей. Наш подход основан на модели силовых констант Борна–фон Кармана. Окружающие выделенный атом соседи по кристаллической структуре разделяются на координационные сферы (оболочки) в зависимости от их относительного расположения. При этом эффективные упругие константы κ_j , соответствующие j -й оболочке, рассматриваются как свободные параметры модели, которые могут варьироваться, изменяя таким образом закон дисперсии. В результате решения полученных уравнений движения бы-

ли получены дисперсионные соотношения $\omega(\mathbf{k})$ для простых двумерных решеток различной конфигурации и проанализированы их зависимости от выбора силовых констант κ_j . Были определены условия, при которых закон дисперсии фоновых мод приобретает квадратичный характер, $\omega \propto k^2$, характерный для изгибных колебаний в тонких макроскопических пластинках [7], в отличие от обычных акустических волн, для которых выполняется соотношение $\omega \propto k$, и скорость звука $v_s = \partial\omega/\partial k$ при малых k оказывается конечной и не зависящей от частоты. Напротив, в случае изгибных волн зависимость $\omega \propto k^2$ приводит к тому, что в длинноволновом пределе $v_s \propto k \rightarrow 0$. Другими словами, низкочастотные изгибные колебания не могут распространяться в среде с квадратичным законом дисперсии. Нами установлено, что квадратичная зависимость $\omega \propto k^2$ для простых двумерных решеток различной геометрии может быть получена только при условии учета взаимодействия с атомами из нескольких координационных сфер, как это уже наблюдалось у одномерных атомных цепочек [12] и решетки графена [11]. При этом эффективные упругие константы, относящиеся к ближайшим соседям и к более удаленным атомам, могут существенно различаться и даже иметь разные знаки [13, 14]. Последнее условие, как оказалось, имеет принципиальное значение для дисперсии изгибных волн в двумерных решетках вне зависимости от их геометрической конфигурации.

2. ИЗГИБНЫЕ МОДЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

2.1. Колебания двумерной квадратной решетки

Учет взаимодействия только с ближайшими соседями

Рассмотрим двумерную систему, атомы которой расположены в узлах ячеек квадратной решетки с периодом a , а эффективная сила упругости с константой взаимодействия κ_1 действует только между ближайшими соседями, по направлению к которым в декартовой системе координат выберем векторы трансляции,

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_x, \quad \mathbf{a}_2 = a\mathbf{e}_y. \quad (4)$$

Обозначим смещение атомов из положения равновесия через $u_{n,m}$, где индексы n и m соответствуют координатам атома x и y относительно осей. С

учетом того, что каждый атом окружен четырьмя ближайшими соседями, уравнение движения имеет вид

$$m \frac{d^2 u_{n,m}}{dt^2} = \kappa_1 (u_{n,m-1} + u_{n,m+1} + u_{n+1,m} + u_{n-1,m} - 4u_{n,m}). \quad (5)$$

Решение будем искать в виде плоской волны:

$$u_{n,m} = u_0 \exp(i\omega t) \exp(-i(n\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 + m\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)). \quad (6)$$

В результате подстановки (6) в (5) получаем дисперсионное соотношение

$$\omega_{(1)}^2 = 4\Omega_1^2 \left(\sin^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{k_y a}{2} \right) \right), \quad (7)$$

где $\Omega_1 = \sqrt{\kappa_1/m}$. Таким образом, в пределе малых k при учете взаимодействия атомов решетки только с ближайшими соседями наблюдается изотропный по отношению к направлению волнового вектора линейный закон дисперсии,

$$\omega_{(1)} \approx v_s k, \quad (8)$$

где $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, $v_s = \Omega_1 a$ — скорость звука, не зависящая от частоты ω .

Атомы взаимодействуют с соседями из трех ближайших координационных сфер

Если допустить, что атомы могут взаимодействовать не только с ближайшими соседями из первой координационной сферы, но также и с атомами из второй и третьей сфер (всего в совокупности с 12 соседними атомами), уравнение движения (5) преобразуется к виду

$$m \frac{d^2 u_{n,m}}{dt^2} = \kappa_1 (u_{n,m-1} + u_{n,m+1} + u_{n+1,m} + u_{n-1,m} - 4u_{n,m}) + \kappa_2 (u_{n-1,m-1} + u_{n+1,m+1} + u_{n-1,m+1} + u_{n+1,m-1} - 4u_{n,m}) + \kappa_3 (u_{n,m-2} + u_{n,m+2} + u_{n+2,m} + u_{n-2,m} - 4u_{n,m}), \quad (9)$$

где κ_1 , κ_2 и κ_3 — соответствующие упругие константы. Полагая, что решения уравнения (9) по-прежнему могут быть представлены в виде суперпозиции собственных колебательных мод (6), перепишем (9):

$$-m\omega^2 = \kappa_1 (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} - 4) + \kappa_2 (e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)} - 4) + \kappa_3 (e^{i2\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i2\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i2\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i2\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} - 4), \quad (10)$$

откуда следует закон дисперсии:

$$\omega_{(1-3)}^2 = 4 \left\{ \frac{\kappa_1}{m} \left(\sin^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{k_y a}{2} \right) \right) + \frac{\kappa_2}{m} \left(\sin^2 \left(\frac{a(k_x + k_y)}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{a(k_x - k_y)}{2} \right) \right) + \frac{\kappa_3}{m} \left(\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a) \right) \right\}. \quad (11)$$

В пределе $ka \ll 1$ последнее выражение можно переписать, ограничившись первыми членами разложения в ряд,

$$\omega_{(1-3)}^2 \approx \frac{4k^2 a^2}{m} \left(\frac{\kappa_1}{4} + \frac{\kappa_2}{2} + \kappa_3 \right) = \left(\Omega_1^2 + 2\Omega_2^2 + 4\Omega_3^2 \right) k^2 a^2, \quad (12)$$

причем дисперсионное соотношение по-прежнему остается изотропным по отношению к направлению волнового вектора. Для того чтобы было возможным распространение волны упругой деформации в двумерной квадратной атомной решетке с одним атомом в элементарной ячейке, необходимо выполнение условия для упругих констант:

$$\frac{\kappa_1}{4} + \frac{\kappa_2}{2} + \kappa_3 > 0. \quad (13)$$

В случае, когда константы имеют разные знаки, например, при $\kappa_1 > 0$ и $\kappa_2, \kappa_3 < 0$, оказывается возможной ситуация, когда выполняется соотношение

$$\kappa_1 + 2\kappa_2 + 4\kappa_3 = 0, \quad (14)$$

при котором первый член в дисперсионном соотношении (12), соответствующий линейному закону дисперсии (8), исчезает, и сохраняются только следующие члены разложения в ряд,

$$\omega_{(1-3)}^2 \approx -\frac{4}{3} \left(\frac{\Omega_1^2}{16} (k_x^4 + k_y^4) + \frac{\Omega_2^2}{8} (k_x^4 + 6k_x^2 k_y^2 + k_y^4) + \Omega_3^2 (k_x^4 + k_y^4) \right) a^4. \quad (15)$$

В результате дисперсионная зависимость приобретает вид, характерный для изгибных мод, $\omega^2 \sim k^4$, но при этом даже при малых k в общем случае приобретает анизотропный характер по отношению к направлению волнового вектора. В этом проявляется отличие простой квадратной решетки от простой гексагональной (треугольной), которая в области длинных волн ведет себя как изотропная среда [15].

