

二维有限晶格振动的自由边界矩阵*

李景德

(物理学系)

摘 要

由 $N \times N$ 二维有限格子振动方程组的简谐近似给出了自由边界矩阵 B_{\pm} 。振动方程可写为矩阵形式 $(\Omega + B_{\pm})|> = \epsilon|>$ ，并用 Ω 表象求解。在无限格子中通常出现的波矢量为波节数 (q_1, q_2) 所代替。 B_{\pm} 导致驻波之间的耦合。反对称耦合解之一为旋转模。当相应于键角和键长力系数之比 $(-h/f)$ 值适当时，对称耦合解中的另一个可以是软模 $|SM\rangle$ 。声学支振动边界耦合软模使得晶体结构发生正弦调制。

晶格动力学通常假设晶体为无限大，并用Born-Karman条件使波矢量量子化。一般认为，要精确地计入边界条件就会使理论陷入严重的困境⁽¹⁾。如果边界效应只影响到理论的精度，则上述做法无可非议。但是，如果边界条件还关系到理论结果的物理图象的本质，则上述近似将歪曲或丢失一些重要结果。对一维问题的讨论表明情况属于后者⁽²⁾。在二维晶格振动中，有限边界作用也导致不同于无限晶格的重要的新物理图象。在最近邻近下，引入键长恢复力系数 f 和键角恢复力系数 $(-h)$ ，对于一个 $N \times N$ 二维正方格子，沿晶轴取 x, y 坐标系，则第 (α, β) 个格点的振动方程可写为

$$\left\{ \begin{array}{l} m\ddot{x}_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha'} a^2 f (x_{\alpha'\beta} - x_{\alpha\beta}) + \sum_{\alpha'\beta'} a^2 h [(x_{\alpha'\beta} - x_{\alpha\beta'}) \\ \quad + (y_{\alpha\beta'} - y_{\alpha'\beta})(\alpha' - \alpha)(\beta' - \beta)], \\ m\ddot{y}_{\alpha\beta} = \sum_{\beta'} a^2 f (y_{\alpha\beta'} - y_{\alpha\beta}) + \sum_{\alpha'\beta'} a^2 h [(y_{\alpha\beta'} - y_{\alpha'\beta}) \\ \quad + (x_{\alpha'\beta} - x_{\alpha\beta})(\alpha' - \alpha)(\beta' - \beta)]. \end{array} \right. \quad (1)$$

其中 $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N$; $\alpha' = \alpha \pm 1$, $\beta' = \beta \pm 1$; m 为格点质量, a 为晶格常数。令

$$x_{\alpha\beta} = \pm y_{\beta\alpha} = A_{\alpha\beta} \exp(-i\omega t) \quad (2)$$

则(1)中的两个方程化为相同形式，振动问题由解 $2N \times N$ 方程组简化为解两个 $N \times N$ 方程组。

由(1)和(2)给出的方程的具体形式对于晶格的内点、边点和角点是各不相同的，因

本文于1985年5月收到。

* 本工作得到中山大学高等学术研究中心的资助。

为后两种点缺少了一些键，相应的项消失。按照 $1 \leq \alpha, \beta, \alpha', \beta' \leq N$ 的规定将 (1) 展开，并用 (2) 可以得到各种点的振幅方程为：

