

ДВАДЦАТЬ ДЕВЯТАЯ ЛЕКЦИЯ

(Апрель 1937 г.)

Системы со многими степенями свободы, кратные корни (повторение). Использование симметрии для отыскания формы и частоты колебаний. Введение в теорию кристаллических решеток. Квантовая теория теплоемкости кристаллов. Работа Эйнштейна. Приближенный прием Дебая. Решение дискретной задачи Борном и Карманом. Одномерная модель кристалла, состоящего из двух сортов атомов. Дебаевский и борновский спектры.

Повторим сначала несколько общих замечаний, относящихся к системам с n степенями свободы. Мы имели:

$$\sum_{k=1}^n (-\omega^2 a_{ik} + c_{ik}) A^{(k)} = 0 \quad (i=1, 2, \dots, n). \quad (1)$$

Эти n линейных однородных уравнений для $A^{(k)}$ определяют собственные колебания: собственные частоты и типы колебаний (относительное распределение амплитуд для всех координат). Уравнения (1) имеют не тривиальные решения только тогда, когда детерминант

$$|-\omega^2 a_{ik} + c_{ik}| = 0. \quad (2)$$

Уравнение (2) для ω^2 имеет n корней (n собственных частот). Если все корни различны, то каждой частоте соответствуют вполне определенные отношения амплитуд $A^{(k)}$. Амплитуды определяются в этом случае системой с точностью до произвольного постоянного множителя.

Но может быть и так, что уравнение (2) имеет равные корни. Вообще говоря, в этом случае постоянных $A^{(k)}$ не хватает для построения общего решения той системы дифференциальных уравнений, из которых получилась система (1). Но для интересующих нас систем, если детерминант имеет двойной корень, то этот корень обращает в нуль также миноры $(n-1)$ -го порядка. Это значит, что независимых соотношений для $A^{(k)}$ имеется не $n-1$, а только $n-2$. Следовательно, отношения амплитуд не определены однозначно. При кратном корне получается произвол, „степень“ которого равна кратности корня.

Умножим каждое из уравнений (1) на $A^{(i)}$ и просуммируем их; это дает:

$$\omega^2 \sum_{i,k=1}^n a_{ik} A^{(i)} A^{(k)} - \sum_{i,k=1}^n c_{ik} A^{(i)} A^{(k)} = 0,$$

откуда

$$\omega^2 = \frac{U(A^{(i)}, A^{(k)})}{T(A^{(i)}, A^{(k)})}. \quad (3)$$

Вообще говоря, формула (3) не избавляет от необходимости решать детерминантное уравнение. Для того, чтобы вычислить ω по формуле (3), нужно в нее подставить такие значения $A^{(i)}$ и $A^{(k)}$, которые удовлетворяют уравнениям (1), а обычно их можно узнать, лишь решив уравнение (2).

Но из свойства собственных частот, выражаемого формулой (3), можно сделать много различных выводов. Она позволяет установить некоторые законы, которым удовлетворяет расположение корней детерминантного уравнения. Она дает качественные ответы на вопрос о том, как меняются частоты в зависимости от условий задачи (я имею в виду теоремы Куранта). Это очень важно, так как решать уравнения n -ой степени чрезвычайно неприятно.

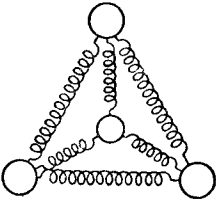


Рис. 116.

Теоремы Куранта хорошо изложены¹. Те вещи, о которых будет идти речь дальше, менее доступны: они разбросаны по разным местам.

Иногда удается найти распределение амплитуд сразу, т. е. не решая уравнения (2). Тогда с помощью (3) можно очень просто определить частоты. Поясним это на примере (рис. 116). Эта модель не совсем выдумана. Примерно так сейчас представляют себе ячейку решетки кальцита CO_3 . Высокая степень симметрии настолько облегчает здесь решение задачи, что можно получить ответ без всяких вычислений.

