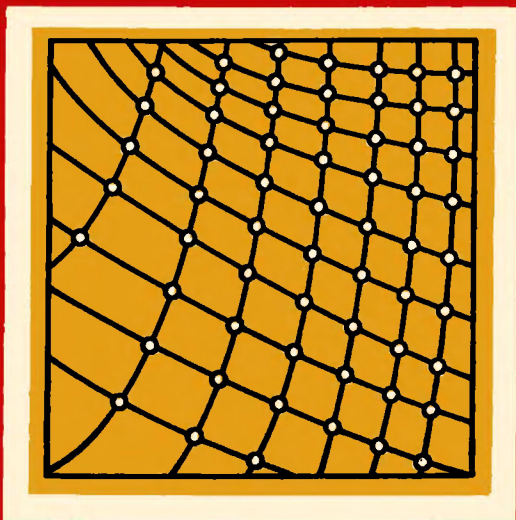


ОСНОВЫ МЕХАНИКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

А.М. КОСЕВИЧ



А. М. КОСЕВИЧ

ОСНОВЫ МЕХАНИКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
МОСКВА 1972

Основы механики кристаллической решетки. А. М. К о с е в и ч, изд-во «Наука», Главная редакция физико-математической литературы, 1972 г.

Дано краткое (без особой детализации конкретных ситуаций), но систематическое изложение основ физики кристаллической решетки. Книга начинается с освещения традиционных вопросов механики кристаллической решетки: изучается спектр колебаний идеального кристалла и вводится представление о газе фононов. Однако основная часть книги посвящена обсуждению таких физических явлений в кристаллах, количественное изучение которых пока мало освещено в монографической литературе. В частности, большое место уделено физике реальных кристаллов. К этой части книги относится изложение следующих вопросов: влияние дефектов на колебательный спектр, взаимодействие различных дефектов кристаллической решетки, связь разных видов движения дислокаций с пластичностью твердого тела.

Рис. 61.

Арнольд Маркович Косевич

ОСНОВЫ МЕХАНИКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

М., 1972 г., 280 стр. с илл.

Редактор *Л. И. Гладнева*

Техн. редактор *С. Я. Шкляр*

Корректор *Т. А. Панькова*

Сдано в набор 3/XII 1971 г. Подписано к печати 24/IV 1972 г.
Бумага 84×108¹/₃₂. Физ. печ. л. 8,75. Условн. печ. л. 14,7. Уч.-изд. л. 14,22.
Тираж 7650 экз. Т-07234. Цена книги 90 коп. Заказ 24

Издательство «Наука».

Главная редакция физико-математической литературы.

117071, Москва В 71, Ленинский проспект, 15

2-я типография издательства «Наука»

Москва Г-99. Шубинский пер., 10,

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	5
-----------------------	---

ВВЕДЕНИЕ

Геометрия кристаллической решетки	7
1. Простые и сложные кристаллические решетки (7). 2. Решетка Браве (10). 3. Кристаллографические классы (12). 4. Обратная решетка (13). 5. Вычисление некоторых решеточных сумм (17).	

КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

§ 1. Колебания простой решетки	20
1. Уравнения малых колебаний (20). 2. Анализ закона дисперсии (24). 3. Спектр значений квазиволнового вектора (28). 4. Закон дисперсии для решетки с взаимодействием ближайших соседей (29).	
§ 2. Изочастотные поверхности и спектр частот	33
1. Поверхности постоянной частоты (33). 2. Функция распределения частот (36). 3. Анализ плотности колебаний (40).	
§ 3. Квантование колебаний кристалла	46
1. Нормальные координаты колебаний кристалла (46). 2. Квантование колебаний (49). 3. Фононы (53). 4. Ангармонизм колебаний кристалла и взаимодействие фононов (56).	
§ 4. Связь спектра частот с функцией Грина	60
1. Функция Грина и ее основные свойства (60). 2. Связь плотности колебаний с функцией Грина (64). 3. Запаздывающая и опережающая функции Грина (67). 4. Квантовомеханическое определение функций Грина (70).	
§ 5. Колебания сложной решетки	72
1. Оптические колебания (72). 2. Поляризация колебаний (79). 3. Общий анализ закона дисперсии (81).	

СПЕЦИАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ДИНАМИКИ КРИСТАЛЛОВ

§ 6. Длинноволновые колебания кристалла	85
1. Уравнения для полей смещений (85). 2. Вывод уравнений теории упругости (90). 3. Колебания ионного кристалла (94). 4. Волны «изгиба» в сильно анизотропном кристалле (102).	
§ 7. Термодинамика и кинетика фононного газа	112
1. Равновесная плотность фононов в кристалле (112). 2. Средняя энергия фононов и теплоемкость кристалла (117). 3. Низкотемпературная теплоемкость кристаллов со слоистой структурой (122). 4. Уравнение движения фонона и кинетическое уравнение (125). 5. Частоты столкновений фононов при низких температурах (129). 6. Теплопроводность кристаллической решетки при низких температурах (134). 7. Второй звук в кристаллах (138).	

§ 8. Колебания кристалла с точечным дефектом	141
1. Локальные колебания решетки вблизи изолированного точечного дефекта (141). 2. Функция Грина для кристалла с точечным дефектом (148). 3. Квазилокальные колебания (151).	
§ 9. Длинноволновые колебания кристалла вблизи линейного или плоского дефекта	157
1. Локализация колебаний у одномерного (линейного) дефекта (157). 2. Частоты локальных колебаний при наличии двухмерного (плоского) дефекта (162). 3. Свободная поверхность кристалла как плоский дефект (167).	
§ 10. Механика одномерного кристалла	173
1. Изгибные колебания линейной цепочки (173). 2. Особенности плотности колебаний одномерного кристалла (182). 3. Возмущение типа ударной волны в одномерном кристалле (185). 4. Одномерная модель дислокации (модель Френкеля — Конторовой) (191).	
ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ	
§ 11. Макроскопическое описание изолированных дефектов	197
1. Основные понятия и теоремы механики сплошной среды (197). 2. Определение и свойства точечного дефекта в теории упругости (201). 3. Дислокация в кристалле (205). 4. Скольжение и переползание дислокаций (210).	
§ 12. Упругое поле дислокаций в кристалле	215
1. Уравнения равновесия упругой среды с дислокациями (215). 2. Поля прямолинейных дислокаций (220). 3. Модель Пайерлса (225).	
§ 13. Взаимодействие дефектов	232
1. Упругое взаимодействие точечных дефектов (232). 2. Непрерывное распределение точечных дефектов в упругом поле (238). 3. Действие поля напряжений на дислокацию (241).	
§ 14. Динамика дислокаций и пластичность кристалла	246
1. Динамические уравнения теории упругости для кристалла с дислокациями (246). 2. Пластическая деформация и движение дислокаций (250). 3. Эффективная масса и уравнение движения дислокации (253).	
§ 15. Диффузионная кинетика механических процессов в твердом теле	259
1. Направленные потоки точечных дефектов и течение кристалла (259). 2. Диффузионное взаимодействие дислокации с точечными дефектами (266). 3. Диффузионно-дислокационное течение кристалла (273).	
Предметный указатель	278

ПРЕДИСЛОВИЕ

Многообразии математических методов и технических приемов, которыми пользуются физики-теоретики в своих исследованиях, часто скрывает простоту физических формулировок решаемых задач и стандартный характер рассматриваемых моделей. Такое положение характерно и для научных публикаций по теоретической физике твердого тела, посвященных изложению новых результатов механики кристаллической решетки. Поэтому, чтобы читатель, особенно начинающий исследователь, мог составить определенное мнение о подобных работах или дать их элементарную оценку, от него требуется ясное и четкое понимание основных положений физики кристаллов. Существует сравнительно небольшое число утверждений или выводов теории кристаллической решетки, владение которыми обеспечивает достаточный «плацдарм для штурма» многочисленных журнальных статей по соответствующей теме. Некоторые из них являются традиционными в физике твердого тела. К ним естественно отнести проблемы динамики идеального кристалла, классификацию особенностей спектра колебаний, представления о фононном газе. Другие окончательно вошли в физику кристаллов недавно, однако вполне могут рассматриваться как известные и принципиально разработанные. Это — вопросы влияния дефектов на колебательный спектр, новые достижения кинетики фононного газа, установление связи дислокаций с пластичностью кристалла, описание взаимодействия различных дефектов кристаллической решетки. Часть последних еще не вошла в учебные курсы по теории твердого тела.

В настоящей книге сделана попытка по возможности просто, без особой детализации конкретных ситуаций, изложить основы физики кристаллической решетки. Наиболее подробно обсуждены теоретические положения, на которые, по мнению автора, в первую очередь следует обращать внимание при изучении механики кристаллов. В ряде разделов книги, с целью упрощения количественного описания физических явлений, использована простейшая модель кристалла, формулировка которой аналогична предположению о том, что все атомы могут колебаться только вдоль одного направления (простая кристаллическая решетка в такой модели обладает лишь одной ветвью колебаний). Эта, неоднократно применявшаяся модель, не

нарушая общности качественных выводов, позволяет произвести до конца практически все выкладки. Подобная возможность получить замкнутые математические выражения показалась нам весьма заманчивой.

Перечень обсуждаемых в книге вопросов легко составить по ее оглавлению. Понятным и не требующим специального пояснения является разбиение книги на три части, первая из которых является элементарным введением в физику кристаллов. Следует лишь указать на важность изложения основных понятий физики реальных кристаллов, являющейся стремительно развивающимся разделом физики твердого тела. Изучению механических свойств реальных кристаллов (кристаллов с дефектами) посвящена огромная масса работ, и возросший интерес к этому разделу физики объясняет отбор материала в третьей части предлагаемой книги.

Книга написана на основе курса лекций, которые на протяжении нескольких лет автор читал студентам-теоретикам Харьковского государственного университета. Этим в значительной степени определяются требования к уровню подготовки читателя: предполагается знакомство с общими курсами теоретической физики в объеме физических или инженерно-физических факультетов.

Естественно, что из книги нельзя почерпнуть всего необходимого для понимания любого вопроса по физике кристаллов. Но мы надеемся, что изучение излагаемого материала позволит во всяком случае ориентироваться в вопросах механики кристаллической решетки.

