

УДК 348.35 : 534.01 : 539,125

© 1990

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ АЛМАЗОПОДОБНЫХ КРИСТАЛЛОВ В КОНЦЕПЦИИ СВЕРХПРОСТРАНСТВЕННОЙ СИММЕТРИИ

И. И. Небола, Н. Р. Хархалис, В. А. Концик

Кристаллическая структура типа алмаза рассмотрена в концепции $(3+d)$ -мерной и изоморфной ей цветной позиционной симметрии. В рамках предложенной суперпозиционной модели исследована динамика решетки алмазоподобных кристаллов: установлены закономерности трансформации зоны Бриллюэна и законов дисперсии при пространственной модуляции протокристалла, рассчитаны дисперсионные зависимости колебательных ветвей кристаллов германия, учтено влияние ковалентного характера связи на поперечные колебательные ветви, отмечается хорошее согласие с экспериментом.

При рассмотрении проблемы колебательного спектра в сложных кристаллах следует выделить два основных момента: 1) получение следствий, вытекающих из симметрии многоатомной элементарной ячейки; 2) строгий и последовательный подход к определению силовых постоянных и описанию характера взаимодействия в кристалле. Первый традиционно решается в рамках федоровской симметрии [1-4], второй — посредством различных приближений [5-10].

Предлагаемая методика [11-13] не затрагивает подходов и приближений, возникающих при определении силовых постоянных, ставит своей целью получить фундаментальные соотношения, следующие из симметрии многоатомной ячейки в обобщенной сверхпространственной (цветной) трактовке.

1. Цветная симметрия и обобщенная трансляционная инвариантность в алмазоподобных кристаллах

Кристаллическую структуру алмаза можно описать как совокупность двух гранецентрированных решеток, получаемых из двух стартовых атомов с координатами $\mathbf{r}_1^{(1)} = (0, 0, 0)$ и $\mathbf{r}_2^{(2)} = (1/4, 1/4, 1/4)$ действием на них переносов $F = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/2, (\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)/2, (\mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1)/2\}$. Иными словами, это совокупность двух орбит пространственной группы $Fd\bar{3}m$ — структура с базисом $\{\mathbf{r}_1^{(1)}, \mathbf{r}_2^{(2)}\}$.

Легко убедиться, однако, что эту же структуру можно описать как орбиту цветной позиционной группы [14]

$$l^{(sp)} \frac{4^{(1')}}{m^{(1')}} \bar{3} \frac{2^{(1')}}{m} = \left\{ \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \left(\frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3}{4} \right)^{(1, 1', 1, 1')} \right\} \frac{4^{(1')}}{m^{(1')}} \bar{3} \frac{2^{(1')}}{m}$$

для единственного стартового атома $\mathbf{r}_1 = (0, 0, 0)$. Действительно, вдоль пространственной диагонали в структуре алмаза в позициях 1, 2, 3, 4 с координатами $\mathbf{r}_1 = (0, 0, 0)$, $\mathbf{r}_2 = (1/4, 1/4, 1/4)$, $\mathbf{r}_3 = (1/2, 1/2, 1/2)$, $\mathbf{r}_4 = (3/4, 3/4, 3/4)$ располагаются последовательно два атома углерода с массой m , а затем две вакансии 0 (рис. 1). Вводя формально оператор рождения—уничтожения $1'$, превращающий атом (с массой m) в вакансию

(с массой 0) и наоборот, найдем, что вдоль направления [1 1 1] действует позиционный перенос $\mathbf{p}^{(1, 1', 1, 1')}$, $\mathbf{p} = (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)/4$, $a_1 = a_2 = a_3$

$$\mathbf{p}^{(1, 1', 1, 1')} m(\mathbf{r}_1) = 1 \cdot m(\mathbf{r}_1 + \mathbf{p}) = m(\mathbf{r}_2),$$

$$\mathbf{p}^{(1, 1', 1, 1')} m(\mathbf{r}_2) = 1' \cdot m(\mathbf{r}_2 + \mathbf{p}) = 0(\mathbf{r}_2 + \mathbf{p}) = 0(\mathbf{r}_3),$$

$$\mathbf{p}^{(1, 1', 1, 1')} 0(\mathbf{r}_3) = 1 \cdot 0(\mathbf{r}_3 + \mathbf{p}) = 0(\mathbf{r}_4),$$

$$\mathbf{p}^{(1, 1', 1, 1')} 0(\mathbf{r}_4) = 1' \cdot 0(\mathbf{r}_4 + \mathbf{p}) = m(\mathbf{r}_4 + \mathbf{p}) = m(\mathbf{r}_1 + 4\mathbf{p}) \equiv m(\mathbf{r}_1).$$