Если уравнение (2) имеет корень n -ой кратности, т. е. существует *единственная* частота, этот корень обращает в нуль миноры всех порядков, до элементов детерминанта включительно. Из того, что при некотором значении ω все элементы детерминанта обращаются в нуль, следует, что

$$\frac{a_{ik}}{c_{ik}} = \text{const.}$$

¹ [Р. Курант и Д. Гильберт. Методы математической физики, гл. 1, § 4. 3-е изд., М., 1951.]

для всех значений i и k . Такое соотношение между кинетической и потенциальной энергией возможно, если

- 1) совсем нет связей между координатами,
- 2) имеются как инерционные, так и упругие связи.

Следовательно, если имеются связи, но только одного типа, то не может быть корня n -ой кратности.

Модель, изображенная на рис. 116, имеет три колебательные степени свободы. Тройной корень невозможен, так как имеется только один тип связи. Следовательно, имеется по крайней мере один простой корень.

Пусть при некотором нормальном колебании

$$\frac{A_1}{A_2} = k_2, \quad \frac{A_1}{A_3} = k_3. \quad (4)$$

В силу симметрии системы возможно нормальное колебание той же частоты, при котором

$$\frac{A_2}{A_1} = k_2, \quad (5)$$

и нормальное колебание той же частоты, при котором

$$\frac{A_3}{A_1} = k_3. \quad (6)$$

Для *простого* корня отношение амплитуд однозначно определено, и, следовательно, распределения (4) — (6) должны совпадать. Это возможно, только если $k_2 = k_3 = 1$. Итак, для простого корня обязательно

$$A_1 = A_2 = A_3.$$

Так как согласно (3) отношения амплитуд однозначно определяют частоту, имеется *только один* простой корень. Следовательно, имеется еще двойной корень.

Какое возможно соотношение между амплитудами в случае двойного корня? Только такое:

$$A_1 + A_2 + A_3 = 0. \quad (7)$$

Докажем это.

Предположим, что имеет место соотношение

$$kA_1 + A_2 + A_3 = 0.$$

Тогда вследствие симметрии должно иметь место также

$$A_1 + kA_2 + A_3 = 0.$$

Но для двойного корня существует *единственное* линейное соотношение между амплитудами и, следовательно, $k=1$.

Соотношению (7) удовлетворяют, например, значения

$$A_1=0, \quad A_2=-A_3.$$

Подставляя эти значения в уравнение (3), мы найдем частоту.

Совершенно то же самое можно сказать о симметричной системе из трех колебательных контуров (рис. 117).

Рассмотрим теперь принципиально важную группу вопросов, касающихся систем с n степенями свободы:



1) динамику кристаллической решетки;

2) техническую задачу о фильтрах;

3) переход от дискретных к сплошным системам.



Рис. 117.

Начнем с применения общих соображений о системах с n степенями свободы к кристаллическим решеткам. Изложение будет вестись на самых простых примерах.

Мы представляем себе кристалл следующим образом. В узлах решетки находятся атомы. Атомы связаны между собой. Вся система может находиться в устойчивом равновесии. Если сжать кристалл, а затем отпустить, он приходит в колебания. Это — колебания системы с n степенями свободы около устойчивого положения равновесия. В первом приближении система описывается квадратичными формами, т. е. получается задача о колебаниях *линейной* системы с n степенями свободы. Число атомов в кристалле обычных размеров — порядка 10^{24} . Число степеней свободы — того же порядка. Если бы не было далеко идущей симметрии, если бы в кристалле не повторялись одинаковые ячейки, то решить задачу было бы невозможно. Мы можем ее решить только благодаря симметрии.

Если ударить по кристаллу, возникают акустические колебания. Они состоят из n независимых (нормальных) колебаний. Тепловое движение кристалла — это *те же* колебания. Заслуга Дебая состоит в том, что он увидел, что тепловое движение кристалла — это упругие колебания, но только очень быстрые. Они являются суперпозицией собственных (нормальных) колебаний решетки.

