

ПРИНЦИП ДЛИННЫХ ВОЛН И ФОНОННЫЕ СПЕКТРЫ КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК

В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина

Получена и решена система уравнений, описывающая колебания моноатомных ОЦК и ГЦК решеток при силовом взаимодействии, имеющем ван-дер-ваальсовскую природу. Показано, что данная система позволяет реализовать принцип длинных волн, согласно которому уравнения колебаний кристаллической решетки должны сводиться к уравнениям распространения волн упругих деформаций в кристалле как в сплошной среде. Сравнение полученных и классических уравнений позволило выразить силовые константы динамической модели через упругие константы рассматриваемого вещества и произвести расчеты фононных спектров некоторых кристаллов с ОЦК и ГЦК решеткой.

Ключевые слова: динамическая модель, диполь, кристаллическая решетка, упругие константы, дисперсионные соотношения, дисперсионные кривые, фононный спектр.

Введение

Настоящая работа представляет собой продолжение исследований, начатых в [1], где была построена динамическая модель для ОЦК и ГЦК кристаллических решеток, использующая силы межатомного взаимодействия, имеющие ван-дер-ваальсовскую природу, и произведены расчеты дисперсионных кривых для Na и Al. Согласно принципам, сформулированным в [1], атом кристалла рассматривается как структуризованный объект, состоящий из ионного остова и электронов на внешних оболочках. Считается, что остов колеблется как единое целое, а колебания электронов на внешних оболочках сводятся к колебаниям их центра заряда. Положение центра заряда внешних электронных оболочек (в.э.о.) определяется взаимным расположением остова рассматриваемого атома A и остовов его соседей, находящихся на первой и второй координационных сферах атома A , и не обязано совпадать с положением его остова. В результате внутри атома наводится дипольный момент, действующий с некоторой силой на его остов. На остов атома действуют силы излучения диполей остальных атомов решетки, которые, изменяя положение центра заряда в.э.о., наводят в атоме A дополнительный дипольный момент, частично экранирующий эти силы. Атом A , представляющий собой динамический диполь, излучает электромагнитную энергию. Эту энергию можно рассматривать как работу силы реакции на излучение, которая, как это можно показать [2], в первом приближении пропорциональна плечу диполя. В состоянии термодинамического равновесия, когда на любом временном промежутке энергия, поглощаемая атомом, совпадает с энергией, излучаемой им, внешняя, частично экранированная кулоновская сила уравновешивается силой реакции. В результате движение остова атома происходит под действием силы внутреннего диполя, наведенного соседними атомами и имеющего квантово-механическую природу своего возникновения.

Принцип длинных волн

Рассмотрим моноатомную кристаллическую решетку и обозначим через μ - массу остова каждого ее атома, через q - его заряд и пусть $\beta = q^2 / 4\pi\epsilon_0$.

Пусть Λ - какое-нибудь множество индексов, с помощью которого можно занумеровать все атомы решетки. Для каждого $\xi \in \Lambda$ обозначим через A_ξ соответствующий атом решетки, через P_ξ - узел, являющийся положением равновесия атома A_ξ , а через u_ξ - смещение остова атома A_ξ из положения равновесия в некоторый момент времени t . Обозначим, далее, через $S_l(\xi)$ - множество индексов из Λ , нумерующих атомы решетки, находящиеся на l -й координационной сфере атома A_ξ . Пусть $A_{\xi'}$ - атом, соседний с атомом A_ξ . Перемещение остовов атомов A_ξ и $A_{\xi'}$ относительно друг друга вызывает изменение степени перекрытия орбиталей их в. э. о., что при-