Здесь для позиций \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_3 , в которых располагается масса m и вакансия 0, мы действуем на m и 0 оператором отождествления 1, стоящим в первой и третьей позициях. Для позиций \mathbf{r}_2 и \mathbf{r}_4 перенос на вектор \mathbf{p} сопровождается умножением масс m и 0 на оператор антиотождествления $1'$, стоящий на второй и четвертой позициях. Имея это в виду, найдем следующее определяющее уравнение для комбинированного позиционного переноса, входящего в группу $I^{(wp)}$:

$$[\mathbf{p}^{(1, 1', 1, 1')}]^4 \equiv 0 \pmod{I}, \quad \text{так как } [\mathbf{p}^{(1, 1', 1, 1')}]^2 = (2\mathbf{p})^{(1', 1', 1', 1')},$$

$$[\mathbf{p}^{(1, 1', 1, 1')}]^3 = (3\mathbf{p})^{(1', 1, 1', 1)}, \quad [\mathbf{p}^{(1, 1', 1, 1')}]^4 = (4\mathbf{p})^{(1, 1, 1, 1)},$$

а также другие определяющие уравнения

$$[\mathbf{p}_i^{(1')}]^2 = [\mathbf{a}_i^{(1')}/2]^2 = \mathbf{a}_i \equiv 0 \pmod{I}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Условие равновероятности замещения эквивалентных (по федоровской группе Φ) позиций атомами и вакансиями [13] позволяет ввести в рассмотрение суперпозиционную модель $m_0(\mathbf{r}) + m(\mathbf{r})$, состоящую из протокристалла (n -подрешеточных структур), в котором реализуется однородное распределение масс $m_0(\mathbf{r})$ однородных атомов во всех n -подрешетках и структуры $m(\mathbf{r})$, осуществляющей пространственную модуляцию избранных физических характеристик гипотетического основного состояния $m_0(\mathbf{r})$.

Пусть в рассматриваемом примере алмазоподобной решетки основному состоянию отвечает среднее распределение [масс $m/2$ в ОЦК решетке, а модулирующей функции — распределение масс $m/2$ (по узлам орбит $Fd\bar{3}m(\mathbf{r}_1^{(1)}, \mathbf{r}_2^{(2)})$) и $-m/2$ (по узлам, дополняющим структуру $Fd\bar{3}m(\mathbf{r}_1^{(1)}, \mathbf{r}_2^{(2)})$ до орбиты $Im\bar{3}m\mathbf{r}_i$). Очевидно, группой симметрии протокристалла является федоровская группа $\Phi(3) = O_h^3 = Im\bar{3}m = \{(\bar{a}, \mathbf{a}, \mathbf{a}), (\mathbf{a}, \bar{a}, \mathbf{a}), (\mathbf{a}, \mathbf{a}, \bar{a})\} m\bar{3}m$, заданная в базисе $\{(-\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)/2, (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)/2, (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3)/2\}$.

Как известно, группы симметрии пространственно-модулированных структур $\Phi(3)^{(wp)}$ связаны изоморфным (\leftrightarrow) соответствием с федоровскими группами $\Phi(3+d)$, действующими в пространстве $3+d$ измерений, и формально могут быть получены из них методом цветного проектирования на трехмерное пространство [12, 14-18].

Изложим суть этого метода применительно к кристаллам типа алмаза на примере одномерных кристаллов, вложенных в двумерное пространство (рис. 2). Аналогично этому трехмерный кристалл типа алмаза можно рассматривать как цветную проекцию периодически упорядоченных трехмерных кристаллов, вложенных в четырехмерное пространство. Федоровская группа симметрии $\Phi(4)$ четырехмерного кристалла (или сверхпространственная группа [18]) превращается в проекции на трехмерное пространство в группу цветной симметрии $\Phi(3)^{(wp)} \leftrightarrow \Phi(3+1)$ расслоенного пространства размерности $3+1$; четвертая координата утрачивает свой геометрический смысл, превращается в цветную координату, принимающую в нашем случае два значения 1 и -1 : $p=1, p^2=-1, p^3=-1, p^4=1$.

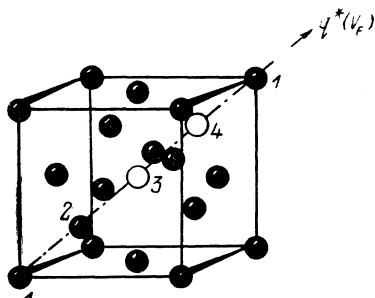


Рис. 1. Элементарная ячейка структуры алмаза в схеме обобщенной симметрии.

