УДК 534.1

ПРИНЦИП ДЛИННЫХ ВОЛН И ДИСПЕРСИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК В МОДЕЛИ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

© 2009 В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина

Брянский государственный университет

Поступила в редакцию 12.01.2009

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. Показано, что согласно принципу длинных волн, в предельном случае полученные уравнения переходят в известные уравнения теории упругости, что позволяет выразить силовые константы динамической модели через упругие константы вещества. Решение полученных уравнений позволило получить дисперсионные соотношения для ОЦК и ГЦК решеток без каких-либо свободных параметров. Произведенные расчеты дисперсионных кривых для Na и Al, показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

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

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.

Холодовский Владимир Евгеньевич, кандидат физикоматематических наук, доцент. E-mail: tfbgubry@mail.ru. Мачихина Инна Олеговна, аспирант. E-mail: ingibordit@yandex.ru.

Исходные предпосылки построения такой модели для металлов заключаются в следующем,

 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 аднабатическом 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 у равновешивает внешние силы, в том числе кулоновские, действующие на его остов со стороны остальных атомов решетки. Последнее предположение существенно упрощает построение динамической модели,

 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 у пругие константы рассматриваемого вещества,

Все указанные выше предпосылки позволили построить динамическую модель, в которой реализован принцип длинных волн и произведены расчеты дисперсионных кривых для ряда элементов 1 – 5 групп таблицы Д.И. Менделеева, без каких бы то ни было подгоночных параметров.

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 Л – какое-нибудь множество индексов, с помощью которого можно занумеровать все атомы решетки. Для каждого ζ ∈ Л обозначим через A_ξ соответствующий атом решетки, через Р_ξ узел, являющийся положением равновесия атома A_E, а через U_E смещение остова атома А_д из положения равновесия в некоторый момент времени t. Обозначим, далее, через $S_m(\xi)$ - множество индексов из Λ , нумерующих атомы решетки, находящиеся на m-ой координационной сфере атома A_{ξ} . Пусть $A_{\xi'}$ – атом, соседний с атомом Аг. Перемещение остовов атомов Ад и Ад' 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 относительно друга. Для атомов же, лежащих друг относительно друга на второй координационной сфере, изменением степени перекрытия их орбиталей при тангенциальном перемещении мы будем пренебрегать. Обозначим через е_{ξξ'} единичный направляющий вектор вектора $\mathcal{P}_{\xi} P_{\xi'}$, а через $w_{\xi\xi'} = u_{\xi'} - u_{\xi}$ – вектор относительного перемещения остовов атомов Аз

и $A_{\xi'}$. Пусть $r_{\xi\xi'} = e_{\xi\xi'} < e_{\xi\xi'}$, $w_{\xi'\xi} > -$ радиальная, а $\tau_{\xi\xi'} = w_{\xi} z - r_{\xi\xi'}$ – тангенциальная составляющие вектора $w_{\xi\xi} = -w_{\xi\xi'}$, где в скобках обозначено скалярное произведение векторов $e_{\xi\xi'}$ и $w_{\xi\xi'}$. Тогда плечо дипольного момента, $p_{\xi\xi'}$, наведенного в атоме A_{ξ} со стороны атома $A_{\xi'}$, лежащего на его первой и второй координационной сферах соответственно можно определить формулами

$$p_{\xi\xi'} = \kappa_{1r} r_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} \tau_{\xi\xi'} = \\ = (\kappa_{1r} - \kappa_{1t}) < e_{\xi\xi'}, w_{\xi\xi} > e_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} w_{\xi\xi}, \quad (1.1) \\ p_{\xi\xi'} = \kappa_{2r} < e_{\xi\xi'}, w_{\xi'\xi} > e_{\xi\xi'}, \quad (1.2)$$

где _{Klr}, K_{lr}, _{K2r} – 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

$$p_{\xi} = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} p_{\xi\xi'} + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} p_{\xi\xi'} \quad .(1.3)$$

