

ДИСПЕРСИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК В МОДЕЛИ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина, Е.А. Кульченков

В работе исследуются колебания моноатомных кристаллических решеток, вызванные Ван-дер-Ваальсовскими силами. Построена динамическая модель и получены уравнения, описывающие колебания моноатомных кубических решёток в адиабатическом приближении. Выражены силовые константы динамической модели через упругие константы вещества и получены дисперсионные соотношения без каких-либо свободных параметров. Приводятся теоретические и экспериментальные дисперсионные кривые для Na и Al.

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

Введение

Как известно, динамические процессы, происходящие в веществе, так или иначе определяются тем, каким образом взаимодействуют между собой отдельные атомы. Поэтому для теоретического исследования свойств вещества возникает необходимость адекватного количественного описания механизма межатомного взаимодействия, позволяющего построить динамическую модель и произвести необходимые расчеты.

В настоящее время существует два подхода к построению такого описания - первопринципный и полуэмпирический. Первый основан на определении волновых функций электронов в кристалле и последующем решении уравнения Шредингера для системы электронов и ядер (или ионных остовов) всего кристалла. Однако решение подобной задачи осложняется наличием огромного числа взаимодействующих частиц и практически невозможно без каких-либо упрощений и привлечения эмпирических поправок или свободных параметров. Все это так или иначе приводит к исчезновению самой сути первопринципного подхода.

Полуэмпирический подход имеет ряд возможностей для своей реализации и, тем самым, сохраняет свою актуальность по сей день. Традиционные подходы предполагают задание для каждого вещества функций межатомных взаимодействий [1-2] или функции распределения электронной плотности в кристалле или в молекуле [3]. И те и другие определяются исследователем из физических соображений, а входящие в них параметры находятся из условий совпадения рассчитанных и экспериментально измеренных физических характеристик исследуемого вещества.

Оба рассмотренных подхода не лишены противоречий. Основное противоречие состоит в том, что для описания свойств какого-либо вещества необходимы экспериментальные данные об этом веществе. При этом отсутствует возможность привлечения микроскопических первопринципных методов для расчета параметров моделей.

Из сказанного следует, что при использовании полуэмпирического подхода важно определить механизм межатомного взаимодействия таким образом, чтобы, во-первых, построенная на его основе динамическая модель не приводила к сверхсложным расчетам, а ее выводы давали достаточно хорошее совпадение с экспериментом, и, во-вторых, не исключалась возможность расчета параметров модели из первых принципов.

В настоящей работе исследуются колебания моноатомных кубических кристаллических решеток, при силовом взаимодействии между отдельными атомами, имеющем Ван-дер-ваальсовский характер. 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. Исходные предпосылки построения такой модели для металлов заключаются в следующем.

1. Количество валентных электронов, находящихся в зоне проводимости, мало по сравнению с количеством тех валентных электронов, которые адиабатически связаны с колеблющимися остовами. Данное предположение анализируется в работах [4, 5].

2. Электронная плотность валентных электронов, связанных с остовом отдельно взятого атома определяется взаимным расположением последнего с остовами соседних атомов из первой и второй координационных сфер. При этом центр заряда внешней электронной оболочки атома не обязан совпадать с положением его остова. Это значит, что в атоме наводится дипольный момент, плечо которого зависит от взаимного расположения его остова и остовов соседних атомов.

3. Дипольный момент, наводимый в атоме со стороны остовов атомов из первой координационной сферы, зависит не только от радиального, а также и от тангенциального взаимного перемещения остова рассматриваемого атома и остовов его соседей. Присутствие тангенциальной составляющей дипольного момента приводит к возникновению сил нецентрального характера, действующих на остовы, что позволяет объяснить нарушение соотношения Коши в кубических металлах. Согласно этому соотношению, для кубических кристаллов, в которых действуют только центральные силы, должно выполняться равенство $C_{12} = C_{44}$. Однако, экспериментом установлено, что во всех металлах это условие нарушено. В работе [6] это обстоятельство объясняется наличием многоионного взаимодействия.