Наличие упорядоченной совокупности одномерных инвариантных кристаллов в пространстве $V_E \oplus V_I$ (прямая сумма внешнего и внутреннего подпространств) отображается в пространстве V_I наличием макроскопической инвариантности, задающейся преобразованием $(0, -n\Delta a)$, которое, однако, в микроскопическом отношении сводится к трансляции вида $n(a, -\Delta a) \cdot n(0, b)$ [12]. Инвариантность объекта относительно трансля-

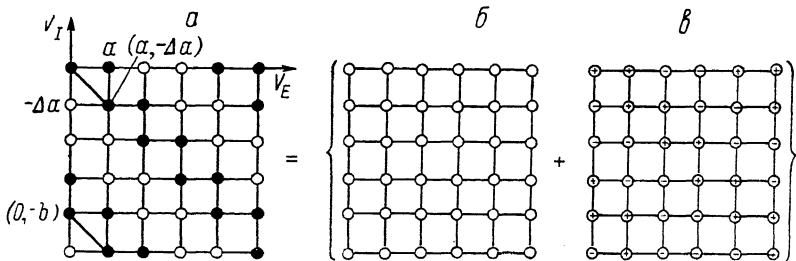


Рис. 2. Графическое представление суперпозиционной модели в случае одномерного модулированного кристалла.

α — система модулированных одномерных кристаллов в пространстве $V_E \oplus V_I$ с распределением масс m и 0 ; β — идеальный $m_0(r, t)$ мотив с распределением масс $m/2$ по узлам одномерной решетки; γ — модулирующая добавка $m(r, t)$ с распределением масс $m/2 \cdot (\cos(qn + b^*t) + \sin(qn + b^*t))$. Знаки « \pm » соответствуют массам узлов $\pm m/2$ соответственно.

ции начала позволяет определить собственные функции операторов трансляции в виде

$$U(r, t) = V(r, t) \exp(ikr + ib^*t), \quad (1)$$

где $V(r, t) = V(r + na, t - n\Delta a) = V(r, t + b)$ — периодические функции, причем $aa^* = 2\pi 1$. Здесь a, a^* — $(3 + d)$ -мерные базисные векторы прямого и обратного $V_E \oplus V_I$ сверхпространства; (k, b^*) — $(3 + d)$ -мерный волновой вектор; 1 — единичная $(3 + d) \times (3 + d)$ матрица.

2. Многомерная решетка кристаллов типа алмаза

Базисные векторы, характеризующие ОЦК решетку, задаются в виде $a_1 = (\bar{a}, a, a)$, $a_2 = (a, \bar{a}, a)$, $a_3 = (a, a, \bar{a})$. Рассмотрим сложный кристалл на базе ОЦК с аналогичным изображенному на рис. 1 мотивом повторения вдоль направления $[1\ 1\ 1]$. Такая ситуация, как легко видеть, приводит к реализации кристаллической структуры типа алмаза. Расстояние между точками 0 и n в структуре может быть записано в виде

$$R^2 = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) a^2 = ja^2. \quad (2)$$

Переход к $(3 + 1)$ -мерной решетке в случае решетки типа алмаза сводится к функциям повторения в базисе трансляций

$$\begin{aligned} a_1 &= (\bar{a}, a, a, -b/4), & a_2 &= (a, \bar{a}, a, -b/4), & a_3 &= (a, a, \bar{a}, -b/4), \\ a_4 &= (0, 0, 0, b), \end{aligned} \quad (3)$$

что задает носитель решеточной функции $M(r, t)$. Векторы обратного пространства V^* равны

$$\begin{aligned} a_1^* &= (0, \pi/a, \pi/a, 0), & a_2^* &= (\pi/a, 0, \pi/a, 0), & a_3^* &= (\pi/a, \pi/a, 0, 0), \\ a_4^* &= (\pi/2a, \pi/2a, \pi/2a, 2\pi/b). \end{aligned} \quad (4)$$

Тогда мотив кристаллов типа алмаза имеет вид

$$m_0(r, t) + m(r, t) = m/2 + (m/2) (\cos(qn + b^*t) + \sin(qn + b^*t)), \quad (5)$$

где $q = \Delta * b^* = (\pi/2a, \pi/2a, \pi/2a)$ — вектор модуляции (трехмерная компонента a_4^*), $2\pi/b$ — четвертая компонента a_4^* [11, 13].

