

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.

Определение нормальных координат и частот, с которыми они колеблются, представляет собой, очевидно, не что иное, как задачу о приведении квадратичной формы (1.9) к сумме квадратов. Как известно из линейной алгебры, для этой цели надо произвести линейное преобразование переменных, т. е. в нашем случае представить векторы смещения отдельных атомов Q_a как линейные комбинации новых обобщенных координат. Вид этой линейной комбинации в интересующей нас задаче можно в известной мере предугадать, принимая во внимание физическую эквивалентность всех элементарных ячеек в основном объеме кристалла. Действительно, на основании этой эквивалентности следует ожидать, что амплитуды смещений соответственных атомов в различных ячейках будут одинаковы и при переходе от одной ячейки к другой будет меняться только фаза колебаний. По этой причине попытаемся представить векторы смещения в виде

$$Q_a(t) = \frac{1}{G^{1/2}} \sum_{\mathbf{q}, s} \{ \zeta_h(\mathbf{q}, s) \eta(\mathbf{q}, s, t) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \}. \quad (2.1)$$

Здесь множитель $G^{-1/2}$ введен для удобства в дальнейшем; \mathbf{q} — некоторый вектор, определяющий изменение фазы при переходе от одной ячейки к другой; \mathbf{r} — вектор (1.1); комплексные величины $\eta(\mathbf{q}, s, t)$ играют роль новых обобщенных координат (зависящих от времени); $\zeta_h(\mathbf{q}, s)$ — векторы, которые надлежит подобрать так, чтобы при подстановке (2.1) в (1.9) «перекрестных» членов не было. Индекс s нумерует различные возможные типы нормальных колебаний, характеризующихся одним и тем же вектором \mathbf{q} . Необходимость ввести этот индекс ясна хотя бы из следующих соображений. Поскольку обобщенные координаты η , по определению, должны гармонически зависеть от времени, выражение (2.1) представляет собой сумму волн. Направление распространения каждой такой волны определяется вектором \mathbf{q} , а направление колебаний h -го атома — вектором ζ_h . В зависимости от угла между этими векторами мы можем иметь различные типы волн с одной и той же длиной, например продольные и поперечные. Именно это обстоятельство и отражается индексом s *).

Вектор \mathbf{q} называется квазиволновым. Название связано с очевидной аналогией между выражением (2.1) и набором волн в сплошной среде. В следующем параграфе мы увидим, однако, что (как и в случае электронов в решетке, § III.2) эта аналогия неполна, почему и не используется термин «волновой вектор».

Возможные значения компонент \mathbf{q} определяются граничными условиями, накладываемыми на векторы смещения. Как и в гл. III, рассматривая систему в основном объеме V , удобно наложить

*) В решетках, содержащих более одного атома в элементарной ячейке, есть и другие причины, требующие введения индекса s (см. ниже, § 3).

условия периодичности на его границах. Тогда компоненты \mathbf{q} даются формулами вида (III.3.10), в которых следует положить

$$L_\alpha = G_\alpha a_\alpha, \quad \alpha = x, y, z.$$

Заметим, что величины $\eta(\mathbf{q}, s, t)$ — комплексные нормальные координаты — не независимы. Действительно, в правой части (2.1) стоят комплексные числа, в то время как компоненты вектора смещения должны быть вещественными. Это возможно, если выполняется равенство

$$\xi_h(\mathbf{q}, s) \eta(\mathbf{q}, s, t) = \xi_h^*(-\mathbf{q}, s) \eta^*(-\mathbf{q}, s, t). \quad (2.2)$$

Действительно, выражение, комплексно сопряженное правой части (2.1), есть

$$G^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}, s} \xi_h^*(\mathbf{q}, s) \eta^*(\mathbf{q}, s, t) e^{-i\mathbf{q}\rho}.$$

Заменяя здесь переменные суммирования q_x, q_y, q_z на $-q_x, -q_y, -q_z$, получаем

$$G^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}, s} \xi_h^*(-\mathbf{q}, s) \eta^*(-\mathbf{q}, s, t) e^{i\mathbf{q}\rho}.$$

В силу (2.2) это есть не что иное, как сама правая часть (2.1). Таким образом, она совпадает с сопряженным ей выражением, т. е. оказывается вещественной.