водит к возникновению у этих атомов соответствующих дипольных моментов. Будем считать, что перекрытие орбиталей может происходить у атомов, лежащих друг относительно друга на первой и второй координационных сферах. Причем для атомов, лежащих друг относительно друга на первой координационной сфере изменение степени перекрытия орбиталей будет происходить как при радиальном, так и при тангенциальном (вращательном) перемещении их друг относительно друга. Для атомов же, лежащих друг относительно друга на второй координационной сфере, изменением степени перекрытия их орбиталей при тангенциальном перемещении мы будем пренебрегать. Обозначим через $e_{\xi\xi'}$ единичный направляющий вектор вектора $P_{\xi}P_{\xi'}$, а через $w_{\xi\xi'} = u_{\xi'} - u_{\xi}$ – вектор относительного перемещения остовов атомов A_{ξ} и $A_{\xi'}$. Пусть $r_{\xi\xi'} = e_{\xi\xi'} \langle e_{\xi\xi'}, w_{\xi\xi'} \rangle$ – радиальная, а $\tau_{\xi\xi'} = w_{\xi\xi'} - r_{\xi\xi'}$ – тангенциальная составляющие вектора $w_{\xi\xi'} = -w_{\xi\xi'}$, где в скобках обозначено скалярное произведение векторов $e_{\xi\xi'}$ и $w_{\xi\xi'}$. Тогда плечо дипольного момента $p_{\xi\xi'}$, наведенного в атоме A_{ξ} со стороны атома $A_{\xi'}$, лежащего на его первой и второй координационной сферах соответственно, можно определить формулами:

$$p_{\xi\xi'} = \kappa_{1r} r_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} \tau_{\xi\xi'} = (\kappa_{1r} - \kappa_{1t}) \langle e_{\xi\xi'}, w_{\xi\xi'} \rangle e_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} w_{\xi\xi'}, \quad (1)$$

$$p_{\xi\xi'} = \kappa_{2r} \langle e_{\xi\xi'}, w_{\xi\xi'} \rangle e_{\xi\xi'}, \quad (2)$$

где κ_{1r} , κ_{1t} , κ_{2r} – числовые параметры, постоянные для данного кристалла.

Плечо p_{ξ} полного дипольного момента, наведенного в атоме A_{ξ} со стороны всех его соседей, вычисляется путем суммирования по всем соседним атомам из первой и второй координационных сфер

$$p_{\xi} = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} p_{\xi\xi'} + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} p_{\xi\xi'}. \quad (3)$$

С учетом сказанного выше, в состоянии термодинамического равновесия уравнение движения остова атома принимает вид

$$\mu \ddot{u}_{\xi} = D_{\xi} = -\frac{\beta}{\alpha} p_{\xi}, \quad (4)$$

где α – поляризуемость атома.

Пусть рассматриваемый кристалл имеет ОЦК или ГЦК кристаллическую решетку. Будем считать, что он имеет форму куба, содержащего n^3 элементарных кубических ячеек, и обозначим через a параметр решетки. Положим $N = \{1, 2, \dots, 2n\}$. Зададим в пространстве систему кристаллографических координат $Oxuz$ с единичными направляющими векторами e_x, e_y, e_z координатных осей так, чтобы положение каждого узла $P = P_{ijk}$ решетки могло быть задано по формуле

$$OP_{ijk} = \frac{a}{2} (ie_x + je_y + ke_z), \quad (5)$$

где $i, j, k \in N$ – некоторый набор чисел. Обозначим через Λ подмножество в N^3 , образованное такими наборами (i, j, k) , для которых формула (5) определяет узел решетки. Тогда для ОЦК решетки

$$\Lambda = \{(i, j, k) \in N^3 \mid i, j, k \text{ – все нечетные или все четные числа}\},$$

а для ГЦК решетки

$$\Lambda = \{(i, j, k) \in N^3 \mid \text{сумма } i + j + k \text{ нечетна}\}.$$

Подставляя (1), (2) в (4), полагая $\sigma_{1r} = \beta\kappa_{1r}/\alpha$, $\sigma_{1t} = \beta\kappa_{1t}/\alpha$, $\sigma_{2r} = \beta\kappa_{2r}/\alpha$ и занося знак «-» под знак суммы, приходим к уравнению

$$\mu \ddot{u}_{\xi} = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle e_{\xi\xi'}, w_{\xi\xi'} \rangle e_{\xi\xi'} + \sigma_{1t} w_{\xi\xi'}] + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} \sigma_{2r} \langle e_{\xi\xi'}, w_{\xi\xi'} \rangle e_{\xi\xi'}. \quad (6)$$

