

## КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

### § 1. Малые колебания

Рассмотрим задачу о малых колебаниях атомов кристаллической решетки около положений равновесия. Будем рассматривать кристалл с произвольным (равным  $r$ ) числом атомов в элементарной ячейке. Равновесное положение любого атома в решетке можно задать с помощью двух величин, одна из которых указывает номер атома в ячейке, а другая — положение данной ячейки в кристалле. Номер атома в ячейке обозначим через  $h$  ( $1 \leq h \leq r$ ). Положение ячейки в кристалле можно задать радиус-вектором  $\rho$  какой-либо ее точки, например центра или одного из атомов. Примем одну из ячеек за начальную, направив оси координат вдоль главных осей кристалла. Тогда компоненты радиус-вектора любой ячейки будут целыми кратными соответствующих компонент вектора решетки  $\mathbf{a}$ :

$$\rho = \{g_x a_x, g_y a_y, g_z a_z\}. \quad (1.1)$$

Здесь  $g_x, g_y, g_z$  — целые числа (или нули); их можно рассматривать как компоненты некоторого вектора  $\mathbf{g}$ . В качестве основного объема \*) кристалла выберем куб, вдоль сторон которого укладывается  $G_x = L/a_x, G_y = L/a_y$  и  $G_z = L/a_z$  элементарных ячеек (таким образом, общее число их есть  $G_x G_y G_z = G$ ). Тогда

$$0 \leq g_\alpha \leq G_\alpha, \quad \alpha = x, y, z. \quad (1.2)$$

(Строго говоря, в правых частях неравенств должно стоять число  $G_\alpha - 1$ , но ввиду колоссальности числа  $G_\alpha$  единицей можно пренебречь.) Для краткости будем обозначать совокупность значков  $h$  и  $g_x, g_y, g_z$  одним индексом  $\alpha$ :

$$\alpha = \{h, g_x, g_y, g_z\}. \quad (1.3)$$

Пусть  $\mathbf{R}_\alpha$  — тройка координат  $\alpha$ -го атома, а  $M_\alpha$  — его масса. Кинетическая энергия решетки будет

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} M_{\alpha} \dot{\mathbf{R}}_{\alpha}^2, \quad (1.4)$$

где  $\dot{\mathbf{R}}_{\alpha} = d\mathbf{R}_{\alpha}/dt$ .

\*) Как и в гл. III, основной объем определяется как достаточно большая область кристалла, на границах которой физические условия одинаковы. Возможность ввести основной объем связана с тем, что мы не интересуемся поверхностными свойствами кристалла, считая его достаточно большим.

Потенциальная энергия решетки  $V$  представляет собой некоторую функцию всех переменных  $\mathbf{R}_\alpha$ . Явный вид ее при произвольном расположении атомов может быть очень сложен. Для наших целей, однако, достаточно заметить, что атомы совершают лишь малые колебания около положений равновесия (координаты последних обозначим через  $\mathbf{R}_\alpha^{(0)}$ ). Поэтому функцию  $V$  можно представить в виде разложения Тэйлора по степеням отклонений атомов от точек равновесия. Разность  $\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\alpha^{(0)}$  мы будем называть вектором смещения  $a$ -го атома и обозначать через  $\mathbf{Q}_a$ :

$$\mathbf{Q}_a = \mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\alpha^{(0)}. \quad (1.5)$$

Обозначим для краткости всю совокупность переменных  $\mathbf{R}_\alpha$  ( $\mathbf{R}_\alpha^{(0)}$ ) символом  $R$  ( $R^{(0)}$ ) и примем во внимание, что при  $R = R^{(0)}$  потенциальная энергия  $V$  имеет минимум — по определению положения устойчивого равновесия. Получим

$$V(R) = V(R^{(0)}) + \frac{1}{2} \sum_{a, a'} \Gamma_{aa'}^{\alpha\alpha'} Q_{a, \alpha} Q_{a', \alpha'} + \dots \quad (1.6)$$

Точками здесь обозначены члены высшего порядка по компонентам вектора смещения. Величина  $V(R^{(0)})$  — потенциальная энергия в точке равновесия — в интересующем нас круге задач представляет собой просто аддитивную постоянную. Ее можно вообще исключить из рассмотрения, выбрав соответствующим образом начало отсчета энергии.

