УДК 534.1
ББК В 312

В. Е. Холодовский, А. А. Сидоров
г. Брянск, Россия

Динамическая модель и дисперсионные соотношения для бинарных кубических решеток типа CsCl

Получено уравнение динамики бинарных кристаллических решеток, имеющих структуру типа CsCl. При этом учитывались силы взаимодействия центрального и нецентрального характера между атомами, расположенными относительно друг друга на первой и второй координационных сферах. Рассчитана динамическая матрица и получены дисперсионные соотношения для основных направлений и поляризаций. В случае длинных волн было обнаружено согласование с аналогичными результатами теории упругости и найдены выражения для силовых коэффициентов динамической модели через упругие константы.

Ключевые слова: уравнение динамики, линейные операторы, собственные векторы, собственные числа, частота, направление поляризации, волновой вектор, дисперсионные соотношения, упругие константы.

V. Ye. Kholodovsky, A. A. Sidorov
Bryansk, Russia

A Dynamic Model and the Dispersion Relations for Binary Cubic Lattice of the CsCl Type

The equation of the dynamics of binary crystal lattices with the CsCl type structure is obtained in the article. At the same time the authors take into account the interaction forces of the central and noncentral character between atoms located relatively to each other on the first and second coordination spheres. The dynamic matrix is calculated and the dispersion relations for the basic directions and polarizations are obtained. In the case of the presence of long waves a complete agreement with the analogous relations of elasticity theory was found and expressions for the force constants of the dynamic model in terms of elastic constants are obtained..

Keywords: dynamic equation, linear operators, eigenvectors, eigenvalues, frequency, direction of polarization, wave vector, dispersion relations, elastic constants.

Настоящая работа продолжает исследования динамики кубических кристаллических решеток применительно к бинарным соединениям со структурой типа CsCl. Ранее, в работах [3–6] рассматривались моноатомные ОЦК и ГЦК решетки и были получены результаты, имеющие хорошее согласие с экспериментом. Было показано, что колебания атомов решеток указанного типа вызваны наличием близкодействующих Ван-дер-ваальсовских сил центрального и нецентрального характера. Дальнодействующие же кулоновские силы в адиабатическом приближении для каждого атома компенсируются силой реакции внутриатомного диполя на его излучение. В настоящей работе при составлении уравнения динамики также учитываются лишь близкодействующие силы, возникающие между атомами, расположенными друг относительно друга на первой и второй координационных сферах.

1. Уравнение динамики ОЦК решетки с базисом. Рассмотрим бинарную ОЦК кристаллическую решетку. Такая решетка может быть получена путем наложения двух простых кубических подрешеток, когда центры кубических ячеек первой подрешетки совмещаются с соответствующими узлами второй. Пусть каждая из подрешеток имеет форму куба, ребра которого содержат n атомов. Тогда $N = n^3$ – число атомов в каждой из подрешеток.

Обозначим через a – параметр решетки, а через μ_1 и μ_2 массы атомов, образующих первую и соответственно вторую подрешетки кристалла. Выберем в пространстве систему кристаллографических координат $Oxyz$ с единичными направляющими векторами $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ координатных осей так, чтобы радиус-вектор каждого узла $P = P^1_{ijk}$ первой подрешетки мог быть задан по формуле:

$$\mathbf{r}^1_{ijk} = a(i\mathbf{e}_x + j\mathbf{e}_y + k\mathbf{e}_z). \tag{1.1}$$

Тогда радиус-вектор каждого узла $P = P^2_{ijk}$ второй подрешетки определится в виде

$$\mathbf{r}^2_{ijk} = a((i+1/2)\mathbf{e}_x + (j+1/2)\mathbf{e}_y + (k+1/2)\mathbf{e}_z), \tag{1.2}$$

где $i, j, k = 1, ..., n$ (т.е. i, j, k - некоторый набор чисел из $\{1, ..., n\}$).

Пусть Λ – множество всех числовых наборов (i, j, k), в которых $i, j, k = 1, ..., n$. Для любого $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$ обозначим через A^1_ξ и A^2_ξ атомы первой и второй подрешеток, положения равновесий которых находятся в узлах $P^1_\xi = P^1_{ijk}$ и $P^2_\xi = P^2_{ijk}$ соответственно. Обозначим, далее, через $S^1_l(\xi)$ и $S^2_l(\xi)$ - множества всех мультииндексов $\xi' \in \Lambda$, нумерующих атомы, находящиеся на l-той координационной сфере атомов A^1_ξ и A^2_ξ. Непосредственной проверкой нетрудно убедиться в том, что для любого $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$ справедливы равенства:

$$S^1_1(\xi) = \{(i-1, j-1, k-1), (i-1, j-1, k), (i-1, j, k-1), (i-1, j, k), (i, j-1, k-1),$$
$$(i, j-1, k), (i, j, k-1), (i, j, k)\},$$

$$S^2_1(\xi) = \{(i, j, k), (i, j+1, k), (i, j, k+1), (i, j+1, k+1), (i+1, j, k),$$
$$(i+1, j, k+1), (i+1, j+1, k), (i+1, j+1, k+1)\},$$

$$S^1_2(\xi) = S^2_2(\xi) = \{(i-1, j, k), (i+1, j, k), (i, j-1, k), (i, j+1, k), (i, j, k-1), (i, j, k+1)\}.$$