Следует отметить, что при определенном «магическом» наборе параметров, $\kappa_2 = -\kappa_1/4$, $\kappa_3 = -\kappa_1/8$, формула (11) преобразуется к виду

$$\omega_{(1-3)}^2 = 2\Omega_1^2 \left(\sin^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{k_y a}{2} \right) \right)^2, \quad (16)$$

что с точностью до множителя воспроизводит выражение для квадрата значения $\omega_{(1)}^2$, определенно выражением (7). Как будет показано ниже, значения «магических» упругих констант определяются единственным образом и зависят от геометрии решетки. Другими словами, включение взаимодействия с атомами, отстоящими более чем на один период решетки, при некотором соотношении упругих констант не только приводит к смене линейного закона дисперсии (8) на квадратичный, но и добавок при этом зависимость (15) для $ka \ll 1$ становится практически изотропной по отношению к направлению волнового вектора, как это было при взаимодействии только с атомами первой сферы, и приобретает вид

$$\omega_{(1-3)} \approx \frac{\Omega_1 a^2}{\sqrt{8}} k^2, \quad (17)$$

что, как и следовало ожидать, воспроизводит результат (15) при выборе $\kappa_2 = -\kappa_1/4$, $\kappa_3 = -\kappa_1/8$.

Таким образом, закон распространения изгибных колебаний в двумерной квадратной решетке в длинноволновом пределе оказывается идентичным известному дисперсионному соотношению для упругих волн в однородных тонких пластинках (3).

Смена характера дисперсионной зависимости с линейного на квадратичный при малых значениях волнового вектора хорошо видна на рис. 1, на котором приведены графики дисперсионных кривых, построенные с учетом взаимодействия с атомами только первой координационной сферы (7) и с учетом трех координационных сфер (11) при $\kappa_2 = -\kappa_1/4$, $\kappa_3 = -\kappa_1/8$. Для наглядности на рисунке отмечены точки симметрии первой зоны Бриллюэна, соответственно, $\Gamma(\mathbf{k} = (0, 0))$, $M(\mathbf{k} = (\pm\pi/a, 0))$ и $K(\mathbf{k} = (\pm\pi/a, \pm\pi/a))$. Квадратичный и изотропный характер зависимости (17) при малых значениях волнового вектора также хорошо заметен

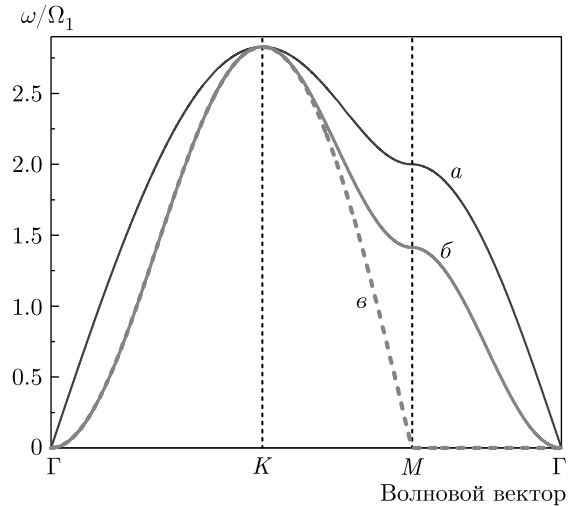


Рис. 1. Дисперсионная зависимость приведенной частоты $\omega_{(1-3)}(k_x, k_y)/\Omega_1$: *a* — с учетом первой координационной сферы (7), *б* — с учетом трех координационных сфер (11) при $\kappa_2 = -\kappa_1/4$, $\kappa_3 = -\kappa_1/8$, *в* — зависимость $\omega(k_x, k_y)/\Omega_1$, полученная при учете взаимодействия с атомами двух координационных сфер при $\kappa_2 = -\kappa_1/2$

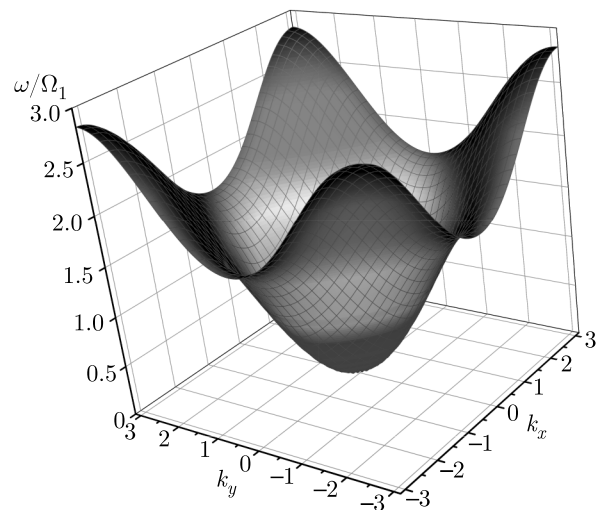


Рис. 2. Дисперсионная зависимость приведенной частоты $\omega_{(1-3)}(k_x, k_y)/\Omega_1$ с учетом трех координационных сфер (11) при $\kappa_2 = -\kappa_1/4$, $\kappa_3 = -\kappa_1/8$

на рис. 2, на котором представлено двумерное распределение $\omega_{(1-3)}(k_x, k_y)$ для «магического» соотношения упругих констант при взаимодействии с атомами из трех координационных сфер. Относительно представленных на рис. 1 графиков следует также отметить одну особенность квадратной решетки, для которой в случае учета трех координационных сфер частота упругих волн в K -точке Дирака первой зоны Бриллюэна не зависит от упругих констант

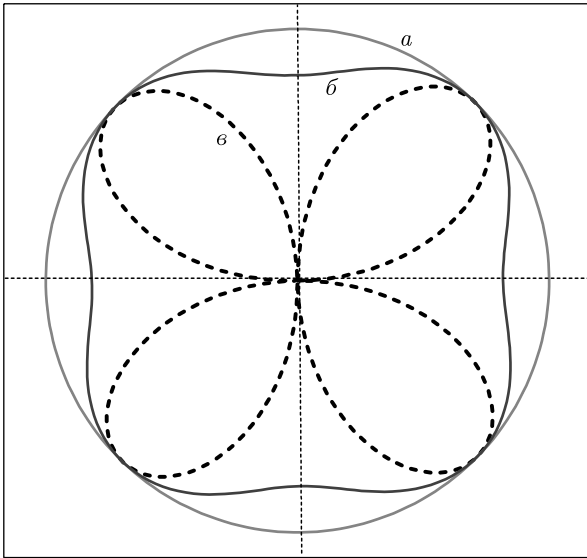


Рис. 3. Угловая зависимость приведенной частоты $\omega_{(1-3)}(k_x, k_y)/\omega_{max}$ при малых k : *a* — с учетом трех координационных сфер (11) при $\kappa_2 = -\kappa_1/4$, $\kappa_3 = -\kappa_1/8$; *б* — при $\kappa_2 = -\kappa_1/3$, $\kappa_3 = -5\kappa_1/12$; *в* — с учетом двух координационных сфер при $\kappa_2 = -\kappa_1/2$

второй и третьей сфер, и, как следует из (11), при любых их значениях равна $2\sqrt{2}\Omega_1$.