Соответствующая сила, действующая на остов атома A_{ξ} , выражается формулой

$$D_{\xi} = -\frac{\beta}{\alpha} p_{\xi}$$

где α – поляризуемость атома,

На внутриатомный диполь атома A_{ξ} действует сила K_{ξ} , вызванная излучением остальных атомов решетки и внешними факторами. В результате действия силы K_{ξ} центр заряда в.э.о. атома A_{ξ} и следовательно плечо его дипольного момента, получает некоторое приращение Δp_{ξ} и становится равным $P_{\xi} = p_{\xi} + \Delta p_{\xi}$. Наведенный дополнительный дипольный момент создает частичную экранизацию силы K_{ξ} . Сучетом этой экранизации внешняя сила, действующая на внутриатомный диполь, становится равной $F_{\xi} = K_{\xi} - \beta \Delta p / \alpha$. При этом энергия, поглощаемая атомом за счет действия внешних сил на

временном промежутке
$$[t_0, t]$$
 равна $\int_{t_0} F_{\xi} dP_{\xi}$.

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 $\int_{t_9}^t R_{\xi} dP_{\xi}$.

С учетом всех сил, действующих на остов атома A_{ξ} , уравнение его движения принимает вид

$$\mu \ddot{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{\zeta}} = \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{\zeta}} + \boldsymbol{R}_{\boldsymbol{\xi}} + \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{\xi}} \,. \tag{1.4}$$

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_o, t] справедливо равенство

$$\int_{t_0}^{t} R_{\xi} dP_{\xi} + \int_{t_0}^{t} F_{\xi} dP_{\xi} = \int_{t_0}^{t} (R_{\xi} + F_{\xi}) dP_{\xi} = 0, \quad (1.5)$$

которое будет выполнено, если считать, что силы R_{ξ} и F_{ξ} уравновешивают друг друга, т.е. $R_{\xi} + F_{\xi} = 0$.

Таким образом, в состоянии термодинамического равновесия уравнение (1.4) движения остова атома принимает вид

$$u\ddot{n}_{\xi} = D_{\xi} = -\frac{\beta}{\alpha}p_{\xi}. \qquad (1.6)$$

2. ПРИНЦИП ДЛИННЫХ ВОЛН

Как уже говорилось во введении, создавая свою динамическую теорию, М. Борн сформулировал положение, называемое принципом длинных волн, согласно которому уравнения, описывающие колебания кристаллической решетки, в предельном случае, когда расстояния между атомами стремятся к нулю, должны переходить в классические уравнения распространения волн упругих деформаций. Ниже показывается, что получаемые таким способом уравнения полностью соответствуют уравнениям теории упругости, что позволяет выразить силовые коэффициенты исследуемой динамической модели через упругие константы рассматриваемого вещества.

Рассмотрим кристалл, имеющий объемноцентрированную 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 $N = \{1, 2, ..., 2n\}$. Зададим в пространстве систему кристаллографических координат Oxyz с единичными направляющими векторами e_x, e_y, e_z координатных осей так, чтобы положение каждого узла $P = P_{ijk}$ решетки могло быть задано по формуле;

$$OP_{ijk} = \frac{a}{2}(ie_x + je_y + ke_z),$$
 (2.1)

где *i*, *j*, *k* О *N* – некоторый набор чисел. Обозначим через L подмножество в N^3 , образованное всеми такими наборами (*i,j,k*), для которых формула (2.1) определяет узел решетки. Тогда для ОЦК решетки

L= {(i,j,k) O N³ S i,j,k – все нечетные или все четные числа },

а для ГЦК решетки

L = { $(ij,k) \cap N^3 S$ сумма i+j+k нечетна }.

