По поводу всего изложенного напомним лишний раз, что речь идет о так называемом *гармоническом* приближении, в котором учитываются лишь квадратичные по смещениям атомов члены в потенциальной энергии. Только в этом приближении различные монохроматические волны (69,6) не взаимодействуют друг с другом, а свободно распространяются по решетке. При учете же следующих, *ангармонических* членов появляются различного рода процессы распада и рассеяния этих волн друг на друге. Взаимодействие может приводить также и к образованию «связанных состояний» волн (фононов — см. ниже), — новых ветвей спектра, отсутствующих в гармоническом приближении.

Кроме того, предполагается, что решетка обладает идеальной периодичностью. Надо иметь в виду, что идеальная периодичность в некоторой степени нарушается (даже без учета возможных «примесей» и других дефектов решетки), если в кристалле имеются атомы различных изотопов, распределенные беспорядочным образом. Это нарушение, однако, сравнительно невелико, если относительная разность атомных весов изотопов мала или если одного изотопа имеется значительно больше остальных. В этих случаях изложенная картина в первом приближении остается в силе, а в следующих приближениях возникают различного рода процессы рассеяния волн на неоднородностях решетки[1]).

§ 70. Плотность числа колебаний

Число колебаний, приходящихся на интервал $d^3k \equiv dk_x dk_y dk_z$ значений компонент волнового вектора, будучи отнесено к единице объема кристалла, равно $d^3k/(2\pi)^3$. Характеристикой спектра колебаний конкретной решетки является функция распределения колебаний по частотам $g(\omega)$, определяющая число $g(\omega)\,d\omega$ колебаний, частоты которых лежат в заданном интервале между ω и $\omega + d\omega$. Это число, разумеется, различно для разных ветвей спектра, но для упрощения обозначений соответствующий индекс α у функций $\omega(\mathbf{k})$ и $g(\omega)$ в этом параграфе мы не будем выписывать.

Число $g(\omega)\,d\omega$ дается (деленным на $(2\pi)^3$) объемом $\mathbf{k}$-пространства, заключенным между двумя бесконечно близкими изочастотными поверхностями (поверхностями постоянной частоты) $\omega(\mathbf{k}) = \mathrm{const}$. В каждой точке $\mathbf{k}$-пространства градиент функции $\omega(\mathbf{k})$ направлен по нормали к проходящей через эту точку изочастотной поверхности. Поэтому из выражения $d\omega = d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})$ ясно, что расстояние между двумя бесконечно близкими такими

---

[1]) Наличие дефектов решетки приводит также и к некоторым изменениям в спектре ее колебаний — появлению новых частот (отвечающих «локальным» колебаниям вблизи дефектов). Исследование этих вопросов — см. *И. М. Лифшиц, А. М. Косевич*, Динамика кристаллической решетки с дефектами, Reports on Progress in Physics, **29**, 217, 1966.

поверхностями (измеренное по отрезку нормали между ними) есть $d\omega/|\nabla_{\mathbf{k}}\omega|$. Умножив эту величину на площадь $df_{\mathbf{k}}$ элемента изочастотной поверхности и проинтегрировав по всей этой поверхности (в пределах одной ячейки обратной решетки), найдем искомую часть объема $\mathbf{k}$-пространства, а разделив ее на $(2\pi)^3$,— плотность распределения частот:

$$g(\omega)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{df_{\mathbf{k}}}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})|}. \qquad (70,1)$$

В каждой зоне (области значений, пробегаемых некоторой ветвью $\omega(\mathbf{k})$ в одной ячейке обратной решетки $\mathbf{k}$) функция $\omega(\mathbf{k})$ должна иметь по крайней мере один минимум и один максимум. Отсюда в свою очередь следует, что эта функция должна обладать также и седловыми точками[1]). Существование всех таких стационарных точек приводит к определенным особенностям функции распределения частот $g(\omega)$ (*L. van Hove*, 1953).