Пусть $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$ и $\xi' = (i', j', k') \in S_l(\xi)$, $l = 1, 2$. Положим $\varepsilon_{ii'} = i' - i$, $\varepsilon_{jj'} = j' - j$, $\varepsilon_{kk'} = k' - k$, $\rho_l = \sqrt{\varepsilon_{ii'}^2 + \varepsilon_{jj'}^2 + \varepsilon_{kk'}^2}$. Тогда вектор $e_{\xi\xi'}$, указывающий направление от узла P_{ξ} к узлу

$P_{\xi'}$, равен $e_{\xi\xi'} = (\varepsilon_{ii'}e_x + \varepsilon_{jj'}e_y + \varepsilon_{kk'}e_z) / \rho_1$. Обозначим через $w_{\xi\xi',x}$, $w_{\xi\xi',y}$, $w_{\xi\xi',z}$ координаты вектора $w_{\xi\xi'}$. Записывая уравнение (6) в проекции на ось Ox , получим

$$\mu i_{\xi,x} = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} \left\{ \frac{\sigma_{1r} \varepsilon_{ii'}^2 + (\rho_1^2 - \varepsilon_{ii'}^2) \sigma_{1t}}{\rho_1^2} w_{\xi\xi',x} + \varepsilon_{ii'} (\varepsilon_{jj'} w_{\xi\xi',y} + \varepsilon_{kk'} w_{\xi\xi',z}) \right\} + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} \sigma_{2r} w_{\xi\xi',x} \quad (7)$$

Введем обозначения:

$$r = OP_{\xi}, \Delta r = P_{\xi} P_{\xi'}, u_x(r, t) = u_{\xi,x}, u_x(r + \Delta r, t) = u_{\xi',x}.$$

Функция $u_x(r, t)$ выражает проекцию на ось Ox отклонения остова атома A_{ξ} в момент времени t из положения равновесия P_{ξ} , радиус-вектор которого равен r . Если считать, что она описывает колебания решетки длин волн много больших ее параметра, то при изменении аргумента на величину порядка a она ведет себя как, по крайней мере, дважды дифференцируемая функция. Следовательно, для вычисления ее приращения при переходе в соседний узел решетки можно воспользоваться формулой Тейлора до дифференциалов второго порядка. Считая момент времени t постоянным и опуская его в обозначениях, получим

$$w_{\xi\xi',x} = u_x(r + \Delta r) - u_x(r) = \nabla u_x \Delta r + \frac{1}{2} \langle \Delta r, (\nabla^2 u_x) \Delta r \rangle, \quad (8)$$

где ∇u_x – градиент функции u_x , а $(\nabla^2 u_x)$ – матрица, строки к

$$\nabla \frac{\partial u_x}{\partial x}, \nabla \frac{\partial u_x}{\partial y}, \nabla \frac{\partial u_x}{\partial z}.$$

Для произвольного узла решетки, положение которого определяется вектором r , вектор Δr смещения в положение соседнего узла равен

$$\Delta r = \Delta r_{\xi\xi'} = \frac{a}{2} (\varepsilon_{ii'} e_x + \varepsilon_{jj'} e_y + \varepsilon_{kk'} e_z),$$

где $\varepsilon_{ii'}, \varepsilon_{jj'}, \varepsilon_{kk'}$ определяются так же, как и выше. Подставляя Δr в выражение $\langle \Delta r, (\nabla^2 u_x) \Delta r \rangle$, приходим к равенству

$$r, \left(u_x \right) r = \frac{a^2}{4} \left\{ \varepsilon_{ii}^2 \frac{2u_x}{x^2} \quad \varepsilon_{jj}^2 \frac{2u_x}{y^2} \quad \varepsilon_{kk}^2 \frac{2u_x}{z^2} \quad 2\varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj} \frac{2u_x}{x y} \right. \\ \left. 2\varepsilon_{ii} \varepsilon_{kk} \frac{2u_x}{x z} \quad 2\varepsilon_{jj} \varepsilon_{kk} \frac{2u_x}{y z} \right\}. \quad (9)$$

Пусть, как и выше, $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$ и $\xi' = (i', j', k') \in S_l(\xi)$, $l = 1, 2$. Обозначим через $\bar{\xi}' \in S_l(\xi)$ индекс атома, соседнего к A_{ξ} , расположенного противоположно атому $A_{\xi'}$. Пусть далее $\bar{S}_l(\xi)$ – набор индексов какой-нибудь полусферы l -й координационной сферы атома A_{ξ} . Тогда, например,

$$\sum_{\xi' \in S_l(\xi)} w_{\xi\xi',x} = \sum_{\bar{\xi}' \in \bar{S}_l(\xi)} (w_{\xi\xi',x} + w_{\xi\bar{\xi}',x}),$$