Подставляя (1.1), (1.2) в (1.6), полагая $\sigma_{1r} = \beta \kappa_{1r} / \alpha$, $\sigma_{1t} = \beta \kappa_{1t} / \alpha$, $\sigma_{2r} = \beta \kappa_{2r} / \alpha$ и занося знак "-" под знак суммы, приходим к уравнению

$$\begin{split} \mu h_{\xi} &= \sum_{\xi' \in S_{1}(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1r}) < e_{\xi\xi'}, w_{\xi\xi'} > e_{\xi\xi'} + \sigma_{1r} w_{\xi\xi'})] + (2.2) \\ &+ \sum_{\xi' \in S_{2}(\xi)} \sigma_{2r} < e_{\xi\xi'}, w_{\xi\xi'} > e_{\xi\xi'} \\ &\text{ Пусть } \\ \xi' &= (i, j, k) \in \Lambda \quad \text{и} \quad \xi' = (i', j', k') \in S_{m}(\xi) , \\ m &= 1, 2 . \quad \text{Положим} \quad \frac{\varepsilon_{ii'} = i' - i}{\varepsilon_{ii'} + \varepsilon_{ij'}^{2} + \varepsilon_{ii'}^{2}} , \quad \varepsilon_{ij'} = j' - j , \\ \varepsilon_{\xi\xi'} &= k' - k, \; \rho_{m} = \sqrt{\varepsilon_{ii'}^{2} + \varepsilon_{ij'}^{2} + \varepsilon_{ik'}^{2}} . \text{ Тогда вектор} \\ e_{\xi\xi'}, \; \text{указывающий направление от узла } P_{\xi} \; \kappa \end{split}$$

узлу *Р*_{ξ'}, равен

 $e_{\xi\xi'} = (\varepsilon_{ii'}e_x + \varepsilon_{jj'}e_y + \varepsilon_{kk'}e_z)/\rho_m$. Обозначим через $W_{\xi\xi'_{j,x}}$, $W_{\xi\xi'_{j,y}}$, $W_{\xi\xi'_{j,z}}$ координаты вектора WEE'. Записывая уравнение (2.2) в проекции на ось Ох, получим

$$+\varepsilon_{ii'}(\varepsilon_{jj'}w_{\xi\xi',y} + \varepsilon_{ii'}w_{\xi\xi',z})\} + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} \sigma_{2r}w_{\xi\xi',x}$$
$$\mu \ddot{u}_{\xi,x} = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} \{\frac{\sigma_{1r}\varepsilon_{ii'}^2 + (\rho_1^2 - \varepsilon_{ii'}^2)\sigma_{1r}}{\rho_1^2}w_{\xi\xi',x} + (2.3)$$

Введем обозначения:

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

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

$$w_{\xi\xi',x} = u_x(r + \Delta r) - u_x(r) =$$

= $\nabla u_x \Delta r + \frac{1}{2} < \Delta r, (\nabla' u_x) \Delta r >,$ (2.4)

где ∇u_x – градиент функции u_x , а (∇u_x) – матрица, строки которой соответственно равны:

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

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

$$D_{\mathbf{r}} = D\mathbf{r}_{g_{z}'} = \frac{a}{2} (\varepsilon_{ii'} e_x + \varepsilon_{jj'} e_y + \varepsilon_{kk'} e_z),$$

где $\mathcal{E}_{ii'}, \mathcal{E}_{jj'}, \mathcal{E}_{kk'}$ определяются также как и выше, Подставляя Δr в выражение $<\Delta r, (\nabla' u_r) \Delta r >$, приходим к равенству

$$<\Delta \mathbf{r}, (\nabla' u_x) \Delta \mathbf{r} > = \frac{a^2}{4} \left\{ \varepsilon_{ii}^2 \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \varepsilon_{jj}^2 \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \varepsilon_{jk}^2 \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} + 2\varepsilon_{ij} \varepsilon_{ik} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + 2\varepsilon_{ij} \varepsilon_{ik} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + 2\varepsilon_{ij} \varepsilon_{ik} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right\}$$

$$(2.5)$$

Пусть, как и выше, $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$ и $\xi' = (i', j', k') \in S_m(\xi)$, m = 1, 2. Обозначим через $\xi' \in S_m(\xi)$ индекс атома, соседнего к A_{ξ} , расположенного противоположно атому Ад. Пусть, далее, $\overline{S}_m(\xi)$ – набор индексов какойнибудь полусферы m – й координационной сферы атома Ag. Тогда, например,

$$\sum_{\substack{\epsilon \in S_{\mu}(\xi)}} w_{\xi\xi',x} = \sum_{\xi' \in \overline{S_{\mu}}(\xi)} (w_{\xi\xi',x} + w_{\xi\overline{\xi'},x}),$$