Подставим выражение (2.1) в правую часть (1.9). Принимая во внимание (1.8), получим

$$H = T + V, \quad (2.3)$$

где

$$T = \frac{1}{2G} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}', s, s'} \sum_h M_h \xi_{h\alpha}(\mathbf{q}, s) \xi_{h\alpha}(\mathbf{q}', s') \times \\ \times \dot{\eta}(\mathbf{q}, s, t) \dot{\eta}(\mathbf{q}', s', t) \sum_{\mathbf{g}} e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}', \rho)}, \quad (2.4)$$

$$V = \frac{1}{2G} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}', s, s'} \sum_h \sum_{h'} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{g} - \mathbf{g}') \times \\ \times \xi_{h\alpha}(\mathbf{q}, s) \xi_{h'\alpha'}(\mathbf{q}', s') \eta(\mathbf{q}, s, t) \eta(\mathbf{q}', s', t) e^{i(\mathbf{q}\rho + \mathbf{q}'\rho')}. \quad (2.5)$$

Как показано в Приложении VIII,

$$\sum_{\mathbf{g}} e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}', \rho)} = G \delta_{\mathbf{q} + \mathbf{q}', 0}, \quad (2.6)$$

где $\delta_{\mathbf{q} + \mathbf{q}', 0}$ есть символ Кронекера, равный единице при $\mathbf{q} + \mathbf{q}' = 0$ и нулю при $\mathbf{q} + \mathbf{q}' \neq 0$.

Следовательно, выражение (2.4) с учетом (2.2) принимает вид

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{s, s'} \sum_h M_h \xi_{h\alpha}(\mathbf{q}, s) \xi_{h\alpha}^*(\mathbf{q}, s') \eta(\mathbf{q}, s, t) \eta^*(\mathbf{q}, s', t). \quad (2.4')$$

Обратимся теперь к вычислению суммы по \mathbf{g} и \mathbf{g}' в правой части (2.5). Заменяем переменные суммирования, полагая

$$\mathbf{g} - \mathbf{g}' = \mathbf{g}_1, \quad \mathbf{g} + \mathbf{g}' = 2\mathbf{g}_2 \quad (2.7)$$

и, соответственно,

$$\rho - \rho' = \rho_1, \quad \rho + \rho' = 2\rho_2.$$

Получим с учетом (2.6)

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}'} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} (\mathbf{g} - \mathbf{g}') e^{i(\mathbf{q}\rho + \mathbf{q}'\rho')} = \\ = \sum_{\mathbf{g}_1} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} (\mathbf{g}_1) e^{i/2(\mathbf{q} - \mathbf{q}', \rho_1)} \sum_{\mathbf{g}_2} e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}', \rho_2)} = \\ = G \sum_{\mathbf{g}_1} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} (\mathbf{g}_1) e^{i\mathbf{q}\rho_1} \delta_{\mathbf{q} + \mathbf{q}', 0}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Пределы суммирования здесь легко устанавливаются на основании (2.7) и (1.2): $-G_x \leq g_{1x} \leq G_x$ и т. д.