4. Наводимые в атомах динамические дипольные моменты излучают электромагнитную энергию. Излучаемую атомом энергию можно рассматривать как результат работы силы реакции на излучение по перемещению его остова. В первом приближении, с учетом размеров плеча диполя, сила реакции пропорциональна плечу диполя. В адиабатическом приближении можно считать, что энергия, излучаемая атомом за некоторый временной промежуток, равна энергии, поглощаемой им за счет излучения остальных атомов решетки. Данное условие будет выполнено, когда сила реакции на излучение диполя атома уравнивает внешние силы, в том числе кулоновские, действующие на его остов со стороны остальных атомов решетки. Последнее предположение существенно упрощает построение динамической модели.

5. Согласно принципу длинных волн, сформулированному М. Борном [1–2], уравнение колебаний остовов атомов решетки в предельном случае сводится к классическому уравнению распространения волн упругих деформаций в кубических кристаллах, что позволяет выразить силовые константы модели через упругие константы рассматриваемого вещества.

Все указанные выше предпосылки позволили построить динамическую модель и произвести расчеты фононных спектров и дисперсионных кривых для ряда элементов 1 – 5 групп таблицы Д.И. Менделеева, без каких бы то ни было подгоночных параметров.

§1. Общие принципы построения динамической модели на основе диполь-дипольного взаимодействия

Рассмотрим моноатомную кристаллическую решетку. Каждый атом решетки мы будем представлять как структуризованный объект, состоящий из остова (ядро и внутренние электронные оболочки) и электронов на внешних электронных оболочках (в. э. о.) считая, что остов совершает колебания как единое целое, а колебания электронов на в. э. о. сводятся к колебаниям их центра заряда. Обозначим через μ – массу остова, 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 $S_m(\xi)$ – множество индексов из Λ , нумерующих атомы решетки, находящиеся на m -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 приводит 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 от-

носителем 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 составляющая 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

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

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

где σ'_{1r} , σ'_{1t} , σ'_{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

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

Атом A_ξ , представляющий собой систему подвижных зарядов, излучает электромагнитную энергию. Излученную атомом энергию на некотором временном промежутке $[t_0, t]$ можно рассматривать как результат работы силы R_ξ реакции на его излучение, приложенной к обоим полюсам внутриатомного диполя и имеющей на них противоположные направления. Тогда энергия, теряемая атомом за счет излучения, выразится интегралом $\int_{t_0}^t R_\xi dP_\xi$. На внутриатомный диполь

атома A_ξ также действует сила F_ξ , вызванная излучением остальных атомов решетки и внешними факторами. При этом энергия, поглощаемая атомом за счет действия внешних сил на временном промежутке $[t_0, t]$ равна $\int_{t_0}^t F_\xi dP_\xi$. В результате действия сил R_ξ и F_ξ плечо дипольного

момента, наведенного в атоме A_ξ , получает некоторое приращение q_ξ и становится равным $P_\xi = p_\xi + q_\xi$.

В состоянии термодинамического равновесия средняя по достаточно малому объему энергия, излучаемая атомами решетки должна совпадать с энергией, поглощаемой ими. Следовательно, не принимая во внимание отдельные флуктуации, можно считать, что в рассматриваемом случае на любом временном промежутке $[t_0, t]$ справедливо равенство

$$\int_{t_0}^t R_\xi dP_\xi + \int_{t_0}^t F_\xi dP_\xi = \int_{t_0}^t \langle R_\xi + F_\xi, dP_\xi \rangle = 0 \quad (4)$$

которое будет выполнено, если считать, что силы R_ξ и F_ξ уравнивают друг друга. В этом случае $q_\xi = 0$, так что справедливо равенство $P_\xi = p_\xi$.

