§ 4. Вектор смещения

Выразим теперь вектор смещения a-го атома через вещественные нормальные координаты x (q, s). Согласно формуле (2.1)

$$\mathbf{Q}_a = G^{-1/2} \sum_{\mathbf{q},\, s} \zeta_h(\mathbf{q},\, s)\, \eta(\mathbf{q},\, s)\, e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}}. \qquad (4.1)$$

Подставляя выражение (2.22) в правую часть (4.1), мы получаем

$$\mathbf{Q}_a = \frac{1}{2\sqrt{G}} \sum_{\mathbf{q},\, s} \zeta_h(\mathbf{q},\, s)\, e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} \times$$
$$\times \left\{x(\mathbf{q},\, s) + x(-\mathbf{q},\, s) + i\,\frac{p(\mathbf{q},\, s) - p(-\mathbf{q},\, s)}{M\omega(\mathbf{q},\, s)}\right\}. \qquad (4.2)$$

Произведем здесь в слагаемых, содержащих x (—q, s) и p (—q, s), замену $\mathbf{q} \to -\mathbf{q}$ и примем во внимание равенства (2.13). Получим окончательно

$$\mathbf{Q}_a = \frac{1}{2\sqrt{G}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{s=1}^{r} \left\{\zeta_h(\mathbf{q},\, s)\left[x(\mathbf{q},\, s) + i\,\frac{p(\mathbf{q},\, s)}{M\omega(\mathbf{q},\, s)}\right] e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}} + \right.$$
$$\left. + \zeta_h^*(\mathbf{q},\, s)\left[x(\mathbf{q},\, s) - i\,\frac{p(\mathbf{q},\, s)}{M\omega(\mathbf{q},\, s)}\right] e^{-i\mathbf{q}\boldsymbol{\varrho}}\right\}. \qquad (4.3)$$

Поскольку величины x (q, s) и p (q, s) гармонически зависят от времени, правая часть формулы (4.3) представляет собой набор бегущих волн; длины волн λ связаны с абсолютными значениями квазиволновых векторов обычным соотношением $\lambda = 2\pi/q$.

Рассмотрим, в частности, одноатомный кристалл ($r = 1$). Тогда компоненты вектора $\boldsymbol{\zeta}$ оказываются вещественными. Как видно из системы уравнений (2.10), чтобы убедиться в этом, достаточно доказать вещественность коэффициентов $\Gamma^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$, определяемых равенством (2.9) (мы опускаем теперь индексы h, h', ибо элементарная ячейка содержит только один атом). В кристаллах рассматриваемого типа каждый атом представляет собой центр симметрии. Следовательно, если в левой части (2.9) имеется слагаемое с некоторым вектором $\mathbf{q}_1$, то там будет и другое слагаемое с равным по величине и противоположно направленным вектором $-\mathbf{q}_1$. Таким образом, равенство (2.9) принимает вид

$$\Gamma^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) = \Gamma^{\alpha\alpha'}(0) + 2\sum_{\mathbf{g}_1} \Gamma^{\alpha\alpha'}(\mathbf{g}_1)\cos(\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}_1),$$

т. е. коэффициенты $\Gamma^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$, а с ними и компоненты вектора $\boldsymbol{\zeta}$ вещественны, что и требовалось доказать.

Очевидно, эти соображения справедливы не только для простой решетки, но и вообще для любой решетки, в которой каждый атом является центром симметрии. Видно также, что в любой сколь угодно сложной решетке коэффициенты $\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$ вещественны при $\mathbf{q}=0$ и $\mathbf{q}\mathbf{a}=\pm\pi$, т. е. для предельно длинных и предельно коротких волн.

Формула (4.3) описывает смещения атомов в дискретной решетке. В ряде явлений, однако, существенны только волны смещения с длиной, значительно превышающей постоянную решетки. При этом факт дискретности решетки не играет роли. Очевидно, в случае длинных волн дискретный аргумент $\boldsymbol{\rho}$ в формуле (4.3) можно заменить непрерывно меняющимся вектором $\mathbf{r}$ — одним и тем же для всех атомов в данной элементарной ячейке. Иначе говоря, в сумме по $\mathbf{q}$ в правой части (4.3) имеет смысл выделить длинноволновую часть $\mathbf{Q}_{\text{дл}}$. В нее входят только слагаемые с квазиволновыми векторами, удовлетворяющими условию

$$2\pi/q \gg |\mathbf{a}|. \tag{4.4}$$

Для акустических колебаний переход от дискретного вектора $\boldsymbol{\rho}$ к непрерывному означает не что иное, как переход к макроскопической теории упругости, в которой кристалл рассматривается как непрерывная среда. При этом все атомы в элементарной ячейке колеблются практически в одной и той же фазе и индекс h у вектора $\boldsymbol{\zeta}$ можно опустить. Таким образом, длинноволновую часть вектора смещения, связанную с колебаниями акустического типа, можно записать в виде

$$\mathbf{Q}_{\text{дл.ак}}(\mathbf{r})=\frac{1}{2\sqrt{G}}\sum_{\mathbf{q}}\sum_{s=1}^{3}\left\{\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{q},s)\left[x(\mathbf{q},s)+i\frac{p(\mathbf{q},s)}{M\omega(\mathbf{q},s)}\right]e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}+\right.$$
$$\left.+\boldsymbol{\zeta}^{*}(\mathbf{q},s)\left[x(\mathbf{q},s)-i\frac{p(\mathbf{q},s)}{M\omega(\mathbf{q},s)}\right]e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\right\}. \tag{4.5}$$

С другой стороны, при рассмотрении оптических колебаний, хотя бы и длинноволновых, полностью пренебрегать дискретностью решетки и отбрасывать индекс h нельзя. Так, в двухатомной решетке векторы $\boldsymbol{\zeta}_h$ у атомов, входящих в одну ячейку, направлены почти в противоположные стороны. Вместе с тем замена дискретного вектора $\boldsymbol{\rho}$ на непрерывный по-прежнему возможна: разность фаз между колебаниями соответственных атомов в соседних ячейках невелика. Таким образом, длинноволновая часть вектора смещения, связанная с колебаниями оптического типа, также дается формулой вида (4.5):

$$\mathbf{Q}_{\text{дл.опт}}(\mathbf{r})=\frac{1}{2\sqrt{G}}\sum_{\mathbf{q}}\sum_{s\geqslant 4}\left\{\boldsymbol{\zeta}_h(\mathbf{q},s)\left[x(\mathbf{q},s)+i\frac{p(\mathbf{q},s)}{M\omega(\mathbf{q},s)}\right]e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}+\right.$$
$$\left.+\boldsymbol{\zeta}_h^{*}(\mathbf{q},s)\left[x(\mathbf{q},s)-i\frac{p(\mathbf{q},s)}{M\omega(\mathbf{q},s)}\right]e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\right\}. \tag{4.6}$$