При составлении плана книги, выборе основных вопросов и их обсуждении автор постоянно пользовался советами И. М. Лифшица, чье доброжелательное отношение к идее написания подобного сочинения позволило автору решиться на ее осуществление. Многие разделы книги полностью или частично основаны на оригинальных работах И. М. Лифшица, а некоторые — появились в результате совместной с ним деятельности. Поэтому автор пользуется случаем выразить И. М. Лифшицу самую искреннюю благодарность. Автор считает приятным долгом выразить свою признательность также Е. М. Лифшицу, чье влияние в значительной мере определило изложение теории дислокаций. Автор благодарен Р. Н. Гуржи, В. И. Пересаде и В. М. Цукернику за полезные обсуждения отдельных разделов книги, а также своим рецензентам М. А. Кривоглазу и И. А. Кунину — за ценные замечания, которые безусловно существенно улучшили изложение трудных вопросов. Наконец, автор с благодарностью отмечает сочувственное отношение к написанию книги его жены Дины, без чьей помощи эта книга не могла бы появиться.

А. Косевич

ВВЕДЕНИЕ

ГЕОМЕТРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

1. Простые и сложные кристаллические решетки

Основным свойством кристаллического состояния вещества, отличающим его от других (газообразного, жидкого и аморфного), является наличие правильного (упорядоченного и симметричного) расположения атомов вещества в пространстве. Кристаллическое состояние обладает четкой пространственной структурой, называемой кристаллической решеткой.

Кристаллическая решетка характеризуется, прежде всего, пространственной периодичностью, или трансляционной симметрией. Это значит, что для каждого неограниченного кристалла существует такая тройка некопланарных векторов $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, что смещение кристалла как целого на любой из этих векторов совмещает его с самим собой. Так как смещение кристалла на векторы, кратные \mathbf{a}_α ($\alpha = 1, 2, 3$), очевидно, также совмещает его с самим собой, то удобно выбрать в качестве *основных векторов* наименьшие по длине в данных направлениях. Эти основные векторы обычно называют *трансляционными периодами* кристаллической решетки. Параллелепипед, построенный на основных трансляционных периодах, называется *элементарной ячейкой*.

Совершенно ясно, что выбор основных векторов, а следовательно, и элементарной ячейки, неоднозначен. На рис. 1 показана возможность различного выбора элементарной ячейки в плоской решетке. Обычно элементарную ячейку выбирают так, чтобы ее вершина совпадала с одним из атомов кристалла (с узлом кристаллической решетки). Тогда векторы \mathbf{a}_α соединяют ближайшие эквивалентные узлы решетки в соответствующих направлениях.

Располагая векторы \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 в правильной последовательности, легко убедиться, что объем элементарной ячейки V_0 равен

$$V_0 = \mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3].$$

Можно проверить, что, несмотря на неоднозначность выбора основных трансляционных периодов, объем элементарной ячейки остается одним и тем же при любом ее выборе.

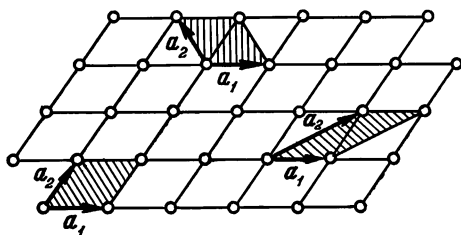


Рис. 1.

Элементарная ячейка содержит по одному атому каждого типа, входящего в состав кристалла *). При этом атомы разного типа отличаются не только своими химическими свойствами, но и своими положениями в элементарной ячейке. Поэтому элементарная ячейка даже кристалла чистого элемента в принципе может содержать больше одного атома.

Если в элементарной ячейке решетки содержится только один атом, то решетка называется *простой*, в противном случае — *сложной*. Итак, кристаллическая решетка называется простой, если ее элементарная ячейка может быть выбрана так, чтобы она содержала один атом.

Разница между простой и сложной решеткой наглядно может быть проиллюстрирована на следующем примере плоской решетки. Рассмотрим весьма симметричную плоскую решетку, атомы которой расположены в вершинах правильных шестиугольников (рис. 2, а), а также

*) Заметим, что в общем вкладе всех атомов в ячейке доля каждого атома, расположенного в вершине ячейки, равна $1/8$, атома на ребре — $1/4$ и атома на грани — $1/2$.

решетку, отличающуюся от первой тем, что в центрах шестиугольников также находятся атомы (рис. 2, б).

Легко убедиться, что первая решетка является сложной, а вторая — простой. Это становится ясным после рассмотрения элементарных ячеек одной и другой решеток.

Кажущееся формальным различие между простыми и сложными решетками влечет за собой отличие существенных физических свойств соответствующих кристаллов. Кристаллы с простой и сложной решетками по ряду свойств качественно отличаются. В частности, колебания сложной решетки обладают некоторыми особенностями, принципиально отличающими их от колебаний простой решетки.

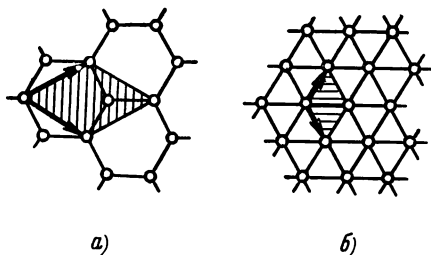


Рис. 2.

Относительно элементарной ячейки следует сделать небольшое, но важное замечание. Элементарная ячейка по определению содержит в себе все элементы трансляционной симметрии кристалла. Имея элементарную ячейку, простым ее повторением в пространстве можно построить весь кристалл. Однако как геометрическая фигура элементарная ячейка очень мало симметрична по отношению к поворотам и отражениям. Это хорошо видно на примере решеток, изображенных на рис. 2, где решетка в целом имеет ось симметрии шестого порядка, а элементарная ячейка таким элементом симметрии не обладает.

Однако в простой решетке всегда можно выбрать такую ячейку, которая будет нести в себе информацию об элементах симметрии кристалла, связанных с поворотами и отражениями. Строится эта ячейка следующим образом. Из некоторого центра, совпадающего с одним из атомов, проводится луч к ближайшему соседнему атому. Через середину этого луча проводится плоскость, перпендикулярная ему. Такая операция повторяется по отношению ко всем соседям. Совокупность получившихся плоскостей выделит вблизи избранного атома некоторую область пространства. Называется эта область *зоной* или *ячейкой*

Вигнера — Зейтца. Ячейка Вигнера — Зейтца имеет объем, равный объему элементарной ячейки. На рис. 3 показано построение ячейки Вигнера — Зейтца для плоской решетки.

Следует заметить, что, в отличие от элементарной ячейки, ячейка Вигнера — Зейтца в трехмерной решетке, вообще говоря, не является параллелепипедом. Она есть многогранник, использование которого иногда удобно благодаря тому, что он содержит атом в своем центре.

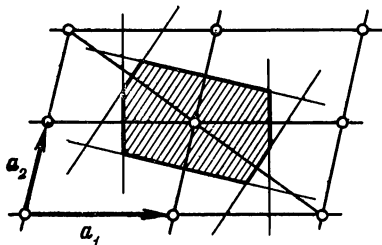


Рис. 3.

Весьма существенным свойством ячейки Вигнера — Зейтца является то, что она как геометрическая фигура обладает всеми элементами симметрии кристалла по отношению к поворотам и отражениям.

2. Решетка Браве

Решеткой Браве называют совокупность всех эквивалентных атомов в кристалле, которые могут быть совмещены друг с другом путем параллельного переноса на основные векторы кристалла.

Решетка Браве простой кристаллической решетки всегда совпадает с последней. Если же кристаллическая решетка сложная, то она состоит из нескольких вставленных одна в другую решеток Браве. Очевидно, что все решетки Браве, из которых состоит некоторая сложная кристаллическая решетка, геометрически тождественны.

В качестве примера плоской кристаллической решетки, состоящей из двух решеток Браве, рассмотрим сложную решетку, изображенную на рис. 2, а. На рис. 4 изображена та же решетка, разделенная окраской узлов и разной толщиной соединяющих их линий на две решетки Браве. Каждая из решеток Браве подобна простой решетке, изображенной на рис. 2, б.

Понятно, что решетка Браве сложной кристаллической решетки, вообще говоря, более симметрична, чем сама

кристаллическая решетка. Решетка Браве обязательно содержит все элементы симметрии кристалла, но она может обладать и дополнительными элементами симметрии. Так, например, решетка Браве всегда обладает центром симметрии (инверсии), совпадающим с одним из ее узлов,

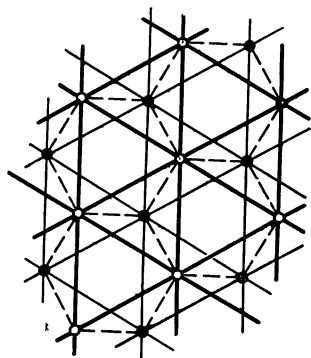


Рис. 4.

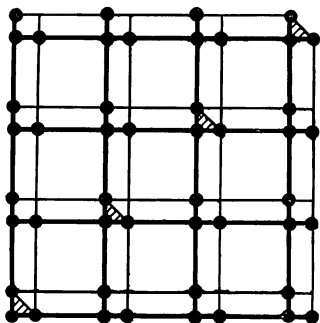


Рис. 5.

в то время как некоторые кристаллические решетки (обязательно сложные!) такого элемента симметрии не имеют. Последнее может быть проиллюстрировано примером плоской решетки, состоящей из трех решеток Браве и изображенной на рис. 5. Даже если все узлы такой кристаллической решетки заняты атомами одного химического элемента, она не обладает центром инверсии. Заштрихованные треугольники на рисунке поясняют отсутствие указанного элемента симметрии.

Классификация решеток Браве производится по отношению к симметрии поворотов и отражений. В соответствии с этой классификацией решетки Браве делятся на семь кристаллических систем или *сингоний*. Каждая из решеток данной сингонии обладает центром инверсии и вполне определенной совокупностью осей и плоскостей симметрии.

