

## Г л а в а 4

### КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Атомы в кристалле находятся в непрерывном колебательном движении. В отличие от газов и жидкостей, характер этого движения подчиняется более строгим закономерностям. Энергия колебаний атомов в решетке *квантуется*, т. е. является величиной, кратной некоторому определенному малому значению — *фонону*, который назван так по аналогии с фотоном. Периодичность решетки и состав атомов элементарной ячейки накладывают определенные условия на характер квантования фононов: интервалы существования упругих колебаний, особенности их спектра.

М. Планк (1900 г.) показал, что экспериментальные данные по излучению абсолютно черного тела можно объяснить, если предположить, что энергия колебаний электромагнитного поля в полости кратна некоторой малой величине — кванту  $h\nu$ . А. Эйнштейн на примере теплоемкости кристалла алмаза пришел к выводу, что ее температурная зависимость может быть объяснена, если предположить, что энергия кванта упругих колебаний решетки — фонона — имеет тот же вид, что и для фотона:

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad (4.1)$$

где  $\omega$  — частота упругого колебания. Пусть кристалл содержит  $N$  частиц. Каждая частица имеет три степени свободы и, таким образом, имеется  $3N$  колебаний, которые можно представить как ансамбль квазичастиц (фононов). Тогда энергия  $n$  фононов данного типа (моды) упругих колебаний может быть представлена просто суммой вкладов вида (4.1):

$$E_n = \sum_n^{\infty} \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (4.2)$$

где  $n$  — целое положительное число или нуль. Неравенство нулю энергии при абсолютном нуле, обусловленное наличием в сумме (4.2) члена с коэффициентом  $1/2$ , связано с энергией *нулевых колебаний*. Последние, в свою очередь, обусловлены действием принципа неопределенности Гейзенберга: локализация частиц при понижении температуры неизбежно должна приводить к увеличению их импульса (кинетической энергии). Следовательно, определенные колебания решетки с минимальной энергией есть и при температуре абсолютного нуля.

Первым экспериментальным доказательством квантования энергии упругих колебаний решетки была явная зависимость теплоемкости твердых тел от температуры с обращением этой величины в нуль при абсолютном нуле. Известно также, что существует неупругое рассеяние фотонов, рентгеновских лучей и нейтронов определенных энергий, происходящее так, что возникают или поглощаются фононы, и ряд других экспериментальных свидетельств в пользу квантового характера колебаний решетки.

#### 4.1. Уравнения движения ионов кристаллической решетки

Атомы или ионы в кристалле не находятся в статическом равновесном состоянии в узлах кристаллической решетки, а совершают малые по амплитуде колебания около этих положений равновесия. При обсуждении колебаний атомов в кристаллической решетке будут использованы некоторые приближения и предположения:

1. Рассматривается бесконечно большой кристалл, так, чтобы имелась полная периодичность идеальной решетки. При таком предположении физические величины, относящиеся ко всему кристаллу, оказываются бесконечно большими. Однако эти величины можно нормировать на конечный объем, выбрав надлежащим образом граничные условия. В качестве условий принято выбирать периодические *граничные условия Борна–Кармана*:

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{R} + L_x) &= \Phi(\mathbf{R}), \\ \Phi(\mathbf{R} + L_y) &= \Phi(\mathbf{R}), \\ \Phi(\mathbf{R} + L_z) &= \Phi(\mathbf{R}),\end{aligned}\tag{4.3}$$

где  $\Phi(\mathbf{R})$  — любая функция расстояния в кристалле, а  $L_x = La_x$ ,  $L_y = La_y$ ,  $L_z = La_z$  — макроскопические размеры кристалла ( $a_x$ ,  $a_y$ ,  $a_z$  — элементарные трансляции).

2. Считается, что среднее равновесное положение каждого иона совпадает с его положением в статической решетке.

3. Принимается, что типичные отклонения ионов от их средних равновесных положений малы по сравнению с расстояниями между ионами.

4. Используется адиабатическое приближение, в котором предполагается, что в любой момент времени электроны, в том числе и валентные, находятся в основном состоянии, отвечающем мгновенному положению ионов. Это приближение основано на том, что типичные скорости электронов много больше скоростей ионов, и при смещении иона электроны мгновенно «подстраиваются» к его новому положению в кристалле.

Равновесное положение ионов в кристалле будем характеризовать вектором

$$\mathbf{r}_0 \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix} = \mathbf{r}_0(l) + \mathbf{r}_0(\nu), \quad (4.4)$$

где  $\mathbf{r}_0(l)$  есть радиус-вектор  $l$ -й элементарной ячейки:

$$\mathbf{r}_0(l) = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3, \quad (4.5)$$

а  $\mathbf{r}_0(\nu)$  описывает положение  $\nu$ -го атома в элементарной ячейке.

В результате тепловых флуктуаций каждый атом смещается из положения равновесия на величину вектора смещения  $X \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix} - r_0 \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix}$  и, таким образом, полная кинетическая энергия, связанная со смещением всех атомов, равна

$$T = \frac{1}{2} \sum_{l,\nu,\alpha} M_\nu \dot{X}_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix}^2, \quad (4.6)$$

где  $M_\nu$  — масса  $\nu$ -го атома,  $\dot{X}_\alpha = \partial X_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix} / \partial t$ .

Потенциальная энергия кристалла есть сумма парных взаимодействий между атомами, и при малых смещениях ионов от своих равновесных положений она может быть разложена в ряд Тейлора по этим смещениям:

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_{l,\nu,\alpha} \Phi_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix} X_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,\nu,\alpha \\ l',\nu',\beta}} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{pmatrix} X_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix} X_\beta \begin{pmatrix} l' \\ \nu' \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Если ограничиться в разложении (4.7) только членами, пропорциональными вторым степеням смещений атомов, то в этом случае имеем *гармоническое приближение*.

