вид

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

$$\Gamma(q) = \sum_{g_1=-\infty}^{+\infty} \Gamma(g_1) e^{iqag_1} = \Gamma(0) + 2\sum_{g_1=1}^{\infty} \Gamma(g_1)\cos(qag_1) \tag{2.30}$$

и

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

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

$$\Gamma(q) = -4\sum_{g_1=1}^{\infty} \Gamma(g_1)\sin^2\left(\frac{qag_1}{2}\right), \tag{2.30'}$$

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

$$\omega(q) = \frac{2}{M}\sqrt{-\sum_{g_1=1}^{\infty} \Gamma(g_1)\sin^2\left(\frac{qag_1}{2}\right)}. \tag{2.32}$$

При малых значениях волнового числа q это дает

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

§ 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:

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

Поскольку индекс h меняется от 1 до r, а $\alpha = x, y, z$, это есть уравнение степени $3r$ относительно ω_s^2. При заданном векторе $\mathbf{q}$ оно имеет $3r$ корней — собственных частот системы. Соответственно мы получаем $3r$, вообще говоря, различных функций $\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{q}, s)$, описывающих различные «ветви» колебаний.

Компоненты вектора $\mathbf{q}$ при этом играют роль параметров. При изменении их собственные частоты и собственные векторы, разумеется, меняются. Зависимость ω_s от $\mathbf{q}$ называется законом дисперсии для нормальных колебаний s-й ветви. Некоторые сведения о законе дисперсии уже были получены в предыдущем параграфе: как мы знаем, частоты представляют собой вещественные и четные функции $\mathbf{q}$. Далее, легко убедиться, что $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$ периодически зависит от вектора $\mathbf{q}$ с периодом обратной решетки $\mathbf{b}$. Действительно, согласно (1.1) при добавлении к вектору $\mathbf{q}$ слагаемого $\mathbf{b}$ выражение под знаком суммы в формуле (2.9) не изменяется. Отсюда следует, что и величины $\omega_s(q) \equiv \omega(\mathbf{q}, s)$ и $\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{q}, s)$ суть периодические функции $\mathbf{q}$ с периодом, равным вектору обратной решетки.

Обратим внимание на аналогию между этими свойствами и соответствующими свойствами энергии и волновой функции электрона в периодической решетке (§§ III.2, III.3). Эта аналогия обусловлена глубокой физической причиной: в обоих случаях мы имеем трансляционно инвариантную систему. Действительно, в гл. III речь шла о движении электрона в периодическом силовом поле; в настоящей же главе рассматриваются малые колебания атомов около периодически распределенных положений равновесия.

Как и в § III.3, периодическая зависимость $\omega(\mathbf{q}, s)$ и $\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{q}, s)$ от квазиволнового вектора позволяет ограничить рассматриваемый интервал значений $\mathbf{q}$, введя представление о зонах Бриллюэна. В частности, первая зона Бриллюэна определяется соотношениями (III.3.8). Поскольку последние носят чисто геометрический характер, мы можем говорить просто о зонах Бриллюэна, не уточняя, что́ именно характеризуют соответствующие квазиволновые векторы — движение электрона или нормальные колебания решетки.

Тождества (2.17), (2.17′) позволяют исследовать общий вид закона дисперсии при малых квазиволновых векторах, т. е. для длинных волн («длинными» в данном случае надо называть волны, длины которых велики по сравнению с постоянной решетки).

Рассмотрим сначала простую решетку ($r = 1$). В этом случае уравнение (3.1) — кубическое. Следовательно, имеются три ветви колебаний: $s = 1, 2, 3$. При $\mathbf{q} = 0$ система (2.10) принимает вид

$$\Gamma_{11}^{\alpha\alpha'}(0)\,\zeta_{1\alpha}(0, s) = \omega_s^2(0)\,\zeta_{1\alpha'}(0, s). \tag{3.2}$$