Введем обозначение

$$\sum_{\mathbf{g}_1} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} (\mathbf{g}_1) e^{i\mathbf{q}\rho_1} = \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} (\mathbf{q}). \quad (2.9)$$

Тогда выражение (2.5) с учетом (2.2) и (2.8) принимает вид

$$V = \frac{1}{2} \sum_{s, s'} \sum_{h, h'} \sum_{\mathbf{q}} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} (\mathbf{q}) \zeta_{h\alpha} (\mathbf{q}, s) \zeta_{h'\alpha'}^* (\mathbf{q}, s') \eta (\mathbf{q}, s, t) \eta^* (\mathbf{q}, s', t). \quad (2.5')$$

Из формул (2.3), (2.4') и (2.5') видно, что слагаемые с различными \mathbf{q} не «перемешиваются» в выражении для полной энергии: последняя представляется суммой членов, каждый из которых относится только к одному вектору \mathbf{q} . Это означает (с учетом (1.1)), что зависимость от \mathbf{q} в линейной комбинации (2.1) выбрана правильно и нормальные колебания действительно можно характеризовать квазиволновым вектором \mathbf{q} . Осталось потребовать, чтобы в выражениях (2.4'), (2.5') обратились в нуль слагаемые с $s \neq s'$. Можно убедиться, что это условие выполняется, если величины $\zeta_{h\alpha}$ удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_h \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} (\mathbf{q}) \zeta_{h\alpha} (\mathbf{q}, s) = \omega_s^2 (\mathbf{q}) M_{h'} \zeta_{h'\alpha'} (\mathbf{q}, s), \quad (2.10)$$

где $\omega_s (\mathbf{q})$ — некоторые числа размерности частоты. (Из дальнейшего будет видно, что они представляют собой не что иное, как частоты нормальных колебаний.) Действительно, в Приложении IX показано, что из системы (2.10) вытекает условие ортогональности

$$\sum_h M_h \zeta_{h\alpha}^* (\mathbf{q}, s) \zeta_{h\alpha} (\mathbf{q}, s') = 0, \quad s' \neq s. \quad (2.11)$$

Из соотношений (2.10) и (2.11) сразу видно, что слагаемые с $s' \neq s$ действительно обращаются в нуль как в (2.4'), так и в (2.5'). Виден также формальный смысл индекса s : он нумерует различные решения системы (2.10) (при заданном векторе q).

Отметим некоторые важные свойства системы (2.10). Прежде всего, из соотношения симметрии (1.7') и определения (2.9) вытекает равенство

$$\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(q) = [\Gamma_{h'h}^{\alpha'\alpha}(-q)]^*. \quad (2.12)$$

Таким образом, матрица коэффициентов в (2.10) переходит сама в себя, если заменить q на $-q$ и одновременно выполнить комплексное сопряжение. То же, очевидно, справедливо и для детерминанта этой матрицы и для его миноров, а потому и для величин $\omega_s^2(q)$ и для векторов $\xi(q, s)$, которые через них выражаются:

$$\xi(q, s) = \xi^*(-q, s), \quad \omega_s^2(q) = [\omega_s^2(-q)]^*. \quad (2.13)$$

Еще одно свойство коэффициентов $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(q)$ можно установить, замечая, что потенциальная энергия кристалла, равно как и ее производные по смещениям, должна быть инвариантной относительно сдвига решетки как целого. Действительно, при таком сдвиге расстояния между атомами не меняются, а потому не могут измениться и силы взаимодействия между ними. С другой стороны, формально мы можем, смещая все атомы на постоянный вектор Q_0 , вычислить изменение потенциальной энергии или ее производных при таком сдвиге. Требуя, чтобы это изменение обращалось в нуль, получим некоторое тождественное соотношение между коэффициентами $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(q)$.

Удобно рассмотреть первую производную от потенциальной энергии по какой-нибудь компоненте вектора смещения $\frac{\partial V}{\partial Q_\alpha(\rho, h)}$ (тот факт, что она равна нулю в условиях равновесия, не играет роли). Очевидно, изменение ее при сдвиге Q_0 есть

$$\left. \frac{\partial V}{\partial Q_\alpha(\rho, h)} - \frac{\partial V}{\partial Q_\alpha(\rho, h)} \right|_0 = \sum_{h'=1}^r \sum_{g'} \frac{\partial^2 V}{\partial Q_\alpha(\rho, h) \partial Q_{\alpha'}(\rho', h')} \Big|_0 Q_{0,\alpha} + \dots \quad (2.14)$$