при этом, согласно (2.4),

$$W_{\xi\xi',x} + W_{\xi\xi',x} = u_x(r + \Delta r_{\xi\xi'}) + u_x(r - \Delta r_{\xi\xi'}) - 2u_x(r) =$$

$$= \langle \Delta r_{\xi\xi'}, (\nabla' u_x) \Delta r_{\xi\xi'} \rangle \qquad (2.6)$$

Переходя в формуле (2,3) к суммированию по полусферам, заменяя при этом Wgg', и на W _{€ x} + W _{₹ x} и т.д., в случае ОЦК решетки приходим к уравнению

$$\begin{aligned} &\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{a^2}{3} \{ (\sigma_{\nu} + 2\sigma_{\nu} + 3\sigma_{\nu}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + (\sigma_{\nu} + 2\sigma_{\nu}) (\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}) + \\ &+ 2 (\sigma_{\nu} - \sigma_{\nu}) (\frac{\partial^2 u_y}{\partial u \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial u \partial z}) \} \end{aligned}$$

$$(2.7)$$

Соответствующее уравнение в случае ГЦК решетки имеет вид

$$\begin{aligned} &\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{a^2}{4} \{ 2(\sigma_v - \sigma_u + 2\sigma_{zv}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + (\sigma_v - 3\sigma_u) (\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}) + \\ &+ 2(\sigma_v + \sigma_u) (\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial v} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z}) \} \end{aligned}$$
(2.8)

Классические уравнения распространения упругих волн деформаций в кристаллах в проекциях на ось Ох для ОЦК и ГЦК решеток соответственно имеют вид [8]:

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

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

$$(2.10)$$

где С₁₁, С₁₂, С₄₄ – упругие константы рассматриваемого вещества,

Сравнивая уравнения (2.6) и (2.7) соответственно с (2.8) и (2.9), приходим к соотношениям между коэффициентами динамической модели и упругими константами.

В случае ОЦК решетки:

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

$$\sigma_{2r} = \frac{a}{2}(C_{11} - C_{44}).$$
(2.11)

В случае ГЦК решетки:

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

$$\sigma_{2r} = \frac{a}{8} (2C_{11} - C_{12} - 3C_{44}).$$
(2.12)

3. МЕТОД СВЕДЕНИЯ КОДНОЦЕПОЧЕЧНОЙ МОДЕЛИ И ОСНОВНЫЕ ДИСПЕРСИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Рассмотрим уравнение (2,2) и будем искать его решение в виде бегущих волн, заданных формулой

$$u_{\zeta}(t) = u(r,t) = \sin(Kr - \omega t)g,$$

(или $u(r,t) = \cos(Kr - \omega t)g),$

где $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$, g – единичный вектор, указывающий направление поляризации волны,

$$r = \frac{a}{2}(ie_x + je_y + ke_z) -$$
радиус-вектор узла ре-

шетки, а $\mathbf{K} = \frac{2\pi}{na} (k_x e_x + k_y e_y + k_z e_z) -$ волновой

вектор. Для сокращения записи положим

$$\xi = ie_x + je_y + ke_z$$
, $k = k_x e_x + k_y e_y + k_z e_z$;

тогда $K = \frac{2\pi}{na}k$. При этом для того, чтобы были

выполнены условия цикличности Борна-Кармана, можно считать, что $k_x, k_y, k_z = 0, ..., n$ -1. Поскольку скалярное произведение K_r определяет фазу колебаний, плоскости постоянной фазы задаются уравнением $k\xi = k_x i + k_y j + k_z k = l$, где l натуральное число, постоянное для данной плоскости, которую мы обозначим Q_l . Колебания любых двух атомов A_ξ и $A_{\xi'}$, узлы которых находятся на плоскости Q_l совпадают и задаются формулой

$$u_{\xi} = u_{\xi'} = u_l(t)g = \sin(\frac{\pi l}{n} - \omega t)g$$
, (3.1)