В (4.7)  $\Phi_0$  — энергия статического кристалла, и производные по смещениям имеют вид

$$\Phi_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix} = \left. \frac{\partial \Phi}{\partial X_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix}} \right|_0, \quad (4.8)$$

$$\Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{pmatrix} = \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix} \partial X_\beta \begin{pmatrix} l' \\ \nu' \end{pmatrix}} \right|_0. \quad (4.9)$$

Индексы  $\alpha, \beta$  принимают значения  $x, y, z$ , а индекс «0» означает, что производные вычислены для равновесной статической конфигурации. Коэффициент  $\Phi_\alpha \begin{pmatrix} l \\ \nu \end{pmatrix}$  имеет смысл взятой с обратным

знаком силы, которая действует на ион  $\left(\begin{smallmatrix} l \\ \nu \end{smallmatrix}\right)$ , находящийся в точке  $\mathbf{r}\left(\begin{smallmatrix} l \\ \nu \end{smallmatrix}\right)$ , в направлении  $\alpha$ . Но в равновесной статической решетке все силы равны нулю, поэтому выполняется

$$\Phi_{\alpha}\left(\begin{smallmatrix} l \\ \nu \end{smallmatrix}\right) = 0. \quad (4.10)$$

Таким образом, в гармоническом приближении функция Гамильтона имеет вид

$$H = \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{l,\nu,\alpha} M_{\nu} \dot{X}_{\alpha}\left(\begin{smallmatrix} l \\ \nu \end{smallmatrix}\right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,\nu,\alpha \\ l',\nu',\beta}} \Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{smallmatrix}\right) X_{\alpha}\left(\begin{smallmatrix} l \\ \nu \end{smallmatrix}\right) X_{\beta}\left(\begin{smallmatrix} l' \\ \nu' \end{smallmatrix}\right), \quad (4.11)$$

$\nu = 1, \dots, n$ ,  $n$  — число атомов в элементарной ячейке. Из (4.11) получим уравнения движения ионов кристаллической решетки

$$M_{\nu} \ddot{X}_{\alpha}\left(\begin{smallmatrix} l \\ \nu \end{smallmatrix}\right) = -\frac{\partial \Phi}{\partial X_{\alpha}\left(\begin{smallmatrix} l \\ \nu \end{smallmatrix}\right)} = -\sum_{l',\nu',\alpha,\beta} \Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{smallmatrix}\right) X_{\beta}\left(\begin{smallmatrix} l' \\ \nu' \end{smallmatrix}\right) \quad (4.12)$$

Правая часть (4.12) означает силу, действующую в направлении оси  $\alpha$  на ион, расположенный в точке  $\mathbf{r}\left(\begin{smallmatrix} l \\ \nu \end{smallmatrix}\right)$ , со стороны иона, расположенного в точке  $\mathbf{r}\left(\begin{smallmatrix} l' \\ \nu' \end{smallmatrix}\right)$ , смещенного в направлении оси  $\beta$ . Матрица  $\Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{smallmatrix}\right)$  называется *силовой матрицей*. Коэффициенты  $\Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{smallmatrix}\right)$  удовлетворяют условию симметрии

$$\Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{smallmatrix}\right) = \Phi_{\beta\alpha}\left(\begin{smallmatrix} l'l \\ \nu'\nu \end{smallmatrix}\right). \quad (4.13)$$

Из периодичности кристаллической решетки следует, что коэффициенты  $\Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{smallmatrix}\right)$  зависят только от разности  $l - l'$ , а не от  $l$  и  $l'$  по отдельности, благодаря чему имеем:

$$\Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{smallmatrix}\right) = \Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} l-l' \\ \nu \nu' \end{smallmatrix}\right). \quad (4.14)$$

Из того, что потенциальная энергия и силы, действующие на ион, не меняются при переносе кристалла как целого, следует:

$$\sum_{\substack{l,\nu \\ l',\nu'}} \Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} ll' \\ \nu\nu' \end{smallmatrix}\right) = 0, \quad (4.15)$$

$$\sum_{l',\nu'} \Phi_{\alpha\beta}\left(\begin{smallmatrix} 0 l' \\ \nu\nu' \end{smallmatrix}\right) = 0. \quad (4.16)$$

### 4.2. Колебания линейной атомной цепочки

Рассмотрим сначала упрощенный случай одномерного кристалла, элементарная ячейка которого состоит из одного атома мас-

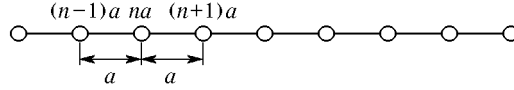


Рис. 4.1. Одномерный моноатомный кристалл ( $a$  — трансляция)

сы  $M$  (рис. 4.1). Пусть имеется взаимодействие только ближайших атомов, которое определяется силовой константой

$$C = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_n \partial X_{n+1}} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_{n-1} \partial X_n}. \quad (4.17)$$

Система уравнений (4.12) в этом случае примет вид

$$M \ddot{X}_{na} = -C(2X_{na} - X_{(n+1)a} - X_{(n-1)a}). \quad (4.18)$$

Решение этого уравнения для смещений  $X_n$  будем искать в виде бегущей плоской волны:

$$X_{na} = X_0 \exp(-i(\omega t + Kna)), \quad (4.19)$$

где  $X_0$  — амплитуда смещения,  $K$  — волновой вектор упругой волны. Подставляя (4.19) в (4.18), имеем:

$$\begin{aligned} & -\omega^2 M X_0 \exp(-i(\omega t + Kna)) = \\ & = C \exp(-i(\omega t + Kna)) X_0 (2 - \exp(iKa) + \exp(-iKa)). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Из (4.20) получаем зависимость частоты колебаний ионов в решетке от волнового вектора  $K$  (дисперсионное соотношение):

$$\omega^2 = \frac{2C}{M}(1 - \cos Ka) = \frac{4C}{M} \sin^2 \frac{Ka}{2}. \quad (4.21)$$

Из (4.21) следует, что все неэквивалентные значения волнового вектора  $K$  находятся в пределах, определяемых неравенством  $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$ . Обращаясь к определению вектора обратной решетки (1.36), для одномерного случая имеем:  $\mathbf{G} = 2\pi/\mathbf{a}$ . Очевидно, что добавление вектора  $\mathbf{G} = 2\pi/\mathbf{a}$  к волновому вектору  $\mathbf{K}$  результат (4.21) не изменит. Это важное обстоятельство практически всегда позволяет ограничиться указанной неравенством  $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$  областью значений волнового вектора  $K$ , которую называют *первой зоной Бриллюэна*. Рассматривая определение ячейки Вигнера–Зейтца (§ 1.8), можно убедиться, что *первая зона Бриллюэна — это ячейка Вигнера–Зейтца в обратном пространстве*. Зависимость  $\omega(K)$  показана на рис. 4.2.