при этом согласно (8)

$$w_{\xi\xi',x} + w_{\xi\bar{\xi}',x} = u_x(r + \Delta r_{\xi\xi'}) + u_x(r - \Delta r_{\xi\xi'}) - 2u_x(r) = \langle \Delta r_{\xi\xi'}, (\nabla^2 u_x) \Delta r_{\xi\xi'} \rangle. \quad (10)$$

Переходя в формуле (7) к суммированию по полусферам, заменяя при этом $w_{\xi\xi',x}$ на $w_{\xi\xi',x} + w_{\xi\bar{\xi}',x}$ и т.д., в случае ОЦК решетки приходим к уравнению

$$\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{a^2}{3} \left\{ (\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t} + 3\sigma_{2r}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + (\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + 2(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right) \right\}. \quad (11)$$

Соответствующее уравнение в случае ГЦК решетки имеет вид

$$\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{a^2}{4} \{ 2(\sigma_{1r} - \sigma_{1t} + 2\sigma_{2r}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + (\sigma_{1r} - 3\sigma_{1t}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + 2(\sigma_{1r} + \sigma_{1t}) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right) \} \quad (12)$$

Согласно принципу длинных волн [3] уравнения (11), (12) должны переходить в классические уравнения распространения упругих волн деформаций в кристаллах. В проекциях на ось Ox для ОЦК и ГЦК решеток эти уравнения соответственно имеют вид [4]:

$$\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = a^2 \left(\frac{aC_{11}}{2} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{aC_{44}}{2} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{a(C_{12} + C_{44})}{2} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right) \right), \quad (13)$$

$$\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = a^2 \left(\frac{aC_{11}}{4} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{aC_{44}}{4} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{a(C_{12} + C_{44})}{4} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right) \right), \quad (14)$$

где C_{11} , C_{12} , C_{44} - упругие константы рассматриваемого вещества.

Сравнивая уравнения (11) и (12) соответственно с (13) и (14), приходим к соотношениям между коэффициентами динамической модели и упругими константами.

В случае ОЦК решетки

$$\sigma_{1r} = \frac{a}{2} (C_{12} + 2C_{44}), \quad \sigma_{1t} = \frac{a}{4} (C_{44} - C_{12}), \quad \sigma_{2r} = \frac{a}{2} (C_{11} - C_{44}). \quad (15)$$

В случае ГЦК решетки

$$\sigma_{1r} = \frac{a}{8} (3C_{12} + 5C_{44}), \quad \sigma_{1t} = \frac{a}{8} (C_{44} - C_{12}), \quad \sigma_{2r} = \frac{a}{8} (2C_{11} - C_{12} - 3C_{44}). \quad (16)$$

Расчет фононного спектра

Будем искать решение уравнения (4) в виде бегущих волн, заданных формулой

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sin(\mathbf{K}\mathbf{r} - \omega t) \mathbf{g}, \quad (\text{или } \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \cos(\mathbf{K}\mathbf{r} - \omega t) \mathbf{g}),$$

где $\mathbf{g} = g_x \mathbf{e}_x + g_y \mathbf{e}_y + g_z \mathbf{e}_z$ - единичный вектор, указывающий направление поляризации волны,

$\mathbf{r} = \frac{a}{2} (i\mathbf{e}_x + j\mathbf{e}_y + k\mathbf{e}_z) = \frac{a}{2} \boldsymbol{\xi}$ - радиус-вектор узла решетки, а $\mathbf{K} = \frac{2\pi}{na} (k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z) = \frac{2\pi}{na} \mathbf{k}$ -