Наведенный в атоме A_ξ дипольный момент создает электрическое поле, которое в случае термодинамического равновесия действует на его остов с силой

$$D_\xi = -\frac{\beta}{\alpha} p_\xi, \quad (5)$$

где α – поляризуемость атома.

При этом, уравнение движения его остова принимает вид

$$\mu \ddot{u}_\xi = D_\xi = -\frac{\beta}{\alpha} p_\xi \quad (6)$$

§ 2. Метод сведения к одноцепочечной модели и основные дисперсионные соотношения

Рассмотрим кристалл, имеющий объемно-центрированную кубическую (ОЦК) или гранецентрированную (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:

$$OP_{ijk} = \frac{a}{2}(ie_x + je_y + le_z), \quad (7)$$

где $i, j, l \in N$ – некоторый набор чисел. Обозначим через Λ подмножество в N^3 , образованное всеми такими наборами (i, j, l) , для которых формула (7) определяет узел решетки. Тогда для ОЦК решетки $-\Lambda = \{(i, j, l) \in N^3 \mid i, j, l - \text{все нечетные или все четные числа}\}$, а в случае ГЦК решетки $-\Lambda = \{(i, j, l) \in N^3 \mid \text{сумма } i + j + l \text{ нечетна}\}$. Индексы, нумерующие атомы решетки, в данном случае представляют собой наборы чисел $\xi = (i, j, l) \in \Lambda$, которые удобно рассматривать и как векторы, считая, что $\xi = ie_x + je_y + le_z$. Будем искать решение уравнения (6) в виде бегущих волн, заданных формулой

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

где g – единичный вектор, указывающий направление поляризации волны, $r = \frac{a}{2} \xi$ – радиус-

вектор узла решетки, а $K = \frac{2\pi}{na}(k_x e_x + k_y e_y + k_z e_z)$ – волновой вектор. Для сокращения записи

положим $k = k_x e_x + k_y e_y + k_z e_z$; тогда $K = \frac{2\pi}{na} k$. 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 Kr определяет фазу колебаний, плоскости постоянной фазы задаются уравнением $k\xi = k_x i + k_y j + k_z l = m$, где m натуральное число, постоянное для данной плоскости, которую мы обозначим Q_m . Колебания любых двух атомов A_ξ и $A_{\xi'}$, узлы которых находятся на плоскости Q_m совпадают и задаются формулой

$$u_\xi = u_{\xi'} = u_m(t)g = \sin\left(\frac{\pi m}{n} - \omega t\right)g. \quad (8)$$

Рассмотрим произвольный атом A_ξ , и пусть $m = k\xi$; тогда $A_\xi \in Q_m$. Пусть $\xi' \in S_h(\xi)$, $h = 1, 2$; положим $\varepsilon_{\xi\xi'} = \xi' - \xi = \varepsilon_{i i'} e_x + \varepsilon_{j j'} e_y + \varepsilon_{l l'} e_z$, $m' = k\xi'$ и $d_{\xi\xi'} = k\varepsilon_{\xi\xi'}$; тогда $m' = m + d_{\xi\xi'}$. Векторы $u_{\xi'}$, $w_{\xi\xi'}$ и $e_{\xi\xi'}$ теперь можно выразить так:

$$u_{\xi'} = u_{m'} g, \quad w_{\xi\xi'} = (u_m - u_{m'}) g, \quad e_{\xi\xi'} = \varepsilon_{\xi\xi'} / \rho_{\xi\xi'},$$

где $\rho_{\xi\xi'}^2 = \varepsilon_{i i'}^2 + \varepsilon_{j j'}^2 + \varepsilon_{l l'}^2$.