При  $K \rightarrow 0$  (предел для длинноволновых колебаний  $\lambda \rightarrow \infty$ , или континуальное приближение) из (4.21) получается:

$$\omega^2(K) = \frac{C}{M}(Ka)^2, \quad (4.22)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{C}{M}}Ka. \quad (4.23)$$

Скорость волны вычислим так (в рассматриваемом случае групповая и фазовая скорости равны):

$$v = \left. \frac{d\omega}{dK} \right|_{K \rightarrow 0} = \sqrt{\frac{C}{M}}a. \quad (4.24)$$

Рис. 4.2. Дисперсионная зависимость для одномерного моноатомного кристалла (первая зона Бриллюэна)

Это значение определяет скорость звука в кристалле. Ветвь колебаний кристаллической решетки, частота которой стремится к нулю в длинноволновом пределе, называется акустической ветвью колебаний.

### 4.3. Колебания линейной атомной цепочки с базисом, содержащим два атома

Одномерный кристалл, элементарная ячейка которого содержит два атома массы  $M_1$  и  $M_2$ , изображен на рис. 4.3. Опять бу-

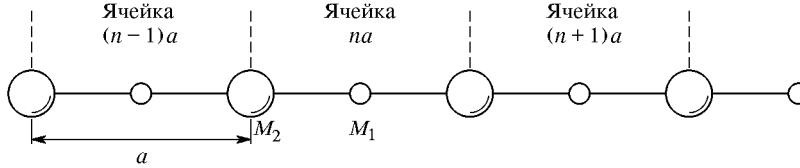


Рис. 4.3. Дисперсионная зависимость для одномерного моноатомного кристалла (первая зона Бриллюэна)

дем предполагать, что взаимодействуют только ближайшие соседи и с одной и той же силовой константой  $C$ . Система уравнений (4.12) сводится в этом случае к системе двух уравнений:

$$\begin{aligned} M_1 X_{na} &= -C(2X_{na} - W_{na} - W_{(n+1)a}), \\ M_2 W_{na} &= -C(2W_{na} - X_{na} - X_{(n-1)a}). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Опять ищем решение уравнений в виде

$$\begin{aligned} X_{na} &= X_0 \exp(-i(\omega t + Kna)), \\ W_{na} &= W_0 \exp(-i(\omega t + Kna)), \end{aligned} \quad (4.26)$$

где  $X_0$  и  $W_0$  — амплитуды смещений атомов с массами  $M_1$  и  $M_2$  соответственно. Подставляя (4.26) в (4.25), имеем

$$\begin{aligned} -\omega^2 M_1 X_0 &= C W_0 (1 + \exp(iKa)) - 2C X_0, \\ -\omega^2 M_2 W_0 &= C X_0 (1 + \exp(-iKa)) - 2C W_0. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Система однородных линейных уравнений имеет нетривиальное решение, если определитель, составленный из коэффициентов при  $X_0$ ,  $W_0$ , равен нулю:

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1 \omega^2 & -C[1 + \exp(iKa)] \\ -C[1 + \exp(-iKa)] & 2C - M_2 \omega^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (4.28)$$

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2) \omega^2 + 2C^2(1 - \cos Ka) = 0, \quad (4.29)$$

откуда имеем дисперсионное соотношение:

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{C}{\mu} \left[ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu}{M_1 + M_2} \sin^2 \frac{Ka}{2}} \right], \quad (4.30)$$

где  $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  — приведенная масса. Таким образом, в двухатомном одномерном кристалле имеются две ветви колебаний.

В случае длинноволновых колебаний ( $\lambda \rightarrow \infty$ )  $K \rightarrow 0$  и  $\sin^2(Ka/2) \approx (Ka/2)^2$ , тогда

$$\sqrt{1 - \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \frac{Ka}{2}} \approx 1 - \frac{2M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \left( \frac{Ka}{2} \right)^2.$$

и для малых  $K$  имеем

$$\omega_1^2 = \frac{C}{\mu} \left[ 1 - 1 + \frac{2\mu}{M_1 + M_2} \left( \frac{Ka}{2} \right)^2 \right] = \frac{2C}{M_1 + M_2} \left( \frac{Ka}{2} \right)^2, \quad (4.31)$$

$$\omega_2^2 = \frac{2C}{\mu} \left[ 1 - \frac{\mu}{M_1 + M_2} \left( \frac{Ka}{2} \right)^2 \right]. \quad (4.32)$$

Из (4.31) и (4.32) видно, что в пределе длинных волн одна из частот колебаний, так же, как и в случае одноатомной линейной цепочки, стремится к нулю пропорционально волновому вектору:

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{Ca^2}{2(M_1 + M_2)}} K. \quad (4.33)$$

Эта ветвь называется *акустической ветвью колебаний*. В длинноволновом пределе при таком колебании смещается центр масс элементарной ячейки. Действительно, из (4.26) при  $K \rightarrow 0$ ,  $\omega \rightarrow 0$  имеем  $X_0/W_0 = 1$ . Это показано на рис. 4.4.

Частота колебаний для другой ветви при  $K \rightarrow 0$  стремится к конечному значению:

$$\omega_2(K = 0) = \sqrt{\frac{2C}{\mu}}. \quad (4.34)$$

В длинноволновом пределе в этом колебании из (4.26) при  $K \rightarrow 0$   $X_0/W_0 = -M_2/M_1$ . Центры масс элементарных ячеек остаются

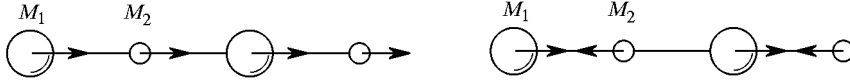


Рис. 4.4. Смещение атомов двухатомной цепочки в акустическом колебании с частотой  $\omega_1$

Рис. 4.5. Смещение атомов в элементарной ячейке двухатомной цепочки в оптическом колебании с частотой  $\omega_2$

на месте, и атомы, занимающие разные позиции в элементарной ячейке, смещаются в противоположных направлениях (рис. 4.5).