Обычно каждой сингонии сопоставляется некоторая геометрическая фигура, построенная на определенном числе ближайших узлов соответствующей решетки Браве и обладающая всеми элементами симметрии рассматриваемой сингонии. Такой фигурой является либо параллелепипед, либо призма. При анализе симметрии этих фигур

оказывается, что внутри одной и той же сингонии иногда может быть произведено дополнительное подразделение на несколько типов решеток Браве. Решетка Браве относится к тому или иному типу в зависимости от того, находятся узлы решетки только в вершинах упомянутой фигуры или также на ее гранях, на ее основаниях (базе), в ее центре. Различают следующие типы решеток Браве: примитивная решетка данной сингонии (П), базоцентрированная (БЦ), гранецентрированная (ГЦ) и объемноцентрированная (ОЦ).

Тип решетки	П	БЦ	ОЦ	ГЦ
Сингония)				
1. Триклинная	+	—	—	—
2. Моноклинная	+	+	—	—
3. Ромбическая (Ортогональная)	+	+	+	+
4. Тетрагональная (Квадратная)	+	—	+	—
5. Тригональная (Ромбоэдрическая)	+	—	—	—
6. Гексагональная	+	—	—	—
7. Кубическая	+	—	+	+

Здесь приведена таблица названий всех семи сингоний и крестиками отмечено наличие соответствующего типа решетки Браве внутри сингонии. Из этой таблицы видно, что существует четырнадцать типов решеток Браве.

3. Кристаллографические классы

При рассмотрении макроскопических свойств твердого тела кристалл можно рассматривать как однородную сплошную среду. Свойства такой среды зависят только от направлений в ней. Поэтому физические свойства тела будут определяться лишь ориентацией элементов симметрии независимо от их положения.

Трансляционная симметрия решетки не влияет на симметрию направлений. Поэтому симметрия направлений определяется совокупностью только так называемых эле-

ментов макроскопической симметрии. Возможны следующие элементы макроскопической симметрии:

- 1) центр симметрии (центр инверсии),
- 2) плоскость симметрии (зеркальная плоскость),
- 3) оси симметрии первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков,
- 4) инверсионные оси первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков *). Все винтовые оси и плоскости скольжения решетки входят в перечисленные элементы макроскопической симметрии как простые оси и плоскости симметрии.

В случае комбинации элементов макроскопической симметрии можно считать, что все они проходят через одну точку; возможные комбинации макроскопических элементов симметрии называются *точечными группами*. Соответственно точечным группам симметрии кристаллы подразделяются на 32 *кристаллографических класса*.

В заключение заметим, что возможные элементы симметрии геометрических фигур совпадают с элементами макроскопической симметрии кристаллов. Однако поскольку геометрические фигуры не имеют решетчатого строения, для них порядок осей симметрии и инверсионных осей не ограничен. Для кристалла же возможны лишь определенные значения порядков осей ($n = 1, 2, 3, 4, 6$).

4. Обратная решетка

Если выбрать начало координат совпадающим с одним из узлов кристаллической решетки, радиус-вектор любого другого эквивалентного узла всегда можно представить в виде вектора

$$\mathbf{R} \equiv \mathbf{R}(n) = \sum_{\alpha=1}^3 n_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha}, \quad \mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3), \quad (1)$$

где n_{α} — целые числа. Вектор \mathbf{R} называют *вектором трансляции*, понимая под этим свойство решетки совмещаться с самой собой при переносе (трансляции) ее как

*) Инверсионной оси n -го порядка отвечает операция поворота на угол $2\pi/n$ вокруг этой оси, сопровождаемого инверсией в заданной точке этой оси. Из допустимых инверсионных осей только ось четвертого порядка является независимым элементом симметрии.

целого на вектор \mathbf{R} . Для простой решетки формула (1) определяет также координаты любого ее атома.

Пространственной кристаллической решетке, построенной на векторах \mathbf{a}_α , можно поставить в соответствие некоторую периодическую структуру, называемую *обратной решеткой*. Обратная решетка строится на трех векторах \mathbf{b}_β ($\beta = 1, 2, 3$), связанных с векторами \mathbf{a}_α следующими соотношениями:

$$\mathbf{a}_\alpha \mathbf{b}_\beta = \delta_{\alpha\beta} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3),$$

где $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера. Векторы \mathbf{b}_β простым образом могут быть выражены через исходные основные векторы \mathbf{a}_α :

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{V_0} [\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3], \quad \mathbf{b}_2 = \frac{1}{V_0} [\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1], \quad \mathbf{b}_3 = \frac{1}{V_0} [\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2].$$

Параллелепипед, построенный на векторах \mathbf{b}_β , называется элементарной ячейкой обратной решетки. Легко проверить, что объем элементарной ячейки обратной решетки равен обратному значению объема элементарной ячейки прямой решетки:

$$\Omega_0 = \mathbf{b}_1 [\mathbf{b}_2 \mathbf{b}_3] = \frac{1}{V_0}.$$

Заметим, что векторы обратной решетки имеют размерность обратной длины.

Несложное построение показывает, что простые решетки всех систем решеток Браве имеют обратными также простые решетки тех же систем. Обратная решетка границентрированных решеток Браве (ромбической, тетрагональной и кубической) является объемноцентрированной решеткой той же системы и наоборот. Решетке с центрированным базисом отвечает обратная решетка также с центрированным базисом.

Наряду с элементарной ячейкой обратной решетки часто бывает удобным построение аналога ячейки Вигнера — Зейтца в обратной решетке. Такая ячейка носит название *зоны Бриллюэна* (или первой зоны Бриллюэна). При различных построениях в обратной решетке понятие зоны Бриллюэна используется значительно чаще, чем понятие ячейки Вигнера — Зейтца в кристаллической решетке.

Аналогично вектору трансляции прямой решетки (1) можно ввести трансляционный вектор обратной решетки:

$$\mathbf{B} \equiv \mathbf{B}(m) = \sum_{\alpha=1}^3 m_{\alpha} \mathbf{b}_{\alpha}, \quad m = (m_1, m_2, m_3), \quad (2)$$

где m_{α} — целые числа. Вектор \mathbf{B} обычно называют *вектором обратной решетки*.

Заметим, что математические соотношения между величинами в прямом и обратном пространствах полностью симметричны относительно этих пространств, поэтому формально следовало бы говорить, что решетки, построенные на тройках векторов \mathbf{a}_{α} и \mathbf{b}_{β} , находятся в обратной связи друг с другом. Любую из них можно считать прямой решеткой, тогда вторая по отношению к ней будет являться обратной. Но при этом, естественно, следует помнить, что физический смысл соответствующих пространств совершенно различен. Кроме того, в случае кристалла исходным понятием, конечно, является понятие пространственной кристаллической решетки, которая и считается прямой решеткой.

Зачем понадобилось введение понятия обратной решетки? Ответ на этот вопрос можно получить, если учесть то обстоятельство, что все физические величины, характеризующие свойства идеального кристалла, описываются функциями с той же периодичностью, что и сама решетка. Если $U(\mathbf{r})$ — такая функция (плотность заряда в решетке, электростатический потенциал или др.), то, очевидно,

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где \mathbf{R} — вектор трансляции решетки (1).

Разложим функцию $U(\mathbf{r})$ в тройной ряд Фурье:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} e^{2\pi i \mathbf{q} \mathbf{r}}, \quad (4)$$

где суммируется по всем возможным значениям вектора \mathbf{q} , которые определяются требованием периодичности (3):

$$\sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} e^{2\pi i \mathbf{q} \mathbf{r}} e^{2\pi i \mathbf{q} \mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} e^{2\pi i \mathbf{q} \mathbf{r}}. \quad (5)$$

Соотношение (5) может быть выполнено, если

$$e^{2\pi i q R} = 1, \quad q R = p, \quad (6)$$

где p — целое число. Для выполнения (6) требуется

$$q a_\alpha = p_\alpha \quad (p_\alpha \text{ — целые числа}). \quad (7)$$

Решение уравнений (7) относительно компонент вектора q имеет вид

$$q = m_1 b_1 + m_2 b_2 + m_3 b_3. \quad (8)$$

Из (8) следует, что вектор q совпадает с вектором обратной решетки: $q = B$, где B определен формулой (2).

Таким образом, любая физическая величина, характеризующая свойства идеального кристалла, может быть разложена в ряд Фурье (4), где вектор q пробегает все узлы обратной решетки.

Следует обратить внимание на то, что очень часто разложение (4) записывают несколько иначе, а именно:

$$\varphi(r) = \sum_k \varphi_k e^{ikr}. \quad (9)$$

Вектор k , очевидно, равен $k = 2\pi q$. Следовательно, в разложении (9) он пробегает своим концом узлы решетки в «обратном пространстве», параметры которой в 2π раз больше параметров обычной решетки. Поскольку обозначение для этого вектора общепринято, то соответствующее ему пространство обычно называют k -пространством.

Будем помнить, что различие между обычной обратной решеткой и решеткой в k -пространстве связано лишь с различным масштабом длины в обратном пространстве: для периодической функции $\varphi(r)$ в формуле (9) $k = 2\pi B$.

Поскольку существует простое соответствие между прямой и обратной решеткой, то должно иметь место также простое соответствие между геометрическими образами в прямом и обратном пространстве. Мы рассмотрим лишь один пример такого соответствия, широко используемый в структурном анализе.

Рассмотрим уравнение относительно вектора r такого вида

$$Br = p \quad (p \text{ — целое число}), \quad (10)$$

где \mathbf{B} — вектор обратной решетки. Уравнение (10) описывает некоторую плоскость в кристалле. Легко проверить, что это *кристаллическая* плоскость, т. е. плоскость, проходящая через бесконечное множество узлов решетки Браве. Поскольку постоянное число p может принимать любое значение, то (10) описывает семейство параллельных плоскостей. Следовательно, каждому вектору обратной решетки $\mathbf{B} = \sum_{\alpha=1}^3 m_{\alpha} b_{\alpha}$ соответствует семейство параллельных кристаллических плоскостей (10). Расстояние между соседними плоскостями семейства (10) равно $d_{\mathbf{B}} = 1/B$, где B — длина соответствующего вектора обратной решетки. Три числа m_1, m_2, m_3 в этих соотношениях можно всегда представить себе как тройку взаимно простых целых чисел p_1, p_2, p_3 (т. е. считать p_1, p_2, p_3 не имеющими общего делителя, за исключением единицы). Тогда тройка чисел (p_1, p_2, p_3) называется *индексами Миллера*.