В силу (2.17′) левая часть (3.2) обращается в нуль, и, поскольку вектор $\boldsymbol{\zeta}$ не должен быть тождественно равен нулю:

$$\omega_s(0) = 0.$$

Таким образом, при $\mathbf{q} = 0$ частоты колебаний всех трех ветвей обращаются в нуль. Поскольку $\omega_s(\mathbf{q})$ есть четная функция $\mathbf{q}$, отсюда, в сочетании с определением (2.9), следует, что для длинных волн ω_s^2 есть квадратичная функция $\mathbf{q}$,

$$\omega_s^2(\mathbf{q}) = c_{\alpha\beta}(s)\, q_\alpha q_\beta, \tag{3.3}$$

т. е.

$$\omega_s = c_s q. \tag{3.3'}$$

Величины c_s зависят, вообще говоря, от направления вектора $\mathbf{q}$ (и, конечно, от номера ветви). Аналогичную формулу, но с постоянными величинами c_s мы получили бы, рассматривая распространение малых колебаний плотности в упругом изотропном континууме. При этом, как известно, одна ветвь (припишем ей индекс $s = 1$) описывает продольные волны (это есть обычный звук), а две другие ($s = 2, 3$) — поперечные волны. В анизотропной среде четкое разделение волн на продольные и поперечные возможно лишь для некоторых особых направлений; вообще же говоря, угол между векторами $\mathbf{q}$ и $\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{q}, s)$ оказывается отличным как от нуля, так и от $\pi/2$. Иными словами, каждая ветвь имеет, вообще говоря, как поперечную, так и продольную компоненты. Тем не менее величины c_s часто называют скоростями звука.

В сложных решетках, когда $r > 1$, также всегда имеются три ветви колебаний, у которых закон дисперсии при малых $\mathbf{q}$ имеет вид (3.3). Этот факт явствует просто из того, что при длинных волнах все атомы в элементарной ячейке могут смещаться практически одинаковым образом, т. е. существуют движения, при которых элементарная ячейка колеблется как целое. Сложная структура ячейки при этом никак не проявляется. Формально в существовании таких ветвей можно убедиться, написав систему (2.10) при $\mathbf{q} = 0$ и предположив заранее, что $\omega_s(0) = 0$:

$$\sum_{h=1}^{r} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(0)\, \zeta_{h\alpha}(0, s) = 0. \tag{3.4}$$

Из тождества (2.17) вытекает, что эта система имеет нетривиальные решения, не зависящие от h:

$$\zeta_h(0, s) = \zeta(s). \tag{3.5}$$

В самом деле, подставляя (3.5) в (3.4), видим, что последнее уравнение удовлетворяется в силу (2.17).

Таким образом, вектор смещения действительно оказывается одним и тем же для всех атомов данной ячейки. Ветви такого типа называются *акустическими*; для некоторых особых направлений их, как и в простой решетке, можно разделить на одну продольную и две поперечные. Мы припишем им значения индекса $s = 1, 2, 3$.

В рассматриваемом случае уравнение (3.1) — степени $3r \geqslant 6$. Следовательно, помимо акустических, должны существовать еще $3r-3$ ветви колебаний, не имеющих себе аналога в динамике сплошной среды. Закон дисперсии для этих ветвей уже не имеет вида (3.3), т. е. при $\mathbf{q} \to 0$ частота колебаний уже не обращается в нуль. Поскольку частота, согласно (2.18), есть четная функция $\mathbf{q}$, для длинных волн величина $\omega(\mathbf{q}, s)$ $(s \geqslant 4)$ почти постоянна *):

$$\omega(\mathbf{q}, s) = \omega_0(s) - \alpha_s \mathbf{q}^2. \tag{3.6}$$

Коэффициент α_s обычно больше нуля. Частота $\omega_0(s)$ называется предельной. Колебания этого типа отличаются тем свойством, что при $\mathbf{q} \to 0$ центр тяжести элементарной ячейки остается в покое. Действительно, при $\mathbf{q} = 0$ и $\omega = \omega_0 \neq 0$ система (2.10) принимает вид

$$\sum_{h=1}^{r} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(0)\, \zeta_{h\alpha}(0, s) = M_{h'}\omega_0^2(s)\, \zeta_{h'\alpha'}(0, s).$$