При  $K = \pm\pi/a$  на границе зоны Бриллюэна из (4.30) следует:

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{2C}{M_2}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{2C}{M_1}}. \quad (4.35)$$

Первая из частот в (4.35) соответствует граничному значению частоты колебаний *акустического типа* (центры масс в соседних ячейках движутся навстречу друг другу, частота этого коле-

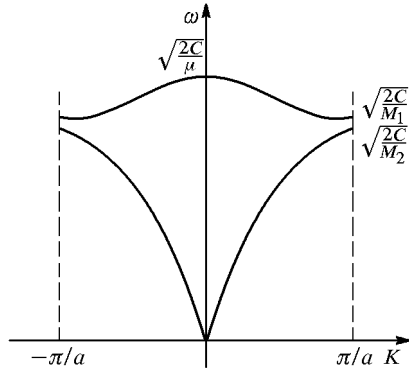


Рис. 4.6. Дисперсионная зависимость для двухатомной линейной цепочки (первая зона Бриллюэна)

бания определяется большей массой). Вторая — частоте *оптических колебаний* на границе зоны Бриллюэна (центры масс во



всех ячейках остаются на месте, в одной ячейке атомы с разной массой движутся навстречу друг другу, в соседней ячейке — друг от друга, частота такого колебания определяется меньшей массой атома). Зависимость частот колебаний акустической и оптической ветвей от волнового вектора, изменяющегося в пределах первой зоны Бриллюэна, показана на рис. 4.6.

Если кристалл состоит из разноименно заряженных ионов, то при колебании оптического типа возникает дипольный момент. Характерные частоты длинноволновых колебаний для ионных кристаллов  $\sim 10^{12} - 10^{13} \text{ с}^{-1}$ , и такие колебания можно регистрировать в инфракрасном диапазоне электромагнитных волн. Отсюда произошло название — оптическая ветвь колебаний решетки.

#### 4.4. Нормальные координаты и динамическая матрица

Рассмотрим теперь общий случай колебаний решетки трехмерного кристалла. Выражение (4.11) для функции Гамильтона представляет собой энергию системы связанных гармонических осцилляторов с координатами  $X_\alpha \binom{l}{\nu}$ . Связь обусловлена «перекрестными» слагаемыми с  $X_\alpha \binom{l}{\nu} X_\beta \binom{l'}{\nu'}$  с  $\alpha \neq \beta, \nu \neq \nu'$ . В результате происходит непрерывный обмен энергией между осцилляторами, и зависимость от времени смещений ионов не имеет вида простого гармонического колебания. Чтобы избавиться от этой трудности, вместо  $X_\alpha \binom{l}{\nu}$  введем другие переменные таким образом, чтобы энергия, выраженная в этих новых переменных, не содержала перекрестных членов (каноническая задача о приведении квадратичной формы к диагональному виду). Новые переменные называются *нормальными координатами*, в которых векторы смещений имеют вид:

$$X_\alpha \binom{l}{\nu} = \frac{1}{L^{1/2}} \sum_{\mathbf{K}, s} \zeta_\nu(\mathbf{K}, s) Q(\mathbf{K}, s, t) \exp(i\mathbf{K}l), \quad (4.36)$$

где множитель  $L^{1/2}$  введен для удобной нормировки, комплексные числа  $Q(\mathbf{K}, s, t)$  — новые координаты, где  $s$  — номер ветви спектра, а векторы поляризации нормальных колебаний  $\zeta'_\nu(\mathbf{K}, s)$  надлежит подобрать таким образом, чтобы энергия (4.11) представляла собой сумму квадратов и не содержала перекрестных членов.

Как и в случае одномерных кристаллов, квазиволновой вектор  $\mathbf{K}$  изменяется в пределах первой зоны Бриллюэна. Вещественность смещений ионов кристалла из положений равновесия накладывает условие на координаты  $Q(\mathbf{K}, s, t)$ , а именно,

$$\zeta_\nu(\mathbf{K}, s, t) Q(\mathbf{K}, s, t) = \zeta_\nu^*(-\mathbf{K}, s) Q^*(-\mathbf{K}, s, t). \quad (4.37)$$

Подставим (4.37) в гамильтониан (4.11):

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2L} \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \sum_{s, s'} \sum_{\nu} M_{\nu} \zeta_{\nu\alpha}(\mathbf{K}, s) \zeta_{\nu\alpha}(\mathbf{K}', s') \dot{Q}(\mathbf{K}, s, t) \dot{Q}(\mathbf{K}', s', t) \times \\
&\times \sum_l \exp(i(\mathbf{K} + \mathbf{K}')l) + \frac{1}{2L} \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \sum_{s, s'} \sum_{\nu, \nu'} \sum_{l, l'} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & -l' \\ \nu & \nu' \end{pmatrix} \times \\
&\times \zeta_{\nu\alpha}(\mathbf{K}, s) \zeta_{\nu'\beta}(\mathbf{K}', s') Q(\mathbf{K}, s, t) Q(\mathbf{K}', s', t) \exp(i(Kl + K'l')). \tag{4.38}
\end{aligned}$$

Используем свойство суммирования по узлам решетки экспоненты (см. задачу 4.5):

$$\sum_l \exp(i(K + K')l) = \begin{cases} L, & \text{если } \mathbf{K} + \mathbf{K}' = 0, \mathbf{G}, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \tag{4.39}$$

где  $\mathbf{G}$  — целый вектор обратной решетки. При выполнении суммирования во втором слагаемом в (4.38) сделаем замену переменных суммирования

$$l - l' = l_1, \quad l + l' = 2l_2. \tag{4.40}$$

С учетом (4.39), (4.40) и переобозначая  $l_2 = l$ , получим:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{s, s'} \sum_{\nu} M_{\nu} \zeta_{\nu\alpha}(\mathbf{K}, s) \zeta_{\nu\alpha}^*(-\mathbf{K}, s') \times \\
&\times \dot{Q}(\mathbf{K}, s, t) \dot{Q}^*(-\mathbf{K}, s', t) + \frac{1}{2L} \sum_{s, s'} \sum_{\nu\nu'} \sum_{\mathbf{K}} D_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{K}) \zeta_{\nu\alpha}(\mathbf{K}, s) \times \\
&\times \zeta_{\nu'\beta}^*(-\mathbf{K}, s') Q(\mathbf{K}, s, t) Q^*(-\mathbf{K}, s', t), \tag{4.41}
\end{aligned}$$

где

$$D_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{K}) = \sum_l \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} 0 & l \\ \nu & \nu' \end{pmatrix} \exp(iKl). \tag{4.42}$$

$D_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{K})$  называется *динамической матрицей*. Из (4.41) видно, что в функции Гамильтона слагаемые с различными  $\mathbf{K}$  не перемешиваются.