Рассмотрим произвольный атом A_{ξ} , и пусть $l = k\xi$; тогда $A_{\xi} \in Q_m$. Пусть $\xi' \in S_m(\xi)$, m = 1, 2; положим $\varepsilon_{\xi\xi'} = \varepsilon_{ii'}e_x + \varepsilon_{ij'}e_y + \varepsilon_{il'}e_z$, $l' = k\xi'$ и $d_{\xi\xi'} = k\varepsilon_{\xi\xi'}$; тогда $l' = l + d_{\xi\xi'}$. Векторы $u_{\xi'}$, $w_{\xi\xi'}$ и $e_{\xi\xi'}$ теперь можно выразить так;

 $u_{\xi'} = u_{m'}g$, $w_{\xi\xi'} = (u_{i'} - u_i)g$, $e_{\xi\xi'} = \varepsilon_{\xi\xi'} / \rho_h$. Пля каждого атома $A_{\xi'}$ соседнего атому $A_{\xi'}$

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

$$u_{l,d} = 2u_l - u_{l-d} - u_{l+d}$$
. (3.2)
Подставляя (3.1) в (3.2), получим

$$u_{l,d_{\xi\xi'}} = 4u_l \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n}$$
. (3.3)

Учитывая формулы (1.1), (1.2) и (3.3), приходим кравенствам;

$$p_{\xi\xi'} + p_{\xi\xi'} = 4u_l \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} (\kappa_1 g_{\xi\xi'} \varepsilon_{\xi\xi'} + \kappa_{lt} g), (3.4)$$

$$p_{\xi\xi'} + p_{\xi\xi'} = u_I \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} \kappa_{2r} g_{\xi\xi'} \varepsilon_{\xi\xi'}, \quad (3.5)$$

где $g_{\xi\xi'} = \langle \varepsilon_{\xi\xi'}, g \rangle, \kappa_1 = (\kappa_{1r} - \kappa_{1r}) / \rho_m^2$. Пусть $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$, а $\overline{S}_m(\xi)$? какая-ни-

будь полусфера координационной сферы $S_m(\xi), m = 1, 2.$ Тогда $\sum_{\xi \in S_n(\xi)} p_{\xi\xi'} = \sum_{\xi \in S_n(\xi)} (p_{\xi\xi'} + p_{\xi\xi'})$ а формула (1.3) представляется в виде:

$$\mathbf{p}_{\xi} = u_{i} \left(4 \sum_{\xi' \in S_{1}(\xi)} \sin^{2} \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} (\kappa_{1} g_{\xi\xi'} \boldsymbol{\varepsilon}_{\xi\xi'} + \kappa_{1i} \mathbf{g}) + \kappa_{2r} \sum_{\xi' \in S_{2}(\xi)} \sin^{2} \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} g_{\xi\xi'} \boldsymbol{\varepsilon}_{\xi\xi'}\right)$$
(3.6)

Подставляя (3.6) в уравнение (1.6), приходим к уравнению

$$\mu \omega^2 \mathbf{g} = 4 \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} (\sigma_1 g_{\xi\xi'} \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t} \mathbf{g}) + \sigma_{2r} \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} \sin^2 \frac{\pi d_{\xi\xi'}}{2n} g_{\xi\xi'} \mathbf{e}_{\xi\xi'}$$
(3.7)

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

$$a_{x}g_{x} + b_{z}g_{y} + b_{y}g_{z} = \lambda g_{x},$$

$$b_{z}g_{x} + a_{y}g_{y} + b_{x}g_{z} = \lambda g_{y},$$

$$b_{y}g_{x} + b_{x}g_{y} + a_{z}g_{z} = \lambda g_{z},$$

$$= \mu\omega^{2}/4.$$
(3.8)

Полученная система линейных уравнений является однородной и имеет симметрическую матрицу.