Коэффициенты  $\Gamma_{aa'}^{\alpha\alpha'}$  суть вторые производные от  $V$  по смещениям, взятые в точке минимума:

$$\Gamma_{aa'}^{\alpha\alpha'} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial R_{a, \alpha} \partial R_{a', \alpha'}} \right|_{R=R^{(0)}}. \quad (1.7)$$

Очевидно, они симметричны относительно перестановки штрихованных и нештрихованных индексов:

$$\Gamma_{aa'}^{\alpha\alpha'} = \Gamma_{a'a}^{\alpha'\alpha}. \quad (1.7')$$

Действительно, такая перестановка сводится просто к перестановке порядка дифференцирования, что не влияет на результат. Из условия минимальности потенциальной энергии при  $R = R^{(0)}$  следует, что величины (1.7) при  $\alpha = \alpha'$ ,  $a = a'$  положительны:

$$\Gamma_{aa}^{\alpha\alpha} > 0. \quad (1.7'')$$

Наконец, еще одно, важное для дальнейшего, свойство коэффициентов  $\Gamma_{aa'}^{\alpha\alpha'}$  можно установить, замечая, что все элементарные ячейки в основном объеме кристалла физически эквивалентны. Отсюда следует, что энергия взаимодействия между атомами может зависеть лишь от положения их в ячейке и от относительного рас-

положения ячеек, в которых они находятся, но не от номеров этих ячеек по отдельности:

$$\Gamma_{aa'}^{\alpha\alpha'} = \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} (\mathbf{g} - \mathbf{g}'). \quad (1.8)$$

В принципе значения  $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}$  можно было бы вычислить, зная силы взаимодействия между атомами. Это, однако, требует весьма громоздких расчетов. В ряде задач (в частности, в задаче о рассеянии электронов) достаточно рассматривать  $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}$  просто как известные параметры, характеризующие данную решетку. Комбинации этих параметров, фактически входящие в окончательные результаты (например, скорость звука), можно определять непосредственно из опыта.

Полная энергия системы атомов, совершающих малые колебания около периодически расположенных положений равновесия, дается суммой выражений (1.4) и (1.6). Опуская аддитивную постоянную  $V(R^0)$ , мы имеем

$$H = \frac{1}{2} \sum_a M_a \dot{\mathbf{Q}}_a^2 + \frac{1}{2} \sum_{a, a'} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} (\mathbf{g} - \mathbf{g}') \mathbf{Q}_{a, \alpha} \mathbf{Q}_{a', \alpha'}. \quad (1.9)$$

При переходе к квантовомеханическому рассмотрению векторы смещения  $\mathbf{Q}_a$  и сопряженные им импульсы  $M_a \dot{\mathbf{Q}}_a$  следует заменить соответствующими операторами. Мы сделаем это несколько позднее, преобразовав сначала выражение (1.9) к более удобному виду.

## § 2. Нормальные координаты

Выражение (1.9) представляет собой энергию системы связанных гармонических осцилляторов, координаты которых суть  $\mathbf{Q}_a$ . Эта связь обусловлена наличием в (1.9) «перекрестных» слагаемых  $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} \mathbf{Q}_{a, \alpha} \mathbf{Q}_{a', \alpha'}$  при  $a' \neq a$ ,  $\alpha' \neq \alpha$ . В результате происходит непрерывный обмен энергией между осцилляторами. Энергия каждого из них в отдельности не является интегралом движения. Соответственно зависимость  $\mathbf{Q}_a$  от времени отнюдь не имеет вида простого гармонического колебания, а оказывается довольно сложной.

Естественно попытаться ввести вместо  $\mathbf{Q}_a$  новые переменные так, чтобы энергия системы, будучи выражена через них, не содержала перекрестных членов. Эти переменные называются *нормальными координатами*. По определению энергия системы, как функция нормальных координат и соответствующих им скоростей (или импульсов), представляет собой сумму энергий независимых гармонических осцилляторов. Соответственно нормальные координаты меняются со временем по простому гармоническому закону (каждая, вообще говоря, со своей частотой). Колебания, совершаемые нормальными координатами, также называются нормальными.