Как уже говорилось, группа $Fd\bar{3}m$ структуры алмаза является общей подгруппой (пересечением \cap) группы $Im\bar{3}m$ основного состояния и группы $I^{(wp)}m^{(1')}\bar{3}m$ модулирующей функции

$$Fd\bar{3}m = Im\bar{3}m \cap I^{(wp)}m^{(1')}\bar{3}m \subset Im\bar{3}m$$

или

$$\{4a_1, 4a_2, 4a_3, 2a_2 + 2a_3, 2a_3 + 2a_1, 2a_1 + 2a_2\} d\bar{3}m = \{2a_1, 2a_2, 2a_3, a_1 + a_2 + a_3\} m\bar{3}m \cap \{2a_1, 2a_2, 2a_3, (a_1 + a_2 + a_3)^{(1, 1', 1, 1')}\} m^{(1')}\bar{3}m.$$

Поэтому переходу в прямом пространстве от элементарной ячейки протокристалла $Im\bar{3}m$ к расширенной ячейке РЭЯ $Fd\bar{3}m$ соответствует переход в обратном пространстве от зоны Бриллюэна (ЗБ) (F -решетка) к суженной зоне СЗБ (I -решетка), что является наглядной иллюстрацией взаимосвязи ЗБ основной и модулированной структур (рис. 3).

3. Дисперсионные кривые фононных спектров кристаллов германия

Фононные спектры алмазоподобных кристаллов хорошо изучены как в теоретическом, так и экспериментальном плане [10, 15, 19] и могут рассматриваться как эталонные для апробации [новых методов расчета [10].

Исходя из обобщенной трансляционной симметрии кристаллов типа алмаза, а также предложенной нами в работах [11-13] методики ее учета при расчете дисперсионных кривых сложных кристаллов, значения дисперсионных кривых могут быть получены путем нахождения отличных от нуля решений системы линейных уравнений при условии равенства нулю детерминанта

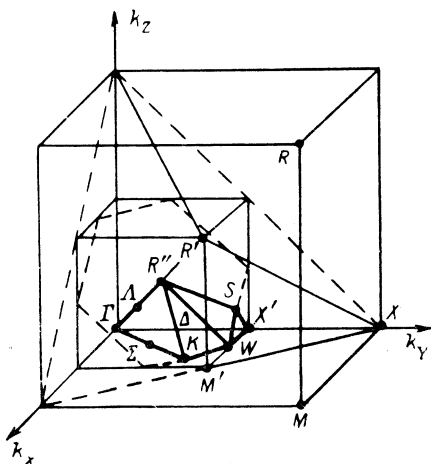


Рис. 3. Этапы трансформации зоны Бриллюэна протокристаллов в ЗБ алмаза.

Большой куб представляет 1/8 часть ЗБ ПКР; многогранник с вершинами $\Gamma R'XM'$ представляет 1/16 часть ЗБ ОПК. Жирными линиями выделена 1/16 часть ЗБ структуры алмаза.

$$|\omega_{j0}^2(\mathbf{k} - \Delta^*\mathbf{b}^*) - \omega^2 \delta_{\mathbf{b}^*\mathbf{b}^*} - \omega^2 \delta_{\mathbf{b}^*, \mathbf{b}^* - \mathbf{b}^*} m(\mathbf{b}^*)/m_0| = 0, \quad (6)$$

где ω^2 — значения частот фононного спектра исследуемых кристаллов; $\omega_{j0}^2(\mathbf{k} - \Delta^*\mathbf{b}^*)$ — значения частот фононных ветвей протокристалла с мотивом $m_0(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ в точках $\mathbf{k}, \mathbf{k} - \Delta^*\mathbf{b}^*, \mathbf{k} - 2\Delta^*\mathbf{b}^*, \dots, \mathbf{k} - s\Delta^*\mathbf{b}^*$ ($s = \mathbf{k}_{ЗБ}/\Delta^*\mathbf{b}^*$, $\mathbf{k}_{ЗБ}$ — вектор зоны Бриллюэна протокристалла); $m(\mathbf{b}^*)$ — d -мерная Фурье-компонента модуляционной функции $m(\mathbf{r}, \mathbf{t})$; j нумерует ветви; δ — символ Кронекера.