Для произвольного $\xi' = (i', j', k') \in S^1_1(\xi)$ обозначим через $\mathbf{e}^1_{\xi\xi'}$ единичный вектор, указывающий направление от узла P^1_ξ к узлу $P^2_{\xi'}$. Полагая $\epsilon^1_{ii'} = 2(i'-i)+1$, $\epsilon^1_{jj'} = 2(j'-j)+1$, $\epsilon^1_{kk'} = 2(k'-k)+1$, приходим к равенству

$$\mathbf{e}^1_{\xi\xi'} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\epsilon^1_{\mathbf{ii'}}\mathbf{e}_x + \epsilon^1_{\mathbf{jj'}}\mathbf{e}_y + \epsilon^1_{\mathbf{kk'}}\mathbf{e}_z). \tag{1.3}$$

Аналогично, если $\xi' = (i', j', k') \in S^2_1(\xi)$, то обозначим через $\mathbf{e}^2_{\xi\xi'}$ единичный вектор, указывающий направление от узла P^2_ξ к узлу $P^1_{\xi'}$. Полагая $\epsilon^2_{ii'} = 2(i'-i)-1$, $\epsilon^2_{jj'} = 2(j'-j)-1$, $\epsilon^2_{kk'} = 2(k'-k)-1$, получаем

$$\mathbf{e}^2_{\xi\xi'} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\epsilon^2_{\mathbf{ii'}}\mathbf{e}_x + \epsilon^2_{\mathbf{jj'}}\mathbf{e}_y + \epsilon^2_{\mathbf{kk'}}\mathbf{e}_z). \tag{1.4}$$

В случае, когда $\xi' = (i', j', k') \in S^1_2(\xi)$ (или $\xi' = (i', j', k') \in S^2_2(\xi)$) единичный вектор, указывающий направление от узла P^1_ξ к узлу $P^1_{\xi'}$ (или от узла P^2_ξ к узлу $P^2_{\xi'}$) обозначим через $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$. Полагая в этом случае $\epsilon_{ii'} = i' - i$, $\epsilon_{jj'} = j' - j$, $\epsilon_{kk'} = k' - k$, приходим к равенству

$$\mathbf{e}_{\xi\xi'} = \epsilon_{ii'}\mathbf{e}_x + \epsilon_{jj'}\mathbf{e}_y + \epsilon_{kk'}\mathbf{e}_z. \tag{1.5}$$

Обозначим, наконец, через $\mathbf{u}^1_\xi(t)$ вектор смещения атома A^1_ξ из положения равновесия в момент времени t; аналогично определим вектор $\mathbf{u}^2_\xi(t)$.

Пусть A_ξ – атом первой или второй подрешетки, а $A_{\xi'}$ – какой-либо из соседей атома A_ξ. Обозначим (опуская пока верхние индексы) через $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$ – единичный вектор, указывающий направление от узла P_ξ к узлу $P_{\xi'}$, а через $\mathbf{w}_{\xi\xi'} = \mathbf{u}_{\xi'} - \mathbf{u}_\xi$ – вектор относительного перемещения атомов A_ξ и $A_{\xi'}$. Пусть $\mathbf{r}_{\xi\xi'}$ и $\boldsymbol{\tau}_{\xi\xi'}$ – радиальная и тангенциальная составляющие вектора $\mathbf{w}_{\xi\xi'}$, вычисляемые по формулам: $\mathbf{r}_{\xi\xi'} = \langle\mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'}\rangle\,\mathbf{e}_{\xi\xi'}$, $\boldsymbol{\tau}_{\xi\xi'} = \mathbf{w}_{\xi\xi'} - \mathbf{r}_{\xi\xi'}$, где в скобках обозначено скалярное произведение векторов $\mathbf{w}_{\xi\xi'}$ и $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$.

На атом A_ξ со стороны атома $A_{\xi'}$ действует сила $\mathbf{F}_{\xi\xi'}$, которую мы будем считать линейно зависящей от вектора $\mathbf{w}_{\xi\xi'}$ согласно формулам: $\mathbf{F}_{\xi\xi'} = \sigma_{1r}\mathbf{r}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\boldsymbol{\tau}_{\xi\xi'} = (\sigma_{1r} - \sigma_{1t})\left\langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \right\rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{w}_{\xi\xi'}$, если $\xi' \in S_1(\xi)$; $\mathbf{F}_{\xi\xi'} = \sigma_{2r}\mathbf{r}_{\xi\xi'} = \sigma_{2r}\left\langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \right\rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}$, если $\xi' \in S_2(\xi)$, где σ_{1r}, σ_{1t}, σ_{2r} – некоторые константы, определяемые свойствами кристалла. Ограничиваясь рассмотрением взаимодействий лишь между атомами, лежащими относительно друг друга на первой и второй координационных сферах, мы можем теперь записать уравнение движения атома A_ξ. Обозначив через μ его массу, согласно второму закону Ньютона, после несложных преобразований приходим к уравнению

$$\mu\ddot{\mathbf{u}}_\xi = -\sigma_0\mathbf{u}_\xi + \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} \left\{ (\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \left\langle \mathbf{u}_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \right\rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{u}_{\xi'} \right\} + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} \sigma_{2r} \left\langle \mathbf{u}_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \right\rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'},$$