Следует обратить внимание на то, что смена линейной дисперсионной зависимости на квадратичную также может произойти при дополнительном учете взаимодействия только с атомами из второй координационной сферы. Как следует из (14), одной из возможных комбинаций упругих констант, обеспечивающих исчезновение линейного члена $\omega \sim k$, является $\kappa_2 = -\kappa_1/2$, что, согласно (14), как раз дает $\kappa_3 = 0$, т. е. вклад третьей сферы полностью исчезает. Однако, как видно на рис. 1, при этом появляется сильная анизотропия изгибных колебательных мод, при которой квадратичный характер дисперсии сохраняется для волновых векторов \mathbf{k} , направленных вдоль линии $\Gamma \rightarrow K$, в то время как для направления $\Gamma \rightarrow M$ их распространение оказывается невозможным.

Для наглядности на рис. 3 приведены зависимости частоты $\omega_{(1-3)}(\mathbf{k})$, приведенной к ее максимальному значению, от направления волнового вектора относительно орта \mathbf{e}_x при малых k . В случае трех сфер при $\kappa_2 = -\kappa_1/4$, $\kappa_3 = -\kappa_1/8$ зависимость $\omega(k_x, k_y)$, согласно (16), изотропна, как и при учете только первой координационной сферы. При других значениях упругих констант, например $\kappa_2 = -\kappa_1/3$, $\kappa_3 = -5\kappa_1/12$, возникает угловая анизотропия при сохранении квадратичной зависимости $\omega \sim k^2$. Кри-

вая, соответствующая учету взаимодействия только с соседями из первых двух координационных сфер при $\kappa_2 = -\kappa_1/2$ наглядно демонстрирует, что угловая зависимость становится существенно анизотропной, причем, как было указано выше, для направления $\Gamma \rightarrow M$

$$\omega(k_x, 0) = \omega(0, k_y) = 0$$

и, как видно на рис. 1, это выполняется не только в пределе малых k , но и во всем диапазоне изменения k_x и k_y .

Атомы взаимодействуют с атомами из произвольного числа координационных сфер

Легко убедиться, что условие (14) для силовых констант соответствует соотношению

$$\sum_{j=1}^3 N_j \kappa_j r_j^2 = 0. \quad (18)$$

Здесь N_j — число атомов в j -й координационной сфере, r_j — ее радиус, а κ_j — соответствующая константа взаимодействия. Действительно, в кристаллической решетке, ячейки которой представляют собой правильные N -угольники, атомы, взаимодействующие с которыми учитывается при расчете закона дисперсии изгибных мод, располагаются на соответствующих координационных окружностях с радиусами r_j и отстоят друг от друга на равные углы $\alpha_j = 2\pi/N_j$. Таким образом, уравнения (10), (11) для трех координационных сфер могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \omega_{(1-3)}^2 &= \sum_{j=1}^3 \frac{\kappa_j}{m} \left(N_j - \sum_{n_j=1}^{N_j} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{n_j}) \right) = \\ &= 4 \sum_{j=1}^3 \frac{\kappa_j}{m} \left(\sum_{n_j=1}^{N_j/2} \sin^2 \left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{n_j}}{2} \right) \right), \quad (19) \end{aligned}$$

где j — номер координационной сферы, n_j — индекс атома на ее поверхности, \mathbf{r}_{n_j} — его радиус-вектор, проведенный из начала координат,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{n_j} = kr_j \cos(n_j \alpha_j + \phi_j), \quad (20)$$

ϕ_j — угол между \mathbf{k} и первым из радиус-векторов, \mathbf{r}_{1n_j} . В длинноволновом пределе, $ka \ll 1$, из (19) в первом порядке разложения в ряд имеем

$$\begin{aligned} \omega_{(1-3)}^2 &\approx \sum_j \frac{\kappa_j}{m} (kr_j)^2 \sum_{n_j=1}^{N_j/2} \cos^2 \left(\frac{2\pi n_j}{N_j} + \phi_j \right) = \\ &= \frac{k^2}{4m} \sum_{j=1}^3 N_j \kappa_j r_j^2, \quad (21) \end{aligned}$$

откуда следует условие для силовых констант (18), при котором линейный закон дисперсии сменяется квадратичным (16). Для рассматриваемой двумерной квадратной решетки $N_j = 4$, а радиусы окружностей равны, соответственно, $r_1 = a$, $r_2 = \sqrt{2}a$, $r_3 = 2a$, что в результате и приводит к полученному ранее соотношению (14).

Следует отметить, что соотношение вида (18) должно выполняться в общем случае для любого числа координационных сфер, атомы на которых располагаются в вершинах вписанных правильных N -угольников. Это утверждение можно проверить, в частности, путем дополнительного учета взаимодействия с восемью атомами из четвертой координационной сферы, которую также можно рассматривать как две одинаковые сферы, содержащие по четыре атома и повернутые друг относительно друга на угол $\pi/4$.

Уравнение, аналогичное (10), теперь приобретает вид

$$\begin{aligned} -m\omega^2 = & \kappa_1 \left\{ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} - 4 \right\} + \\ & + \kappa_2 \left\{ e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)} + \right. \\ & + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)} - 4 \left. \right\} + \kappa_3 \left\{ e^{i2\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i2\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i2\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + \right. \\ & + e^{-i2\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} - 4 \left. \right\} + \kappa_4 \left\{ e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + \right. \\ & + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+2\mathbf{a}_2)} + \\ & + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+2\mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-2\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-2\mathbf{a}_2)} - 8 \left. \right\}. \quad (22) \end{aligned}$$

Соответствующий закон дисперсии записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \omega_{(1-4)}^2 = & 4 \left\{ \frac{\kappa_1}{m} \left(\sin^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{k_y a}{2} \right) \right) + \right. \\ & + \frac{\kappa_2}{m} \left(\sin^2 \left(\frac{a(k_x+k_y)}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{a(k_x-k_y)}{2} \right) \right) + \\ & + \frac{\kappa_3}{m} \left(\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a) \right) + \\ & + \frac{\kappa_4}{m} \left(\sin^2 \left(\frac{a(2k_x+k_y)}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{a(2k_x-k_y)}{2} \right) \right) + \\ & \left. + \sin^2 \left(\frac{a(k_x+2k_y)}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{a(k_x-2k_y)}{2} \right) \right\} \quad (23) \end{aligned}$$

и в пределе $ka \ll 1$ при ограничении первыми членами разложения в ряд может быть переписан как

$$\omega_{(1-4)}^2 \approx \left(\Omega_1^2 + 2\Omega_2^2 + 4\Omega_3^2 + 10\Omega_4^2 \right) k^2 a^2, \quad (24)$$

где $\Omega_4 = \sqrt{\kappa_4/m}$, причем изотропия дисперсии относительно направления волнового вектора по-

прежнему сохраняется. Последнее выражение эквивалентно сумме (21) для четырех слагаемых, где $N_4 = 8$, $r_4 = \sqrt{5}a$. Таким образом, при дополнительном учете атомов из следующей координационной сферы соотношение (14), определяющее условия, при которых линейный характер дисперсии сменяется квадратичным, преобразуется к виду

$$\Omega_1^2 + 2\Omega_2^2 + 4\Omega_3^2 + 10\Omega_4^2 = 0. \quad (25)$$

По такой же схеме будет осуществляться дальнейшее увеличение числа координационных сфер, причем независимо от их количества условием смены характера дисперсии будет оставаться равенство нулю суммы

$$\sum_{j=1} N_j \kappa_j r_j^2$$

по всем учитываемым сферам.