Здесь индекс «0» указывает, что соответствующая величина вычисляется при $Q_0 = 0$, а многоточием обозначены члены, содержащие высшие степени компонент Q_0 . Их мы всегда можем отбросить, считая величину $|Q_0|$ достаточно малой. Принимая во внимание определение величин $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}$ (см. (1.7)), мы получаем из (2.14)

$$\sum_{h'=1}^r \sum_{g'} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(g-g') Q_{0,\alpha'} \equiv 0. \quad (2.15)$$

Суммирование по g' , очевидно, можно заменить суммированием по разности $g-g' = g''$. Поскольку компоненты $Q_{0,\alpha'}$ независимы,

равенство (2.15) дает

$$\sum_{h'=1}^r \sum_{g'} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(g') \equiv 0. \quad (2.16)$$

Ради единства обозначений мы заменили здесь индекс суммирования g'' на g' . Соотношение (2.16) должно выполняться тождественно для любой кристаллической решетки.

В частности, в простой решетке, когда в элементарной ячейке имеется всего один атом ($r = 1$), суммирование по h' отпадает ($h' = h = 1$) и тождество (2.16) принимает вид

$$\sum_{g'} \Gamma_{11}^{\alpha\alpha'}(g') \equiv 0. \quad (2.16')$$

Обращаясь теперь к определению (2.9), видим, что сумма по g' в левой части (2.16) есть не что иное, как значение $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$ при $\mathbf{q} = 0$. Таким образом, мы имеем

$$\sum_{h'=1}^r \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})|_{\mathbf{q}=0} = 0. \quad (2.17)$$

В простой решетке сумма по h' отпадает ($h = h' = 1$) и

$$\Gamma_{11}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})|_{\mathbf{q}=0} = 0. \quad (2.17')$$

Система уравнений (2.10) представляет собой стандартную математическую задачу на собственные значения: величины $\omega_s^2(\mathbf{q})$ и $\xi_{ha}(\mathbf{q}, s)$ суть, соответственно, собственные значения и собственные векторы матрицы $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$. Согласно (2.12) эта матрица эрмитова. В линейной алгебре доказывается, что собственные значения таких матриц $\omega_s^2(\mathbf{q})$ вещественны. Основываясь на свойстве минимальности потенциальной энергии в положении равновесия, можно доказать также [1], что собственные значения $\omega_s^2(\mathbf{q})$ неотрицательны, т. е. сами частоты $\omega_s(\mathbf{q})$ вещественны. В сочетании с (2.13) отсюда следует

$$\omega_s(\mathbf{q}) = \omega_s(-\mathbf{q}), \quad (2.18)$$

т. е. частоты нормальных колебаний суть четные функции квази-волнового вектора.

При $s' = s$ сумма в левой части (2.11) отлична от нуля. Ее значение в этом случае можно назначить по произволу. Действительно, из формулы (2.1) видно, что изменение вектора $\xi_h(\mathbf{q}, s)$ на постоянный множитель сводится (при заданном векторе смещения \mathbf{Q}_a) просто к изменению масштаба обобщенных координат η . Далее, система (2.10) однородна и, следовательно, также определяет $\xi_h(\mathbf{q}, s)$ лишь с точностью до постоянного множителя. Выбор последнего есть вопрос удобства. Для дальнейшего удобно сохранить за координатами η размерность длины. Тогда функции $\xi_h(\mathbf{q}, s)$ должны

быть безразмерными и условие нормировки удобно записать в виде

$$\sum_{h=1}^r M_h |\xi_h(\mathbf{q}, s)|^2 = M. \quad (2.19)$$

Здесь M есть масса элементарной ячейки:

$$M = \sum_{h=1}^r M_h.$$

В частности, если массы всех атомов одинаковы, то вектор ξ_h оказывается единичным:

$$|\xi_h(\mathbf{q}, s)|^2 = 1. \quad (2.19')$$

Подставляя теперь выражения (2.4') и (2.5') в формулу (2.3) и пользуясь равенствами (2.10), (2.11) и (2.19) мы получаем