волновой вектор. При этом для того, чтобы были выполнены условия цикличности Борна-Кармана, можно считать, что $k_x, k_y, k_z = 0, \dots, n-1$. Поскольку скалярное произведение $\mathbf{K}\mathbf{r}$ определяет фазу колебаний, плоскости постоянной фазы задаются уравнением $\mathbf{k}\boldsymbol{\xi} = k_x i + k_y j + k_z k = m$, где m - натуральное число, постоянное для данной плоскости, которую мы обозначим Q_m . Колебания любых двух атомов $A_{\boldsymbol{\xi}}$ и $A_{\boldsymbol{\xi}'}$, узлы которых находятся на плоскости Q_m , совпадают и задаются формулой

$$\mathbf{u}_{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{u}_{\boldsymbol{\xi}'} = u_m(t) \mathbf{g} = \sin\left(\frac{\pi m}{n} - \omega t\right) \mathbf{g}. \quad (17)$$

Рассмотрим произвольный атом $A_{\boldsymbol{\xi}}$, и пусть $m = \mathbf{k}\boldsymbol{\xi}$, тогда $A_{\boldsymbol{\xi}} \in Q_m$. Для $\boldsymbol{\xi}' \in S_l(\boldsymbol{\xi})$, $l = 1, 2$; положим $\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'} = \boldsymbol{\xi}' - \boldsymbol{\xi} = \varepsilon_{ii'} \mathbf{e}_x + \varepsilon_{jj'} \mathbf{e}_y + \varepsilon_{kk'} \mathbf{e}_z$. Пусть $m' = \mathbf{k}\boldsymbol{\xi}'$ и $d_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'} = \mathbf{k}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'}$, тогда $m' = m + d_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'}$. Векторы $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\xi}'}$, $\mathbf{w}_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'}$ и $\mathbf{e}_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'}$ теперь можно выразить так:

$$\mathbf{u}_{\boldsymbol{\xi}'} = u_{m'} \mathbf{g}, \quad \mathbf{w}_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'} = (u_m - u_{m'}) \mathbf{g}, \quad \mathbf{e}_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'} / \rho_l.$$

Для каждого атома $A_{\boldsymbol{\xi}'}$, соседнего атому $A_{\boldsymbol{\xi}}$, обозначим через \bar{m}' - номер плоскости, на которой находится атом $A_{\boldsymbol{\xi}'}$. Тогда $\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'} = -\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{\xi}'\boldsymbol{\xi}}$, $\bar{m}' = m - d_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}'}$. Положим

$$u_{m,d} = 2u_m - u_{m-d} - u_{m+d}. \quad (18)$$

Подставляя (17) в (18), получим

$$u_{md} = 4u_m \sin^2 \frac{\pi d}{2n}. \quad (19)$$

Пусть $g_{\xi\xi'} = \langle \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \mathbf{g} \rangle$, $\kappa_1 = \frac{\kappa_{1r} - \kappa_{1t}}{\rho_1^2}$, $\sigma_1 = \beta\kappa_1/\alpha$. Тогда с учетом введенных обозначений и формул (1), (2) и (19) приходим к равенствам:

$$p_{\xi\xi'} + p_{\xi\xi'} = 4u_m \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} (\kappa_1 g_{\xi\xi'} \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} \mathbf{g}), \quad (20)$$

$$p_{\xi\xi'} + p_{\xi\xi'} = \kappa_{2r} u_m \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} g_{\xi\xi'} \mathbf{e}_{\xi\xi'}. \quad (21)$$

Пусть $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$, а $\bar{S}_l(\xi)$ – какая-нибудь полусфера координационной сферы $S_l(\xi)$, $l = 1, 2$. Тогда

$$\sum_{\xi' \in S_l(\xi)} p_{\xi\xi'} = \sum_{\xi' \in S_l(\xi)} (p_{\xi\xi'} + p_{\xi\xi'}),$$

а формула (3) представляется в виде

$$p_{\xi} = u_m \left\{ 4 \sum_{\xi' \in \bar{S}_1(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} (\kappa_1 g_{\xi\xi'} \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} \mathbf{g}) + \kappa_{2r} \sum_{\xi' \in \bar{S}_2(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} g_{\xi\xi'} \mathbf{e}_{\xi\xi'} \right\}. \quad (22)$$