2.2. Колебания двумерной треугольной решетки

Учет взаимодействия только с ближайшими соседями

Ближайшие соседи в первой координационной сфере двумерной треугольной (простой гексагональной) решетки расположены в вершинах правильного шестиугольника со стороной a . Пара трансляционных векторов в декартовой системе координат может быть выбрана как

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2} (\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y), \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2} (\mathbf{e}_x - \sqrt{3}\mathbf{e}_y). \end{aligned} \quad (26)$$

Динамика атома, положение которого относительно осей, направленных вдоль векторов трансляции, определяется индексами n и m , и дисперсионное соотношение представляется в форме

$$\omega_{(1)}^2 = \Omega_1^2 \left\{ N_1 - (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_1)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_1)}) \right\}, \quad (27)$$

где $N_1 = 6$, $\Omega_1 = \sqrt{\kappa_1/m}$, и может быть переписано в явном виде с учетом (26):

$$\begin{aligned} \omega_{(1)}^2 = & 4\Omega_1^2 \left\{ \sin^2 \left(\frac{(k_x + \sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \right. \\ & \left. + \sin^2 \left(\frac{(k_x - \sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \sin^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) \right\}. \quad (28) \end{aligned}$$

В длинноволновом пределе в первом порядке разложения в ряд дисперсионная зависимость является изотропной по отношению к направлению векторов трансляции и определяется линейным членом, $\omega \sim k$:

$$\omega_{(1)}^2 \approx \frac{3}{2} \Omega_1^2 k^2 a^2. \quad (29)$$

Аналогично тому, как это было сделано в (19), формула (27) может быть переписана в виде

$$\omega_{(1)}^2 = 4\Omega_1^2 \left(\sum_{n_1=1}^{N_1/2} \sin^2 \left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{n_1}}{2} \right) \right), \quad (30)$$

где $N_1 = 6$, а скалярные произведения радиус-векторов \mathbf{r}_{n_1} и волнового вектора \mathbf{k} определяются в соответствии с (20), где $r_1 = a$, $\phi_1 = 0$. В пределе $ka \ll 1$ в первом порядке разложения в ряд выражение (30) преобразуется к виду

$$\omega_{(1)}^2 \approx \Omega_1^2 \sum_{n_1=1}^{N_1/2} \cos^2 \left(\frac{2\pi n_1}{N_1} \right) = \frac{3}{2} \Omega_1^2 k^2 a^2, \quad (31)$$

что в точности совпадает с формулой (29). Таким образом, как и в случае квадратной решетки, при учете взаимодействия только с ближайшими соседями из первой координационной сферы дисперсионная зависимость $\omega(k)$ является изотропной по отношению к направлению волнового вектора и линейной (8), где в данном случае $v_s = \sqrt{3/2} \Omega_1 a$.

Учет взаимодействия с атомами из трех ближайших координационных сфер

При дополнительном включении взаимодействия с атомами из второй и третьей координационных сфер, которые также расположены в вершинах правильных шестиугольников, дисперсионная зависимость приобретает вид

$$\begin{aligned} \omega^2 = & \Omega_1 \left\{ N_1 - (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + \right. \\ & \left. + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}) \right\} + \\ & + \Omega_2 \left\{ N_2 - (e^{i\mathbf{k} \cdot (2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2)} + \right. \\ & \left. + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}) \right\} + \\ & + \Omega_3 \left\{ N_3 - (e^{i2\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i2\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{2i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-2i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + \right. \\ & \left. + e^{2i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)} + e^{-2i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}) \right\}, \quad (32) \end{aligned}$$

где $N_1 = N_2 = N_3 = 6$, $\Omega_2 = \sqrt{\kappa_2/m}$ и $\Omega_3 = \sqrt{\kappa_3/m}$ — соответствующие собственные частоты

для второй и третьей координационных сфер. Последняя формула также может быть переписана в явном виде с учетом (26):

$$\begin{aligned} \omega_{(1-3)}^2 = & 4\Omega_1^2 \left\{ \sin^2 \left(\frac{(k_x + \sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \right. \\ & \left. + \sin^2 \left(\frac{(k_x - \sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \sin^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) \right\} + \\ & + 4\Omega_2^2 \left\{ \sin^2 \left(\frac{(3k_x + \sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \right. \\ & \left. + \sin^2 \left(\frac{(3k_x - \sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \sin^2 \left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2} \right) \right\} + \\ & + 4\Omega_3^2 \left\{ \sin^2 \left(\frac{(k_x + \sqrt{3}k_y)a}{2} \right) + \right. \\ & \left. + \sin^2 \left(\frac{(k_x - \sqrt{3}k_y)a}{2} \right) + \sin^2(k_x a) \right\}. \quad (33) \end{aligned}$$

При этом, как и в аналогичной ситуации с квадратной решеткой, при определенном «магическом» наборе параметров, $\kappa_2 = -\kappa_1/5$, $\kappa_3 = -\kappa_1/10$, формула (32) с точностью до численного множителя воспроизводит квадрат выражения (27), описывающего закон дисперсии с учетом взаимодействия только с атомами из ближайшей координационной сферы.

Дисперсионное соотношение вновь может быть преобразовано аналогично (19), (20). В длинноволновом пределе, $ka \ll 1$, как и в случае квадратной решетки (21), с учетом того, что $N_j = 6$ (для всех $j = 1, 2, 3$), а радиусы координационных окружностей равны $r_1 = a$, $r_2 = \sqrt{3}$, $r_3 = 2a$, закон дисперсии приобретает вид

$$\begin{aligned} \omega_{(1-3)}^2 \approx & \frac{k^2}{4m} \sum_{j=1}^3 N_j \kappa_j r_j^2 = \\ & = \frac{3}{2} (\Omega_1^2 + 3\Omega_2^2 + 4\Omega_3^2) k^2 a^2. \quad (34) \end{aligned}$$

Отсюда следует соотношение для упругих констант, при котором исчезает линейный член $\omega \sim k$,

$$\kappa_1 + 3\kappa_2 + 4\kappa_3 = 0, \quad (35)$$

а дисперсионная зависимость при малых значениях волнового вектора приобретает квадратичный характер и преобразуется к форме

$$\omega_{(1-3)}^2 \approx -\frac{3}{32} (\Omega_1^2 + 9\Omega_2^2 + 16\Omega_3^2) k^4 a^4. \quad (36)$$

Так, например, при выборе $\kappa_2 = -\kappa_1/5$, $\kappa_3 = -\kappa_1/10$ формула (36) приобретает вид

$$\omega_{(1-3)}^2 \approx \frac{9}{40} \Omega_1^2 k^4 a^4, \quad (37)$$

эквивалентный закону дисперсии для изгибных волн в однородных тонких пластинках (3).