Теперь определим  $\zeta_{\nu\alpha}(\mathbf{K}, s)$  таким образом, чтобы обратились в нуль слагаемые с  $s \neq s'$ . Для выполнения этого условия векторы  $\zeta_{\nu\alpha}(\mathbf{K}, s)$  должны удовлетворять системе уравнений

$$\sum_{\nu} D_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{K}) \zeta_{\nu\alpha}(\mathbf{K}, s) = \omega_s^2(\mathbf{K}) M_{\nu'} \zeta_{\nu'\beta}(\mathbf{K}, s'), \tag{4.43}$$

где  $\omega_s(\mathbf{K})$  и есть частоты нормальных колебаний.

Условием существования ненулевого решения системы уравнений является равенство нулю определителя, составленного из коэффициентов:

$$\left| D_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{K}) - \omega_s^2(\mathbf{K})\delta_{\alpha\beta}\delta_{\nu\nu'} \right| = 0, \quad (4.44)$$

где  $\delta_{\alpha\beta}$ ,  $\delta_{\nu\nu'}$  — символы Кронекера.

Формула (4.44) представляет собой уравнение  $3\nu$ -й степени относительно  $\omega^2$  и для каждого значения вектора  $\mathbf{K}$  имеет  $3\nu$  решений. Динамическая матрица  $D_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{K})$  является эрмитовой. Из свойства (4.16) матрицы силовых постоянных следует:

$$\sum_{\nu'} D_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{K} = 0) = 0. \quad (4.45)$$

Формулы (4.43), (4.44) применимы для вычисления спектра колебаний в кристалле любого состава и любой симметрии, если известны значения элементов матрицы силовых постоянных. Однако общий вид законов дисперсии  $\omega_s(\mathbf{K})$  для некоторых простых случаев можно установить и без детальных вычислений фононного спектра. Рассмотрим кристалл с одним атомом в элементарной ячейке ( $\nu = 1$ ). В этом случае уравнение (4.44) — кубическое и, следовательно, имеет три решения, соответствующие ветвям колебаний  $s = 1, 2, 3$ .

В длинноволновом пределе  $K = 0$ , и система (4.43) принимает вид

$$D_{11}^{\alpha\beta}(0)\zeta_{1\alpha}(0, s) = \omega_s^2(0)\zeta_{1\beta}(0, s). \quad (4.46)$$

Из формулы (4.45) следует, что

$$D_{11}^{\alpha\beta}(0) = 0 \quad (4.47)$$

и, так как вектор  $\zeta$  не может тождественно быть равным нулю, получим:

$$\omega_s^2(0) = 0, \quad (4.48)$$

поскольку  $\omega_s(\mathbf{K})$  — четная функция волнового вектора при  $\mathbf{K} \rightarrow 0$ .

Динамическая матрица  $\Phi(\mathbf{K})$  есть четная функция  $\mathbf{K}$ :

$$\begin{aligned} D_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{K}) &= \sum_{l=-\infty}^{l=\infty} \Phi_{\alpha\beta} \binom{l}{\nu\nu'} \exp(iKl) = \\ &= -2 \sum_{l=0}^{l=\infty} \Phi_{\alpha\beta} \binom{l}{\nu\nu'} \sin^2 \left( \frac{Kl}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.49)$$

Следовательно,  $\omega_s(\mathbf{K})$  тоже четная функция  $\mathbf{K}$ , поэтому при  $\mathbf{K} \rightarrow 0$   $\omega_s^2(\mathbf{K})$  является квадратичной функцией  $\mathbf{K}$ :

$$\omega_s^2(\mathbf{K}) = v_{\alpha\beta}^2(s) K_\alpha K_\beta. \quad (4.50)$$

Величины  $v_{\alpha\beta}$  зависят в общем случае от направления вектора  $\mathbf{K}$  и, в частности, для кубического кристалла одна из них является скоростью звука продольных упругих волн, а две другие при  $s = 2$  и  $s = 3$  описывают поперечные волны.

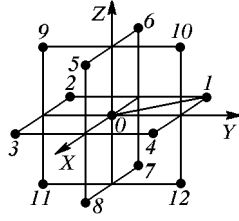


Рис. 4.7. Нумерация атомов для ГЦК решетки

Проиллюстрируем теперь дисперсионную зависимость частот колебаний от волнового вектора для нескольких симметричных направлений по всей зоне Бриллюэна. Рассмотрим одноатомный кристалл с гранецентрированной кубической решеткой и ограничимся только короткодействующими взаимодействиями между ближайшими соседями (рис. 4.7). Такая модель может быть применена к описанию

динамики решетки кристаллов инертных газов и металлов, если для последних принять достаточно грубое приближение, что из-за экранирования электронным газом ионы взаимодействуют только на ближайших расстояниях. Динамическая матрица в этом случае имеет вид

$$D^{\alpha\beta}(\mathbf{K}) = -2 \sum_{nn} \Phi_{\alpha\beta}(nn) \sin^2 \left( \frac{\mathbf{K}\mathbf{r}_n}{2} \right), \quad (4.51)$$

где  $nn$  означает сумму по 12 ближайшим соседям в ГЦК решетке. Элементы матрицы силовых постоянных  $\Phi_{\alpha\beta}(nn)$  есть вторые производные от потенциальной энергии по смещениям атомов из положения равновесия и, в силу кубической симметрии, в этой матрице есть только три независимые величины, которые в нашем случае являются подгоночными параметрами:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_x^0 \partial X_x^1} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_y^0 \partial X_y^1} = \dots = \alpha, \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_x^0 \partial X_y^1} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_y^0 \partial X_x^1} = \dots = \beta, \quad (4.53)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_z^0 \partial X_z^1} = \dots = \gamma. \quad (4.54)$$