Для каждого атома $A_{\xi'}$ соседнего атому A_ξ обозначим через $A_{\bar{\xi}'}$ атом, соседний к $A_{\xi'}$, расположенный противоположно атому $A_{\xi'}$ и пусть \bar{m}' – номер плоскости, на которой находится атом $A_{\bar{\xi}'}$. Тогда $\varepsilon_{\xi\bar{\xi}'} = -\varepsilon_{\xi\xi'}$ и потому $\bar{m}' = m - d_{\xi\xi'}$. Положим

$$u_{m, d_{\xi\xi'}} = 2u_m - u_{m-d_{\xi\xi'}} - u_{m+d_{\xi\xi'}}. \quad (9)$$

Подставляя (8) в (9), получим

$$u_{m, d_{\xi\xi'}} = 4u_m \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n}. \quad (10)$$

Учитывая формулы (1), (2) и (4), приходим к равенствам:

$$P_{\xi\xi'} + P_{\xi\xi'} = 4u_m \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} (\sigma'_1 g_{\xi\xi'} \varepsilon_{\xi\xi'} + \sigma'_{1,t} \mathbf{g}) \quad (11)$$

$$P_{\xi\xi'} + P_{\xi\xi'} = \sigma'_{2,r} u_m \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} g_{\xi\xi'} \varepsilon_{\xi\xi'}, \quad (12)$$

где $g_{\xi\xi'} = \langle \varepsilon_{\xi\xi'}, \mathbf{g} \rangle$, $\sigma'_1 = (\sigma'_{1,r} - \sigma'_{1,t}) / \rho_{\xi\xi'}^2$.

Пусть $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$. Обозначим через $S'_h(\xi)$ – какую-нибудь полусферу координационной сферы $S_h(\xi)$, $h=1,2$, для которой справедливо равенство $\sum_{\xi' \in S'_m(\xi)} P_{\xi\xi'} = \sum_{\xi' \in S'_m(\xi)} (P_{\xi\xi'} + P_{\xi\xi'})$. Тогда

формула (3) представляется в виде:

$$P_{\xi} = u_m (4 \sum_{\xi' \in S'_1(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} (\sigma'_1 g_{\xi\xi'} \varepsilon_{\xi\xi'} + \sigma'_{1,t} \mathbf{g}) + \sigma'_{2,r} \sum_{\xi' \in S'_2(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} g_{\xi\xi'} \varepsilon_{\xi\xi'}) \quad (13)$$

Положим $\sigma_{1,r} = \beta \sigma'_{1,r} / \alpha$, $\sigma_{1,t} = \beta \sigma'_{1,t} / \alpha$, $\sigma_{2,r} = \beta \sigma'_{2,r} / \alpha$, $\sigma_1 = \beta \sigma'_1 / \alpha$. Подставляя (13) в уравнение (6), приходим к уравнению

$$\mu \omega^2 \mathbf{g} = 4 \sum_{\xi' \in S'_1(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} (\sigma_1 g_{\xi\xi'} \varepsilon_{\xi\xi'} + \sigma_{1,t} \mathbf{g}) + \sigma_{2,r} \sum_{\xi' \in S'_2(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} g_{\xi\xi'} \varepsilon_{\xi\xi'}, \quad (14)$$

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

$$\begin{aligned} a_x g_x + b_z g_y + b_y g_z &= \lambda g_x, \\ b_z g_x + a_y g_y + b_x g_z &= \lambda g_y, \\ b_y g_x + b_x g_y + a_z g_z &= \lambda g_z, \end{aligned} \quad (15)$$

где $\lambda = \mu \omega^2 / 4$.

Полученная система линейных уравнений является однородной и имеет симметрическую матрицу. Следовательно, ее собственные числа λ действительные, а собственные векторы $\mathbf{g} = g_x \mathbf{e}_x + g_y \mathbf{e}_y + g_z \mathbf{e}_z$, отвечающие различным собственным числам, ортогональны. Для нахождения собственных чисел матрицы системы (15) необходимо решить характеристическое уравнение

$$(a_x - \lambda)(a_y - \lambda)(a_z - \lambda) - b_x^2(a_x - \lambda) - b_y^2(a_y - \lambda) - b_z^2(a_z - \lambda) + 2b_x b_y b_z = 0. \quad (16)$$

Таким образом, по заданному волновому вектору \mathbf{K} , направление и величина которого определяются набором чисел k_x, k_y, k_z , уравнение (16) позволяет найти соответствующие частоты $\omega^2 = \lambda_m / \mu$, а система (15) – соответствующие три ортогональных направления векторов поляризации \mathbf{g}_m , $m=1,2,3$.