Для кристаллов типа алмаза выражение (6) может быть переписано в виде

$$\begin{vmatrix} \omega_{j0}^2(\mathbf{k}) - \omega^2 & (1-i)\omega^2/2 & 0 & (1+i)\omega^2/2 \\ (1+i)\omega^2/2 & \omega_{j0}^2(\mathbf{k} - \Delta^*\mathbf{b}^*) - \omega^2 & (1-i)\omega^2/2 & 0 \\ 0 & (1+i)\omega^2/2 & \omega_{j0}^2(\mathbf{k} - 2\Delta^*\mathbf{b}^*) - \omega^2 & (1-i)\omega^2/2 \\ (1-i)\omega^2/2 & 0 & (1+i)\omega^2/2 & \omega_{j0}^2(\mathbf{k} - 3\Delta^*\mathbf{b}^*) - \omega^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (7)$$

Решение (7) может быть записано в виде решения квадратного уравнения

$$A\omega^4 - 2B\omega^2 + C = 0, \quad (8)$$

где

$$A = (F + Q)^2 - P^2 - \bar{R}^2, \quad B = FQ(F + Q) - FP^2 - QR^2, \\ C = F^2Q^2 + P^2\bar{R}^2 - F^2P^2 - Q^2\bar{R}^2,$$

которые в свою очередь определяются через

$$2F = \omega_{j_0}^2(\mathbf{k} - 2\Delta^*\mathbf{b}^*) + \omega_{j_0}^2(\mathbf{k}), \quad 2Q = \omega_{j_0}^2(\mathbf{k} - 3\Delta^*\mathbf{b}^*) + \omega_{j_0}^2(\mathbf{k} - \Delta^*\mathbf{b}^*), \\ 2P = \omega_{j_0}^2(\mathbf{k} - 2\Delta^*\mathbf{b}^*) - \omega_{j_0}^2(\mathbf{k}), \quad 2\bar{R} = \omega_{j_0}^2(\mathbf{k} - 3\Delta^*\mathbf{b}^*) - \omega_{j_0}^2(\mathbf{k} - \Delta^*\mathbf{b}^*). \quad (9)$$

Отметим, что выражения (7)–(9), которые следуют из обобщенной трансляционной симметрии алмазоподобных кристаллов, задают фундаментальные перенормировочные соотношения, позволяющие определить дисперсионные зависимости кристаллов германия, кремния и алмаза исходя из выражений для дисперсионных зависимостей ОЦК протокристалла, и не зависят от способа описания силовых постоянных и числа учитываемых соседей.

Рассмотрим наиболее удобные для нашего рассмотрения выражения $\omega_{j_0}^2(\mathbf{k})$ для высокосимметричных направлений ЗБ ОЦК [13] исходя из характера взаимодействия, описываемого моделями, предложенными в [6, 7].

Для сокращения записей введем обозначения: $\sin(nka) = S_n$, $\cos(nka) = C_n$, $(S_n)^2 = L_n$, $(C_n)^2 = M_n$; силовые постоянные обозначим α_j , где j равен квадрату радиус-вектора, соединяющего узлы 0 и n ОЦК решетки (см. (2)); параметры γ_1 и γ_2 задают трехчастичное взаимодействие и совпадают с обозначениями работы [7]. Отметим, что силовые постоянные α_j типа α_4 выбирались равными нулю, так как они учитывают взаимодействия лишь между атомами и вакансиями.

а) Направление $\Gamma - R^n$, ($k_x = k_y = k_z = k$).

Продольная ветвь протокристалла задается выражением вида

$$\omega_{10}^2(\mathbf{k}) = \frac{8}{3} \alpha_3 (1 - M1C1 + 2L1C1) + 8\alpha_8 L2 + \frac{8}{11} \alpha_{11} (11(1 - C3M2) + 6S3S2 + \\ + 2C3L1) + 4\alpha_{16} L2 + 32\gamma_1 (1 - C1) + 32\gamma_2 (1 - M1C1 - 2L1C1) + \dots, \quad (10)$$

поперечная ветвь

$$\omega_{20}^2(\mathbf{k}) = \frac{8}{3} \alpha_3 (1 - C1) + 2\alpha_8 L2 + \frac{8}{11} \alpha_{11} (11 - (1 - C3M2) - 3S3S2 - C3L1) + \\ + 32\gamma_1 (1 - M1C1 + 0.5L1C1) + 32\gamma_2 (1 - M1C1 + L1C1) + \dots \quad (11)$$