Тогда матрицы силовых констант взаимодействия узла решетки под номером 0 с ближайшими соседями будут иметь вид:

$$\text{с соседями под номерами } 1, 2, 3, 4 \text{ — } \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 \\ \beta & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix};$$

$$\text{с соседями под номерами } 5, 6, 7, 8 \text{ — } \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & \beta \\ 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix};$$

$$\text{с соседями под номерами } 9, 10, 11, 12 \text{ — } \begin{pmatrix} \alpha & 0 & \beta \\ 0 & \gamma & 0 \\ \beta & 0 & \alpha \end{pmatrix}.$$

Подставим эти величины в (4.51) и просуммируем по ближайшим соседям. Получим:

$$\begin{aligned} D_{xx}(\mathbf{K}) = & 4\gamma \left( \sin^2 \frac{K_y + K_z}{4} a + \sin^2 \frac{K_y - K_z}{4} a \right) + \\ & + 4\alpha \left( \sin^2 \frac{K_x + K_y}{4} a + \sin^2 \frac{K_x - K_y}{4} a + \right. \\ & \left. + \sin^2 \frac{K_x + K_z}{4} a + \sin^2 \frac{K_x - K_z}{4} a \right), \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$D_{xy}(\mathbf{K}) = 4\beta \left( \sin^2 \frac{K_x + K_z}{4} a + \sin^2 \frac{K_x - K_y}{4} a \right), \quad (4.56)$$

а элементы  $D_{yy}(\mathbf{K})$ ,  $D_{zz}(\mathbf{K})$ ,  $D_{yz}(\mathbf{K})$  и  $D_{zx}(\mathbf{K})$  получаются из (4.55), (4.56) циклической перестановкой  $x \rightarrow y \rightarrow z$ .

Из уравнения (4.44) получаем дисперсионные зависимости частот колебаний в симметричных направлениях для одноатомной ГЦК решетки с взаимодействием ближайших соседей

Для  $\mathbf{K} \parallel [100]$ :

$$\omega_1(\mathbf{K}) = \frac{16\alpha}{M} \sin^2 \frac{Ka}{4} \quad \text{— продольная волна,}$$

$$\omega_2(\mathbf{K}) = \frac{8(\alpha + \gamma)}{M} \sin^2 \frac{Ka}{4} \quad \text{— дважды вырожденная поперечная волна (дисперсионные ветви для поперечных волн совпадают).}$$

Для  $\mathbf{K} \parallel [110]$  :

$$\omega_1(\mathbf{K}) = \frac{1}{M} \left[ 8(\alpha + \gamma) \sin^2 \frac{Ka}{4} + 4(\alpha + \beta) \sin^2 \frac{Ka}{2} \right] \quad \text{— продольная волна,}$$

$$\omega_2(\mathbf{K}) = \frac{1}{M} \left[ 8(\alpha + \gamma) \sin^2 \frac{Ka}{4} + 4(\alpha - \beta) \sin^2 \frac{Ka}{2} \right] \quad \text{— поперечная волна,}$$

$$\omega_3(\mathbf{K}) = \frac{1}{M} \left[ 16\alpha \sin^2 \frac{Ka}{4} + 4\gamma \sin^2 \frac{Ka}{2} \right] \quad \text{— поперечная волна.}$$

Для  $\mathbf{K} \parallel [111]$  :

$$\omega_1(\mathbf{K}) = \frac{(8\alpha + 8\beta + 4\gamma)}{M} \sin^2 \frac{Ka}{2} \quad \text{— продольная волна,}$$

$$\omega_2(\mathbf{K}) = \frac{(8\alpha - 4\beta + 4\gamma)}{M} \sin^2 \frac{Ka}{2} \quad \text{— дважды вырожденная поперечная волна.}$$

Типичные дисперсионные кривые для моноатомной решетки показаны на рис. 4.8.

В кристаллах, элементарная ячейка которых содержит  $\nu > 1$  атомов, также всегда имеется три акустические ветви колебаний,

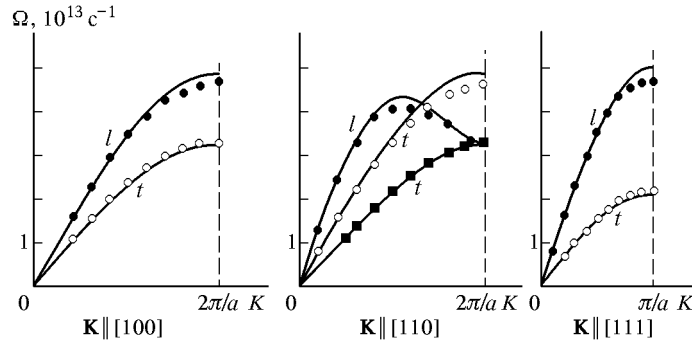


Рис. 4.8. Дисперсионные зависимости для трехмерного моноатомного кристалла ГЦК меди. Точки — экспериментальные значения, линии — результаты полгонки методом Борна-Кармана с тремя различающимися связями с ближайшими соседями.

в которых в длинноволновом пределе  $\mathbf{K} \rightarrow 0$  все атомы ячейки движутся как целое и частоты которых стремятся линейно к нулю

с уменьшением  $K$ . Остальные  $(3\nu - 3)$  ветвей — оптические, частоты которых в длинноволновом пределе стремятся к некоторым

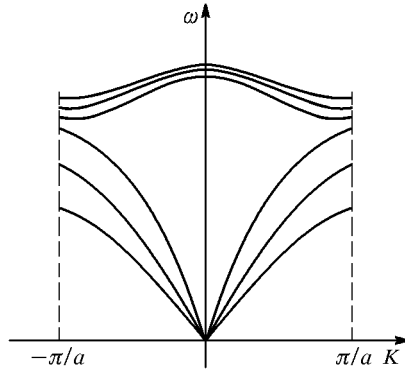


Рис. 4.9. Дисперсионные зависимости для двухатомного трехмерного кристалла (первая зона Бриллюэна)

значениям, отличным от нуля. Типичные дисперсионные кривые для двухатомного трехмерного кристалла приведены на рис. 4.9.