Наиболее просто уравнение (16) и система (15) могут быть решены, если направление волнового вектора совпадает с каким-то из основных кристаллографических направлений. В этом случае можно получить явную зависимость между величиной волнового вектора и направлением поляризации с одной стороны, и частотой соответствующей бегущей волны – с другой. Такая зависимость носит название дисперсионного соотношения. В предельном случае длинных волн полученные соотношения переходят в дисперсионные соотношения, известные из теории упругости [8], где фигурируют упругие константы. Данное обстоятельство позволило выразить силовые константы динамической модели через упругие константы рассматриваемого вещества, взятые из [9]. Ниже будут получены дисперсионные соотношения для ОЦК и ГЦК решеток. в выражении через упругие константы. для основных кристаллографических направлений, продольных и поперечных поляризаций соответственно:

в направлении [111] : продольные волны

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{2a}{\mu} ((2C_{44} - C_{12}) \sin^2 \frac{Ka}{4\sqrt{3}} + (2C_{44} + C_{12}) \sin^2 \frac{3Ka}{4\sqrt{3}} + (C_{11} - C_{44}) \sin^2 \frac{2Ka}{4\sqrt{3}}), \\ \omega^2 &= \frac{a}{\mu} (C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{2\sqrt{3}}, \end{aligned}$$

поперечные волны

$$\omega^2 = \frac{2a}{\mu} ((7C_{44} + C_{12}) \sin^2 \frac{Ka}{4\sqrt{3}} + (C_{44} - C_{12}) \sin^2 \frac{3Ka}{4\sqrt{3}} + 2(C_{11} - C_{44}) \sin^2 \frac{2Ka}{4\sqrt{3}}),$$

$$\omega^2 = \frac{a}{\mu} (C_{11} - C_{12} + C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{2\sqrt{3}},$$

в направлении [110] продольные волны

$$\omega^2 = \frac{2a}{\mu} (C_{11} + C_{12} + 2C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{2\sqrt{2}},$$

$$\omega^2 = \frac{a}{\mu} (4C_{44} \sin^2 \frac{Ka}{4\sqrt{2}} + (C_{11} + C_{12} + C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{2\sqrt{2}}),$$

поперечные, поляризованные вдоль оси Oz

$$\omega^2 = \frac{2a}{\mu} (C_{11} - C_{12}) \sin^2 \frac{Ka}{2\sqrt{2}},$$

$$\omega^2 = \frac{a}{2\mu} (4(C_{12} + 3C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{4\sqrt{2}} - (C_{12} - C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{2\sqrt{2}}),$$

поперечные, поляризованные в плоскости Oxy

$$\omega^2 = \frac{4a}{\mu} C_{44} \sin^2 \frac{Ka}{4},$$

$$\omega^2 = \frac{a}{\mu} (4C_{44} \sin^2 \frac{Ka}{4\sqrt{2}} + (C_{11} - C_{12} - C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{2\sqrt{2}}),$$

в направлении [100] продольные волны

$$\omega^2 = \frac{2a}{\mu} (4C_{44} \sin^2 \frac{Ka}{4} + (C_{11} - C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{2}),$$

$$\omega^2 = \frac{a}{2\mu} (4(C_{12} + 3C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{4} + (2C_{11} - C_{12} - 3C_{44}) \sin^2 \frac{Ka}{2}),$$

поперечные волны

$$\omega^2 = \frac{8a}{\mu} C_{44} \sin^2 \frac{Ka}{4}, \quad \omega^2 = \frac{4a}{\mu} 4aC_{44} \sin^2 \frac{Ka}{4}.$$

На рис. 1 и 2 приводятся дисперсионные кривые для Al, Na в направлениях [111], [110], [100] для продольной и поперечной поляризации при температуре 78 К. Сравнение полученных дисперсионных кривых для Na и Al с экспериментальными данными из [7], как это видно из приведенных рис. 1, 2, показывает хорошее соответствие теоретических кривых экспериментальным данным (экспериментальные данные нанесены точками).