Важно отметить, что, в отличие от квадратной решетки, для которой учет влияния двух следующих координационных сфер с точностью до множителя воспроизводит выражение для квадрата дисперсионного соотношения, соответствующего первой сфере, только при одной-единственной комбинации упругих констант ($\kappa_2 = -\kappa_1/4$, $\kappa_3 = -\kappa_1/8$), для двумерной треугольной решетки в пределе $ka \ll 1$ это выполняется не только при $\kappa_2 = -\kappa_1/5$, $\kappa_3 = -\kappa_1/10$, но и для всех возможных их комбинаций, удовлетворяющих условию (35). При этом, как следует из (36), при смене линейного характера дисперсионной зависимости (31) на квадратичный (36) при всех возможных сочетаниях упругих констант (35) при малых k будет сохраняться угловая изотропия закона дисперсии. Однако необходимо обратить внимание на то, что, как и в случае квадратной решетки, точное воспроизведение квадрата закона дисперсии первой координационной сферы во всем диапазоне значений волнового вектора у треугольной решетки при учете влияния трех оболочек также происходит только при одном-единственном «магическом» соотношении, $\kappa_2 = -\kappa_1/5$, $\kappa_3 = -\kappa_1/10$.

Смена характера дисперсионной зависимости при малых значениях волнового вектора хорошо видна на рис. 4, на котором построены графики дисперсионных кривых с учетом взаимодействия с атомами только первой координационной сферы (28), с учетом двух сфер при $\kappa_2 = -\kappa_1/3$ и с учетом трех сфер при $\kappa_2 = -\kappa_1/5$, $\kappa_3 = -\kappa_1/10$. На рисунке вновь для наглядности отмечены точки симметрии первой зоны Бриллюэна, соответственно, $\Gamma(\mathbf{k} = (0, 0))$, $M(\mathbf{k} = (0, 2\pi/\sqrt{3}a))$ и $K(\mathbf{k} = (2\pi/3a, 2\pi/\sqrt{3}a))$.

Квадратичная зависимость (36) и ее близкое к изотропному угловое распределение для малых k также хорошо видны на рис. 5, где представлено двумерное изображение $\omega_{(1-3)}(k_x, k_y)$, соответствующее «магическому» соотношению упругих констант при взаимодействии с атомами из трех координационных сфер.

Отдельный интерес представляет изменение закона дисперсии в зависимости от соотношения между силовыми константами при увеличении волно-

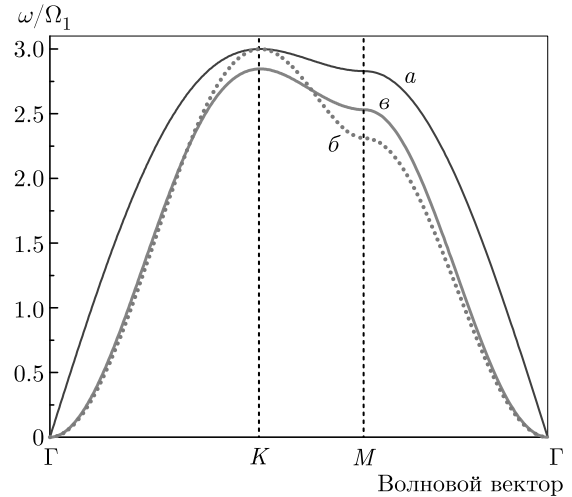


Рис. 4. Дисперсионная зависимость приведенной частоты $\omega_{(1)}(k_x, k_y)/\Omega_1$: *a* — с учетом первой координационной сферы (28), *б* — с учетом двух координационных сфер $\omega_{(1-2)}(k_x, k_y)/\Omega_1$ при $\kappa_2 = -\kappa_1/3$ и *в* — с учетом трех координационных сфер $\omega_{(1-3)}(k_x, k_y)/\Omega_1$ при $\kappa_2 = -\kappa_1/5$, $\kappa_3 = -\kappa_1/10$

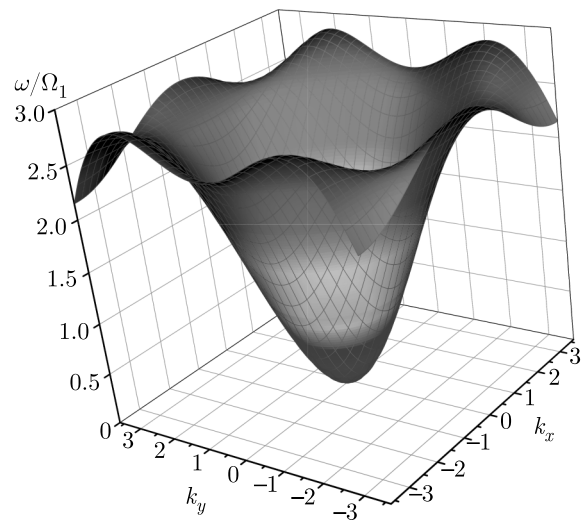


Рис. 5. Дисперсионная зависимость приведенной частоты $\omega_{(1-3)}(k_x, k_y)/\Omega_1$ с учетом трех координационных сфер при $\kappa_2 = -\kappa_1/5$, $\kappa_3 = -\kappa_1/10$

вого вектора. На рис. 6*a* изображены дисперсионные зависимости, построенные с учетом взаимодействия с атомами из трех координационных сфер при различных наборах упругих констант, удовлетворяющих условию (35). Легко видеть, что с изменением константы κ_2 в сторону положительных значений по мере удаления от «магического» соотношения (синяя линия) зависимость частоты от

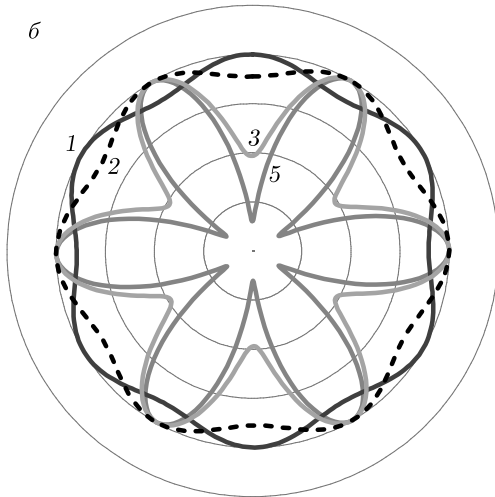
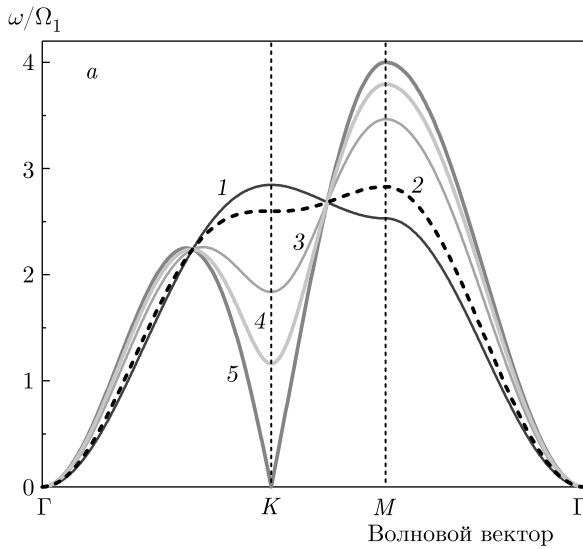


