

### 5.5. КОЛЕБАНИЯ АТОМОВ ТРЕХМЕРНОЙ РЕШЕТКИ

В самом начале этой главы мы говорили о том, что количественный анализ колебаний атомов реального трехмерного твердого тела представляет исключительно сложную задачу. Для того, чтобы понять общие свойства нормальных мод в таком теле, мы предварительно рассмотрели задачу о колебаниях атомов линейной цепочки. Теперь используем результаты этого рассмотрения для качественного описания колебаний атомов трехмерной решетки.

Допустим, что трехмерная решетка состоит из одинаковых атомов массы  $M$  и на объем кристалла  $V$  приходится  $N$  элементарных примитивных ячеек Бравэ. Поскольку каждый атом имеет в решетке три степени свободы, то весь кристалл характеризуется  $3N$  степенями свободы. При решении задачи в гармоническом приближении смещение каждого  $j$ -го атома подчиняется уравнению движения, аналогичному уравнению движения в цепочке из одинаковых атомов с заменой смещения на

вектор смещения  $\vec{u}_j$ . В результате для полного описания спектра колебаний трехмерной решетки с учетом степеней свободы получают систему  $3N$  связанных уравнений движения. Решение такой системы снова ищут в виде бегущих волн:

$$\vec{u}_j = A_k \vec{\epsilon}_v(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \vec{R}_j^0 - \omega t)], \quad (5.61)$$

где теперь  $\vec{k}$  — волновой вектор, определяющий направление распространения волны;  $A_k$  — амплитуда колебаний;  $\vec{\epsilon}_v(\vec{k})$  — единичный вектор поляризации нормальной моды, описывающий направление, в котором движутся ионы;  $\vec{R}_j^0$  — радиус-вектор  $j$ -го атома в равновесной конфигурации.

Подставляя решение (5.61) в систему  $3N$  уравнений движения, получают систему однородных уравнений относительно амплитуд  $A_k$ , которая имеет нетривиальные решения, если детерминант, составленный из коэффициентов, при неизвестных  $A_k$  равен нулю. Последний оказывается полиномом третьей степени относительно  $\omega^2$  и имеет в общем случае три корня, которые должны быть действительными и положительными. Отрицательные значения, если атомы находились в исходном состоянии в равновесии, не имеют смысла.

Таким образом, для каждого значения волнового вектора  $\vec{k}$  имеют место три моды колебаний, которые определяют три ветви (рис. 5.14) дисперсионных соотношений:

$$\omega = \omega_{kv} \quad (v=1, 2, 3). \quad (5.62)$$

Одна из трех мод  $L$  соответствует продольной волне, а две другие  $T_1$  и  $T_2$  — поперечным волнам. В изотропной среде решения выбирают таким образом, чтобы вектор поляризации  $\vec{\epsilon}_v(\vec{k})$  и смещения атомов были параллельны вектору  $\vec{k}$  для

продольной волны и перпендикулярны ему для поперечных волн.

Для нахождения интервала изменения и определения числа допустимых значений волновых векторов к снова воспользуемся условием цикличности Борна — Кармана, для чего для простоты предположим, что кристалл имеет форму прямоугольного параллелепипеда с ребрами  $N_1 \vec{a}_1$ ,  $N_2 \vec{a}_2$ ,  $N_3 \vec{a}_3$ , где  $\vec{a}_1 = a$ ,  $\vec{a}_2 = b$ ,  $\vec{a}_3 = c$  — векторы прямой решетки, а  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $N_3$  — большие целые числа. В соответствии с условием цикличности для каждого решения запишем

$$u_j(\vec{R}_j^0 + N_i \vec{a}_i) = u_j(\vec{R}_j^0) \quad (i=1, 2, 3). \quad (5.63)$$

Тогда разрешенные значения векторов должны удовлетворять условию

$$\exp[i(N_i \vec{k} \vec{a}_i)] = 1. \quad (5.64)$$

Отсюда

$$\vec{k} \vec{a}_i = 2\pi n_i / N_i \quad (n_i — \text{целое число}) \quad (5.65)$$

или

$$\vec{k} = 2\pi \left( \frac{n_1}{N_1} \vec{a}^* + \frac{n_2}{N_2} \vec{b}^* + \frac{n_3}{N_3} \vec{c}^* \right), \quad (5.66)$$

где  $\vec{a}^*$ ,  $\vec{b}^*$ ,  $\vec{c}^*$  — векторы обратной решетки.

Можно показать, что изменения  $\vec{k}$  можно ограничить пределами одной зоны Бриллюэна (ячейки Вигнера — Зейтца):

$$-\frac{\pi}{a} \leq \vec{k} \leq +\frac{\pi}{a}. \quad (5.67)$$

Очевидно, что число допустимых значений в интервале (5.67), удовлетворяющих условию (5.64), равно числу элементарных ячеек  $N$  в кристалле, при этом разрешенные значения  $\vec{k}$  равномерно распределены в  $\vec{k}$ -пространстве с плотностью  $V/(2\pi)^3$ .