где $\sigma_0 = \frac{8}{3}(\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) + 2\sigma_{2r}$. Разделяя теперь атомы кристалла по подрешеткам, полученное уравнение можно записать в виде системы, описывающей колебания каждой подрешетки:

$$\mu_1\ddot{\mathbf{u}}^1_\xi = -\sigma_0\mathbf{u}^1_\xi + \sum_{\xi' \in S^1_1(\xi)} \left\{ (\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \left\langle \mathbf{u}^2_{\xi'}, \mathbf{e}^1_{\xi\xi'} \right\rangle \mathbf{e}^1_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{u}^2_{\xi'} \right\} + \sum_{\xi' \in S^1_2(\xi)} \sigma_{2r} \left\langle \mathbf{u}^1_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \right\rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'},$$

$$\mu_2\ddot{\mathbf{u}}^2_\xi = -\sigma_0\mathbf{u}^2_\xi + \sum_{\xi' \in S^2_1(\xi)} \left\{ (\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \left\langle \mathbf{u}^1_{\xi'}, \mathbf{e}^2_{\xi\xi'} \right\rangle \mathbf{e}^2_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{u}^1_{\xi'} \right\} + \sum_{\xi' \in S^2_2(\xi)} \sigma_{2r} \left\langle \mathbf{u}^2_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \right\rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}. \tag{1.6}$$

Запишем систему (1.6) в проекции на ось Ox. Проекции на другие координатные оси могут быть получены перестановкой индексов. Вводя сокращенные обозначения $\sigma_1 = (\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t})/3$, $\sigma_2 = (\sigma_{1r} - \sigma_{1t})/3$, приходим к системе:

$$\mu_1\ddot{u}^1_{\xi,x} = -\sigma_0 u^1_{\xi,x} + \sigma_1 \sum_{\xi' \in S^1_1(\xi)} u^2_{\xi',x} + \sigma_2 \sum_{\xi' \in S^1_1(\xi)} \epsilon^1_{ii}(\epsilon^1_{jj'}u^2_{\xi',y} + \epsilon^1_{kk'}u^2_{\xi',z}) + \sigma_{2r}(u^1_{i-1jk,x} + u^1_{i+1jk,x}),$$

$$\mu_2\ddot{u}^2_{\xi,x} = -\sigma_0 u^2_{\xi,x} + \sigma_1 \sum_{\xi' \in S^2_1(\xi)} u^1_{\xi',x} + \sigma_2 \sum_{\xi' \in S^2_1(\xi)} \epsilon^2_{ii}(\epsilon^2_{jj'}u^1_{\xi',y} + \epsilon^2_{kk'}u^1_{\xi',z}) + \sigma_{2r}(u^2_{i-1jk,x} + u^2_{i+1jk,x}). \tag{1.7}$$

Для проведения дальнейших исследований нам потребуется использовать векторно-операторную форму записи системы (1.7). С этой целью рассмотрим евклидово пространство $\mathbf{R}^N$, где, как и выше, $N = n^3$. Векторы $\mathbf{r} \in \mathbf{R}^N$ будем представлять как наборы чисел $\mathbf{r} = (r_\xi) = (r_{ijk})$, занумерованные посредством мультииндексов $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$, с покоординатными операциями сложения, умножения на число и скалярного произведения. Тогда наборы $(u^1_{\xi,x})$, $(u^2_{\xi,x})$ и др. можно рассматривать как вектор-функции $\mathbf{u}^1_x$, $\mathbf{u}^2_x$ переменного t со значениями в $\mathbf{R}^N$. Для преобразования системы (1.7) к векторной форме в ее левых частях мы должны записать векторы $\mu_1\ddot{\mathbf{u}}^1_x$ и $\mu_2\ddot{\mathbf{u}}^2_x$, тогда как правые части будут представлять собой некоторые линейные операции над векторами $\mathbf{u}^1_x$, $\mathbf{u}^2_x$, $\mathbf{u}^2_y$, $\mathbf{u}^2_z$ и $\mathbf{u}^2_x$, $\mathbf{u}^1_x$, $\mathbf{u}^1_y$, $\mathbf{u}^1_z$ соответственно. Заметим, что последние слагаемые в системе (1.7) представляют одну и ту же линейную операцию над векторами $\mathbf{u}^1_x$ и $\mathbf{u}^2_x$. Отсюда в векторно-операторной форме уравнения (1.7) примут вид

$$\mu_1\ddot{\mathbf{u}}^1_x = -\sigma_0\mathbf{u}^1_x + \sigma_1\hat{A}^1\mathbf{u}^2_x + \sigma_2(\hat{B}^1_z\mathbf{u}^2_y + \hat{B}^1_y\mathbf{u}^2_z) + \sigma_{2r}\hat{D}_x\mathbf{u}^1_x,$$

$$\mu_2\ddot{\mathbf{u}}^2_x = -\sigma_0\mathbf{u}^2_x + \sigma_1\hat{A}^2\mathbf{u}^1_x + \sigma_2(\hat{B}^2_z\mathbf{u}^1_y + \hat{B}^2_y\mathbf{u}^1_z) + \sigma_{2r}\hat{D}_x\mathbf{u}^2_x, \tag{1.8}$$