#### 4.5. Определение собственных частот колебаний из опытов по рассеянию фотонов и медленных нейтронов

Для простоты в дальнейшем мы будем обсуждать только кристаллы с одним атомом в элементарной ячейке. Поскольку упругие колебания решетки кристалла обладают и свойствами частиц, то характер динамики взаимодействия квазичастиц-фононов с другими квазичастицами следует описывать в терминах, которые используются в классической и квантовой механике. Так, взаимодействие фонона, имеющего волновой вектор  $\mathbf{K}$  (параметр волны!), с другими частицами и квазичастицами происходит таким образом, как если бы фонон обладал импульсом

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{K}. \quad (4.57)$$

В действительности колебания решетки реальным импульсом не обладают, поэтому величину (4.57) называют *квазиимпульсом*. Существует много процессов взаимодействия частиц, идущих с образованием или поглощением фононов.

Упругое рассеяние — *брегговскую дифракцию* — рентгеновских фотонов, происходящее без изменения длины волны излучения, можем представить с помощью соотношения

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}, \quad (4.58)$$

где  $\mathbf{k}'$ ,  $\mathbf{k}$  — волновые векторы рассеянного и падающего фотонов,  $\mathbf{G}$  — вектор обратной решетки. В данном случае соотношение (4.58) представляет собой *правило отбора* для волновых векторов.

Если фотон испытывает рассеяние, при котором образуется фотон с волновым вектором  $\mathbf{K}$ , то правило отбора для волновых векторов будет иметь вид

$$\mathbf{k}' + \mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}. \quad (4.59)$$

Если, напротив, при неупругом рассеянии фотона фотон поглощается, то этому процессу соответствует такое соотношение:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K} + \mathbf{G}. \quad (4.60)$$

Рассматривая кристалл как сплошную среду с показателем преломления  $n$ , модуль волнового вектора фотона можно определить соотношением

$$\omega = \frac{ck}{n}, \quad \lambda\nu = \frac{c}{n}, \quad (4.61)$$

где  $c$  — скорость света в вакууме. Импульс фотона определяется аналогично соотношению (4.57):

$$\mathbf{p}_{\text{фот}} = \hbar\mathbf{k}. \quad (4.62)$$

Физически взаимодействие фотона со звуковой волной можно понять, если принять, что поле упругих деформаций звуковой волны изменяет локальную — в пределах длины упругой волны — концентрацию атомов и/или его электронную поляризуемость, и, тем самым, показатель преломления кристалла. Следовательно, звуковая волна модулирует оптические свойства среды, и, наоборот, электрическое поле световой волны модулирует упругие свойства среды.

При неупругом рассеянии меняются волновой вектор и энергия (частота) фотона. Пусть при этом образуется фотон с волновым

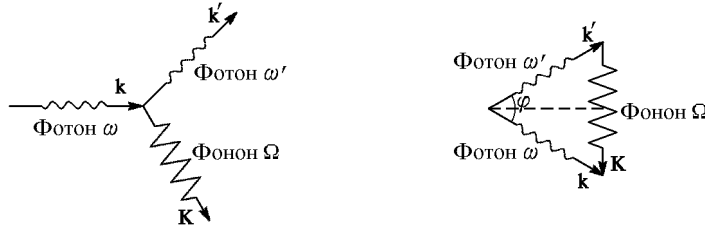


Рис. 4.10. Схема неупругого рассеяния фотона

Рис. 4.11. Правило отбора при неупругом рассеянии фотона в кристалле

вектором  $\mathbf{K}$  и угловой частотой  $\Omega$  (рис. 4.10). В процессе рассеяния должны выполняться законы сохранения энергии:

$$\hbar\omega = \hbar\omega' + \hbar\Omega \quad (4.63)$$



и импульса (правило отбора для волновых векторов):

$$\mathbf{k}' + \mathbf{K} = \mathbf{k}. \quad (4.64)$$

В соотношении (4.64) для упрощения опущен член, описывающий упругое (брэгговское) рассеяние. Если скорость звука от частоты не зависит, то для частоты фонона справедливо соотношение

$$\Omega = v_{\text{зв}} K,$$

где  $v_{\text{зв}}$  — скорость акустической волны.

Из-за большого различия скоростей света и звука лишь малая часть энергии фотона передается фонону. Для фонона с волновым вектором  $\mathbf{K}$ , сравнимым по величине с волновым вектором  $\mathbf{k}$  фотона, можно записать, что  $ck \gg v_{\text{зв}} K$ . Поскольку  $\omega = ck$ ,  $\Omega = v_{\text{зв}} K$ , то  $\omega \gg \Omega$ , и из закона сохранения энергии (4.63) следует, что

$$\omega' \approx \omega \Rightarrow k' \approx k. \quad (4.65)$$

Существование условий (4.65) и (4.63) возможно, если векторный треугольник, иллюстрирующий соотношение (4.64), — равнобедренный (рис. 4.11). Из этого следует, что

$$K \approx 2k \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right). \quad (4.66)$$

Пользуясь (4.61), запишем соотношение (4.66) так:

$$\Omega = v_{\text{зв}} K \approx \frac{2v_{\text{зв}}\omega n}{c} \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right). \quad (4.67)$$

Формула (4.66) дает возможность вычисления частот фононов, возбужденных в результате неупругого рассеяния фотонов.

Пусть на среду с показателем преломления  $n = 1,5$  падает видимый свет ( $\lambda_{\text{вак}} = 4000 \text{ \AA}$ ). Примем скорость звука  $v_{\text{зв}} \approx \approx 5 \cdot 10^5 \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$ . Из формулы (4.67), полагая  $\sin(\varphi/2) = 1$ , получим максимальное значение частоты фононов, генерируемых в этом процессе:

$$\Omega \approx \frac{2 \cdot 5 \cdot 10^5 \cdot 2\pi \cdot 1,5}{4 \cdot 10^{-5}} \approx 2 \cdot 10^{11} \text{ рад} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (4.68)$$

Эффект рассеяния света на фононах в твердых телах или жидкостях известен как эффект рассеяния Мандельштама–Бриллюэна.