где λ

Следовательно, ее собственные числа λ действительные, а собственные векторы $\boldsymbol{g} = g_{\chi} \boldsymbol{e}_{\chi} + g_{\chi} \boldsymbol{e}_{\chi} + g_{z} \boldsymbol{e}_{z}$, отвечающие различным собственным числам, ортогональны. Для нахождения собственных чисел матрицы системы (3.8) необходимо решить характеристическое уравнение

$$(a_x - \lambda)(a_y - \lambda)(a_z - \lambda) - b_x^2(a_x - \lambda) - b_y^2(a_y - \lambda) - b_z^2(a_z - \lambda) + 2b_x b_y b_z = 0.$$
(3.9)

Таким образом, по заданному волновому вектору **К**, направление и величина которого определяются набором чисел k_x, k_y, k_z , уравнение (3.9) позволяет найти соответствующие частоты $\omega^2 = \mu \lambda_m$, а система (3.8) — соответствующие три ортогональных направления векторов поляризации g_m , m = 1, 2, 3.

Наиболее просто уравнение (3.9) и система (3.8) 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. Ниже приводятся дисперсионные соотношения для ОЦК и ГЦК решеток соответственно в выражении через упругие константы для основных кристаллографических направлений, продольных и поперечных поляризаций.

В направлении [111]: продольные волны

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

поперечные волны

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

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 Оz

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

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

поперечные, поляризованные в плоскости Оху

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

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

B HallpableHuk [100] продольные водны

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

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

На рис. 1 и 2 приводятся дисперсионные кривые для Al, Na в направлениях [111], [110], [100] для продольной и поперечной поляризации при температуре 78К с использованием справочных данных из [9]. Сравнение полученных дисперсионных кривых с экспериментальными данными из [7], как это видно из приведенных рис. 1, 2, показывает хорошее соответствие теоретических кривых экспериментальным данным (экспериментальные данные нанесены точками).

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Борн М., Генперт Мейер М. Теория твердого тела. М., 1. 1938. 562 c.
- Борн М., Хуан К. Динамическая теория кристалличес-2. ких решеток. М., ИЛ, 1958. 488 с.
- Баранов М.А. Сферическая симметрия электронных 3. оболочек атомов и стабильность кристаллов // ЭФТЖ. 2006. T.1. C. 34-48.
- 4
- *Chater G.V.* // Adv. Phys.– 1961.– № 10.–Р.357. *Бровман Е.Г., Каган Ю.М.* Фононы в непереходных ме-5. таллах //УФН.- 1974.- Вып. 3.- Т.112. С.369-427.
- 6. Бровман Е.Г., Каган Ю.М., Холас А. // ЖЭТФ. 1969. № 57. C. 1635.
- Brockhouse B.N., March R.H., Stewart A.T. // Phys. Rev. 7. 1962. № 128. P. 1112.
- 8. Китель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 792 с.
- 9. Свойства элементов. Справочник Часть 1. Физические свойства / Под редакцией Г.В. Самсонова. М., Металлургия, 1976. 600 с.



Рис. 1. Кривые дисперсии фононов в АІ



Рис. 2. Кривые дисперсии фононов в Na

LONG-WAVES PRINCIPLE AND DISPERSION RELATIONS FOR CUBIC CRYSTAL LATTICES IN THE MODEL OF DIPOLE-DIPOLE INTERACTIONS

© 2009 V.E. Kholodovskij, I.O. Machihina

Bryansk State University

The paper considers monoatomic crystal lattice vibrations, caused by Van der Waals forces. A dynamical model is constructed and equations are derived, which describe monoatomic crystal lattice vibrations in the adiabatic approximation. It is shown that according to long-waves principle in the limit the received equations turn into well-known equations of elasticity theory. This makes it possible to express the force constants of the dynamical model in terms of elastic constants of the substance. The solution of the received equations allowed to derive dispersion relations for bcc and fcc lattices without any free parameters. The calculated dispersion curves for Na and Al are in good agreement with experimental data.

Key words: dynamical model, dipole, crystal lattice, elastic constants, dispersion relations, dispersion curves.

Vladimir Kholodovskij, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor. E-mail: tfbgubry@mail.ru. Inna Machihina, Graduate Student. E-mail: ingibordit@yandex.ru.