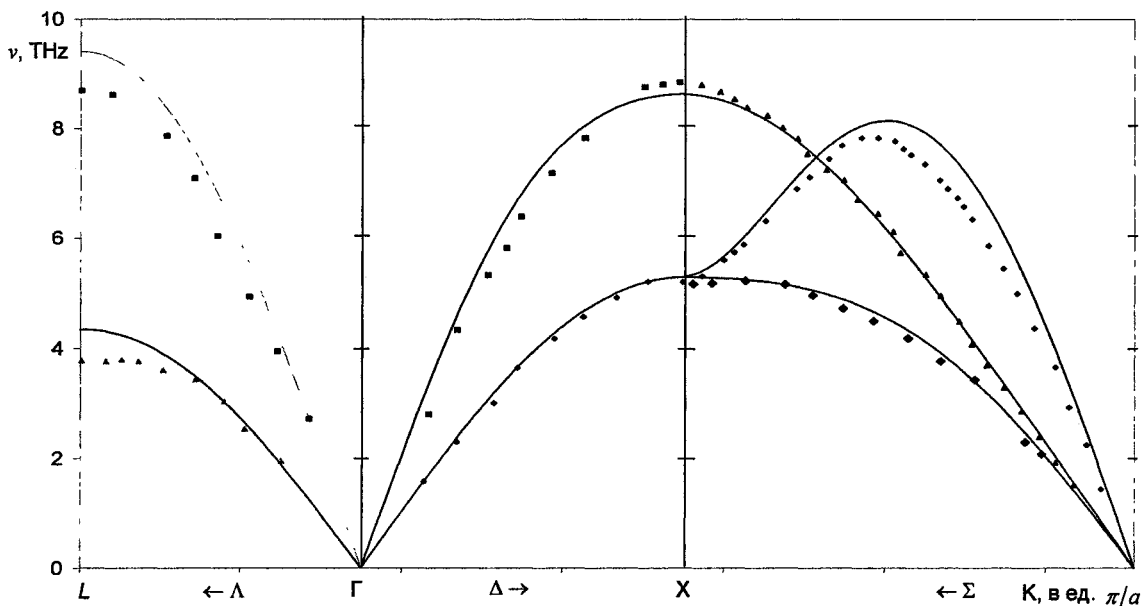


Рис. 1. Кривые дисперсии фононов в Al

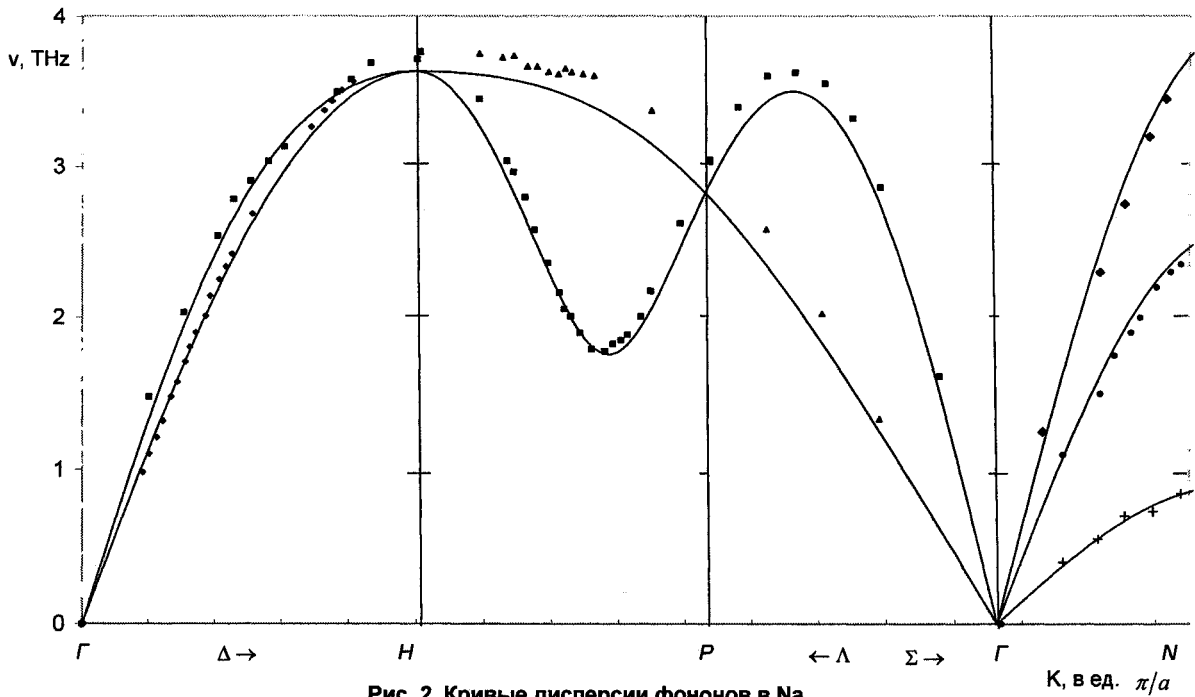


Рис. 2. Кривые дисперсии фононов в Na

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

Литература

1. Борн, М. Теория твердого тела / М. Борн, М. Генперт-Мейер. - М., 1938. - 562 с.
2. Борн, М. Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, К. Хуан. - М.: ИЛ, 1958. - 488 с.
3. Баранов, М.А. Сферическая симметрия электронных оболочек атомов и стабильность кристаллов / М.А. Баранов // ЭФТЖ. - 2006. - Т. 1. - С. 34-8.
4. Chater, G.V. /G.V. Chater // Adv. Phys. - 1961.-№10.-Р. 357.
5. Бровман, Е.Г. Фононы в неперегородных металлах / Е.Г. Бровман, Ю.М. Каган // УФН.- 1974. - Вып. 3. - Т. 112. - С. 369-427.
6. Бровман, Е.Г. / Е.Г. Бровман, Ю.М. Каган, А. Холас // ЖЭТФ. - 1969. - № 57. - С. 1635.
7. Woods, A.D.B./ A.D.B. Woods, B.N. Brockhouse, R.H March, A.T. Stewart // Phys. Rev. - 1962.-№128.-Р. 1112.
8. Китель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Китель. - М.: Наука, 1978. - 792 с.
9. Справочник. Свойства элементов. Часть 1. Физические свойства / под ред. Г.В. Самсонова. - М.: Металлургия, 1976. - 600 с.

Поступила в редакцию 26 января 2008 г.

DISPERSION RELATIONS FOR CUBICAL CRYSTAL LATTICE IN THE DIPOLE-DIPOLE INTERACTIONS MODEL

The authors researched oscillations of monoatomic crystal lattices, caused by the Van der Waals forces. They developed a dynamic model and obtained equations depicting the oscillations of the monoatomic cubic lattices in the adiabatic approach. The authors evaluated forced constants of the dynamic model through the elastic constants of the substance and obtained the dispersion relations without any free parameters. The authors also provide the theoretical and experimental dispersion curves for Na and Al.

Keywords: dynamic model, dipole, crystal lattice, elastic constant, dispersion relations, dispersion curves.

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: tfgubry@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

Kulchenkov Evgeny Aleksandrovich - Assistant Professor at the General Physics Department, Bryansk State Technical University.

Кульченков Евгений Александрович - старший преподаватель кафедры общей физики, Брянский государственный технический университет.

e-mail: evgeniy2000@mail.ru