Одним из самых важных методов изучения фононного спектра в твердых телах является метод неупругого рассеяния медленных нейтронов на фононах. Дебройлевская длина волны  $\lambda$  медленных (тепловых) нейтронов с энергией  $\sim 0,1 \text{ эВ}$  имеет порядок межатомного расстояния, и кристаллическая решетка, так же,

как и для рентгеновских лучей, может служить дифракционной решеткой. Однако энергия тепловых нейтронов того же порядка, что и энергия тепловых колебаний атомов кристалла. Поэтому, измеряя энергию, приобретенную или потерянную нейтронами при рассеянии, можно узнать информацию о тепловых колебаниях решетки. Нейтрон взаимодействует с решеткой за счет рассеяния на ядрах атомов. При этом происходит передача части энергии нейтрона кристаллу, которую можно трактовать как образование («рождение») фонона. Правило отбора для волновых векторов в этом процессе аналогично соотношениям (4.59) или (4.60) для фотон-фононного взаимодействия:

$$\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}' \pm \mathbf{K}. \quad (4.69)$$

Знак «плюс» соответствует процессу образования фонона, знак «минус» — процессу исчезновения («уничтожения») фонона,  $\mathbf{G}$  — произвольный вектор обратной решетки. Импульс нейтрона связан с волновым вектором аналогично соотношению (4.62) для фотонов:

$$\mathbf{p}_n = \hbar \mathbf{k}_n. \quad (4.70)$$

Тогда кинетическая энергия нейтрона равна

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_n}. \quad (4.71)$$

Закон сохранения энергии в этом процессе можно представить в виде

$$\frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 k_n'^2}{2m_n} \pm \hbar \omega_{\mathbf{K}}. \quad (4.72)$$

Знак «плюс» по-прежнему соответствует процессу образования фонона, знак «минус» — процессу его исчезновения.

Для нахождения закона дисперсии фононов  $\omega = \omega(\mathbf{K})$  с помощью соотношений (4.70) и (4.72) экспериментально определяют, в зависимости от направления рассеяния, приращение или потерю энергии нейтронов, испытавших рассеяние. С помощью этого метода удалось экспериментально получить вид кривых  $\omega = \omega(\mathbf{K})$  для многих кристаллов (см. рис. 4.8).

Зная скорости падающих и рассеянных нейтронов, можно с помощью (4.72) найти частоту фонона, участвующего в процессе рассеяния. Импульс  $\mathbf{k}'_n - \mathbf{k}_n$ , переданный фонону, можно найти по углу рассеяния, а волновой вектор фонона  $\mathbf{K}$  можно определить из (4.69). Таким образом находится дисперсионная формула для частот фононов:

$$\omega = \omega_s(\mathbf{K}). \quad (4.73)$$

Однако в трехмерном кристалле каждому вектору  $\mathbf{K}$  соответствует три частоты, каждая из которых принадлежит своей ветви колебаний, и для заданного  $\mathbf{K}$  каждому направлению рассеяния должно соответствовать три значения  $|\mathbf{k}'_n|$ . Это приводит к тому, что распределение нейтронов имеет острые пики, соответствующие трем значениям  $|\mathbf{k}'_n|$ .

Используя свойство периодичности  $\omega_s(\mathbf{K} + \mathbf{G}) = \omega_s(\mathbf{K})$ , (4.73) и (4.72) можно записать в компактной форме:

$$\mathbf{k}'_n{}^2 - \mathbf{k}_n^2 = \frac{2m_n}{\hbar} \omega_s(\mathbf{K}). \quad (4.74)$$

Для каждой фоновой ветви  $s$  и заданного вектора  $k_n$  падающих нейтронов уравнение (4.73) задает в  $k'_n$ -пространстве поверхность  $S_j$ . Три поверхности  $S_1, S_2, S_3$  обычно пересекают друг друга, и важно уметь правильно относить острые пики нейтронов к соответствующим ветвям колебаний. Это можно сделать, измеряя интенсивность по поверхности рассеяния, которая пропорциональна величине

$$\frac{\left( (\mathbf{k}_n - \mathbf{k}'_n), \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{K}_s) \right)^2}{\omega_j^2(\mathbf{K})}, \quad (4.75)$$

где  $\boldsymbol{\zeta}$  — вектор поляризации колебания, введенный в (4.36). Для поперечных колебаний интенсивность рассеяния ослабляется, когда  $(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}'_n)$  параллелен вектору  $\mathbf{K}$ , так как при этом  $\left( \mathbf{k}_n, \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{K}_s) \right) = 0$ , а для продольных колебаний в этом случае интенсивность рассеяния усиливается.

В эксперименте наблюдается распределение рассеянных электронов под определенным углом по отношению к направлению падающего пучка. Направление наблюдения определяет направление вектора  $\mathbf{k}'_n$  рассеянных нейтронов. В сочетании с известными значениями энергий падающих и рассеянных нейтронов определяются частота и волновой вектор колебания, с которым произошло взаимодействие.

### Задачи

4.1. Замкнув цепочку из  $N$  одинаковых атомов в кольцо, подсчитать число различных бегущих волн для случаев продольных колебаний (считать, что смещения атомов происходят вдоль цепочки).

4.2. Получить выражения для групповой и фазовой скорости продольных фононов линейной монокристаллической цепочки. Построить графики полученных зависимостей.

4.3. Найти закон дисперсии  $\omega(K)$  для линейной цепочки с базисом из атомов одинаковой массы. Построить график полученной зависимости.

4.4. При какой частоте колебаний сдвиг фаз между двумя атомами в одномерной монокристаллической цепочке, находящимися на расстоянии  $8a$ , составит  $\pi/2$ , если  $a = 2 \text{ \AA}$ , а скорость звука  $5000 \text{ м/с}$ ?

4.5. Учитывая, что  $L_i = L \cdot a_i$ , доказать тождество

$$\frac{1}{L} \sum_i \exp(iKl) = \begin{cases} 1, & \text{если } \mathbf{K} = 0, \mathbf{G}, \\ 0, & \text{если } \mathbf{K} \neq 0, \mathbf{G}, \end{cases}$$

где  $\mathbf{G}$  — целый вектор обратной решетки. *Указание:* выполнить суммирование для геометрической прогрессии, раскрыв неопределенность  $0/0$ .

4.6. Доказать, что для динамической матрицы выполняется  $\sum_{\nu'} D_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(K=0) = 0$ .