В случае колебаний атомов трехмерной решетки с базисом, когда на элементарную ячейку приходится  $r$  атомов (система с  $3rN$  степенями свободы), решение системы  $3rN$  уравнений приводит к существованию  $3r$  ветвей колебаний и дисперсионные соотношения этих ветвей можно записать в виде

$$\omega = \omega_{\vec{k}, \nu}^s \quad (\nu=1, 2, 3; \quad s=1, 2, 3, \dots, r). \quad (5.68)$$

Три нижние ветви (рис. 5.15), которые при малых  $\vec{k}$  стремятся линейно к нулю, называют акустическими, остальные  $(3r-3)$  являются оптическими, среди них также различают ветви продольных и поперечных колебаний. Скорость распрост-

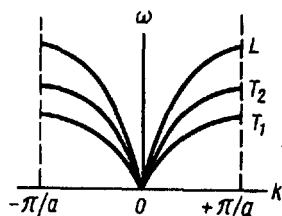


Рис. 5.14. Дисперсионные кривые для примитивной трехмерной решетки Бравэ

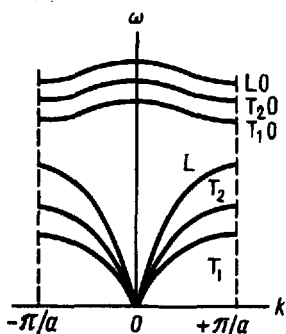


Рис. 5.15. Дисперсионные кривые для трехмерной решетки с базисом:  $T_1$  и  $T_2$  — кривые, соответствующие акустическим,  $L$  — продольным модам

ранения продольных волн больше скорости распространения поперечных волн, так как частоты колебаний продольных волн больше частот колебаний поперечных волн ( $\omega_L > \omega_{T2} > \omega_{T1}$ ).

Таким образом, в наиболее общем случае решетки с базисом движение атомов может быть представлено как суперпозиция  $3rN$  нормальных колебаний, или мод. Каждое нормальное колебание с механической точки зрения представляет собой гармонический осциллятор, для которого нормальные координаты  $q_{\vec{k},s}$  удовлетворяют уравнению

$$\ddot{q}_{\vec{k},s} + \omega^2(\vec{k}, s) q_{\vec{k},s} = 0. \quad (5.69)$$

Полная энергия колебаний кристалла равна сумме энергий колебаний  $3rN$

не взаимодействующих между собой гармонических осцилляторов. Снова, как и в одномерном случае легко провести квантово-механическое обобщение, тогда каждому осциллятору, колеблющемуся с частотой  $\omega(\vec{k}, s)$ , нужно приписать энергию

$$E_{\vec{k},s} = \hbar \omega(\vec{k}, s) [n(\vec{k}, s) + 1/2] \quad (n(\vec{k}, s) = 0, 1, 2, 3, s = 1, 2, 3, \dots r). \quad (5.70)$$

Полная энергия, являющаяся суммой кинетической и потенциальной энергий, примет вид

$$E = \sum_{\vec{k}} \sum_s E_{\vec{k},s} = \sum_{\vec{k}} \sum_s [n(\vec{k}, s) + 1/2] \hbar \omega(\vec{k}, s) + U_0, \quad (5.71)$$

где  $U_0$  — потенциальная энергия в состоянии равновесия.

Итак, колебания сильно связанных между собой атомов кристаллической решетки мы свели к совокупности слабо связанных волн с волновым вектором  $\vec{k}$  и частотой  $\omega(\vec{k}, s)$ , распространяющихся во всем объеме кристалла. Каждой волне мы сопоставили осциллятор, колеблющийся с частотой  $\omega(\vec{k}, s)$ .

Процессы, происходящие в твердых телах, связанные с колебаниями атомов кристаллической решетки, выглядят особенно просто, если обратиться к одному из самых фундаментальных обобщений квантовой механики. В основе этого обобщения лежит идея французского физика Луи де Бройля о том, что каждую волну с частотой  $\omega$  и волновым вектором  $\vec{k}$  можно сопоставить с частицей с энергией  $E = \hbar \omega$  и импульсом  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ .

Так, световые (электромагнитные) волны можно рассматривать как квантовые осцилляторы излучения или считать, что они состоят из частиц — квантов, называемых *фотонами*. Каждый фотон имеет энергию  $\hbar\omega$ . Аналогично, если обратиться к формуле (5.70) для энергии квантового осциллятора, то звуковую волну с волновым вектором  $\vec{k}$  и поляризацией  $s$  можно рассматривать как совокупность  $n(\vec{k}, s)$  квантов с энергией  $\hbar\omega(\vec{k}, s)$  каждый и плюс основного состояния  $\frac{1}{2}\hbar\omega(\vec{k}, s)$ . Эти кванты (или частицы звука) звуковой волны называют *фононами*. Величина  $\hbar\omega(\vec{k}, s)$ , очевидно, представляет собой наименьшую порцию энергии возбуждения над основным уровнем  $\frac{1}{2}\hbar\omega(\vec{k}, s)$ . Так как фонон несет наименьшую энергию, его рассматривают как элементарное возбуждение. «Сложное» возбуждение есть просто возбуждение, содержащее много фононов. *Коллективные движения атомов в кристалле представляют собой звуковые волны, а соответствующие им возбуждения — кванты звука, или фононы.*

Из сказанного следует, что каждую моду колебаний с классической частотой  $\omega(\vec{k}, s)$  можно возбудить с помощью целого числа квантов  $\hbar\omega(\vec{k}, s)$  энергии. При этом величина  $n(\vec{k}, s)$  в формуле (5.70) имеет простой смысл — это число фононов данного сорта с импульсом  $\vec{p}$  и энергией  $\hbar\omega(\vec{k}, s)$ . Во многих задачах, связанных с тепловыми свойствами твердых тел, необходимо знать среднее число фононов  $\langle n(\vec{k}, s) \rangle$  с энергией  $\hbar\omega(\vec{k}, s)$ , существующих в данной моде колебаний при температуре  $T$ . Для нахождения  $n(\vec{k}, s)$  воспользуемся выражением для средней энергии квантового осциллятора, полученного Планком:

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega(\vec{k}, s)}{\exp[\hbar\omega(\vec{k}, s)/(k_B T)] - 1} + \frac{\hbar\omega(\vec{k}, s)}{2}. \quad (5.72)$$

Член  $\hbar\omega(\vec{k}, s)/2$  при подсчете среднего числа  $n(\vec{k}, s)$  можно не учитывать, поскольку он не зависит от температуры. Из (5.72) видно, что

$$\langle n(\vec{k}, s) \rangle = \frac{\langle E \rangle}{\hbar\omega(\vec{k}, s)} = \frac{1}{\exp[\hbar\omega(\vec{k}, s)/(k_B T)] - 1}. \quad (5.73)$$

Это выражение определяет также *распределение фононов, подчиняющихся статистике Бозе — Эйнштейна.*

Таким образом, среднее число фононов в одной ячейке фа-

зового пространства объемом  $(2\pi\hbar)^3$  с энергией  $\hbar\omega(\vec{k}, s)$  определяется выражением (5.73).

*В твердом теле возможны как акустические, так и оптические фононы. Поскольку частота колебаний оптических фононов всегда выше частоты колебаний акустических фононов, то энергия оптических фононов выше энергии акустических. Поэтому при очень низких температурах возбуждаются только акустические фононы.*

*Введение понятия фононов позволяет во многих случаях рассматривать любое твердое тело как ящик, в котором заключен газ фононов. Фононы, как частицы обычного газа, движутся от стенки к стенке такого ящика, сталкиваются друг с другом, в результате взаимодействия фононы могут рождаться и исчезать. Газ фононов — это не обычный газ. Число фононов в твердом теле не постоянно. Фононов тем больше, чем выше температура, а при приближении к нулю их число также стремится к нулю.*

В заключение отметим, что в настоящее время наиболее мощным средством экспериментального наблюдения волн в решетке является неупругое рассеяние тепловых нейтронов на фононах. Энергии и импульсы тепловых нейтронов и фононов сравнимы между собой. При неупругом столкновении нейтрон теряет или приобретает значительную долю своей энергии, в результате чего можно определить как изменение длины волны (изменение энергии), так и изменение направления (изменение импульса). Если отдельный фонон возбуждается или исчезает в результате столкновения с нейтроном, то изменение длины волны нейтрона определяет энергию и частоту фонона, а изменение импульса нейтрона — волновое число фонона.

При изучении колебаний решетки с помощью рассеяния нейтронов необходимо учитывать закон сохранения энергии при неупругом рассеянии теплового нейтрона:

$$\frac{\hbar^2}{2m_n} (\vec{k}_i^2 - \vec{k}_j^2) = \hbar \omega_{\vec{k}}$$

где  $\vec{k}_i$  и  $\vec{k}_j$  — соответственно начальный и конечный волновые векторы нейтрона;  $m_n$  — масса нейтрона;  $\omega_{\vec{k}}$  — частота фонона

на в решетке с волновым вектором  $\vec{k}$ . Точно измерив  $\vec{k}_i$  и  $\vec{k}_j$  и энергетические потери нейтронного пучка, можно определить экспериментально связь между  $\omega$  и  $k$ , т. е. дисперсионное соотношение для волн в решетке. Используя метод неупругого рассеяния фононов, можно изучать не только спектры фононов, но и спектры магнонов и других тепловых возбуждений, а также силовое взаимодействие атомов и получать числовые значения силовых констант. Области применения этого метода постоянно расширяются.