Раньше к задаче о колебаниях кристалла подходили так: рассматривали кристаллы как континуум, вводили такие понятия, как плотность и упругие постоянные, и получали для кристалла уравне-

ние в частных производных. Его гораздо легче решить, чем систему, состоящую из очень большого числа обыкновенных дифференциальных уравнений. В действительности кристалл не является сплошным, и поэтому такое „сплошное“ рассмотрение не может дать всего. К тепловым колебаниям так подходить нельзя.

Теория тепловых колебаний кристаллов была поставлена на вычислительную почву в связи с вопросом о теплоемкости твердых тел.

Вначале теория теплоемкости кристаллов строилась так. Каждый атом рассматривался как осциллятор с тремя степенями свободы, т. е. как три осциллятора. Таким образом, в кристалле, содержащем n атомов, имеется $3n$ осцилляторов. Средняя энергия теплового движения каждого осциллятора равна kT (k — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура). Поэтому полная средняя энергия теплового движения

$$W = 3nkT.$$

Нельзя себе представлять, что в кристалле имеется $3n$ осцилляторов, колеблющихся с одинаковой частотой. Если осцилляторы связаны, то имеется $3n$ нормальных колебаний *различной* (вообще говоря) частоты. На каждое нормальное колебание приходится по классической статистике одинаковая энергия kT , независимо от его частоты. Акустические колебания — сравнительно медленные; частоты тепловых колебаний очень велики (в них ν доходит до 10^{13}). Но раньше, в классической статистике, не нужно было интересоваться частотами, ибо, повторяю, в ней энергия, приходящаяся на каждое колебание, не зависит от частоты.

Опыт не подтверждает той зависимости энергии от температуры, которую дает классическая теория.

Эйнштейн первый указал на то, что здесь нужно *отбросить* классику, что резонатор, в согласии с теорией Планка, имеет среднюю энергию, равную не kT , а

$$w = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

(h — постоянная Планка). Эта величина очень сильно зависит от ν . Поэтому для того, чтобы вычислить теплоемкость по квантовой теории, необходимо знать частоты колебаний кристалла.

Эйнштейн решил задачу просто. Он подобрал разумным образом некоторую среднюю частоту ν . Основные противоречия были

устранены, но полученная таким образом формула не очень хорошо совпадала с опытом. Теория была явно недостаточна.

Мысль о том, что нужно перейти к планковской теории, была огромным шагом вперед. Но для того, чтобы подсчитать теплоемкость, нужно учесть, что в кристалле имеются колебания с совершенно различными частотами. Как рассчитать эти частоты? За эту задачу взялся Дебай в 1912 г. Он сделал явно неправильную, но гениальную вещь.

Будем рассматривать кристалл как сплошное тело. Будем говорить для простоты о стержне в одном измерении (не о цепочке из l частиц, а о макроскопическом стержне). Вычислим частоты его собственных колебаний.

Пусть l — длина стержня, ρ — плотность, E — модуль Юнга. Тогда скорость распространения звука

$$v = \sqrt{\frac{E}{\rho}},$$

длины волн

$$\lambda_s = \frac{2l}{s},$$

где s — целые числа, и для частот мы получаем:

$$\omega_s = 2\pi \frac{v}{\lambda_s} = \frac{s\pi}{l} \sqrt{\frac{E}{\rho}}. \quad (8)$$

Вот что дает теория сплошных систем.

Но колебания с малым s , т. е. длинные акустические волны в кристалле, — заведомо такие, которые дает теория сплошных систем. Забудем, что кристалл имеет структуру, и напишем для него формулу (8). Сплошной стержень имеет бесчисленное множество таких собственных колебаний ($s = 1, 2, \dots, \infty$). Если рассчитать теплоемкость по такой модели, получается очень плохой результат.