Подставляя (17) в уравнение (4) и учитывая полученную выше формулу и определенные ранее коэффициенты $\sigma_{1r}, \sigma_{1t}, \sigma_{2r}, \sigma_1$, приходим к уравнению

$$\mu\omega^2 \mathbf{g} = 4 \sum_{\xi' \in \bar{S}_1(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} (\sigma_1 g_{\xi\xi'} \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t} \mathbf{g}) + \sigma_{2r} \sum_{\xi' \in \bar{S}_2(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} g_{\xi\xi'} \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \quad (23)$$

которое распадается на систему уравнений в проекциях на координатные оси следующего вида:

$$\begin{aligned} a_x g_x + b_z g_y + b_y g_z &= \lambda g_x, \\ b_z g_x + a_y g_y + b_x g_z &= \lambda g_y, \\ b_y g_x + b_x g_y + a_z g_z &= \lambda g_z, \end{aligned} \quad (24)$$

где $\lambda = \mu\omega^2$. После несложных преобразований система (24) приводится к системе

$$\begin{aligned} c_x g_x - b_z g_y - b_y g_z &= (\sigma_0 - \lambda) g_x, \\ -b_z g_x + c_y g_y - b_x g_z &= (\sigma_0 - \lambda) g_y, \\ -b_y g_x - b_x g_y + c_z g_z &= (\sigma_0 - \lambda) g_z, \end{aligned} \quad (25)$$

в которой $c_x + c_y + c_z = 0$. Положим $\gamma = \sigma_0 - \lambda$. Тогда характеристическое уравнение системы (25) принимает вид

$$\gamma^3 + (c_x c_y + c_y c_z + c_x c_z - b_x^2 - b_y^2 - b_z^2) \gamma + b_x^2 c_x + b_y^2 c_y + b_z^2 c_z - c_x c_y c_z + 2b_x b_y b_z = 0. \quad (26)$$

Для сокращения записи при вычислении коэффициентов уравнения (26), положим

$c(k) = \cos \frac{\pi k}{n}$, $s(k) = \sin \frac{\pi k}{n}$. Тогда в случае ОЦК решетки:

$$\begin{aligned} c_x &= \frac{2}{3} \sigma_{2r} (2c(2k_x) - c(2k_y) - c(2k_z)), \\ b_x &= \frac{8}{3} (\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) c(k_x) s(k_y) s(k_z), \end{aligned} \quad (27)$$

$$\sigma_0 = \frac{8}{3} (\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) (1 - c(k_x) c(k_y) c(k_z)) + \frac{2}{3} \sigma_{2r} (3 - c(2k_x) - c(2k_y) - c(2k_z)),$$

а в случае ГЦК решетки:

$$\begin{aligned} c_x &= \frac{2}{3} (\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) (c(k_x) c(k_y) + c(k_x) c(k_z) - 2c(k_y) c(k_z)) + \frac{2}{3} \sigma_{2r} (2c(2k_x) - c(2k_y) - c(2k_z)), \\ b_x &= 2(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) s(k_y) s(k_z), \end{aligned} \quad (28)$$

$$\sigma_0 = \frac{4}{3} (\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) (3 - c(k_x) c(k_y) - c(k_y) c(k_z) - c(k_x) c(k_z)) + \frac{2}{3} \sigma_{2r} (3 - c(2k_x) - c(2k_y) - c(2k_z)),$$

причем остальные коэффициенты вычисляются путем круговой перестановки индексов x, y, z .

С учетом формул (15), (16) равенства (27), (28) могут быть записаны так:
в случае ОЦК решетки:

$$\begin{aligned} c_x &= \frac{a}{3}(C_{11} - C_{44})(2c(2k_x) - c(2k_y) - c(2k_z)), \\ b_x &= 2a(C_{12} + C_{44})c(k_x)s(k_y)s(k_z), \end{aligned} \quad (29)$$

$$\sigma_0 = 4aC_{44}(1 - c(k_x)c(k_y)c(k_z)) + \frac{2}{3}a(C_{11} - C_{44})(s^2(k_x) + s^2(k_y) - s^2(k_z));$$

в случае ГЦК решетки:

$$\begin{aligned} c_x &= \frac{a}{12}\{4(C_{12} + C_{44})(c(k_x)c(k_y) + c(k_x)c(k_z) - 2c(k_y)c(k_z)) + (2C_{11} - C_{12} - 3C_{44})(2c(2k_x) - c(2k_y) - c(2k_z))\} \\ b_x &= a(C_{12} + C_{44})s(k_y)s(k_z), \end{aligned} \quad (30)$$

$$\sigma_0 = \frac{a}{6}\{(C_{12} + 7C_{44})(3 - c(k_x)c(k_y) - c(k_y)c(k_z) - c(k_x)c(k_z)) + (2C_{11} - C_{12} - 3C_{44})(s^2(k_x) - s^2(k_y) - s^2(k_z))\},$$

а остальные коэффициенты вычисляются путем перестановки индексов x, y, z .