Рис. 6. а) Дисперсионная зависимость приведенной частоты $\omega_{(1-3)}(k_x, k_y)/\Omega_1$ с учетом трех координационных сфер при различных значениях упругих констант, удовлетворяющих условию (35): 1 — $\kappa_2 = -\kappa_1/5$; 2 — $\kappa_2 = 0$; 3 — $\kappa_2 = 0.5\kappa_1$; 4 — $\kappa_2 = 0.8\kappa_1$; 5 — $\kappa_2 = \kappa_1$. б) Соответствующие угловые зависимости приведенной частоты $\omega_{(1-3)}/\omega_{max}$ при значении модуля волнового вектора $k = 2\pi/3a$

волнового вектора перестает быть монотонной, при этом по-прежнему сохраняется квадратичный характер в области $ka \ll 1$. При этом на дисперсионной кривой появляется участок, где групповая скорость отрицательна, $d\omega/dk < 0$, так называемая область обратной волны [16]. Более того, при некотором критическом соотношении $\kappa_1 = \kappa_2 = 1, \kappa_3 = -1$ (красная кривая) частота колебаний в K -точке Дирака обращается в нуль и дальнейшее увеличение

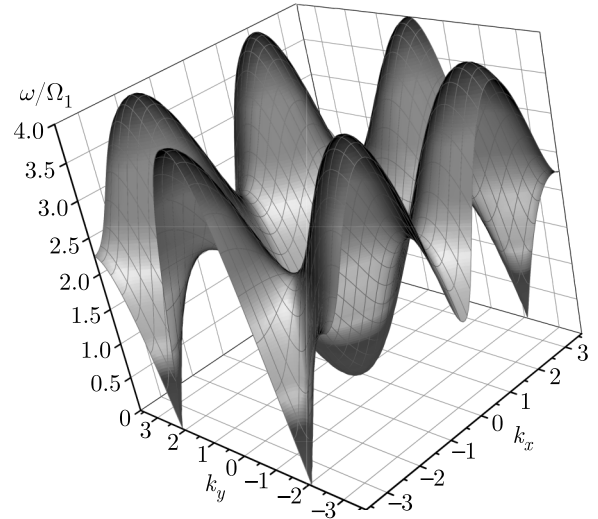


Рис. 7. Дисперсионная зависимость приведенной частоты $\omega_{(1-3)}(k_x, k_y)/\Omega_1$ с учетом трех координационных сфер при значениях упругих констант $\kappa_2 = \kappa_1, \kappa_3 = -\kappa_1$ (красная линия 5 на рис. 6)

κ_2 приведет к потере устойчивости системы. При этом, как видно на рис. 6а, в отличие от длинноволновой области $ka \ll 1$, для которой любая комбинация упругих констант, удовлетворяющая соотношению (35), обеспечивает изотропный характер зависимости $\omega \sim k^2$ (36), ситуация при больших значениях волнового вектора в корне меняется. На рис. 6б представлены зависимости приведенной частоты $\omega(k_x, k_y)/\omega_{max}$ от угла между направлением волнового вектора \mathbf{k} и ортом \mathbf{e}_x , построенные при $k = 2\pi/3a$, что соответствует точке M первой зоны Бриллюэна. Из графиков следует, что при «магическом» соотношении констант $\kappa_2 = -\kappa_1/5, \kappa_3 = -\kappa_1/10$ угловая зависимость все еще близка к изотропной (синяя линия) даже при больших k , в то время как по мере приближения к критическим значениям $\kappa_1 = \kappa_2 = 1, \kappa_3 = -1$ анизотропия возрастает и частота при \mathbf{k} , соответствующих направлениям на K -точки Дирака, стремится к нулю, в то время как для направлений на точки M частота оказывается максимальной, что согласуется с рис. 6а. Эта угловая анизотропия хорошо видна также на рис. 7, на котором изображена дисперсионная зависимость, построенная для критического соотношения констант с учетом взаимодействия атомов из трех координационных сфер. Отчетливо видно, что при малых k закон дисперсии носит квадратичный и изотропный характер, в то время как по мере увеличения модуля волнового вектора анизотропия возрастает, и в K -точках Дирака частота равна нулю.

Этот результат согласуется с предсказанным в работе [15] появлением при длинах волн сравнимых с расстоянием между частицами в решетке «звуковых каналов», в которых скорость распространения волн много больше скоростей распространения фононов в других направлениях, что также подтверждается в экспериментах по исследованию теплопроводности кристаллических структур [17]. Здесь важно еще раз отметить, что, как видно на рис. 6б, при «магическом» соотношении упругих констант простая двумерная треугольная решетка ведет себя как изотропная среда в широком диапазоне длин волн, а не только в пределе $ka \ll 1$.

Учет взаимодействия с атомами из произвольного числа координационных сфер

По аналогии с квадратной решеткой определим, какое влияние на закон дисперсии оказывает взаимодействие с атомами из более удаленных координационных сфер. Для примера в уравнение (32) добавим атомы из четвертой сферы, которая представляет собой две одинаковые окружности, содержащие по шесть атомов и повернутые друг относительно друга на угол $\pi/6$. Важно отметить, что, в отличие от ситуации с квадратной решеткой, в совокупности эти две сферы не являются правильным вписанным N -угольником и поэтому подход, основанный на выражении (19), применим только к каждой из них по отдельности. Уравнение, описывающее закон дисперсии, теперь принимает вид

$$\begin{aligned} \omega^2 = & \Omega_1 \left\{ (N_1 - (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + \right. \\ & \left. + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)})) \right\} + \\ & + \Omega_2 \left\{ N_2 - (e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+2\mathbf{a}_2)} + \right. \\ & \left. + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+2\mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)}) \right\} + \\ & + \Omega_3 \left\{ N_3 - (e^{i2\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i2\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i2\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{-i2\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + \right. \\ & \left. + e^{i2\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + e^{-i2\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)}) \right\} + \\ & + \Omega_4 \left\{ 2N_4 - (e^{i\mathbf{k}\cdot(3\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(3\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)} + \right. \\ & + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1+3\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1+3\mathbf{a}_2)} + \\ & + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-2\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-2\mathbf{a}_2)}) - \\ & - (e^{i\mathbf{k}\cdot(3\mathbf{a}_1+2\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(3\mathbf{a}_1+2\mathbf{a}_2)} + \\ & + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+3\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+3\mathbf{a}_2)} + \\ & \left. + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)}) \right\}, \quad (38) \end{aligned}$$