5. Вычисление некоторых решеточных сумм

Рассмотрим простую кристаллическую решетку и обозначим через $\rho(\mathbf{r})$ плотность вещества (плотность атомов) в кристалле. В соответствии с (4) и (8) мы можем записать

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{B}} \rho_{\mathbf{B}} e^{2\pi i \mathbf{B} \mathbf{r}}. \quad (11)$$

Напоминаем, что \mathbf{B} — это всевозможные векторы обратной решетки.

Для определения коэффициента $\rho_{\mathbf{B}}$ умножим левую и правую части (11) на $e^{-2\pi i \mathbf{B} \mathbf{r}}$ и проинтегрируем по объему всего кристалла:

$$\int \rho(\mathbf{r}) e^{-2\pi i \mathbf{B} \mathbf{r}} dV = \sum_{\mathbf{B}'} \rho_{\mathbf{B}'} \int e^{2\pi i (\mathbf{B}' - \mathbf{B}) \mathbf{r}} dV = V \rho_{\mathbf{B}}. \quad (12)$$

Итак,

$$\rho_{\mathbf{B}} = \frac{1}{V} \int \rho(\mathbf{r}) e^{-2\pi i \mathbf{B} \mathbf{r}} dV.$$

Теперь воспользуемся периодичностью функции $\rho(\mathbf{r})$ и

перепишем (12) в виде

$$\rho_{\mathbf{B}} = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \rho(\mathbf{r}) e^{-2\pi i \mathbf{B} \mathbf{r}} dV,$$

где трехмерный интеграл вычисляется по объему одной элементарной ячейки V_0 .

В случае точечного распределения масс в решетке плотность вещества имеет вид

$$\rho(\mathbf{r}) = M \sum_{\mathbf{R}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (13)$$

где M — масса одного атома и суммирование производится по всем узлам кристаллической решетки. Коэффициенты $\rho_{\mathbf{B}}$ для распределения масс (13) не зависят от \mathbf{B} и равны

$$\rho_{\mathbf{B}} = \frac{M}{V_0} = \rho_0,$$

где ρ_0 — средняя плотность кристалла. Поэтому плотность $\rho(\mathbf{r})$ в случае точечного распределения масс может быть представлена в виде суммы по узлам обратной решетки:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 \sum_{\mathbf{B}} e^{2\pi i \mathbf{B} \mathbf{r}}. \quad (14)$$

Наконец, сравнивая (14) с (13), легко получить следующее важное соотношение теории решетки:

$$\sum_{\mathbf{B}} e^{2\pi i \mathbf{B} \mathbf{r}} = V_0 \sum_{\mathbf{R}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}). \quad (15)$$

Суммирование в левой части (15) производится по всем узлам обратной решетки, а в правой части — по всем узлам кристаллической решетки.

Введем для функции $\rho(\mathbf{r})$ ее преобразование Фурье

$$g(\mathbf{q}) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{-2\pi i \mathbf{q} \mathbf{r}} dV, \quad (16)$$

где интегрирование ведется по всему пространству. Тогда

имеет место обратное преобразование

$$\rho(r) = \int g(q) e^{2\pi i q r} d\Omega, \quad (17)$$

причем интегрирование в (17) производится по всему обратному пространству ($d\Omega$ — элемент объема в обратном пространстве). Функцию $g(q)$ естественно назвать плотностью в обратном пространстве.

При точечном распределении масс в кристалле мы можем воспользоваться записью (14), и тогда плотность в обратной решетке приобретает вид

$$g(q) = \rho_0 \sum_B \delta(q - B). \quad (18)$$

Таким образом, точечное распределение масс в кристалле порождает периодическое точечное распределение «масс» в обратном пространстве.

Подставляя (13) в (16) и сравнивая результат с (18), мы можем получить соотношение, аналогичное (15), а именно:

$$\sum_R e^{-2\pi i q R} = \Omega_0 \sum_B \delta(q - B), \quad (19)$$

где в левой части суммирование распространяется на все узлы кристаллической решетки, а в правой — на все узлы обратной решетки.

Между прочим, соотношение (19) могло быть написано сразу после вывода соотношения (15) на основании полной симметрии обратных зависимостей между величинами в пространстве r и в пространстве q .

КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

§ 1. КОЛЕБАНИЯ ПРОСТОЙ РЕШЕТКИ

1. Уравнения малых колебаний

Как было отмечено выше, все узлы кристаллической решетки можно перенумеровать с помощью целочисленного вектора $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$. Если выбрать начало координат в одном из узлов, то радиус-вектор произвольного узла решетки, имеющего «номер» \mathbf{n} , будет иметь вид *)

$$\mathbf{r}_n \equiv \mathbf{r}(\mathbf{n}) = \sum_{\alpha=1}^3 n_\alpha \mathbf{a}_\alpha. \quad (1)$$

В простой решетке нумерация узлов решетки совпадает с нумерацией атомов, поэтому целочисленный вектор \mathbf{n} является одновременно «номером» соответствующего атома. Однако координата узла решетки (1) отличается от координаты соответствующего атома, когда атомы смещены относительно своих положений равновесия. Если положения равновесия атомов совпадают с узлами решетки (1), то для определения координат атома, помимо указания его «номера», следует указать также его смещение относительно своего узла. Будем обозначать смещение атома с «номером» \mathbf{n} из своего положения равновесия через $\mathbf{u}(\mathbf{n})$.

Существование кристаллического состояния означает, что в широком интервале температур относительные смещения атомов малы по сравнению с постоянной решетки a (под постоянной решетки мы будем понимать величину, порядок которой совпадает с величинами основных трансляционных векторов \mathbf{a}_α ; в кубической решетке $a_1 = a_2 =$

*) В дальнейшем для координат узлов кристаллической решетки мы будем пользоваться обозначением $\mathbf{r}(\mathbf{n})$ вместо обозначения $\mathbf{R}(\mathbf{n})$, принятого в предыдущем параграфе.

$= a_3 = a$). Поэтому при изучении колебаний кристаллической решетки естественно начать со случая малых гармонических колебаний.

Для того чтобы получить возможность сразу приступить к качественному анализу колебаний кристаллической решетки, избежав ненужных громоздких выкладок и ссылок на различные математические теоремы, полезно вначале ограничиться рассмотрением простейшей модели кристалла, для которой основные результаты могут быть описаны сравнительно простыми формулами в замкнутом виде. Такой известной моделью, сохраняющей большинство интересующих нас свойств реального кристалла и позволяющей во многих случаях получать правильные количественные оценки, является кристаллическая решетка, в которой все атомы смещаются как бы вдоль одного направления*). В подобной решетке смещение атома от равновесного положения описывается не вектором смещения, а скалярной величиной $u(n)$. К этой модели мы будем обращаться всякий раз, когда потребуется продемонстрировать схему расчета или идею математического метода, приводящих в реальном трехмерном кристалле к тем же качественным результатам, но ценой трудоемких и громоздких вычислений.

Перейдем теперь к выводу и записи уравнений малых колебаний в сформулированной модели кристаллической решетки. Рассмотрим потенциальную энергию кристалла, атомы которого слегка смещены из равновесных положений, и выразим ее через смещения атомов $u(n)$. Конечно, следует помнить, что энергия кристалла, вообще говоря, зависит от координат всех частиц, его составляющих — атомных ядер и электронов. Однако электроны столь подвижны, что в основном успевают приспособиться к движению ядер. Поэтому в каждый данный момент состояние электронов можно описывать функцией, зависящей от положения ядер в тот же момент времени. Возможность исключить электронные координаты из энергии кристалла

*) Эту модель мы используем практически на протяжении всей первой части, и только в конце § 5 изложен краткий анализ гармонических колебаний реального трехмерного кристалла. Результаты соответствующих разделов из § 5 подтверждают справедливость качественных выводов и общность утверждений, полученных нами с помощью указанной модели.

составляет] суть так называемого *адиабатического приближения*, которое может быть оправдано как при изучении гармонических колебаний, так и в случае учета малых ангармонизмов.

Считая потенциальную энергию кристалла U функцией только координат атомных ядер, фактически совпадающих с координатами центров тяжести атомов, разложим ее по степеням $u(\mathbf{n})$ и ограничимся первыми исчезающими членами разложения. Считая кристалл равновесным при $u(\mathbf{n}) = 0$, представим потенциальную энергию U в виде

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \beta(\mathbf{n}, \mathbf{n}') u(\mathbf{n}) u(\mathbf{n}'), \quad (2)$$

где $U_0 = \text{const}$ и суммирование производится по всем узлам кристалла.

Так как в первую очередь следует обсудить объемные свойства кристалла, будем считать кристаллическую решетку неограниченной. Тогда

$$\beta(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}'), \quad (3)$$

и энергия (2) запишется в виде

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u(\mathbf{n}) u(\mathbf{n}'). \quad (4)$$

Поскольку мы считаем, что при $u(\mathbf{n}) = 0$ кристалл находится в механически равновесном состоянии, то матрица $\beta(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ должна быть положительно определенной, в частности, обязательно должно выполняться неравенство $\alpha(0) > 0$.

Имея выражение (4), нетрудно написать уравнение движения каждого атома в кристалле:

$$m\ddot{u}(\mathbf{n}) = - \frac{\partial U}{\partial u(\mathbf{n})} = - \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u(\mathbf{n}'), \quad (5)$$

где m — масса атома, а точка является символом дифференцирования по времени.