Положим

$$\begin{aligned} -3p &= c_x c_y + c_y c_z + c_x c_z - b_x^2 - b_y^2 - b_z^2, \\ -q &= b_x^2 c_x + b_y^2 c_y + b_z^2 c_z - c_x c_y c_z + 2b_x b_y b_z, \end{aligned}$$

тогда уравнение (26) запишется в виде

$$\gamma^3 - 3p\gamma - q = 0, \quad (31)$$

а его решения выразятся формулой

$$\gamma_m = 2\sqrt{p} \cos \frac{\varphi + 2\pi m}{3}, \quad m = 0, 1, 2,$$

где $\varphi = \arccos \frac{q}{2\sqrt{p^3}}$ или $\varphi = \frac{\pi}{2} - \arctg \frac{q}{\sqrt{4p^3 - q^2}}$.

Тем самым частоты фононного спектра выражаются формулой

$$\omega = \sqrt{(\sigma_0 - \gamma_m) / \mu}. \quad (32)$$

Ниже, в табл. 1 и 2 приводятся значения исходных данных для ряда элементов, имеющих ОЦК и ГЦК решетки, на основе которых были произведены расчёты фононных спектров для Na и V при температуре 78 К, для Al и Si при 0 К, представленных на рис. 1-4.

Таблица 1

Атомная масса μ , параметр решетки a , упругие константы C_{ij} элементов с ОЦК

Вещество	μ , а.е.	a , Å	T , К	C_{11} , ГПа	C_{12} , ГПа	C_{44} , ГПа
Na	22,9897	4,2906	78	8,2	6,8	5,8
			298	7,3	6,2	4,26
V	50,9414	3,0282	78	231,77	119,2	45,23
			298	228,00	119	42,60

Таблица 2

Атомная масса μ , параметр решетки a , упругие константы C_{ij} элементов с ГЦК

Вещество	μ , а.е.	a , Å	T , К	C_{11} , ГПа	C_{12} , ГПа	C_{44} , ГПа
Al	26,98	4,04959	0	122,6	70,8	30,6
			298	107,3	60,9	28,3
Cu	63,55	3,61479	0	176,2	124,9	81,7
			293	168,4	121,4	75,4