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, s} M \{ |\dot{\eta}(\mathbf{q}, s, t)|^2 + \omega_s^2(\mathbf{q}) |\eta(\mathbf{q}, s, t)|^2 \}. \quad (2.20)$$

Это выражение формально похоже на энергию системы независимых гармонических осцилляторов, частоты которых равны $\omega_s(\mathbf{q})$. Однако, как уже отмечалось, комплексные нормальные координаты $\eta(\mathbf{q}, s, t)$ фактически не независимы, а связаны условием (2.2). Последнее, согласно (2.13), можно переписать в виде

$$\eta(\mathbf{q}, s, t) = \eta^*(-\mathbf{q}, s, t). \quad (2.2')$$

Чтобы представить энергию системы в виде суммы энергий независимых гармонических осцилляторов, надо выразить комплексные величины $\eta(\mathbf{q}, s, t)$ через вещественные нормальные координаты так, чтобы условие (2.2') удовлетворялось автоматически. При этом вещественные нормальные координаты, которые мы обозначим через $x(\mathbf{q}, s, t)$, должны гармонически зависеть от времени. Мы обеспечим это, подчинив их уравнению (впредь для краткости мы не будем выписывать аргумент t у функции $x(\mathbf{q}, s, t)$)

$$\ddot{x}(\mathbf{q}, s) + \omega^2(\mathbf{q}, s) x(\mathbf{q}, s) = 0. \quad (2.21)$$

Положим

$$\eta(\mathbf{q}, s, t) = \frac{1}{2} \left\{ x(\mathbf{q}, s) + x(-\mathbf{q}, s) + \frac{i}{\omega(\mathbf{q}, s)} [\dot{x}(\mathbf{q}, s) - \dot{x}(-\mathbf{q}, s)] \right\}. \quad (2.22)$$

Непосредственно видно, что условие (2.2') при этом удовлетворяется. Заметим, далее, что, согласно (2.21) и (2.22),

$$\dot{\eta}(\mathbf{q}, s, t) = \frac{1}{2} \left\{ \dot{x}(\mathbf{q}, s) + \dot{x}(-\mathbf{q}, s) - i\omega(\mathbf{q}, s) [x(\mathbf{q}, s) - x(-\mathbf{q}, s)] \right\}. \quad (2.23)$$

Подставляя выражения (2.22) и (2.23) в правую часть (2.20), находим окончательное выражение для энергии кристаллической решетки, совершающей малые колебания около положений равновесия:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, s} \{ M \dot{x}^2(\mathbf{q}, s) + M \omega^2(\mathbf{q}, s) x^2(\mathbf{q}, s) \}. \quad (2.24)$$

В правой части (2.24) стоит сумма энергий независимых гармонических осцилляторов, частоты которых равны $\omega(\mathbf{q}, s)$, а массы равны M . Координаты этих осцилляторов представляют собой искомые нормальные координаты решетки.

Для перехода к квантовой теории удобно вместо обобщенных скоростей $\dot{x}(\mathbf{q}, s)$ ввести соответствующие импульсы

$$p(\mathbf{q}, s) = M \dot{x}(\mathbf{q}, s). \quad (2.25)$$

Тогда

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, s} \left\{ \frac{p^2(\mathbf{q}, s)}{M} + M \omega^2(\mathbf{q}, s) x^2(\mathbf{q}, s) \right\}. \quad (2.24')$$

Выразим теперь нормальные координаты через векторы смещения. Пользуясь формулами (2.6) и (2.1), мы получаем

$$\eta(\mathbf{q}, s, t) = \frac{1}{MG} \sum_{g, h} M_h Q_{g, h, \alpha} \zeta_{h, \alpha}^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_g}. \quad (2.26)$$

Отсюда видно, что в идеальной решетке каждое нормальное колебание охватывает, вообще говоря, все атомы и не может быть приписано какому-то одному из них. Иначе говоря, нормальные координаты описывают коллективные движения частиц системы.