где $N_4 = 6$, $\Omega_4 = \sqrt{\kappa_4/m}$. В результате дисперсионную зависимость можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \omega_{(1-4)}^2 = & \omega_{(1-3)}^2 + 4\Omega_4^2 \left\{ \sin^2 \left(\frac{(k_x + 3\sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \right. \\ & + \sin^2 \left(\frac{(k_x - 3\sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \sin^2 \left(\frac{(5k_x + \sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \\ & + \sin^2 \left(\frac{(5k_x - \sqrt{3}k_y)a}{4} \right) + \sin^2 \left(\frac{(2k_x + \sqrt{3}k_y)a}{2} \right) + \\ & \left. + \sin^2 \left(\frac{(2k_x - \sqrt{3}k_y)a}{2} \right) \right\}, \quad (39) \end{aligned}$$

где значение $\omega_{(1-3)}^2$ определено согласно (33). В пределе $ka \ll 1$ с учетом (34) закон дисперсии для четырех взаимодействующих сфер приобретает вид

$$\omega_{(1-4)}^2 \approx \frac{3}{2} (\Omega_1^2 + 3\Omega_2^2 + 4\Omega_3^2 + 14\Omega_4^2) k^2 a^2, \quad (40)$$

что согласуется с результатом суммирования по четырем координационным сферам аналогично формуле (21), где $r_4 = \sqrt{7}a$. Таким образом, в случае учета взаимодействия с атомами из четырех координационных сфер условием смены линейного закона дисперсии на квадратичный становится соотношение

$$\Omega_1^2 + 3\Omega_2^2 + 4\Omega_3^2 + 14\Omega_4^2 = 0. \quad (41)$$

Дальнейшее увеличение числа учитываемых сфер, как и в случае квадратной решетки, может быть осуществлено аналогичным образом.

3. ДИНАМИЧЕСКАЯ МАТРИЦА ИЗГИБНЫХ МОД

В этом разделе рассмотрим альтернативный подход к определению колебательных спектров системы взаимодействующих частиц, основанный на использовании динамической матрицы силовых констант (она же гессиан потенциальной поверхности). Для простоты рассмотрим систему, содержащую N взаимодействующих частиц с единичными массами. Смещения $u_i(t)$ атома с индексом i такой системы вблизи ее положения равновесия в общем виде описывается уравнением движения

$$\frac{d^2 u_i(t)}{dt^2} = -\hat{M} u_i(t), \quad (42)$$

в котором \hat{M} — динамическая матрица размером $N \times N$. Собственные числа динамической матрицы \hat{M} соответствуют квадратам собственных колебательных частот ω_i^2 . При рассмотрении большой

конечной системы $N = \text{const} \gg 1$ матрица \hat{M} по своей сути является ее дискретным лапласианом. В скалярной модели смещений динамическая матрица \hat{M} выражается через энергию взаимодействия частиц U следующим образом:

$$M_{ij} = \frac{\partial^2 U}{\partial u_i \partial u_j}. \quad (43)$$

В такой записи видно, что квадратная динамическая матрица \hat{M} является симметричной матрицей: $M_{ij} = M_{ji}$. Важным симметричным свойством системы является ее трансляционная инвариантность относительно сдвига $u \rightarrow u + \text{const}$. Это свойство накладывает ограничения на вид динамической матрицы в виде правила сумм:

$$\sum_i M_{ij} = \sum_j M_{ij} = 0. \quad (44)$$

Пусть динамическая матрица $\hat{M}^{(1)}$ описывает взаимодействие только между ближайшими соседями, расположенными в узлах некоторой кристаллической решетки. Тогда она может быть представлена в следующем виде:

$$\hat{M}^{(1)} = \hat{D} - \hat{B}. \quad (45)$$

Здесь матрица весов \hat{D} — диагональная матрица, элемент которой D_{ii} равен числу ближайших атомов, с которым взаимодействует атом i , т. е. числу атомов из первой координационной сферы. Симметричная матрица смежности \hat{B} устроена так, что ее элемент B_{ij} равен 1 и отличен от нуля, только если есть взаимодействие между атомами с номерами i и j . Из такого представления следует, что

$$D_{ii} = \sum_j B_{ij},$$

и, таким образом, обеспечивает выполнение условия (44) для динамической матрицы:

$$\sum_j M_{ij}^{(1)} = 0.$$

Пусть динамическая матрица $\hat{M}^{(n)}$ описывает взаимодействие с атомами из n -й координационной сферы. Тогда полная динамическая матрица, которая описывает взаимодействие атома со всей решеткой, представима в следующем виде:

$$\hat{M} = \sum_{n \geq 1} \kappa_n \hat{M}^{(n)}. \quad (46)$$

Константы κ_n представляют собой константы взаимодействия в соответствующих координационных сферах. При некотором соотношении между этими упругими константами κ_n полная динамическая

матрица может быть представима в следующем виде:

$$\hat{M} = \alpha \hat{M}^{(1)} (\hat{M}^{(1)})^T. \quad (47)$$

где $\alpha > 0$ — некоторый масштабный множитель. В таком представлении динамическая матрица $\hat{M}^{(1)}$ играет роль матрицы инцидентности (с точностью до ортогонального преобразования), строки которой нумеруют атомы, а столбцы нумеруют связи между атомами. При этом матрица $\hat{M}^{(1)}$ является квадратной, и число связей системы равно ее числу степеней свободы N . В результате система, описываемая динамической матрицей $\hat{M}^{(1)} (\hat{M}^{(1)})^T$, согласно правилу Максвелла [18] обладает нулевой макроскопической жесткостью. Таким образом, среда становится предельно мягкой, и в ней не могут распространяться колебания с большой длиной свободного пробега.

Для нахождения «магического» соотношения между константами упругости κ_n , при котором выполняется условие (47), воспользуемся представлением (45):

$$\hat{M} = \alpha (\hat{D} - \hat{B}) (\hat{D} - \hat{B})^T. \quad (48)$$

Будем считать, что каждый атом в решетке связан с одинаковым числом соседей D . В случае простой квадратной решетки $D = 4$, в случае простой треугольной решетки $D = 6$. Учитывая, что матрицы \hat{D} и \hat{B} являются симметричными, из сравнения (46) и (48) можно найти соотношение для определения упругих констант κ_n :

$$\sum_{n \geq 1} \kappa_n \hat{M}^{(n)} = 2\alpha D \hat{M}^{(1)} - \alpha \hat{M}^{(1)} \hat{Q}^{(1)}, \quad (49)$$

где $\hat{Q}^{(1)} = \hat{D} + \hat{B}$. Матрица $\hat{M}^{(1)} \hat{Q}^{(1)}$ описывает взаимодействие не соседних атомов i и j , а атомов, имеющих хотя бы одного общего соседа, т. е. соседей второго порядка. Действительно, вклад в сумму

$$\sum_k B_{ik} B_{jk}$$

будет отличен от нуля, только если атом с номером k взаимодействует с атомами с номером i и с номером j . При этом матрица $\hat{M}^{(1)} \hat{Q}^{(1)}$ может описывать взаимодействие атомов из нескольких координационных сфер. В общем случае для описания взаимодействия с соседями порядка m выбирается матрица $\hat{D}^m - \hat{B}^m$.