$$\begin{aligned}
 \text{内点:} \quad & \epsilon A_{\alpha\beta} = (A_{\alpha+1,\beta} + A_{\alpha-1,\beta}) + 2\sigma(A_{\alpha,\beta+1} + A_{\alpha,\beta-1}), \\
 \text{边点:} \quad & \epsilon A_{1\beta} = (A_{2,\beta} + A_{1,\beta}) + 2\sigma(A_{1,\beta+1} + A_{1,\beta-1}) + \\
 & \quad + [\sigma(-A_{1,\beta+1} - A_{1,\beta-1} + 2A_{1,\beta} \pm A_{\beta-1,1} \mp A_{\beta+1,1})], \\
 & \epsilon A_{N\beta} = (A_{N-1,\beta} + A_{N,\beta}) + 2\sigma(A_{N,\beta+1} + A_{N,\beta-1}) + \\
 & \quad + [\sigma(-A_{N,\beta+1} - A_{N,\beta-1} + 2A_{N,\beta} \pm A_{\beta+1,N} \mp A_{\beta-1,N})], \\
 & \epsilon A_{\alpha 1} = (A_{\alpha+1,1} + A_{\alpha-1,1}) + 2\sigma(A_{\alpha,2} + A_{\alpha,1}) + \\
 & \quad + [\sigma(A_{\alpha+1,1} + A_{\alpha-1,1} - 2A_{\alpha,1} \pm A_{1,\alpha+1} \mp A_{1,\alpha-1})], \\
 & \epsilon A_{\alpha N} = (A_{\alpha+1,N} + A_{\alpha-1,N}) + 2\sigma(A_{\alpha,N} + A_{\alpha,N-1}) + \\
 & \quad + [\sigma(A_{\alpha+1,N} + A_{\alpha-1,N} - 2A_{\alpha,N} \pm A_{N,\alpha-1} \mp A_{N,\alpha+1})], \\
 \text{角点:} \quad & \epsilon A_{11} = (A_{21} + A_{11}) + 2\sigma(A_{11} + A_{12}) + [\sigma(A_{21} - A_{12} \pm A_{12} \mp A_{21})], \\
 & \epsilon A_{1N} = (A_{2N} + A_{1N}) + 2\sigma(A_{1N} + A_{1N-1}) + [\sigma(A_{2N} - A_{1N-1} \pm \\
 & \quad \pm A_{N-1,1} \mp A_{N2})], \\
 & \epsilon A_{N1} = (A_{N-1,1} + A_{N1}) + 2\sigma(A_{N2} + A_{N1}) + \\
 & \quad + [\sigma(-A_{N2} + A_{N-1,1} \pm A_{2N} \mp A_{1,N-1})], \\
 & \epsilon A_{NN} = (A_{N-1,N} + A_{NN}) + 2\sigma(A_{NN} + A_{N,N-1}) + \\
 & \quad + [\sigma(A_{N-1,N} - A_{N,N-1} \pm A_{N,N-1} \mp A_{N-1,N})].
 \end{aligned} \tag{3}$$

$$\text{其中} \quad \epsilon = \frac{2a^2 f - m\omega^2}{a^2 f + 2a^2 h}, \quad \sigma = \frac{-h}{f + 2h}. \tag{4}$$

以 $A_{\alpha\beta}$ 为分量组成一个 $N \times N$ 维矢量，将各分量排成列矩阵，用 Dirac 记号表示以避免晶格动力学中通常所出现的繁琐的大量附标，则由 (3) 可将晶格振动问题写成矩阵的本征方程形式

$$(\Omega + B_{\pm}) | \rangle = \epsilon | \rangle. \tag{5}$$

其中 Ω 和 B_{\pm} 都是 $N^2 \times N^2$ 方阵。 B_{\pm} 由 (3) 中各方括号以内的 $A_{\alpha\beta}$ 的系数为元素组成， Ω 由 (3) 中等号右边其余各项系数组成。只有边点和角点才对 B_{\pm} 有贡献，称 B_{\pm} 为二维自由边界矩阵。令

$$A_{\alpha\beta}(q_1 q_2) = C_{q_1 q_2} \cos(2\alpha - 1) q_1 \theta \cos(2\beta - 1) q_2 \theta, \quad \theta = \pi/2N, \tag{6}$$

以 $A_{\alpha\beta}(q_1 q_2)$ 为元素的列矩阵记为 $| q_1, q_2 \rangle$ 。可以证明

$$\Omega | q_1, q_2 \rangle = \epsilon(q_1, q_2) | q_1, q_2 \rangle, \tag{7}$$

零级近似本征值为

$$\epsilon(q_1, q_2) = 2\cos(2q_1\theta) + 4\sigma\cos(2q_2\theta), \tag{8}$$

$$\text{其中} \quad q_1, q_2 = 0, 1, 2, \dots, (N-1). \tag{9}$$

Ω 的不同的本征矢是彼此正交的，归一化常数

$$C_{qq'} = \frac{2}{N}, \quad C_{q_0} = C_{0q} = \frac{\sqrt{2}}{N}, \quad C_{00} = \frac{1}{N}, \quad (q, q' \neq 0). \tag{10}$$