Вблизи экстремальной точки, находящейся при некотором $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$, разность $\omega(\mathbf{k})-\omega_0$ (где $\omega_0=\omega(\mathbf{k}_0)$) имеет вид

$$\omega-\omega_0=\frac{1}{2}\gamma_{ik}(k_i-k_{0i})(k_k-k_{0k}).$$

Направив координатные оси в $\mathbf{k}$-пространстве вдоль главных осей этой квадратичной формы, запишем её в виде

$$\omega-\omega_0=\frac{1}{2}\left[\gamma_1(k_x-k_{0x})^2+\gamma_2(k_y-k_{0y})^2+\gamma_3(k_z-k_{0z})^2\right], \qquad (70,2)$$

где $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — главные значения симметричного тензора γ_{ik}.

Рассмотрим сначала точку минимума или максимума функции $\omega(\mathbf{k})$. Тогда $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ имеют одинаковый знак. Введя вместо k_x, k_y, k_z новые переменные $\varkappa_x, \varkappa_y, \varkappa_z$ согласно $\varkappa_x=\sqrt{|\gamma_1|}(k_x-k_{0x}), \ldots$, пишем:

$$\omega-\omega_0=\pm\frac{1}{2}(\varkappa_x^2+\varkappa_y^2+\varkappa_z^2)=\pm\frac{1}{2}\varkappa^2. \qquad (70,3)$$

При этом изочастотные поверхности в $\varkappa$-пространстве являются сферами. Переходя в (70,1) к интегрированию в $\varkappa$-пространстве, имеем

$$g(\omega)=\frac{1}{(2\pi)^3\sqrt{\gamma}}\int\frac{df_\varkappa}{|\nabla_\varkappa\omega(\varkappa)|}, \qquad \gamma=|\gamma_1\gamma_2\gamma_3|. \qquad (70,4)$$

Элемент поверхности сферы: $df_\varkappa=\varkappa^2\,do_\varkappa$, где $do_\varkappa$ — элемент телесного угла. Градиент же функции (70,3): $\nabla_\varkappa\omega(\varkappa)=\pm\boldsymbol{\varkappa}$. Поэтому

[1]) Можно показать (на чем мы здесь не будем останавливаться), что должно существовать по крайней мере шесть седловых точек,—по три каждого из двух типов, которым отвечают знаки + и — в формуле (70,8) ниже.

интеграл в (70,4) оказывается равным $4\pi\varkappa$; выразив $\varkappa$ через $\omega-\omega_0$ согласно (70,3), окончательно находим

$$g(\omega)=\frac{1}{\pi^2\sqrt{2\gamma}}\sqrt{|\omega-\omega_0|}. \qquad (70,5)$$

Таким образом, плотность числа колебаний имеет корневую особенность; производная $dg/d\omega$ обращается при $\omega\to\omega_0$ в бесконечность.

Следует, однако, иметь в виду, что в общем случае (если значение $\omega=\omega_0$ лежит внутри, а не на самых краях полосы изменения частоты) изочастотные поверхности для близких к ω_0 значений ω могут содержать (помимо эллипсоидов вокруг точки $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$) еще и другие листы, в других частях ячейки $\mathbf{k}$-пространства. Поэтому в общем случае выражение (70,5) дает лишь «особую» часть плотности числа колебаний, так что правильнее писать

$$g(\omega)=g(\omega_0)+\frac{\sqrt{|\omega-\omega_0|}}{\pi^2\sqrt{2\gamma}}, \qquad (70,6)$$

с одной стороны от точки $\omega=\omega_0$ (при $\omega<\omega_0$ в случае максимума, или $\omega>\omega_0$ в случае минимума), и $g(\omega)=g(\omega_0)$ с другой стороны.

Отметим также, что формула (70,5) не относится, конечно, к окрестности нижнего края ($\omega=0$) зоны акустических колебаний, где закон дисперсии имеет вид (69,15). Легко видеть, что в этом случае

$$g(\omega)=\mathrm{const}\,\omega^2. \qquad (70,7)$$

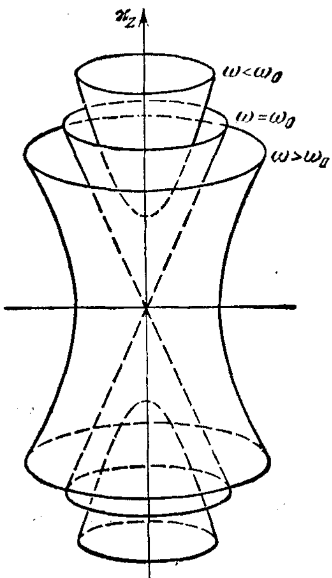

Рис. 9.