В записи (5) легко увидеть одно важное свойство коэффициентов $\alpha(\mathbf{n})$. Предположим, что кристалл сместился как целое: $u(\mathbf{n}) = u_0 = \text{const}$. Тогда внутреннее состоя-

ние кристалла измениться не может (внешние силы отсутствуют); следовательно, на атомы не будут действовать никакие дополнительные силы. Из этого вытекает, что

$$\sum_{n'} \alpha(n - n') \equiv \sum_n \alpha(n) = 0. \quad (6)$$

Учтем условие (6) в записи уравнения движения (5):

$$m\ddot{u}(n) = \sum_{n'} \alpha(n - n') [u(n) - u(n')]. \quad (7)$$

Наибольший интерес представляет анализ стационарных колебаний, при которых все переменные величины зависят от времени только посредством множителя $e^{-i\omega t}$. Для таких колебаний вместо (7) мы получим

$$\omega^2 u(n) + \frac{1}{m} \sum_{n'} \alpha(n - n') [u(n) - u(n')] = 0. \quad (8)$$

Решение уравнения (8) можно искать в виде

$$u(n) = ue^{ikr(n)}. \quad (9)$$

Вектор k , который играет роль волнового вектора колебаний кристалла, называют *квазиволновым вектором*. О его возможных значениях речь будет идти ниже. Сейчас он является свободным параметром, характеризующим искомое решение. Подставляя (9) в (8), получим

$$\omega^2 = \frac{1}{m} \sum_{n'} \alpha(n - n') \{e^{ik[r(n') - r(n)]} - 1\}. \quad (10)$$

Но из определения (1) следует

$$r(n) - r(n') = \sum_{\alpha=1}^3 (n_\alpha - n'_\alpha) a_\alpha = r(n - n'),$$

поэтому

$$\omega^2 = \frac{1}{m} \sum_n \alpha(n) [e^{-ikr(n)} - 1], \quad (11)$$

или, что то же самое,

$$\omega^2 = \frac{1}{m} \sum_n \alpha(n) e^{-ikr(n)}. \quad (12)$$

Соотношение (11) или (12) связывает частоту возможных колебаний кристалла с квазиволновым вектором k . Подобное соотношение называется *законом дисперсии*. Следовательно, мы получили закон дисперсии

$$\omega = \omega_0(k)$$

для колебаний идеальной кристаллической решетки.

В простой решетке каждый атом является центром инверсии, поэтому

$$\alpha(n) = \alpha(-n), \quad (13)$$

и (11) сводится к записи, в которой очевидна вещественность квадрата частоты

$$\omega_0^2(k) = \frac{1}{m} \sum_n \alpha(n) [\cos kr(n) - 1]. \quad (14)$$

2. Анализ закона дисперсии

Изучая (14), заметим прежде всего, что закон дисперсии определяет частоту как периодическую функцию квазиволнового вектора с периодом, определяемым вектором обратной решетки:

$$\omega(k) = \omega(k + 2\pi B).$$

Это — основное существенное отличие закона дисперсии колебаний кристалла от закона дисперсии колебаний сплошной среды, так как для последнего характерна монотонная зависимость частоты от волнового вектора. Одновременно в этом проявляется отличие квазиволнового вектора k от обычного волнового вектора. Оказывается, что лишь значениям вектора k , лежащим внутри одной элементарной ячейки обратной решетки, отвечают физически неэквивалентные состояния кристалла.

Чтобы сделать более понятным появление ограничений на область физически неэквивалентных значений k , заметим, что всегда можно записать $k = 2\pi/\lambda$, где λ — длина

соответствующей волны. Рассмотрим для простоты одномерный кристалл (линейную цепочку) с периодом a , для которого «вектор» обратной решетки равен $b = 1/a$. Выберем в качестве элементарной ячейки обратной решетки интервал $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$. Тогда предельное значение квазиволнового числа $k = \pi/a$ будет отвечать длине волны $\lambda = 2a$. Из физического смысла волнового движения вытекает, что эта длина волны является минимальной в кристалле, поскольку мы имеем возможность наблюдать движение вещества только в тех точках, где находятся материальные частицы. На

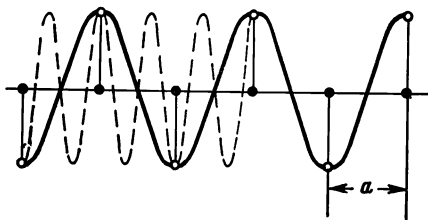


Рис. 6.

рис. 6 сплошная кривая соответствует волне именно такой длины (темными точками изображены положения равновесия частиц, а светлыми кружками — их положения в некоторый момент движения). Штриховая кривая соответствует волне с волновым числом, больше предельного на величину периода обратной решетки, а именно: $k = \pi/a + 2\pi/a = 3\pi/a$. Обе волны дают одинаково верное представление о движении кристалла, однако не имеет особого физического смысла вводить длину волны $\lambda = 2a/3$, не несущей никакой дополнительной информации о движении частиц.

Возвращаясь к анализу закона дисперсии, рассмотрим колебания с малыми k , т. е. колебания, для которых $ak \ll 1$. Разложим косинус в правой части (14) по степеням его аргумента и используем то обстоятельство, что функция $\alpha(n)$ быстро убывает с ростом «номера» n . Тогда в основном приближении

$$\omega_0^2(k) = -\frac{1}{2m} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 (ka_\alpha)(ka_\beta) \sum_n \alpha(n) n_\alpha n_\beta. \quad (15)$$

Обозначим $k = k\mathbf{x}$, введя единичный вектор направления \mathbf{x} в обратном пространстве, и представим (15) в виде

$$\omega^2 = s^2(\mathbf{x})k^2, \quad (16)$$

где

$$s^2(\kappa) = -\frac{1}{2m} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 (\kappa a_\alpha) (\kappa a_\beta) \sum_n \alpha(n) n_\alpha n_\beta. \quad (17)$$

Таким образом, при малых k мы получаем характерный для анизотропной сплошной среды линейный закон дисперсии звуковых колебаний:

$$\omega = s(\kappa)k, \quad (18)$$

где s имеет смысл фазовой скорости звука. Этот результат представляется вполне естественным, потому что малым k отвечают большие длины волн λ , и условие $ak \ll 1$ эквивалентно требованию $\lambda \gg a$, определяющему возможность перехода от механики кристаллической решетки к механике сплошной среды.

Используя предельный вид закона дисперсии и формулу (17), мы можем указать связь величины макроскопических механических параметров среды с атомарными характеристиками кристалла. Действительно, из теории упругости известно, что $s^2 \sim \mu/\rho$, где μ — характерный упругий модуль кристалла (например, его модуль сдвига), а ρ — плотность кристалла. Поэтому из (17) вытекает оценка

$$\mu \sim \frac{\rho}{m} \alpha a^2 \sim \frac{1}{a^3} \alpha a^2 = \frac{\alpha}{a}, \quad (19)$$

связывающая порядок величины макроскопических упругих модулей кристалла с величиной микроскопических силовых коэффициентов.

Что же касается произвольных величин k , то из записи (14) следует, что при $ak \sim 1$ характер закона дисперсии существенно определяется конкретным видом силовой матрицы $\alpha(n)$. В общем случае мы можем лишь утверждать, что когда коэффициенты $\alpha(n)$ достаточно быстро убывают с ростом номера n , функция $\omega(k)$ непрерывна, дифференцируема и обязательно ограничена. В одномерном кристалле ее типичный график имеет вид, схематически изображенный на рис. 7.

Таким образом, обращает на себя внимание еще одно характерное свойство закона дисперсии для простой решетки: возможные частоты колебаний кристалла запол-

няют полосу конечной ширины $(0, \omega_m)$, вне которой собственные частоты отсутствуют.

Легко оценить порядок величины максимальной частоты ω_m . Действительно, по порядку величины

$$\omega_m \sim \frac{s}{a} \sim 10^{13} \text{ сек}^{-1}. \quad (20)$$

В численной оценке (20) использованы типичные значения $a \sim 10^{-8}$ см и $s \sim 10^5$ см/сек.

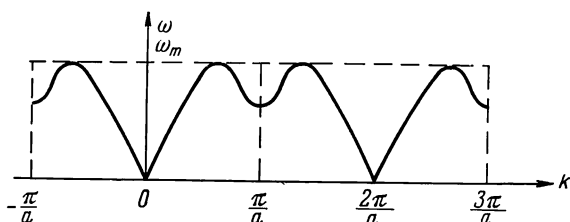


Рис. 7.

У верхнего края полосы возможных частот, т. е. при $\omega_m - \omega \ll \omega_m$ связь частоты и квазиволнового вектора должна описываться квадратичной зависимостью следующего вида:

$$\omega = \omega_m - \frac{1}{2} \gamma_{ij} (k_i - k_{mi}) (k_j - k_{mj}), \quad (21)$$

или, что то же самое,

$$\omega^2 = \omega_m^2 - \omega_m \gamma_{ij} (k_i - k_{mi}) (k_j - k_{mj}), \quad (22)$$

где вектор k_m определяется условием $\omega_0(k_m) = \omega_m$, а матрица постоянных коэффициентов γ_{ij} является положительно определенной. Линейные по $k - k_m$ члены не содержатся в (21), так как частота ω_m по определению является максимальной.

Закон дисперсии типа (21) или (22) принято называть квадратичным законом дисперсии.

3. Спектр значений квазиволнового вектора

Мы выяснили, что отдельные колебания (9), являющиеся независимыми состояниями движения всей кристаллической решетки, характеризуются различными значениями квазиволнового вектора k . При этом вопрос о возможных значениях самого вектора k остался открытым. Было лишь установлено, что при рассмотрении физически неэквивалентных колебаний кристалла достаточно ограничиться значениями k , лежащими в одной элементарной ячейке обратной решетки. Однако совершенно ясно, что далеко не все точки внутри элементарной ячейки в k -пространстве могут соответствовать независимым состояниям движения кристалла. Это следует хотя бы из того, что множество всех точек в элементарной ячейке имеет мощность континуума, а множество независимых колебаний, фактически совпадающее с множеством степеней свободы кристаллической решетки, даже в случае бесконечного кристалла является счетным. Если же речь идет о кристалле конечных размеров, то отмеченное обстоятельство становится тем более очевидным. Поэтому общее качественное исследование колебаний кристалла не может считаться полным, пока не установлен спектр возможных значений k .

Известно, что при заданном виде уравнения движения, т. е. при заданной силовой матрице $\alpha(n)$ в уравнении (8), для определения спектра собственных значений необходимо сформулировать некоторые граничные условия. Однако оказывается, что конкретный вид разумных («корректных») граничных условий мало влияет на спектр возможных значений k в кристалле, состоящем из очень большого числа атомов. Исходя из этого интуитивно ясного положения, мы выберем граничное условие так, чтобы оно максимально упрощало решение задачи. Таким условием является требование цикличности, согласно которому

$$u(r_n) = u(r_n + N_1 a_1) = u(r_n + N_2 a_2) = u(r_n + N_3 a_3). \quad (23)$$

При формулировке (23) предполагается, что кристалл имеет форму параллелепипеда с ребрами $N_\alpha a_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, 3$), т. е. содержит $N = N_1 N_2 N_3$ атомов.