где $\hat{A}^{1,2}$, $\hat{B}^{1,2}_{x,y,z}$, $\hat{D}_{x,y,z}$ – некоторые линейные операторы в $\mathbf{R}^N$. Применяя круговую перестановку для нижних индексов, мы можем получить векторно-операторное представление системы (1.6) в проекциях на другие координатные оси. Полученную в результате систему из шести уравнений можно рассматривать как систему из двух дифференциальных уравнений в пространстве $\mathbf{R}^{3N}$, где неизвестными являются вектор-функции $\mathbf{u}^\nu = (\mathbf{u}_x^\nu, \mathbf{u}_y^\nu, \mathbf{u}_z^\nu)$, $\nu = 1, 2$, а правые части содержат матричные операторы, определяемые равенствами:

$$\widetilde{D} = \begin{pmatrix} \hat{D}_x & 0 & 0 \\ 0 & \hat{D}_y & 0 \\ 0 & 0 & \hat{D}_z \end{pmatrix}, \qquad \widetilde{A}^\nu = \begin{pmatrix} \hat{A}^\nu & 0 & 0 \\ 0 & \hat{A}^\nu & 0 \\ 0 & 0 & \hat{A}^\nu \end{pmatrix}, \tag{1.9}$$

$$\widetilde{B}^\nu = \begin{pmatrix} 0 & \hat{B}_z^\nu & \hat{B}_y^\nu \\ \hat{B}_z^\nu & 0 & \hat{B}_x^\nu \\ \hat{B}_y^\nu & \hat{B}_x^\nu & 0 \end{pmatrix}, \qquad \nu = 1, 2. \tag{1.10}$$

Используя введенные обозначения, такую систему мы можем переписать в компактной форме:

$$\ddot{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} \ddot{\mathbf{u}}^1 \\ \ddot{\mathbf{u}}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mu_1}(-\sigma_0 \widetilde{E} + \sigma_{2r}\widetilde{D}) & \frac{1}{\mu_1}(\sigma_1 \widetilde{A}^1 + \sigma_2 \widetilde{B}^1) \\ \frac{1}{\mu_2}(\sigma_1 \widetilde{A}^2 + \sigma_2 \widetilde{B}^2) & \frac{1}{\mu_2}(-\sigma_0 \widetilde{E} + \sigma_{2r}\widetilde{D}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^1 \\ \mathbf{u}^2 \end{pmatrix} = \bar{L}\mathbf{u}, \tag{1.11}$$

где $\widetilde{E}$ – тождественный оператор в пространстве $\mathbf{R}^{3N}$.

Согласно общим принципам теории линейных дифференциальных уравнений, фундаментальную систему решений уравнения (1.11) образуют вектор-функции вида $\mathbf{u}(t) = \varphi(t)\mathbf{w}$, где $\mathbf{w}$ - некоторый собственный вектор оператора $\bar{L}$. Если собственное значение вектора $\mathbf{w}$ обозначить через $-\omega^2$, то, как нетрудно видеть, временной множитель $\varphi(t)$ будет являться решением уравнения $\ddot{\varphi}+\omega^2\varphi = 0$ гармонического осциллятора. Найдя все собственные значения и соответствующие им собственные векторы оператора $\bar{L}$, мы можем построить фундаментальную систему решений уравнения (1.11).

Таким образом, решение задачи о колебаниях решетки, в частности, о ее фононном спектре сводится к решению уравнения

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\mu_1}(-\sigma_0 \widetilde{E} + \sigma_{2r}\widetilde{D}) & \frac{1}{\mu_1}(\sigma_1 \widetilde{A}^1 + \sigma_2 \widetilde{B}^1) \\ \frac{1}{\mu_2}(\sigma_1 \widetilde{A}^2 + \sigma_2 \widetilde{B}^2) & \frac{1}{\mu_2}(-\sigma_0 \widetilde{E} + \sigma_{2r}\widetilde{D}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{w}^1 \\ \mathbf{w}^2 \end{pmatrix} = -\omega^2 \begin{pmatrix} \mathbf{w}^1 \\ \mathbf{w}^2 \end{pmatrix}. \tag{1.12}$$

2. Построение общего решения уравнения динамики. Рассмотрим n-мерное евклидово пространство $\mathbf{R}^n$, и пусть $(\delta_{pp'})$ - матрица, представляющая тождественный оператор в $\mathbf{R}^n$. Обозначим через $(\delta^1_{pp'})$ и $(\delta^2_{pp'})$ матрицы, коэффициенты которых вычисляются по формулам:

$$\delta^1_{pp'} = \begin{cases} \delta_{p-1p'}, & p = 2, ..., n;\ p' = 1, ..., n \\ \delta_{np'}, & p = 1; \quad\quad p' = 1, ..., n \end{cases},$$

$$\delta^2_{pp'} = \begin{cases} \delta_{p+1p'}, & p = 1, ..., n-1;\ p' = 1, ..., n \\ \delta_{1p'}, & p = n; \quad\quad p' = 1, ..., n \end{cases}.$$