Рассмотрим теперь окрестность седловой точки. В этом случае две из величин γ_1, γ_2, γ_3 в (70,2) положительны, а одна отрицательна, или наоборот. Вместо (70,3) будем иметь теперь

$$\omega-\omega_0=\pm\frac{1}{2}(\varkappa_x^2+\varkappa_y^2-\varkappa_z^2). \qquad (70,8)$$

Примем для определенности верхний знак в этом выражении. Тогда изочастотные поверхности при $\omega<\omega_0$ представляют собой двухполостные, а при $\omega>\omega_0$—однополостные гиперболоиды; граничная же поверхность $\omega=\omega_0$ является двухполостным конусом (рис. 9).

Интегрирование в (70,4) удобно производить теперь в цилиндрических координатах в $\varkappa$-пространстве: $\varkappa_\perp$, $\varkappa_z$, φ, где $\varkappa_\perp = \sqrt{\varkappa_x^2+\varkappa_y^2}$, а φ — полярный угол в плоскости $\varkappa_x$, $\varkappa_y$. Абсолютная величина градиента: $|\nabla_\varkappa \omega| = \varkappa$. При $\omega < \omega_0$ интеграл берется по двум полостям гиперболоида:

$$df_\varkappa = \frac{2\pi\varkappa_\perp \varkappa}{|\varkappa_z|} d\varkappa_\perp, \qquad g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3\sqrt{\gamma}}\, 2\int\limits_0^K \frac{2\pi\varkappa_\perp d\varkappa_\perp}{\sqrt{\varkappa_\perp^2 + 2(\omega_0-\omega)}};$$

в качестве верхнего предела K (значение которого не отражается на виде искомой особенности) можно взять какое-либо значение $\varkappa$, большое по сравнению с $\sqrt{\omega_0-\omega}$, но в то же время настолько малое, что еще применимо выражение (70,8) для формы изочастотной поверхности. В результате находим

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi^2\sqrt{\gamma}}\left[K - \sqrt{2(\omega_0-\omega)}\right].$$

При $\omega > \omega_0$ аналогичным путем находим

$$g(\omega) = \frac{2}{(2\pi)^3\sqrt{\gamma}} \int\limits_{\varkappa_{\perp\min}}^K \frac{2\pi\varkappa_\perp d\varkappa_\perp}{\sqrt{\varkappa_\perp^2 - 2(\omega-\omega_0)}} = \frac{K}{2\pi^2\sqrt{\gamma}},$$

где $\varkappa_{\perp\min}^2 = 2(\omega-\omega_0)$. Таким образом, в окрестности седловой точки плотность числа колебаний имеет вид

$$g(\omega) = \begin{cases} g(\omega_0) - \dfrac{\sqrt{|\omega_0-\omega|}}{\pi^2\sqrt{2\gamma}} & \text{при } \omega < \omega_0, \\ g(\omega_0) & \text{при } \omega > \omega_0. \end{cases} \qquad (70,9)$$

И здесь $g(\omega)$ имеет корневую особенность.

Для седловой точки с нижним знаком в (70,8) получается такой же результат с перестановкой областей $\omega < \omega_0$ и $\omega > \omega_0$ (корневая особенность при $\omega > \omega_0$).

§ 71. Фононы.

Обратимся к вопросу о том, как выглядит картина колебаний решетки с точки зрения квантовой теории.

Вместо волн (69,6), в которых атомы испытывают в каждый момент времени определенные смещения, в квантовой теории вводится понятие о так называемых *фононах* как о некоторых распространяющихся по решетке *квазичастицах*, обладающих определенными энергиями и направлениями движения. Поскольку