Применим уравнение (2.10) к частному случаю линейной цепочки одинаковых атомов, вытянутой вдоль оси x . При этом «элементарная ячейка» состоит из одного атома ($r = 1$), т. е. всюду следует положить $h' = h = 1$ и $M_h = M$; векторные индексы α, α' также принимают лишь по одному значению ($\alpha' = \alpha = x$). Соответственно значки h, h', α, α' можно вообще опустить, и уравнение (2.10) принимает вид

$$\Gamma(\mathbf{q}) \zeta(\mathbf{q}, s) = M \omega_s^2(\mathbf{q}) \zeta(\mathbf{q}, s). \quad (2.27)$$

Это уравнение имеет нетривиальное решение лишь при

$$\omega_s^2(\mathbf{q}) = \Gamma(\mathbf{q})/M. \quad (2.28)$$

Таким образом, здесь возможен лишь один тип нормальных колебаний; по этой причине индекс s также можно опустить. Вектор ρ (см. (1.1)) имеет теперь лишь одну компоненту $\rho = g a$, где g — номер атома в цепочке, а a — расстояние между соседними атомами. Соответственно равенства (1.7), (2.9) и (2.17') принимают

ВИД

$$\Gamma(g - g') = \frac{\partial^2 V}{\partial R_g \partial R_{g'}} \Big|_{R=R^0}, \quad (2.29)$$

$$\Gamma(q) = \sum_{g_1=-\infty}^{+\infty} \Gamma(g_1) e^{i q a g_1} = \Gamma(0) + 2 \sum_{g_1=1}^{\infty} \Gamma(g_1) \cos(q a g_1) \quad (2.30)$$

и

$$\Gamma(0) + 2 \sum_{g_1=1}^{\infty} \Gamma(g_1) = 0. \quad (2.31)$$

При этом, в силу (1.7"), $\Gamma(0) > 0$. Принимая во внимание это обстоятельство и пользуясь равенством (2.31), можем переписать выражение (2.30) в виде

$$\Gamma(q) = -4 \sum_{g_1=1}^{\infty} \Gamma(g_1) \sin^2\left(\frac{q a g_1}{2}\right), \quad (2.30')$$

причем

$$- \sum_{g_1=1}^{\infty} \Gamma(g_1) > 0.$$

Наконец, вместо равенства (2.19') мы получаем

$$\zeta^2 = 1.$$

Таким образом, частоты нормальных колебаний даются выражением

$$\omega(q) = \frac{2}{M} \sqrt{- \sum_{g_1=1}^{\infty} \Gamma(g_1) \sin^2\left(\frac{q a g_1}{2}\right)}. \quad (2.32)$$

При малых значениях волнового числа q это дает

$$\omega(q) = \frac{a}{M} \sqrt{\left[\sum_{g_1=1}^{\infty} \Gamma(g_1) g_1^2 \right] q}. \quad (2.32')$$

§ 3. Частоты нормальных колебаний. Акустические и оптические ветви

Обратимся к более подробному рассмотрению однородной системы уравнений (2.10). Она имеет нетривиальные решения, лишь если детерминант ее обращается в нуль:

$$\begin{vmatrix} \Gamma_{11}^{xx} - M_1 \omega_s^2 & \Gamma_{11}^{xy} & \Gamma_{11}^{xz} & \Gamma_{12}^{xx} & \dots & \Gamma_{1r}^{xz} \\ \Gamma_{11}^{yx} & \Gamma_{11}^{yy} - M_1 \omega_s^2 & \Gamma_{11}^{yz} & \Gamma_{12}^{yx} & \dots & \Gamma_{1r}^{yz} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Gamma_{r1}^{zx} & \Gamma_{r1}^{zy} & \Gamma_{r1}^{zz} & \Gamma_{r2}^{zx} & \dots & \Gamma_{rr}^{zz} - M_r \omega_s^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (3.1)$$