Положим $(\Delta_{pp'}) = (\delta^1_{pp'} + \delta^2_{pp'})$, $(\Delta^{1+}_{pp'}) = (\delta^1_{pp'} + \delta_{pp'})$, $(\Delta^{1-}_{pp'}) = (\delta^1_{pp'} - \delta_{pp'})$, $(\Delta^{2+}_{pp'}) = (\delta^2_{pp'} + \delta_{pp'})$, $(\Delta^{2-}_{pp'}) = (\delta^2_{pp'} - \delta_{pp'})$.

Операция умножения определенных выше матриц на вектор $\mathbf{v} = (v_{p'}) \in \mathbf{R}^n$, $p' = 1, ..., n$ приводит к равенствам:

$$(\Delta^{1\pm}_{pp'})(v_{p'}) = (v_{p-1} \pm v_p), \qquad (\Delta^{2\pm}_{pp'})(v_{p'}) = (v_{p+1} \pm v_p), \qquad (\Delta_{pp'})(v_{p'}) = (v_{p-1} + v_{p+1}),$$

причем выполняются условия цикличности: $v_0 = v_n$, $v_{n+1} = v_1$.

Обозначим через $(\Delta^{1+}_{ii'})(\Delta^{1+}_{jj'})(\Delta^{1+}_{kk'})$ и $(\Delta^{1-}_{ii'})(\Delta^{1-}_{jj'})(\Delta^{1+}_{kk'})$ – линейные операторы в $\mathbf{R}^N$, действие которых на вектор $\mathbf{r} = (r_{\xi'}) \in \mathbf{R}^N$ сводится к последовательному умножению составляющих их матриц на данный вектор по соответствующему штрихованному индексу. Непосредственным вычислением нетрудно показать, что операторы $\hat{A}^\nu$, $\hat{B}^\nu_z$, $\hat{D}_x$ представляются в виде

$$\hat{A}^\nu = (\Delta^{\nu+}_{ii'})(\Delta^{\nu+}_{jj'})(\Delta^{\nu+}_{kk'}), \qquad \hat{B}^\nu_z = (\Delta^{\nu-}_{ii'})(\Delta^{\nu-}_{jj'})(\Delta^{\nu+}_{kk'}), \qquad \nu = 1, 2,$$
$$\hat{D}_x = (\Delta_{ii'})(\delta_{jj'})(\delta_{kk'}). \tag{2.1}$$

Формулы, представляющие остальные операторы $\hat{B}^{\nu}_{x,y}$, $\hat{D}_{y,z}$, получаются из (2.1) путем перестановки индексов. Обозначим через $\hat{I}$ линейный оператор в пространстве $\mathbf{R}^N$, заданный по формуле

$$\hat{I} = (\delta_{n-i+1i'})(\delta_{n-j+1j'})(\delta_{n-k+1k'}) = (\delta_{in-i'+1})(\delta_{jn-j'+1})(\delta_{kn-k'+1}),$$

при этом оператор $\hat{I}$ совпадает со своим обратным. Нетрудно убедиться в справедливости следующих перестановочных соотношений

$$\hat{I}\hat{A}^1 = \hat{A}^2\hat{I}, \qquad \hat{I}\hat{B}^1_{x,y,z} = \hat{B}^2_{x,y,z}\hat{I}, \qquad \hat{D}_{x,y,z}\hat{I} = \hat{I}\hat{D}_{x,y,z} \tag{2.2}$$

соответственно для x, y, и z. Из равенств (1.9), (1.10), (2.2) следует

$$\widetilde{A}^2\widetilde{I} = \widetilde{I}\widetilde{A}^1, \qquad \widetilde{B}^2\widetilde{I} = \widetilde{I}\widetilde{B}^1, \qquad \widetilde{D}\widetilde{I} = \widetilde{I}\widetilde{D}, \tag{2.3}$$

где

$$\widetilde{I} = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 & 0 \\ 0 & \hat{I} & 0 \\ 0 & 0 & \hat{I} \end{pmatrix},$$

$\widetilde{I}$ – линейный оператор в пространстве $\mathbf{R}^{3N}$.

Полагая в уравнении (1.12) $\mathbf{w}^1 = \mathbf{r} = \widetilde{I}\widetilde{I}\mathbf{r}$, $\mathbf{w}^2 = \widetilde{I}\mathbf{s}$, $\widetilde{A} = \widetilde{A}^1\widetilde{I}$, $\widetilde{B} = \widetilde{B}^1\widetilde{I}$, с учетом (2.3) получим систему уравнений

$$(\sigma_0\widetilde{E} - \sigma_{2r}\widetilde{D})\mathbf{r} - (\sigma_1\widetilde{A} + \sigma_2\widetilde{B})\mathbf{s} = \mu_1\omega^2\mathbf{r},$$

$$-(\sigma_1\widetilde{A} + \sigma_2\widetilde{B})\mathbf{r} + (\sigma_0\widetilde{E} - \sigma_{2r}\widetilde{D})\mathbf{s} = \mu_2\omega^2\mathbf{s}, \tag{2.4}$$