若略去边界效应，即认为 $B_{\pm} = 0$ ，则 (6) 至 (10) 已给出 (5) 的通解。

零级近似解给出一些驻波， q_1 和 q_2 是沿 x 和 y 方向的波节数目。由 Ω 的本征方程的非

相组合,才能给出简谐近似下的独立振动模。图1中的驻波(01)_±有类似情况。一般地,组合得出的独立振动模式变复杂了。但是也有简单了的特殊情况。例如反对称解中驻波(01)₋与(03)₋, (05)₋……等组合给出以晶格质心为定点绕z轴旋转的独立模,虽然各个成份驻波相应的频率都不等于零,即

$$\epsilon(0, q) < 2 + 4\sigma, \quad q = 1, 3, 5, \dots,$$

但他们组合给出的独立的旋转模具有零频率,即本征值 ϵ 等于 $(2 + 4\sigma)$ 。在通常的晶格动力学中认为不同波矢量的模各自独立,不容许在简谐近似下作任何组合,结果丢失了众所周知的旋转模,这显然是错误的。在三维晶体中,传统的晶格动力学只给出一个纵声支零频率和两个横声支零频率,丢失了三个旋转零频率。自从软模的物理意义被阐明以后,丢失了零频率是不能容忍的错误。有限晶格动力学应用自由边界矩阵方法找回来了旋转模的零频率,是否还能找到其他被丢失的零频率,必须进一步考虑。如果可能找到,这将是一个被丢失的软模,其本征矢将记为 $|SM\rangle$ 。

将对称解和反对称解的本征值分别记为 ϵ_+ 和 ϵ_- 。应用(11)可证明一般地有

$$\text{Tr} B_{\pm} = 0. \quad (15)$$

故 $\sum \epsilon_{\pm} = \text{Tr}(\Omega + B_{\pm}) = \text{Tr} \Omega = \sum_{q_1 q_2} \epsilon(q_1 q_2)$ 。容易由(8)给出各本征值之和

$$\sum \epsilon_{\pm} = (2 + 4\sigma)N \quad (16)$$

为定值。在零级近似对称解和反对称解中各只有一个最大的本征值 $\epsilon(00) = (2 + 4\sigma)$ 。其他驻波在耦合后必然有些本征值减小而另一些增大,才能保持(16)为定值。其中最大的一个最有可能达到 $(2 + 4\sigma)$ 而给出零频率。反对称解中的旋转模就是例子。在对称解中也可找到这样的例子。设 $N = 3$, 容易计算出

$$|SM\rangle = \frac{1}{\sqrt{18 - 12\sqrt{2}}} |10\rangle + \frac{2\sqrt{2} - 3}{\sqrt{18 - 12\sqrt{2}}} |12\rangle. \quad (17)$$

相应本征值

$$\epsilon_+(SM) = 1 + 2(1 + 2\sqrt{2})\sigma. \quad (18)$$

当键角力系数与键长力系数比值 $(-h/f)$ 由零增大至0.35355时, σ 单调上升至1.2071,这时(18)相应的频率下降到零。对于较大的 N 值,类似情况的出现是可能的。

在无限晶格动力学中通常认为SM的出现是由于某个模(相应于本文的零级近似)的恢复力系数软化向零⁽³⁾。前述边界耦合软模具有不同的性质,甚至在键长力系数 f 大致不变而键角力系数 $(-h)$ 硬化增大时也会满足软模条件。从化学意义看,这反映了共价键增强时发生的现象。声学振动边界耦合软模是一个 $\omega \rightarrow 0$ 的组合驻波,其结果将导致晶体出现格子常数被调制的超晶格结构。这种效应在真实晶体中近年已被广泛观察到⁽⁴⁾。

参 考 文 献

- [1] J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State*, Ch. 1, Academic Press, N. Y., 1976.

- [2] Lee Jingder, *Ferroelectrics Lett.*, 2 (1984), 2, 59.
- [3] R. Blinc and B. Zeks, *Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferro-electrics*, Ch. 1, North-Holland, 1974.
- [4] Y. Yamada, and T. Yamada, *J. Phys. Soc. Japan*, 21 (1966), 2176.

Free Boundary Matrices for Vibration of a Finite Lattice in Two-Dimension

Li Jingde

Abstract

From the harmonic approximation for vibration equation of a $N \times N$ finite lattice in two-dimension, the free boundary matrices B are given. The vibration equation may be written in matrix form $(\Omega + B_{\pm})|\rangle = \epsilon|\rangle$, and solved in Ω representation. The wave vectors which usually appeared in infinite lattices are replaced by the numbers (q_1, q_2) of nodes of standing waves. B_{\pm} lead to coupling between standing waves. One of the asymmetry coupling solutions is the rotation mode. Another one of symmetry coupling solutions may be a soft mode, if the ratio $(-h/f)$ of force constants related to bond angle and bond length is suitable. The boundary coupling soft mode of acoustic vibration results in sinusoidal modulation of the crystal structure.