Аналогичные выражения могут быть получены также для $\omega_{j_0}^2(\mathbf{k} - \Delta^*\mathbf{b}^*)$, $\omega_{j_0}^2(\mathbf{k} - 2\Delta^*\mathbf{b}^*)$ и $\omega_{j_0}^2(\mathbf{k} - 3\Delta^*\mathbf{b}^*)$. После несложных преобразований приведем выражения (9) для $F_1(\Gamma - R^n)$, $Q_1(\Gamma - R^n)$, $P_1(\Gamma - R^n)$, $\bar{R}_1(\Gamma - R^n)$ к виду

$$F_1(\Gamma - R^n) = Q_1(\Gamma - R^n) = Z + 8\alpha_8 L2 + 4\alpha_{16} L2 + \dots \\ P_1(\Gamma - R^n) = \frac{8}{3} \alpha_3 (M1C1 - 2L1C1) + \frac{8}{11} \alpha_{11} (11C3M1 - 6S3S2 - 2C3L1) + \\ + 32\gamma_1 C1 + 32\gamma_2 (M1C1 + 2L1C1) + \dots \\ \bar{R}_1(\Gamma - R^n) = \frac{8}{3} \alpha_3 (L1C1 - 2M1S1) + \frac{8}{11} \alpha_{11} (-11S3L1 + 6C3S2 + 2S3M1) + \\ + 32\gamma_1 S1 + 32\gamma_2 (L1S1 + 2M1S1) + \dots \quad (12)$$

для продольной ветви и

$$F_2(\Gamma - R^n) = Q_2(\Gamma - R^n) = Z + 2\alpha_8 L2 + 4\alpha_{16} L2 + \dots \\ P_2(\Gamma - R^n) = \frac{8}{3} \alpha_3 C1 + \frac{8}{11} \alpha_{11} (11C3M1 + 3S3S2 + C3L1) + 32\gamma_1 (M1C1 - 0.5L1C1) + \\ + 32\gamma_2 (M1 - L1) C1 + \dots \\ \bar{R}_2(\Gamma - R^n) = \frac{8}{3} \alpha_3 S1 - \frac{8}{11} \alpha_{11} (11S3L1 + 3C3S2 + S3M1) + 32\gamma_1 (L1S1 - 0.5M1S1) + \\ + 32\gamma_2 (L1 - M1) S1 + \dots \quad (13)$$

для поперечной ветви. В выражениях (12), (13) и в последующих

$$Z = \frac{8}{3} \alpha_3 + 8\alpha_{11} + 32(\gamma_1 + \gamma_2) + \dots \quad (14)$$

б) Направление $\Gamma - X'$, ($k_x = k$, $k_y = k_z = 0$).

Продольная ветвь в ОЦК задается выражением

$$\omega_{10}^2(\mathbf{k}) = \frac{8}{3} \alpha_3 (1 - C1) + 8\alpha_8 L1 + \frac{8}{11} \alpha_{11} (11 - 9C3 - 2C1) + 32(\gamma_1 + \gamma_2)(1 - C1) + \dots \quad (15)$$

поперечная

$$\omega_{20}^2(\mathbf{k}) = \frac{8}{3} \alpha_3 (1 - C1) + 4\alpha_8 L1 + \frac{8}{11} \alpha_{11} (11 - 10C1 - C3) + 32(\gamma_1 + \gamma_2)(1 - C1) + \dots \quad (16)$$

Аналогично могут быть получены выражения типа $F(\Gamma - X')$, $Q(\Gamma - X')$, $P(\Gamma - X')$, $\bar{R}(\Gamma - X')$ для $\Gamma - X'$ направления в виде

$$\begin{aligned} F_1(\Gamma - X') &= Q_1(\Gamma - X') = Z + 8\alpha_8 L1 + 4\alpha_{16} L2 + \dots, \\ P_1(\Gamma - X') &= \frac{8}{3} \alpha_3 C1 + \frac{8}{11} \alpha_{11} (9C3 + 2C1) + 32(\gamma_1 + \gamma_2) C1 + \dots, \\ \bar{R}_1(\Gamma - X') &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

для продольной ветви и

$$\begin{aligned} F_2(\Gamma - X') &= Q_2(\Gamma - X') = Z + 4\alpha_8 L2 + \dots, \\ P_2(\Gamma - X') &= \frac{8}{3} \alpha_3 C1 + \frac{8}{11} \alpha_{11} (10C1 + C3) + 32(\gamma_1 + \gamma_2) C1 + \dots, \\ \bar{R}_2(\Gamma - X') &= \pm \frac{8}{3} \alpha_3 S1 - \frac{8}{11} \alpha_{11} (6S1 + S3) + 16(\gamma_1 + \gamma_2) S1 \end{aligned} \quad (18)$$

для поперечной.