Накладывая требование (23) на решение (9), получаем

$$k a_{\alpha} = \frac{2\pi}{N_{\alpha}} p_{\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, 3), \quad (24)$$

где p_{α} — целые числа. Чтобы ограничить себя значениями k , лежащими в одной элементарной ячейке обратной решетки, будем считать, что целые числа p_{α} принадлежат совокупности $p_{\alpha} = 0, 1, 2, \dots, N$. В кубической решетке формула (24) может быть значительно упрощена, если положить $L_{\alpha} = N_{\alpha} a$ и направить оси координат по осям симметрии четвертого порядка:

$$k_x = \frac{2\pi}{L_1} p_1, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_2} p_2, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_3} p_3. \quad (25)$$

Наконец, совокупность целых чисел p_{α} обычно берут расположенной симметрично на числовой оси:

$$p_{\alpha} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N_{\alpha} - 1}{2} \quad (\alpha = 1, 2, 3).$$

Из (24) или (25) следует, что дискретные значения компонент вектора k разделены интервалами $\Delta k \sim 1/L$, убывающими с увеличением линейных размеров кристалла. Поэтому в том случае, когда все линейные размеры кристалла являются макроскопическими, спектр значений k может считаться квазинепрерывным. Последнее свойство спектра k мы использовали при анализе закона дисперсии, рассматривая частоту как непрерывную функцию квазиволнового вектора.

4. Закон дисперсии для решетки с взаимодействием ближайших соседей

Получим явный вид закона дисперсии для колебаний простой решетки в случае взаимодействия ближайших соседей.

Вначале рассмотрим пример весьма симметричной решетки, каковой является кубическая решетка. В простой кубической решетке основные трансляционные векторы a_{α} ($\alpha = 1, 2, 3$) можно направить вдоль осей симметрии четвертого порядка, и тогда $|a_1| = |a_2| = |a_3| = a$. Целочисленный вектор n , соединяющий ближайших соседей, пробегает значения $(\pm 1, 0, 0)$, $(0, \pm 1, 0)$, $(0, 0, \pm 1)$,

которые мы обозначим $n^{(1)}$. Очевидно, что для всех значений $n^{(1)}$ величины $\alpha(n^{(1)})$ совпадают: $\alpha(n^{(1)}) = \alpha_1$. Таким образом, колебания простой кубической решетки с взаимодействием ближайших соседей характеризуются двумя упругими коэффициентами: $\alpha_0 = \alpha(0)$ и α_1 . Из соотношения (6) вытекает

$$\alpha_0 + 6\alpha_1 = 0, \quad \alpha_1 = -\frac{\alpha_0}{6}. \quad (26)$$

Следовательно,

$$\omega^2(k) = -\frac{2\alpha_1}{m} (3 - \cos ak_x - \cos ak_y - \cos ak_z). \quad (27)$$

Если теперь воспользоваться формулой (26), то закону дисперсии (27) легко придать следующий вид:

$$\omega^2(k) = \frac{2\alpha_0}{3m} \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2} \right). \quad (28)$$

Из (28) следует, что частота принимает максимальное значение $\omega_m = \sqrt{2\alpha_0/m}$ в вершинах элементарной ячейки обратной решетки ($k_x = \pm k_y = \pm k_z = \pm \pi/a$).

Для длинноволновых колебаний закон дисперсии (28) сводится к соотношению

$$\omega(k) = sk, \quad s^2 = \frac{\alpha_0 a^2}{6m}, \quad (29)$$

где s — скорость звука в кубической решетке.

Помимо очень симметричной кубической решетки, интересно проанализировать примеры сильно анизотропных решеток. В качестве такой анизотропной модели рассмотрим тетрагональную решетку с различным взаимодействием ближайших атомов в базисной плоскости xOy и вдоль оси четвертого порядка (оси z). Выбирая естественным образом основные трансляционные векторы, обозначим $|a_1| = |a_2| = a$, $|a_3| = b$. Взаимодействие соседних атомов в базисной плоскости будем описывать элементом силовой матрицы α_1 , а взаимодействие вдоль оси z — элементом α_2 . На основании соотношения (6) имеем

$$\alpha_0 + 4\alpha_1 + 2\alpha_2 = 0. \quad (30)$$

Поскольку $\alpha_0 \equiv \alpha(0) > 0$, то из (30) следует, что

$2\alpha_1 + \alpha_2 < 0$. Мы будем считать $\alpha_1 < 0$ и $\alpha_2 < 0$. Закон дисперсии (14) для рассматриваемой решетки можно записать в виде

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_1^2 \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} \right) + 2\omega_2^2 \sin^2 \frac{bk_z}{2}, \quad (31)$$

где обозначено $\omega_1^2 = -4\alpha_1/m$ и $\omega_2^2 = -2\alpha_2/m$.

Предположим теперь, что взаимодействие атомов в базисной плоскости намного сильнее такого вдоль оси четвертого порядка:

$$\omega_1 \gg \omega_2. \quad (32)$$

Подобное предположение превращает тетрагональную решетку в модель кристалла со слоистой структурой, отдельные атомные слои которого слабо связаны друг с другом. Формула (31) для такого кристалла будет определять крайне анизотропный закон дисперсии, проявление чего легко увидеть в низкочастотной части спектра колебаний.

Рассмотрим частоты $\omega \ll \omega_1$, при которых формула (31) значительно упрощается:

$$\omega^2 = s_1^2 k_{\perp}^2 + 2\omega_2^2 \sin^2 \frac{bk_z}{2}, \quad k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad s_1^2 = \frac{1}{4} a^2 \omega_1^2, \quad (33)$$

где величина s_1 имеет смысл скорости звука в базисной плоскости *).

Помня условие (32), мы оставили без изменения второе слагаемое в правой части (33), так как из предположения $\omega \ll \omega_1$ вовсе не следует малость величины bk_z . Этим самым учитывается то обстоятельство, что при сравнительно низких частотах составляющая квазиволнового вектора вдоль оси z может быть не малой.

В длинноволновом пределе, когда $bk_z \ll 1$, формула (33) дает закон дисперсии звуковых колебаний в

*) Квадратичное приближение по k_{\perp} в формуле (33), т. е. пренебрежение четвертыми степенями k_x и k_y и одновременный учет членов порядка ω_2^2 , имеет смысл лишь при условии $s_1 k_{\perp} (ak_{\perp}) \ll \ll \omega_2$, которое безусловно выполняется, например, для $ak_{\perp} \lesssim \omega_2/\omega_1$.

анизотропной среде:

$$\omega^2 = s_1^2 k_{\perp}^2 + s_2^2 k_z^2, \quad s_2^2 = \frac{1}{2} b^2 \omega_2^2, \quad (34)$$

где s_2 — скорость звука вдоль оси z .

Если параметры решетки a и b отличаются незначительно (имеют одинаковый порядок величины), то скорость звука в базисной плоскости «слоистого» кристалла намного больше скорости звука в перпендикулярном направлении.

Запись (33) может быть упрощена еще в одном важном случае, а именно в случае частот колебаний, лежащих в интервале

$$\omega_2 \ll \omega \ll \omega_1. \quad (35)$$

Для таких частот второе слагаемое в (33) может не учитываться, и закон дисперсии сводится к соотношению

$$\omega = s_1 k_{\perp} \equiv s_1 \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (36)$$

совпадающему с законом дисперсии звуковых колебаний двухмерной упругой среды. Следовательно, при условии (35) частота колебаний трехмерного «слоистого» кристалла не зависит от составляющей волнового вектора вдоль направления, перпендикулярного его «слоям».

Ясно, что наряду со «слоистым» кристаллом можно рассмотреть модель кристалла с «игольчатой» структурой, в котором одномерные цепочки атомов слабо взаимодействуют одна с другой. Чтобы получить такую модель, достаточно предположить $\omega_1 \ll \omega_2$. Тогда все изложенные выше рассуждения можно повторить, поменяв местами номера 1 и 2, а также компоненты k_{\perp} и k_z . В частности, легко понять, что в интервале частот $\omega_1 \ll \omega \ll \omega_2$ закон дисперсии колебаний такого кристалла будет совпадать с законом дисперсии упругих колебаний одномерной системы:

$$\omega = s_2 k_z, \quad (37)$$

т. е. частота колебаний не будет зависеть от проекции волнового вектора на плоскость, перпендикулярную направлению сильного взаимодействия атомов.

§ 2. ИЗОЧАСТОТНЫЕ ПОВЕРХНОСТИ И СПЕКТР ЧАСТОТ

1. Поверхности постоянной частоты

В кристалле, где все атомы смещаются вдоль одного направления, закон дисперсии

$$\omega = \omega_0(k)$$

содержит исчерпывающую информацию о характере колебательных состояний решетки. Однако для понимания ряда явлений, связанных с колебаниями решетки, более удобным является не аналитическая запись закона дисперсии, а его специфическое геометрическое (или, точнее, топографическое) представление. Последнее связано с введением и анализом так называемых изочастотных поверхностей.

Изочастотной поверхностью, или поверхностью постоянной частоты, называют поверхность в k -пространстве, описываемую уравнением

$$\omega_0(k) = \omega, \quad \omega = \text{const}, \quad (1)$$

или, что то же самое, уравнением

$$\omega_0^2(k) = \varepsilon, \quad \varepsilon = \text{const}. \quad (2)$$

Выясним, как меняется форма изочастотных поверхностей с изменением частоты от $\omega = 0$ до $\omega = \omega_m$. При малых частотах закон дисперсии кристалла совпадает с законом дисперсии звуковых волн, а потому изочастотная поверхность определяется уравнением

$$k = \frac{\omega}{s(\kappa)}, \quad \kappa = \frac{k}{k}, \quad (3)$$

где $s(\kappa)$ — скорость звука.