при этом компоненты операторов $\widetilde{A}$ и $\widetilde{B}$ имеют вид

$$\hat{A} = \hat{A}^1\hat{I}, \qquad \hat{B}_x = \hat{B}^1_x\hat{I}, \qquad \hat{B}_y = \hat{B}^1_y\hat{I}, \qquad \hat{B}_z = \hat{B}^1_z\hat{I}. \tag{2.5}$$

Обозначим через $\mathbf{s}_{hlm}$ и $\mathbf{c}_{hlm}$ векторы в пространстве $\mathbf{R}^N$ вида

$$\mathbf{s}_{hlm} = (\sin(\varphi_{h,i'} + \varphi_{l,j'} + \varphi_{m,k'})), \qquad \mathbf{c}_{hlm} = (\cos(\varphi_{h,i'} + \varphi_{l,j'} + \varphi_{m,k'})), \qquad (i', j', k') \in \Lambda,$$

где h, l, k - некоторый набор целых чисел,

$$\varphi_{p,q} = \frac{\pi p(4q-3)}{2n}.$$

Отсюда, действуя операторами (2.5) на векторы $\mathbf{s}_{hlm}$ и $\mathbf{c}_{hlm}$, получим

$$\hat{A}\mathbf{s}_{hlm} = -8c_hc_lc_m\mathbf{s}_{hlm}, \qquad \hat{B}_x\mathbf{s}_{hlm} = 8c_ls_ls_m\mathbf{s}_{hlm}, \qquad \hat{D}_x\mathbf{s}_{hlm} = 2c_{2h}\mathbf{s}_{hlm},$$

$$\hat{A}\mathbf{c}_{hlm} = -8c_hc_lc_m\mathbf{c}_{hlm}, \qquad \hat{B}_x\mathbf{c}_{hlm} = 8c_hs_ls_m\mathbf{c}_{hlm}, \qquad \hat{D}_x\mathbf{c}_{hlm} = 2c_{2h}\mathbf{c}_{hlm}, \tag{2.6}$$

где $c_p = \cos\frac{\pi p}{n}$, $s_p = \sin\frac{\pi p}{n}$. Равенства для других операторов получаются путем перестановки индексов.

Полагая

$$\mathbf{r} = (x_1\mathbf{s}_{hlm}, x_2\mathbf{s}_{hlm}, x_3\mathbf{s}_{hlm}) = \mathbf{x}\mathbf{s}_{hlm}, \qquad \mathbf{s} = \mathbf{y}\mathbf{s}_{hlm}, \tag{2.7}$$

где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3) \in \mathbf{R}^3$, и действуя операторами $\widetilde{A}, \widetilde{B}, \widetilde{D}$ на векторы (2.7), с учетом (2.6) приведем систему (2.4) к виду

$$(a_x - \mu_1\omega^2)x_1 + by_1 + b_zy_2 + b_yy_3 = 0, \qquad (a_y - \mu_1\omega^2)x_2 + b_zy_1 + by_2 + b_xy_3 = 0,$$

$$(a_z - \mu_1\omega^2)x_3 + b_yy_1 + b_xy_2 + by_3 = 0, \qquad bx_1 + b_zx_2 + b_yx_3 + (a_x - \mu_2\omega^2)y_1 = 0,$$

$$b_zx_1 + bx_2 + b_xx_3 + (a_y - \mu_2\omega^2)y_2 = 0,$$

$$b_y x_1 + b_x x_2 + b x_3 + (a_z - \mu_2\omega^2) y_3 = 0, \tag{2.8}$$

где

$$a_x = \sigma_0 - 2\sigma_{2r}c_{2h} = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}s_h^2, \quad a_y = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}s_l^2, \quad a_z = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}s_m^2,$$

$$b = 8\sigma_1 c_h c_l c_m, \quad b_x = -8\sigma_2 c_h s_l s_m, \quad b_y = -8\sigma_2 s_h c_l s_m, \quad b_z = -8\sigma_2 s_h s_l c_m. \tag{2.9}$$

Очевидно, мы получим ту же самую систему, если положим $\mathbf{r} = \mathbf{x}\mathbf{c}_{hlm}$, $\mathbf{s} = \mathbf{y}\mathbf{c}_{hlm}$.

Полагая $\lambda = \omega^2$ и приравнивая определитель Δ системы (2.8) к нулю, получим ее характеристическое уравнение:

$$\Delta = 0, \tag{2.10}$$

где

$$\Delta = p_x p_y p_z + (d_x^2 - b_x^2 p_x) q_{yz} + (d_y^2 - b_y^2 p_y) q_{zx} + (d_z^2 - b_z^2 p_z) q_{xy} +$$

$$+ (c_x^2 - b^2 p_y) p_x + (c_y^2 - b^2 p_z) p_y + (c_z^2 - b^2 p_x) p_z - d^2,$$

$$p_x(\lambda) = \mu_1\mu_2\lambda^2 - (\mu_1 + \mu_2) a_x \lambda + a_x^2, \qquad q_{xy}(\lambda) = 2\mu_1\mu_2\lambda^2 - (\mu_1 + \mu_2)(a_x + a_y)\lambda + 2a_x a_y,$$

аналогично определяются квадратные трехчлены $p_y(\lambda)$, $p_z(\lambda)$, $p_{yz}(\lambda)$, $p_{zx}(\lambda)$,

$$d = b^3 + 2b_x b_y b_z - b(b_x^2 + b_y^2 + b_z^2), \qquad d_x = b b_x - b_y b_z, \qquad c_x = b^2 - b_x^2,$$

коэффициенты d_y, d_z, c_y, c_z получаются из приведенных выше путем круговой перестановки индексов.