Проанализируем особенности фононных спектров в высокосимметричных точках ЗБ — Γ , R'' , X' . Легко видеть, что в точке $\Gamma(0, 0, 0)$

$$\begin{aligned} F_1(\Gamma - R'') &= F_2(\Gamma - R'') = F_1(\Gamma - X') = F_2(\Gamma - X') = P_1(\Gamma - R'') = P_2(\Gamma - R'') = \\ &= P_1(\Gamma - X') = P_2(\Gamma - X'), \\ \bar{R}_1(\Gamma - R'') &= \bar{R}_2(\Gamma - R'') = \bar{R}_1(\Gamma - X') = \bar{R}_2(\Gamma - X') \end{aligned}$$

и тогда, согласно (8),

$$\omega_{12}^2(\Gamma) = \omega_{22}^2(\Gamma) = \frac{2}{3} Z, \quad \omega_{11}^2(\Gamma) = \omega_{21}^2(\Gamma) = 0, \quad (19)$$

т. е. имеются два трехкратно вырожденные состояния, которые описываются, как известно, неприводимыми представлениями Γ_{15} и Γ'_{25} [20]. Индексы на первой позиции при $\omega^2(\mathbf{k})$ в (19) и в следующих формулах нумеруют продольную (1), поперечную (2) ветви, на второй позиции — акустическую (1) и оптическую (2) ветви, 1 — акустическую, 2 — оптическую ветви. В точке $R''(\pi/4a, \pi/4a, \pi/4a)$ (рис. 3), как показывает анализ выражений (8), (12)—(14), существуют две невырожденные частоты $\omega_{11}^2(R'')$ и $\omega_{12}^2(R'')$, описываемые представлениями R'_2 , R_1 группы волнового вектора R'' и две двукратно вырожденные частоты $\omega_{21}^2(R'')$ и $\omega_{22}^2(R'')$, которые описываются R'_3 и R_3 представлениями.

В точке $X'(\pi/2a, 0, 0)$ для продольной ветви $F_1(\Gamma - X') = \bar{R}_1(\Gamma - X') = 0$, тогда получаем двукратно вырожденную частоту

$$\omega_{11}^2(X') = \omega_{12}^2(X') = \frac{1}{2}(Z + 8\alpha_8 + \dots). \quad (20)$$

Таким образом, фононный спектр в точке X' характеризуется тремя двукратно вырожденными частотами.

Дальнейший расчет проводился методом подбора значений силовых постоянных α_j , γ_1 и γ_2 путем минимизации суммы квадратов отклонений расчетных и экспериментальных значений $\omega_{1j}^2(\mathbf{k})$ в 10 точках ЗБ. Расчет показал, что для продольных ветвей удается подобрать значения силовых

постоянных (см. таблицу), при использовании которых суммарное относительное отклонение между расчетными и экспериментальными значениями меньше 1 %. Для поперечных ветвей колебаний (рис. 4, штриховые кривые) использование этих значений приводит лишь к качественному согласию с экспериментом. Результат подтверждает выводы работы [10] о том, что взаимодействие, описывающее поперечные ветви в ковалентных кристаллах Ge, не может быть аналогичным продольному взаимодействию, а должно с необходимостью учитывать значительную составляющую электрон-фононного взаимодействия. Фено-

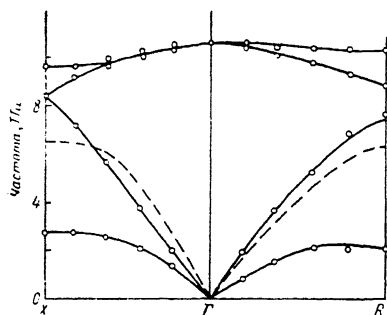


Рис. 4. Дисперсии фононных спектров кристаллов германия.

Сплошные линии — расчет, точки — эксперимент [10]. Штриховые линии — поперечные ветви с силовыми постоянными, равными силовым постоянным для продольных ветвей.

менологически это обстоятельство учитывается в данной работе введением отдельных значений поперечных силовых постоянных для направлений $\Gamma-R''$ и $\Gamma-X'$ соответственно. При этом выражения для $P_2(\Gamma-X')$ и $\bar{R}_2(\Gamma-X')$ записываются в виде

$$P_2(\Gamma-X') = \frac{8}{3} (a_3' + a_3'' C1) + \frac{8}{11} (a_{11}' + a_{11}'' (10C1 + C3)) + 32 (\gamma_1' + \gamma_2') + (\gamma_1'' + \gamma_2'') C1 + \dots,$$

$$\bar{R}_2(\Gamma-X') = \pm \frac{8}{3} a_3'' 3S1 - \frac{8}{11} a_{11}'' (6S1 + S3) + 16 (\gamma_1'' + 2\gamma_2'') S1 + \dots, \quad (21)$$

где

$$a_j' + a_j'' = a_j, \quad \gamma_1' + \gamma_1'' = \gamma_1, \quad \gamma_2' + \gamma_2'' = \gamma_2.$$

Аналогичные выражения выбирались и для $\Gamma-R''$ направления. Значения для a_j'' , γ_1'' и γ_2'' , приведенные в таблице, позволили получить хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных с относительным суммарным отклонением порядка 1 %.