В случае простой квадратной решетки $\hat{M}^{(1)} \hat{Q}^{(1)}$ описывает взаимодействие с атомами, лежащими во второй и третьей координационных сферах. При этом каждый атом имеет двух соседей второго порядка из второй сферы и одного из третьей. В этом

случае, как следует из (49), $\kappa_1 = 2\alpha D = 8\alpha$, $\kappa_2 = -2\alpha$ и $\kappa_3 = -\alpha$, что в точности воспроизводит «магический» набор силовых констант, удовлетворяющий соотношению (14). Наличие отрицательных связей в более дальнем взаимодействии и делает среду достаточно мягкой для распространения в ней упругих колебаний. Для получения такой предельно мягкой среды можно пренебречь взаимодействием с другими координационными сферами с $n \geq 4$.

Для простой треугольной решетки матрица $\hat{M}^{(1)}\hat{Q}^{(1)}$ включает в себя взаимодействие с атомами, лежащими в первой, во второй и в третьей координационных сферах. Как и в случае простой квадратной решетки, каждый атом имеет двух соседей второго порядка из второй сферы и одного из третьей, но также и двух соседей второго порядка из первой координационной сферы. В результате получаем «магическое» соотношение

$$\kappa_1 = 2\alpha(D - 1) = 10\alpha, \quad \kappa_2 = -2\alpha, \quad \kappa_3 = -\alpha,$$

удовлетворяющее условию (35).

Таким образом, условие (47), которое обеспечивает воспроизведение квадрата закона дисперсии первой координационной сферы во всем диапазоне значений волнового вектора, выполняется при единственном наборе упругих констант, значения которых определяются геометрией решетки. При этом суммирование (46) осуществляется по всем координационным сферам, в которых присутствуют соседи второго порядка. Интересно проверить полученные результаты на примере сотовидной гексагональной решетки графена, элементарная ячейка которого, в отличие от рассмотренных выше простых квадратной и треугольной решеток, содержит два атома [4]. Каждый атом графена имеет $D = 3$ ближайших соседей и один соседний узел второго порядка во второй координационной сфере. В этом случае матрица $\hat{M}^{(1)}\hat{Q}^{(1)}$ описывает взаимодействие с атомами только из второй координационной сферы, что приводит к «магическим» соотношениям $\kappa_1 = 2\alpha D = 6\alpha$, $\kappa_2 = -\alpha$. Этот результат в точности совпадает со значениями силовых констант, при которых, согласно [19, 20], происходит смена линейного закона дисперсии на квадратичный для изгибных волн в кристаллической решетке графена. Таким образом, предлагаемый подход к анализу дисперсии изгибных мод в двумерных решетках может быть применен к системам любой геометрической конфигурации, обладающим определенной симметрией.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы предлагаем простую модель для изгибных мод в двумерной кристаллической решетке, позволяющую получить наглядные аналитические формулы для дисперсионных соотношений без проведения численных расчетов. В результате проведенного теоретического анализа фононных спектров в простых двумерных кристаллических решетках был выявлен ряд особенностей, которые позволили сделать выводы об условиях, при которых возможно распространение изгибных волн, для которых характерен квадратичный закон дисперсии $\omega \sim k^2$. Показано, что независимо от геометрии элементарной ячейки двумерной решетки, для смены линейной дисперсионной зависимости на квадратичную необходимо учитывать взаимодействие каждого атома не только с ближайшими соседями, но и с атомами из более удаленных координационных сфер. При этом оказалось, что при описании динамики решетки в рамках модели силовых констант Борна–фон Кармана для возникновения квадратичной дисперсионной зависимости необходимо, чтобы эффективные упругие константы, соответствующие разным координационным сферам, имели разные знаки и были связаны между собой соотношением вида (18). Другими словами, физической причиной смены закона дисперсии с линейного на квадратичный является полная компенсация положительных упругих констант отрицательными. В результате изгибный модуль упругости и скорость звука в длинноволновом пределе обращаются в нуль. При этом в пределе малых k дисперсионная зависимость не только приобретает квадратичный характер, но и становится практически изотропной по отношению к направлению волнового вектора, в результате чего для описания процесса распространения изгибных волн в двумерной кристаллической решетке может быть использовано волновое уравнение для тонких однородных макроскопических пластинок.

Нами также показано, что для трех взаимодействующих координационных сфер существует единственный «магический» набор силовых констант, при котором выражение, описывающее закон дисперсии, с точностью до численного множителя воспроизводит квадрат дисперсионной зависимости, полученной для первой сферы, во всем диапазоне изменения волновых векторов. При этом угловая зависимость $\omega(\mathbf{k})$ близкая к изотропной также сохраняется практически для всех k . Таким образом, появляется возможность путем подбора силовых кон-

тант придать двумерной кристаллической решетке свойства подобные упругим свойствам тонкой макроскопической пластинки. Напротив, по мере удаления констант взаимодействия от «магических» значений даже при сохранении условия (18), обеспечивающего квадратичный закон дисперсии, характерный для изгибных мод, угловая зависимость становится все более анизотропной, причем для некоторых направлений распространение упругих волн становится невозможным.

Таким образом, можно сделать вывод, что дисперсионные характеристики двумерных кристаллических решеток, от которых, в частности, зависит их теплопроводность, в значительной мере определяются соотношением между силовыми константами, причем учет взаимодействия с атомами из нескольких координационных сфер может коренным образом менять свойства решетки по сравнению с приближением, учитывающим вклад только от ближайших соседей.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. И. Балабанов, *Нанотехнологии. Наука будущего*, Эксмо, Москва (2009).
2. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Science* **306**, 666 (2004).
3. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Nature* **438**, 197 (2005).
4. M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press, New York (2012).
5. M. I. Katsnelson, *The Physics of Graphene*, Cambridge University Press, New York (2020).
6. Hanyu Zhu, Jun Yi, Ming-Yang Li et al., *Science* **359**, 579 (2018).
7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987).
8. Л. А. Фальковский, *ЖЭТФ* **142**, 560 (2012).
9. L. A. Falkovsky, *ЖЭТФ* **132**, 446 (2007).
10. L. A. Falkovsky, *Phys. Lett. A* **372**, 5189 (2008).
11. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, К. В. Кравченко и др., *ФНТ* **35**, 208 (2008).
12. А. М. Косевич, *Основы механики кристаллической решетки*, Наука, Москва (1972).
13. R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical and Chemical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, UK (2003).
14. Г. Л. Беленький, Э. Ю. Салаев, Р. А. Сулейманов, *УФН* **155**, 89 (1988).
15. С. П. Никитенкова, А. И. Потапов, *ВНТР* **31**, 25 (2010).
16. C. Qui, X. Zhang, and Z. Liu, *Phys. Rev. B* **71**, 054302-1 (2005).
17. В. Н. Богомолов, Л. С. Парфеньева, И. А. Смирнов и др., *ФТТ* **44**, 175 (2002).
18. J. C. Maxwell, *Phil. Mag.* **27**, 294 (1865).
19. И. О. Райков, Д. А. Колюх, А. Н. Ипатов, Д. А. Паршин, *ФТТ* **11**, 1866 (2020).
20. А. Н. Ипатов, Д. А. Паршин, Д. А. Колюх, *ЖЭТФ* **160**, вып. 4 (2021).