То, что сделал Дебай, сводится к следующему. Кристалл имеет $N = 3n$ колебаний. Вычислим частоты по формуле для сплошной среды, но возьмем только первые $3n$ частот, первые $3n$ колебаний и *отбросим остальные*. Это смело и заведомо неправильно, но это исключительно сильный прием. Дебай так сделал и сумел разрубить узел.

Теория Дебая была первой серьезной теорией теплоемкости кристалла. Дебай получил для ряда тел замечательно хороший

результат. Но, как мы скоро увидим, есть такие случаи, когда теория Дебая не дает совпадения с опытом.

За проблему теплоемкости кристаллов взялись также Борн и Карман. Они решили взять быка за рога, просчитать собственные колебания кристаллической решетки, найти частоты и типы колебаний, рассматривая дискретную решетку как таковую, не сводя ее к континууму.

Решение этой задачи можно довести до конца в силу высокой симметрии. При этом получаются принципиальные отличия от



Рис. 118.

сплошной среды — качественное своеобразие, обуславливающее ряд явлений.

Рассмотрим простую одномерную модель (рис. 118) — цепочку частиц (атомов), связанных одинаковыми пружинами. Если атомы одинаковы, то результат Дебая довольно хорошо подходит; различие между дискретной системой и континуумом скрыто. Но предположим, что в цепочке чередуются два сорта атомов, имеющих различные массы (рис. 119). Этого достаточно для того, чтобы выяснить все принципиальные, основные вопросы, связанные с различием между дискретной системой и континуумом.

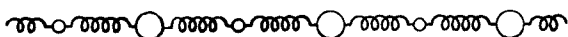


Рис. 119.

Пусть все четные массы равны M , все нечетные — m . Пусть α — постоянная пружины (при удлинении ее на Δl возникает сила $-\alpha \Delta l$). Пусть расстояние между соседними атомами равно d .

Для того, чтобы сравнивать результаты, которые мы получим для цепочки, с тем, что дает теория сплошного стержня, нужно будет принять во внимание следующее.

Пусть E — модуль Юнга цепочки. Тогда, очевидно,

$$\alpha = \frac{E}{d}. \tag{9}$$

Пусть далее ρ — масса цепочки на единицу длины (линейная плотность). Масса всей цепочки (длина ее l) равна

$$n(M + m) = \rho l \tag{10}$$

(n — число частиц каждого сорта). С другой стороны,

$$l = 2nd. \quad (11)$$

Мы считаем здесь n настолько большим, что можно пренебречь отличием между $2n$ и $2n+1$ (следует заметить, что такое пренебрежение даже при очень большом n допустимо не во всех вопросах). Из соотношений (10) и (11) следует, что

$$\rho = \frac{n(M+m)}{l} = \frac{M+m}{d}. \quad (12)$$

Пусть $x^{(k)}$ — координаты атомов первого сорта, $y^{(j)}$ — координаты атомов второго сорта. Нумеровать атомы мы будем подряд, так что k будет пробегать все нечетные, а j — все четные значения. Концы цепочки будем считать закрепленными. Мы могли бы считать, что k принимает значения $1, 3, \dots, 2n-1$, а j — значения $2, 4, \dots, 2n$; но уравнения будут гораздо более симметричны, если координаты закрепленных точек мы назовем $y^{(0)}$ и $x^{(2n+1)}$. У нас будет при этом уже не $2n$, а $2n+2$ частиц и столько же координат. Так как концы закреплены, мы потребуем, чтобы было

$$y^{(0)} = 0, \quad x^{(2n+1)} = 0. \quad (13)$$

Потенциальная энергия U состоит из энергий отдельных пружин

$$2U = \alpha [(y^{(0)} - x^{(1)})^2 + (x^{(1)} - y^{(2)})^2 + (y^{(2)} - x^{(3)})^2 + \dots]. \quad (14)$$

Для кинетической энергии T имеем:

$$2T = m [(\dot{x}^{(1)})^2 + (\dot{x}^{(3)})^2 + \dots] + M [(\dot{y}^{(2)})^2 + (\dot{y}^{(4)})^2 + \dots]. \quad (15)$$

Уравнения движения могут быть получены с помощью выражений (14) и (15) (как уравнения Лагранжа). Они могут быть получены также с помощью элементарных механических соображений, учитывающих силы.