Силовые постоянные a_j, γ_1, γ_2 для продольных ветвей. Направления $\Gamma-R''$ и $\Gamma-X'$	Силовые постоянные $a_j'', \gamma_1'', \gamma_2''$ для поперечных ветвей	
	$\Gamma-R''$	$\Gamma-X'$
$a_3 = 27.754$	$a_3'' = -9.96$	$a_3'' = -7.455$
$a_8 = -2.774$	$a_8'' = -2.774$	$a_8'' = -2.774$
$a_{11} = -0.738$	$a_{11}'' = 3.479$	$a_{11}'' = 5.092$
$a_{16} = -0.066$	$a_{16}'' = -0.066$	$a_{16}'' = -0.066$
$\gamma_1 = 1.511$	$\gamma_1'' = 0.343$	$\gamma_1'' = -0.761$
$\gamma_2 = 0.247$	$\gamma_2'' = -0.241$	$\gamma_2'' = 0.652$

В заключение отметим, что полученные фундаментальные соотношения (6)—(9) при выборе соответствующей модели, удовлетворительно учитывающей характер взаимодействия, значительно упрощают расчет и позволяют удовлетворительно описать экспериментальные кривые. Выбор модели расслоенного физического пространства $m_0(\mathbf{r}) + m(\mathbf{r})$, обладающего позиционной симметрией, индуцирует соответствующую симметрию и в обратном пространстве $\omega^2(\mathbf{k})$, допуская проведение позиционного согласования теории с экспериментом для отдельных ветвей $\omega^2(\mathbf{k})$ и фиксированных по симметрии областей изменения волнового вектора.

- [1] Марадудин А., Монтрелл Э., Вейсс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. М.: Мир, 1965. 375 с.
- [2] Maradudin A. A., Vosko S. H. // *Rev. Mod. Phys.* 1968. V. 40. N 1. P. 1—37.
- [3] Venkataraman G., Sahni V. C. // *Rev. Mod. Phys.* 1970. V. 42. N 4. P. 409—470.
- [4] Штрайвольф Г. Теория групп в физике твердого тела. М.: Мир, 1971. 262 с.
- [5] Бирман Дж. Пространственная симметрия и оптические свойства твердых тел. Т. 1, 2. М.: Мир, 1978. 387, 350 с.
- [6] Ансельм А. Н. Введение в теорию полупроводников. М.: Мир, 1978. 615 с.
- [7] Ramamurthy V. // *Phys. St. Sol. (b)*. 1982. V. 112. P. 463—470.
- [8] Лейбфрид Г., Бройер Н. Точечные дефекты в металлах. М.: Мир, 1981. 439 с.
- [9] Кикоин К. А., Мищенко А. С. // *ЖЭТФ*. 1988. Т. 94. № 11. С. 237—253.
- [10] Kunc K., Dacosta P. G. // *Phys. Rev. B*. 1985. V. 32. N 4. P. 2010—2021.
- [11] Небола И. И., Хархалис Н. Р., Берча Д. М. // *Кристаллография*. 1985. Т. 30. С. 340—344.
- [12] Небола И. И., Хархалис Н. Р., Коцник В. А. // *ФТТ*. 1987. Т. 29. № 11. С. 3223.
- [13] Небола И. И., Хархалис Н. Р. // *Деп. в УкрНИИТИ*. 1987. № 13315. 47 с.
- [14] Рябчиков С. А., Коцник В. А. // *Деп. в ВИНТИ*. 1984. № 14939-84. 36 с.
- [15] Коцник В. А., Рябчиков С. А., Сиротин Ю. И. // *Кристаллография*. 1977. Т. 22. С. 229—241.
- [16] Коцник В. А. // *Теоретико-групповые методы в физике*. М.: Наука, 1983. Т. 1. С. 320—331.
- [17] Коцник В. А. // *Теоретико-групповые методы в физике*. М.: Наука, 1986. Т. 1. С. 710—714.
- [18] Yanner A., Yanssen T. // *Phys. Rev. B*. 1977. V. 15. P. 643.
- [19] Рейсленд Дж. Физика фононов. М.: Мир, 1975. 365 с.
- [20] Ковалев О. В. Неприводимые представления пространственных групп. Киев, 1961. 154 с.

Ужгородский государственный университет
Ужгород

Поступило в Редакцию
29 ноября 1988 г.
В окончательной редакции
22 июня 1989 г.