Поскольку скорость звука в кристалле является конечной величиной при всех направлениях κ , из (3) следует, что соответствующие изочастотные поверхности являются замкнутыми (и подобными). На рис. 8 схематически изображено сечение этих поверхностей некоторой плоскостью, проходящей через точку $k = 0$. Очевидно, что отмеченные на рис. 8 частоты ω_1 и ω_2 удовлетворяют условию $\omega_1 < \omega_2$

(изочастотная поверхность для меньшей частоты помещается внутри поверхности для большей частоты).

Столь же простой вид имеют изочастотные поверхности для частот, близких к ω_m . Действительно, из формулы (21) предыдущего параграфа следует, что поверхности постоянной частоты имеют в этом случае

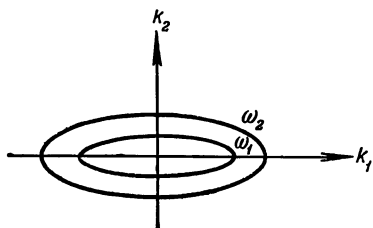


Рис. 8.

вид эллипсоидов с центрами в точке $\mathbf{k} = \mathbf{k}_m$, соответствующей максимальной частоте ω_m . Отсчитывая вектор \mathbf{k} от указанной точки, мы получим следующее уравнение эллипсоида:

$$\frac{1}{2} \gamma_{ij} k_i k_j = \omega_m - \omega,$$

$$\omega_m - \omega \ll \omega_m. \quad (4)$$

Сечениям семейства эллипсоидов (4) плоскостью, проходящей через их общий центр, можно снова сопоставить рис. 8, однако теперь $\omega_1 > \omega_2$ (изочастотная поверхность для большей частоты помещается внутри поверхности для меньшей частоты).

Выяснив топологию изочастотных поверхностей у границ полосы собственных частот, заметим, что в силу свойств периодичности закона дисперсии точки, в которых $\omega = 0$ и $\omega = \omega_m$, должны периодически повторяться в обратном пространстве. Для изображения соответствующих геометрических образов рассмотрим пример достаточно симметричного кристалла, частоты колебаний которого принимают максимальные значения только в вершинах элементарной ячейки обратной решетки. Пусть плоскость $k_1 0 k_2$ в обратном пространстве отвечает некоторому «хорошему» кристаллографическому направлению. Обозначим через b_1 и b_2 векторы обратной решетки соответственно вдоль осей k_1 и k_2 и примем, что $\omega = 0$ в точке $k_1 = k_2 = 0$, а $\omega = \omega_m$ при $k_1 = \pi b_1$, $k_2 = \pi b_2$. Тогда изображенные на рис. 9 точки $(0, 0)$, $(0, 2\pi b_2)$, $(2\pi b_1, 0)$ и $(2\pi b_1, 2\pi b_2)$ будут окружены замкнутыми изочастотными поверхностями, «расширяющимися» с ростом ω ($\omega \ll \omega_m$), а вокруг точки $(\pi b_1, \pi b_2)$ расположатся замкнутые поверхности, «сжимающиеся» по мере роста частоты ($\omega_m - \omega \ll \omega_m$). Поскольку ясно, что рассмотренные

семейства «расширяющихся» и «сжимающихся с ростом ω замкнутых поверхностей не могут перейти одно в другое без изменения их топологии, то, помимо замкнутых изочастотных поверхностей, полностью помешающихся в

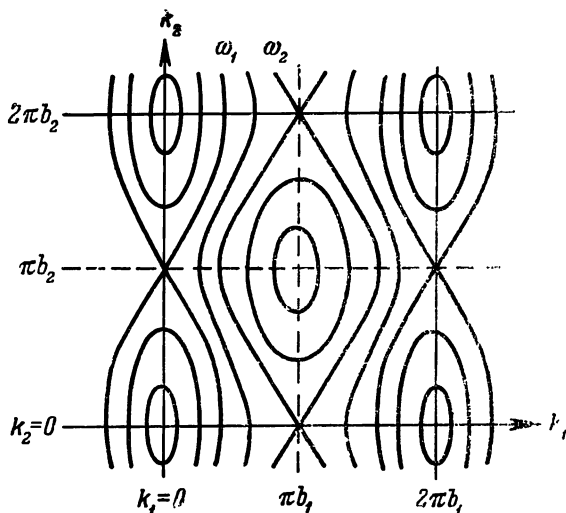


Рис. 9

одной элементарной ячейке обратной решетки, должны существовать изочастотные поверхности другого типа. На рис. 9 таковыми являются поверхности постоянных частот, лежащих в интервале $\omega_1 < \omega < \omega_2$. Это — поверхности, непрерывно переходящие из одной элементарной ячейки обратной решетки в другую. Подобные поверхности принято называть *открытыми*.

Обычно точки типа $(0, \pi b_2)$ или $(2\pi b_1, \pi b_2)$, через которые осуществляется переход от замкнутых изочастотных поверхностей к открытым, являются коническими точками в трехмерном k -пространстве. Вблизи таких точек закон дисперсии имеет вид

$$\omega = \omega_k + \gamma_1 k_1^2 + \gamma_2 k_2^2 - \gamma_3 k_3^2, \quad (5)$$

где постоянные коэффициенты γ_1 , γ_2 и γ_3 имеют одинаковые знаки, вектор k отсчитывается от конической точки,

а ось k_3 направлена по оси соответствующего конуса. Значение ω_k в конической точке определяется конкретным видом силовой матрицы $\alpha(n)$ рассматриваемого кристалла.

Вытекающее из (5) уравнение для изочастотных поверхностей определяет семейство гиперboloидов. Если все коэффициенты γ_α положительны, то при $\omega < \omega_k$ мы получаем двухполостные гиперboloиды, а при $\omega > \omega_k$ — однополостные гиперboloиды. Схематическое изображение этих поверхностей приведено на рис. 10, где $\omega_1 < \omega_k < \omega_2$.

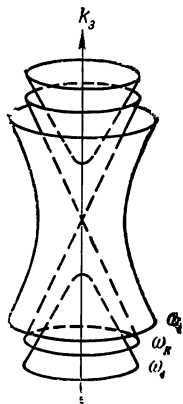


Рис. 10.

Заканчивая геометрический анализ поверхностей постоянной частоты, заметим, что форма изочастотной поверхности, проходящей через некоторую точку k , однозначно определяет направление групповой скорости соответствующей волны. Действительно, групповая скорость определяется формулой

$$v = \frac{\partial \omega}{\partial k} \equiv \nabla_k \omega_0(k), \quad (6)$$

где символ градиента означает операцию требуемого дифференцирования в k -пространстве. Но известно, что градиент направлен по нормали к поверхности постоянного уровня той функции, для которой он вычисляется. Поэтому скорость $v(k)$ направлена по нормали к изочастотной поверхности, проходящей через точку k .

2. Функция распределения частот

Для объяснения ряда свойств кристалла, обусловленных колебаниями решетки, не требуется столь полная информация о колебаниях, которая содержится в законе дисперсии, а достаточно знать лишь распределение колебаний по частотам. Имея это в виду, вводят понятие плотности колебаний или функции распределения частот.

Введем обозначение $\varepsilon = \omega^2$ (и сохраним его в дальнейшем). Тогда число колебаний кристалла dn , квадраты частот которых лежат в интервале $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$, можно

записать в виде

$$dn = N g(\varepsilon) d\varepsilon,$$

где N — число атомов в кристалле. Функцию $g(\varepsilon)$ мы будем называть *плотностью колебаний*. Очевидно, что имеет место формула

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k})), \quad (7)$$

где зависимость $\omega_0^2(\mathbf{k})$ определяется законом дисперсии кристалла, а суммирование производится по всем физически неэквивалентным значениям этого вектора, находящимся в одной ячейке обратной решетки.

Воспользуемся квазинепрерывностью спектра значений вектора \mathbf{k} и перейдем от суммирования в (7) к интегрированию. Учтя соотношения (24) или (25) предыдущего параграфа, легко получить правило перехода к интегрированию:

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int f(\mathbf{k}) d^3k, \quad (8)$$

где интегрирование производится по объему одной элементарной ячейки в \mathbf{k} -пространстве.

Преобразуем формулу (7), переходя к интегрированию по правилу (8) и проделав замену переменных интегрирования:

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) &= \frac{V_0}{(2\pi)^3} \int \delta[\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k})] d^3k = \\ &= \frac{V_0}{(2\pi)^3} \int \delta(\varepsilon - \omega^2) d\omega^2 \frac{dS_{\mathbf{k}}}{|\nabla \omega_0^2(\mathbf{k})|}, \quad (9) \end{aligned}$$

где V_0 — объем элементарной ячейки кристалла, а $dS_{\mathbf{k}}$ — элемент площади изочастотной поверхности $\omega_0^2(\mathbf{k}) = \omega^2$.

Содержащийся в записи (9) якобиан перехода к новым переменным может быть получен следующим образом. Введем в окрестности некоторой точки на поверхности $\omega_0^2(\mathbf{k}) = \omega^2$ такие ортогональные координаты (u, v) , чтобы $dS_{\mathbf{k}} = du dv$, и запишем

$$d\omega^2 dS_{\mathbf{k}} = d\omega^2 du dv = \left| \frac{\partial(\omega^2, u, v)}{\partial(k_x, k_y, k_z)} \right| d^3k.$$

Выберем теперь в этой точке на рассматриваемой поверхности декартовы координаты так, чтобы ось k_x совпала с координатной линией u , а ось k_y — с координатной линией v в этой точке. Тогда

$$\left| \frac{\partial (\omega^2, u, v)}{\partial (k_z, k_x, k_y)} \right| = \left| \frac{\partial \omega^2}{\partial k_z} \right| = |\nabla \omega_0^2(k)|, \quad (10)$$

Последняя часть равенства (10) получена на основании того, что при указанном выборе декартовых координат ось k_z направлена по нормали к поверхности $\omega_0^2(k) = \omega^2$, и потому соответствующая производная совпадает с градиентом функции $\omega_0^2(k)$.