Решение характеристического уравнения (2.10) и системы (2.8) для всех допустимых значений коэффициентов (2.9), определяемых набором индексов hlm, позволяет найти частоту ω каждого из возможных колебаний атомов кристалла и направления векторов $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$. При этом сами колебания каждой из подрешеток представляются как стоячие волны вида

$$\mathbf{u}^1(t) = \mathbf{x}\sin(\omega t + \varphi)\mathbf{s}_{hlm}, \qquad \mathbf{u}^2(t) = \mathbf{y}\sin(\omega t + \varphi)\mathbf{s}_{hlm}$$

или вида

$$\mathbf{u}^1(t) = \mathbf{x}\sin(\omega t + \psi)\mathbf{c}_{hlm}, \qquad \mathbf{u}^2(t) = \mathbf{y}\sin(\omega t + \psi)\mathbf{c}_{hlm},$$

а векторы $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ указывают направление поляризации при колебаниях первой и второй подрешеток соответственно.

3. Дисперсионные соотношения и принцип длинных волн. Как уже говорилось выше, одна колебательная мода кристалла представляет собой наложение четырех стоячих волн, имеющих одну и ту же частоту и направление векторов поляризации. Оказывается, что она является также наложением четырех колебаний представляющих бегущие волны вида:

$$\mathbf{u}_\xi^1(t) = \mathbf{x}\sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi^1 \pm \omega t), \qquad \mathbf{u}_\xi^2(t) = \mathbf{y}\sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi^2 \pm \omega t),$$

$$\mathbf{u}_\xi^1(t) = \mathbf{x}\cos(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi^1 \pm \omega t), \qquad \mathbf{u}_\xi^2(t) = \mathbf{y}\cos(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi^2 \pm \omega t),$$

где $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$, $\mathbf{r}_\xi^1$, $\mathbf{r}_\xi^2$ – векторы, определяемые формулами (1.1), (1.2), $\mathbf{K}$ – волновой вектор, который в условиях цикличности границ Борна–Кармана [1] должен иметь вид

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{na}(h\mathbf{e}_x + l\mathbf{e}_y + m\mathbf{e}_z), \qquad h, k, l = 0, ..., n-1. \tag{3.1}$$

Будем искать решение системы (2.8) в случае, когда направление волнового вектора совпадает с одним из основных кристаллографических направлений. К таким направлениям относятся: направление $\{100\}$:

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi h}{na}\mathbf{e}_x, \qquad l = m = 0, \qquad K = |\mathbf{K}| = \frac{2\pi h}{na}, \qquad \frac{\pi h}{n} = \frac{Ka}{2}; \tag{3.2}$$

направление $\{110\}$:

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi h}{na}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad h = l, \quad m = 0, \quad K = \frac{2\pi h\sqrt{2}}{na}, \quad \frac{\pi h}{n} = \frac{Ka}{2\sqrt{2}}; \tag{3.3}$$

направление $\{111\}$:

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi h}{na}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z), \quad h = l = m, \quad K = \frac{2\pi h\sqrt{3}}{na}, \quad \frac{\pi h}{n} = \frac{Ka}{2\sqrt{3}}. \tag{3.4}$$

Рассмотрим направление $\{100\}$. Из формул (2.9) с учетом (3.2) следуют равенства

$$a_x = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}\sin^2\frac{Ka}{2}, \qquad a_y = a_z = 8\sigma_1, \qquad b = 8\sigma_1\cos\frac{Ka}{2},$$

$$b_x = b_y = b_z = 0.$$

В этом случае система (2.8) распадается на три независимые подсистемы, первая из которых описывает продольные, а две остальные – поперечные колебания. При этом вторая и третья подсистемы совпадают. Для вычисления соответствующих частот, решая характеристические уравнения подсистем, получаем

$$\omega^2 = \frac{a_x(\mu_1 + \mu_2)}{2\mu_1\mu_2}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1\mu_2(a_x^2 - b^2)}{(\mu_1 + \mu_2)^2 a_x^2}}\right], \tag{3.5}$$

$$\omega^2 = \frac{a_y(\mu_1 + \mu_2)}{2\mu_1\mu_2}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1\mu_2(a_y^2 - b^2)}{(\mu_1 + \mu_2)^2 a_y^2}}\right]. \tag{3.6}$$

Равенства (3.5) и (3.6) представляют собой дисперсионные соотношения для акустической (в скобках берется знак «минус») и оптической колебательных мод, имеющих соответственно продольную и поперечную поляризации.