Для k -го атома массы m имеем:

$$m\ddot{x}^{(k)} + \alpha (2x^{(k)} - [y^{(k-1)} + y^{(k+1)}]) = 0 \quad (k = 1, 3, \dots, 2n+1). \quad (16)$$

Для j -го атома массы M имеем:

$$M\ddot{y}^{(j)} + \alpha (2y^{(j)} - [x^{(j-1)} + x^{(j+1)}]) = 0 \quad (j = 0, 2, 4, \dots, 2n). \quad (17)$$

Всех уравнений движения $2n+2$.

Казалось бы, особенных успехов мы не достигли: нужно решить систему из 10^{24} уравнений! Но здесь будет видна мощь применения индексов. Ничтоже сумняшеся, полагаем:

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= A^{(k)} \cos(\omega t + \varphi), \\ y^{(j)} &= B^{(j)} \cos(\omega t + \varphi) \end{aligned}$$

(так мы делаем всегда, когда ищем решение уравнений дискретной линейной консервативной системы со многими степенями свободы). Мы получаем:

$$\left. \begin{aligned} (2\alpha - m\omega^2) A^{(k)} - \alpha [B^{(k-1)} + B^{(k+1)}] &= 0; \\ -\alpha [A^{(j-1)} + A^{(j+1)}] + (2\alpha - M\omega^2) B^{(j)} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Мы превратили, таким образом, $2n + 2$ дифференциальных уравнений во столько же алгебраических уравнений для $A^{(k)}$ и $B^{(j)}$. Но можно свести определение $2n + 2$ величин $A^{(1)}, A^{(3)}, \dots, B^{(2)}, B^{(4)}, \dots$ к определению всего лишь *двух* величин. Это делается с помощью очень красивого приема (не знаю, как до него дошли). Полагаем:

$$\left. \begin{aligned} A^{(k)} &= a \sin k\beta; \\ B^{(j)} &= b \sin j\beta. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Можно так распорядиться величинами a , b и β (если мы правильно подберем ω , т. е. частоту), что выражения (19) будут решением системы алгебраических уравнений (18).

Подставляем (19) в (18). Получаем:

$$\begin{aligned} (2\alpha - m\omega^2) a \sin k\beta - \alpha b [\sin(k-1)\beta + \sin(k+1)\beta] &= 0, \\ -\alpha a [\sin(j-1)\beta + \sin(j+1)\beta] + (2\alpha - M\omega^2) b \sin j\beta &= 0, \end{aligned}$$

или

$$\left. \begin{aligned} [(2\alpha - m\omega^2) a - 2\alpha \cos \beta \cdot b] \sin k\beta &= 0, \\ [-2\alpha \cos \beta \cdot a + (2\alpha - M\omega^2) b] \sin j\beta &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Наша подстановка (19) будет удовлетворять уравнениям (20) при любых k и j , если

$$\left. \begin{aligned} (2\alpha - m\omega^2) a - 2\alpha \cos \beta \cdot b &= 0, \\ -2\alpha \cos \beta \cdot a + (2\alpha - M\omega^2) b &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Мы сделали огромный шаг вперед. Нужно было решить систему алгебраических уравнений (18) с очень большим числом неизвест-

ных. Мы ищем их в виде (19). [Здесь зависимость неизвестного от его номера j или k заключена под знаком синуса. При подстановке (19) в (18) j и k выпадают, и мы получаем, вместо $2n+2$ уравнений, два уравнения (21). Это оказалось возможным потому, что все уравнения (16) и все уравнения (17) имеют одинаковую структуру.]