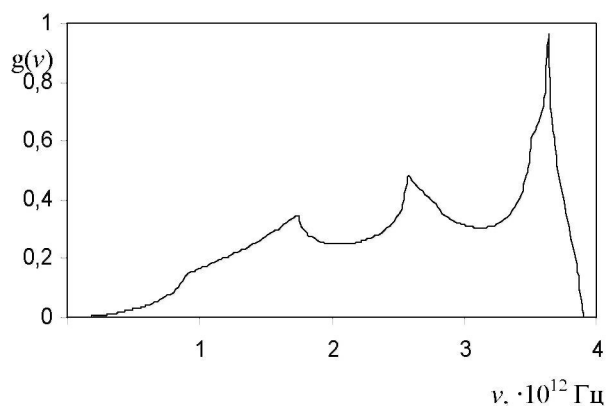


Рис. 1. Фоновый спектр Na

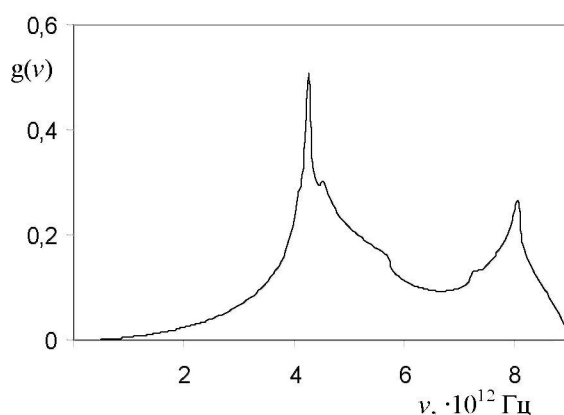


Рис. 2. Фоновый спектр V

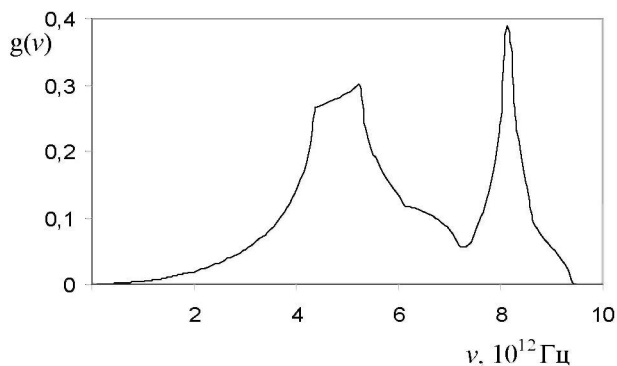


Рис. 3. Фоновый спектр Al

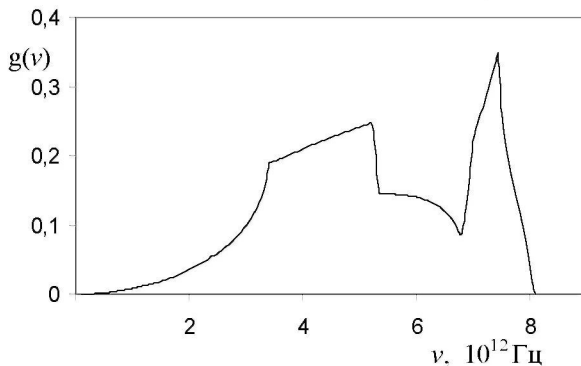


Рис. 4. Фоновый спектр Cu

Статья выполнена при поддержке программы ФА по образованию «Развитие научного потенциала высшей школы» (грант РНП 2.1.1.7071).

Литература

1. Холодовский, В.Е. Дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решеток в модели диполь-дипольных взаимодействий / В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина, Е.А. Кульченков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». - 2009. - Вып. 12. - № 10(143). - С.92-99.
2. Холодовский, В.Е. Поток энергии и сила реакции на излучение подвижного диполя / В.Е. Холодовский, И.О. Сергеева // Вестник БГУ. Серия «Естественные и точные науки». - 2005. - Вып. 12. - № 4(273). - С. 266-268.
3. Борн, М. Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, К. Хуан. - М.: Иностранная литература, 1958. - 488 с.
4. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. - М.: Наука, 1978. - 792 с.
5. Свойства элементов: справочник. Ч. 1. Физические свойства / под ред. Г.В. Самсонова. - М.: Металлургия, 1976. - 600 с.

Поступила в редакцию 25 марта 2009 г.

In the article the authors obtain and solve a system of equations, describing vibrations of the monoatomic body-centered and face-centered cubic lattices during the force interaction possessing van der Waals nature. They demonstrate that the system allows implement of the long waves principle according to which the equations of crystal lattice vibrations are to resolve themselves into the equations of elastic deformation wave propagation in a crystal as in the continuous medium. The comparison of the received and classical equations allows to show the force constants of the dynamical model in terms of elastic constants of a given substance, and to calculate the phonon spectra of some body-centered and face-centered cubic lattices crystals.

Keywords: dynamic model, dipole, crystal lattice, elastic constants, dispersion relations, dispersion curves, phonon spectrum.

Kholodovsky Vladimir Evgenievich - Cand.Sc.(Physics and Mathematics), Associate Professor of the Mathematical Analysis Department, I.G. Petrovskij Bryansk State University.

Холодовский Владимир Евгеньевич - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического анализа, Брянский государственный университет им. академика И.Г. Петровского.

e-mail: tfbgubry@mail.ru

Machikhina Inna Olegovna - Graduate Student at the Theoretical Physics Department, I.G. Petrovskij Bryansk State University.

Мачихина Инна Олеговна - аспирант кафедры теоретической физики, Брянский государственный университет им. академика И.Г. Петровского.

e-mail: ingibordit@yandex.ru