Для направления $\{110\}$ справедливы равенства:

$$a_x = a_y = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}\sin^2\frac{Ka}{2\sqrt{2}}, \qquad a_z = 8\sigma_1, \qquad b = 8\sigma_1\cos^2\frac{Ka}{2\sqrt{2}},$$

$$b_x = b_y = 0, \qquad b_z = -8\sigma_2\sin^2\frac{Ka}{2\sqrt{2}}.$$

В этом случае система (2.8) распадается на три подсистемы для одной продольной и двух поперечных поляризаций.

В случае поперечных волн, поляризованных вдоль оси Oz, справедливы равенства: $x_1 = x_2 = y_1 = y_2 = 0$, а дисперсионное соотношение имеет вид

$$\omega^2 = \frac{a_z(\mu_1 + \mu_2)}{2\mu_1\mu_2}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1\mu_2(a_z^2 - b^2)}{(\mu_1 + \mu_2)^2 a_z^2}}\right]. \tag{3.7}$$

В случае продольных колебаний, решение характеристического уравнения получающейся системы дается формулой

$$\omega^2 = \frac{a_x(\mu_1 + \mu_2)}{2\mu_1\mu_2}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1\mu_2[a_x^2 - (b + b_z)^2]}{(\mu_1 + \mu_2)^2 a_x^2}}\right]. \tag{3.8}$$

Для поперечных колебаний, поляризованных перпендикулярно оси Oz, решение характеристического уравнения выражается в виде

$$\omega^2 = \frac{a_x(\mu_1 + \mu_2)}{2\mu_1\mu_2}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1\mu_2[a_x^2 - (b - b_z)^2]}{(\mu_1 + \mu_2)^2 a_x^2}}\right]. \tag{3.9}$$

Пусть теперь волновой вектор имеет направление $\{111\}$. Тогда справедливы равенства:

$$a_x = a_y = a_z = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}\sin^2\frac{Ka}{2\sqrt{3}}, \qquad b = 8\sigma_1\cos^3\frac{Ka}{2\sqrt{3}},$$

$$b_x = b_y = b_z = -8\sigma_2\cos\frac{Ka}{2\sqrt{3}}\sin^2\frac{Ka}{2\sqrt{3}}.$$

Если колебательная мода имеет продольную поляризацию, то $x_1 = x_2 = x_3$, $y_1 = y_2 = y_3$, а решение уравнения (2.10) дается формулой

$$\omega^2 = \frac{a_x(\mu_1 + \mu_2)}{2\mu_1\mu_2}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1\mu_2[a_x^2 - (b + 2b_x)^2]}{(\mu_1 + \mu_2)^2 a_x^2}}\right]. \tag{3.10}$$

В случае поперечной поляризации должны выполняться равенства $x_1+x_2+x_3 = 0$, $y_1+y_2+y_3 = 0$, означающие, что векторы $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ ортогональны направлению $\{111\}$. Тогда решение уравнения (2.10) выражается формулой

$$\omega^2 = \frac{a_x(\mu_1 + \mu_2)}{2\mu_1\mu_2}\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1\mu_2[a_x^2 - (b - b_x)^2]}{(\mu_1 + \mu_2)^2 a_x^2}}\right]. \tag{3.11}$$

Рассматривая соотношения (3.5)–(3.11) для акустических мод в случае длинных волн, когда справедливо неравенство $Ka << 1$, и сравнивая получающиеся уравнения с соответствующими дисперсионными соотношениями из теории упругости [2], получим семь уравнений, связывающих постоянные σ_1, σ_2, σ_{2r} с упругими константами. Оказалось, что эти уравнения не противоречат друг другу. Следовательно, построенная динамическая модель согласуется с выводами теории упругости. Выражая ее силовые коэффициенты через упругие константы C_{ij}, приходим к равенствам

$$\sigma_1 = \frac{a}{2}C_{44}, \qquad \sigma_2 = \frac{a}{4}(C_{12} + C_{44}), \qquad \sigma_{2r} = \frac{a}{2}(C_{11} - C_{44}).$$

Список литературы

1. Борн М., Хуан К. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Иностр. литература, 1958. 488 с.

2. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 792 с.

3. Холодовский В. Е., Мачихина И. О., Кульченков Е. А. Дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решеток в модели диполь-дипольных взаимодействий // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». 2009. Вып. 12. №10(143). С. 92–99.

4. Холодовский В. Е., Мачихина И. О., Кульченков Е.А. Принцип длинных волн и дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решеток в модели диполь-дипольных взаимодействий // Известия СамНЦ РАН. Серия «Физика и электроника». 2009. Том 11. №5(31). С. 49–55.

5. Холодовский В. Е. Мачихина И. О. Принцип длинных волн и фононные спектры кубических кристаллических решеток // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». 2009. Вып.1. №22. С. 109–116.

6. Холодовский В. Е., Мачихина И. О., Кульченков Е. А. Расчет теплоемкости и среднеквадратичных смещений по фононным спектрам для кристаллов с ОЦК и ГЦК решеткой // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». 2010. Вып.2. №9. С. 101–109.

Рукопись поступила в редакцию 14 апреля 2011 г.