Суммируя эти равенства по h' и переставляя в левой части порядок суммирования по h и h', получаем

$$\sum_{h=1}^{r} \zeta_{h\alpha}(0, s) \sum_{h'=1}^{r} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(0) = \sum_{h'=1}^{r} M_{h'}\omega_0^2(s)\, \zeta_{h'\alpha'}(0, s).$$

Согласно (2.17) левая часть этого равенства тождественно равна нулю. Следовательно, при $\omega_0(s) \neq 0$

$$\sum_{h'=1}^{r} M_{h'}\zeta_{h'\alpha'}(0, s) = 0. \tag{3.7}$$

В левой части (3.7) стоит не что иное, как вектор смещения центра тяжести элементарной ячейки, умноженный на M. Этим и доказывается высказанное выше утверждение. Ветви колебаний с законом дисперсии вида (3.6) называются *оптическими*. Физическую природу различия между акустическими и оптическими колебаниями легко понять, рассматривая кристалл с двумя атомами в элементарной ячейке. Как мы видели, при длинноволновых акустических колебаниях эти атомы движутся почти синфазно, а при длинноволновых оптических, согласно (3.7), — почти в противофазе (рис. 12.1). Очевидно, в ионных кристаллах при колебаниях последнего типа может сильно изменяться дипольный момент элементарной ячейки. Поэтому некоторые оптические колебания в этих кристаллах сравнительно легко возбуждаются переменным электромагнитным полем подходящей частоты. Рассмотренный процесс составляет один из важных механизмов поглощения электромагнит-

*) Выражение (3.6) получается в результате разложения $\omega(\mathbf{q}, s)$ при $s \geqslant 4$ по степеням q^2 и пренебрежения величинами порядка $(q^2)^2$, $(q^2)^3$ и т. д.

ных волн ионными кристаллами. С этим обстоятельством связано и само название «оптические».

В решётке с бо́льшим числом атомов в элементарной ячейке фазовые соотношения между смещениями различных атомов усложняются, однако суть различия между длинноволновыми акустическими и оптическими колебаниями остается прежней: первые

Рис. 12.1. Смещения атомов при длинноволновых акустических и оптических колебаниях решетки в двухатомном кристалле. Кружками изображены атомы, входящие в данную элементарную ячейку.

отвечают смещениям элементарной ячейки как целого, вторые — внутренним деформациям в ней при почти неподвижном центре тяжести ячейки.

При уменьшении длины волны закон дисперсии делается более сложным и его трудно установить в общем виде. Можно лишь утверждать, что при всех возможных значениях q частота колебаний остается ограниченной. В конечном счете это связано с тем, что соответствующая длина волны $2\pi/q$ не может быть меньше расстояния между соседними атомами. Наибольшая частота акустических колебаний называется *дебаевской* (ω_D); с ней можно связать характерную *дебаевскую температуру* T_D, полагая $\hbar\omega_D = kT_D$.

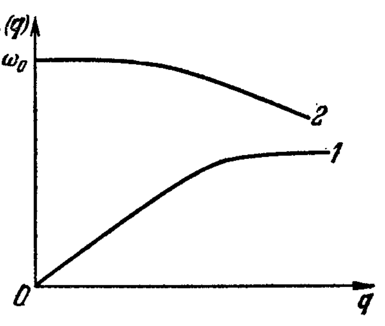

Рис. 12.2. Законы дисперсии для акустических (кривая *1*) и оптических (кривая *2*) фононов в одномерной цепочке атомов (схематически).

Для определения зависимости ω_s (q) во всей зоне Бриллюэна приходится либо выполнять численные расчеты в рамках каких-либо конкретных моделей, либо использовать экспериментальные данные. В этом отношении весьма полезными оказываются опыты по неупругому рассеянию проникающих излучений, особенно медленных нейтронов, кристаллами. Измеряя угловое распределение рассеянных нейтронов и пользуясь законами сохранения энергии и квазиимпульса, удается с хорошей точностью восстановить вид закона дисперсии ω_s (q) *). Примерный вид зависимости ω_s (q) для акустической и оптической ветвей представлен на рис. 12.2 (кривые *1* и *2*).

---

*) Подробнее об этом можно прочитать в книге [2].