Но прежде, чем решать уравнения (21), нужно определить величину β . Вспомним для этого, что концы цепочки закреплены. Это выражается условиями (13). Подставляя в (19) $j=0$, мы видим, что первое из этих условий уже выполнено. Остается подобрать β так, чтобы было выполнено также второе условие (13). Для этого должны быть

$$(2n+1)\beta = s\pi,$$

где s — произвольное целое число, или

$$\beta = \frac{s\pi}{2n+1}. \quad (22)$$

Получается бесчисленное множество возможных значений β . Легко видеть, что значениям β , получающимся при $s=1, 2, \dots, n$, соответствуют различные решения уравнений (21), а значениям, получающимся при $s=n+1, n+2, \dots$, соответствуют решения уравнений (21), повторяющие те, которые получаются при $s=1, 2, \dots, n$ ¹.

Подставляя значения β , соответствующие $s=1, 2, \dots, n$, в уравнения (21), мы будем каждый раз получать для определения частот детерминантное уравнение

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - m\omega^2 & -2\alpha \cos \beta \\ -2\alpha \cos \beta & 2\alpha - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (23)$$

Это — квадратное уравнение относительно ω^2 . Для каждого заданного β оно дает два значения ω^2 , т. е. две различные частоты. Мы получаем всего $2n$ различных частот. Так как число степеней свободы равно $2n$, больше требовать ничего нельзя, — мы нашли все частоты.

¹ [Подробнее см. 30-ю лекцию.]

Обозначим через $x_s^{(k)}$ и $y_s^{(j)}$ смещения k -ой и j -ой точки при определенном s . Тогда

$$x_s^{(k)} = a_s \sin \frac{ks\pi}{2n+1} \cos(\omega_s t + \varphi_s),$$

$$y_s^{(j)} = b_s \sin \frac{js\pi}{2n+1} \cos(\omega_s t + \varphi_s).$$

Для каждого s имеется две частоты ω_{s1} и ω_{s2} и соответственно два значения отношения b/a . Для того, чтобы найти эти значения, нужно решить систему уравнений (21) при $\omega = \omega_{s1}$ и $\omega = \omega_{s2}$. Для амплитуд имеем:

$$A_s^{(k)} = a_s \sin \frac{ks\pi}{2n+1}, \quad B_s^{(j)} = b_s \sin \frac{js\pi}{2n+1}.$$

Рассматриваемые колебания продольны, но представим себе, что мы отложили смещения, как ординаты, против точек, где расположены массы. Для данного s все массы каждого сорта располагаются в любой момент времени по синусоиде. Длина волны синусоиды определяется числом s . Например, для $s=1$ на цепочке укладывается полволны.

В случае континуума точки также располагаются по синусоидам. Но между полученной здесь картиной и тем, что дает „непрерывная“ теория, есть принципиальная разница. В случае континуума каждой длине волны соответствует одна частота. В нашей дискретной системе для каждого s , для каждой длины волны имеется два нормальных колебания — две частоты и два распределения амплитуд. Это — замечательное обстоятельство.

ТРИДЦАТАЯ ЛЕКЦИЯ

(6/V 1931 г.)

Одномерная модель кристалла, состоящего из двух сортов атомов (продолжение). Подробное исследование типов колебаний и строения спектра. Акустические и внутримолекулярные колебания. Принципиальное отличие от теории, не учитывающей атомистическую структуру. Переход к случаю, когда все атомы имеют одинаковую массу. Задача об электрических фильтрах.

В прошлой лекции мы начали разбирать одномерную модель кристаллической решетки, состоящей из чередующихся частиц (атомов) двух сортов. Конечно, реальная решетка — трехмерна, но основные, характерные черты можно увидеть и на одномерной