Выполнив в (9) интегрирование по ω^2 , получим окончательную формулу для плотности колебаний

$$g(\varepsilon) = \frac{V_0}{(2\pi)^3} \oint_{\omega_0^2(k)=\varepsilon} \frac{dS_k}{|\nabla \omega^2|}, \quad (11)$$

где интегрирование производится по изочастотной поверхности $\omega_0^2(k) = \varepsilon$.

Часто удобно пользоваться не плотностью колебаний $g(\varepsilon)$, а функцией распределения по частотам ω . Если записать число колебаний, частоты которых лежат в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$, в виде

$$dn = \nu(\omega) d\omega,$$

то $\nu(\omega)$ определит функцию распределения частот.

Между функциями $\nu(\omega)$ и $g(\varepsilon)$ существует очевидное соотношение

$$\nu(\omega) = 2N \omega g(\omega^2), \quad (12)$$

и для функции $\nu(\omega)$ можно записать формулу, аналогичную (11), а именно:

$$\nu(\omega) = \frac{V_0}{(2\pi)^3} \oint_{\omega_0(k)=\omega} \frac{dS_k}{v}, \quad (13)$$

в которой учтено определение (6).

Иногда полезно знать не плотность колебаний, а полное число колебаний, частоты которых меньше некоторой

фиксированной частоты ω . Ясно, что можно записать

$$n(\omega) = \int_0^{\omega} \nu(\omega) d\omega \equiv N \int_0^{\omega^2} g(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{V}{(2\pi)^3} \Omega(\omega), \quad (14)$$

где $\Omega(\omega)$ — это объем в k -пространстве, ограниченный изочастотной поверхностью $\omega_0(k) = \omega$.

Помимо выражений (11) или (13), которые весьма удобны для аналитического вычисления плотности колебаний при известном законе дисперсии, существуют другие ее представления, которые могут оказаться полезными при разрешении некоторых вопросов, относящихся к спектру колебаний. Поэтому, возвращаясь к исходному определению (7), рассмотрим его с другой точки зрения. Используем одно из определений сингулярной функции $\delta(x)$ и запишем следующую цепочку равенств:

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \frac{\gamma}{x^2 + \gamma^2} = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \frac{1}{x - i\gamma}, \quad (15)$$

где Im является символом мнимой части соответствующего комплексного числа.

Наконец, запишем вытекающее из (15) соотношение

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \frac{d}{dx} \ln(x - i\gamma)$$

и используем его для преобразования формулы (7):

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \frac{d}{d\varepsilon} \frac{1}{N} \sum_k \ln[\varepsilon - \omega_0^2(k) - i\gamma]. \quad (16)$$

Переставим порядок различных операций в (16) и запишем

$$Ng(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \frac{d}{d\varepsilon} \operatorname{Im} \ln D(\varepsilon - i\gamma), \quad (17)$$

где введено новое обозначение

$$D(\varepsilon) = \prod_k [\varepsilon - \omega_0^2(k)]. \quad (18)$$

Функция $D(\varepsilon)$ интересна тем, что ее нули непосредственно определяют квадраты частот колебаний кристалла. Действительно, квадраты возможных частот совпадают с набором корней уравнения

$$D(\omega^2) = 0. \quad (19)$$

3. Анализ плотности колебаний

Конкретный вид функции $g(\epsilon)$ или $\nu(\omega)$, так же как и закона дисперсии $\omega_0(k)$, различен у разных кристаллов, поэтому мы можем высказать определенные общие суждения только о поведении плотности колебаний вблизи некоторых особых точек. Такими особыми точками являются, прежде всего, концы полосы собственных частот ($\omega = 0$ и $\omega = \omega_m$).

Мы начнем с анализа функций распределения в низкочастотной области ($\omega \ll \omega_m$), где закон дисперсии наиболее прост:

$$\omega = s(\kappa)k. \quad (20)$$

Из (20) следует, что групповая скорость волны колебаний $v = \nabla \omega_0(k) = v_0(\kappa)$ зависит только от направления вектора κ (и не зависит от его величины), а дифференциал площади на изочастотной поверхности (3) можно записать в виде

$$dS_{\kappa} = \frac{k^2 dO}{\cos \theta} = \frac{|\nabla \omega|}{(\kappa \nabla \omega)} k^2(\kappa) dO = \omega^2 \frac{v_0(\kappa) dO}{s^2(\kappa) (\kappa v_0)}, \quad (21)$$

где dO — элемент телесного угла, а θ — угол между вектором κ и направлением нормали к изочастотной поверхности в соответствующей точке, т. е. направлением градиента $\nabla \omega$.

Подставляя (21) в (13), мы получим для функции распределения частот следующее выражение:

$$\nu(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 s_0^3} \omega^2, \quad (22)$$

при записи которого использовано обозначение

$$\frac{1}{s_0^3} = \frac{1}{4\pi} \oint \frac{dO}{s^2(\kappa) (\kappa v_0(\kappa))},$$

подразумевающее интегрирование по всем направлениям вектора κ (по полному телесному углу).

Таким образом, мы показали, что в низкочастотной области ($\omega \ll \omega_m$) функция распределения частот $\nu(\omega)$ пропорциональна квадрату частоты. Последнее является прямым следствием линейного характера зависимости $\omega = \omega(k)$ в области низких частот.

Что же касается плотности колебаний $g(\varepsilon)$ в этой области, то для нее может быть получено соответствующее выражение на основании (12):

$$g(\varepsilon) = \frac{V_0}{(2\pi)^2 s_0^3} \sqrt{\varepsilon}, \quad \varepsilon \ll \omega_m^2. \quad (23)$$

Появление так называемой «корневой особенности» у плотности колебаний связано с тем, что закон дисперсии, записанный в виде $\varepsilon = \varepsilon(k) \equiv \omega^2(k)$, является квадратичным при малых ε .

У высокочастотной границы непрерывного спектра ($\omega_m - \omega \ll \omega_m$) путем указанного при записи (4) выбора начала отсчета для вектора k закон дисперсии может быть приведен к виду

$$\omega = \omega_m - \frac{1}{2} \gamma_{ij} k_i k_j, \quad (24)$$

а уравнению изочастотных поверхностей можно придать следующую форму записи:

$$k^2(x) = \frac{2(\omega_m - \omega)}{\gamma_{ij} x_i x_j}. \quad (25)$$

Из (24) и (6) следует, что

$$v_i = \frac{\partial \omega}{\partial k_i} = -\gamma_{ij} k_j = -k \gamma_{ij} x_j,$$

поэтому дифференциал площади поверхности (25) может быть преобразован следующим образом:

$$dS_k = \frac{|\nabla \omega|}{(xv)} k^2(x) dO = \sqrt{2(\omega_m - \omega)} \frac{|\nabla \omega| dO}{(\gamma_{ij} x_i x_j)^{3/2}}. \quad (26)$$

Подставляя (26) в (13), получим для функции распределения частот такое выражение:

$$v(\omega) = \frac{V}{Q} \sqrt{\omega_m - \omega}, \quad (27)$$

где посредством Q обозначена величина, не зависящая от частоты и определяемая равенством

$$\frac{1}{Q} = \frac{V\sqrt{2}}{(2\pi)^3} \oint \frac{dO}{(\gamma_{ij} x_i x_j)^{3/2}},$$

В котором интегрирование производится по полному телесному углу. В соответствии со сказанным выше описываемая выражением (27) «корневая особенность» функции распределения частот у верхней границы спектра есть следствие квадратичного закона дисперсии (24).

Плотность колебаний $g(\varepsilon)$ у высокочастотного края полосы собственных частот имеет вид

$$g(\varepsilon) = \frac{V_0}{(2\omega_m)^{3/2}Q} \sqrt{\omega_m^2 - \varepsilon}, \quad \omega_m^2 - \varepsilon \ll \omega_m^2. \quad (28)$$

Сравнивая (23) и (28), мы можем заключить, что плотность колебаний $g(\varepsilon)$ исчезает на концах полосы собственных частот по закону

$$g(\varepsilon) = \text{const} \sqrt{|\varepsilon - \varepsilon^*|},$$

где ε^* определяет положение какой-либо из границ непрерывного спектра квадратов частот.

Помимо границ непрерывного спектра, довольно общему анализу могут быть подвергнуты окрестности частот, которые разделяют изочастотные поверхности разной топологии. Мы ограничимся рассмотрением того случая, когда «граничная» изочастотная поверхность $\omega = \omega_K$ обладает конической точкой, закон дисперсии вблизи которой дается соотношением (5). Предположим, что вне малой окрестности конической точки все изочастотные поверхности тонкого слоя вблизи $\omega = \omega_K$ являются регулярными, и скорость v на них не обращается в нуль. Тогда особые свойства плотности колебаний, которые мы ожидаем найти при $\omega = \omega_K$, могут появиться лишь за счет вклада колебаний, соответствующих малой окрестности конической точки. Поэтому проведем пару плоскостей $k_3 = \pm K_3$, проходящих на таком расстоянии от конической точки, где изочастотные поверхности еще имеют вид гиперboloидов, изображенных на рис. 10, и вычислим число состояний $\delta n(\omega)$ в объеме $\delta\Omega(\omega)$, ограниченном этими плоскостями и гиперboloидом $\omega_0(k) = \omega$. Для упрощения выкладок положим $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$, т. е. будем считать изочастотные поверхности вблизи конической точки гиперboloидами вращения. Кроме того, примем $\gamma > 0$ и $\gamma_3 > 0$.

Если $\omega < \omega_K$, то легко убедиться, что объем $\delta\Omega(\omega)$ определяется формулой

$$\delta\Omega(\omega) = 2\pi \int_{k_0}^{K_3} (k_1^2 + k_2^2) dk_3 = 2\pi \left(\frac{\gamma_3}{\gamma} \right) \int_{k_0}^{K_3} (k_3^2 - k_0^2) dk_3,$$

где множитель 2 учитывает наличие двух полостей гиперболоида, а k_0 определяет «вершину» гиперболоида:

$$k_0 = \sqrt{\frac{\omega_K - \omega}{\gamma_3}}.$$

Таким образом, оказывается, что

$$\delta\Omega(\omega) = 2\pi \left(\frac{\gamma_3}{\gamma} \right) \left\{ \frac{1}{3} K_3^3 + K_3 \frac{\omega - \omega_K}{\gamma_3} + \frac{2}{3} \left(\frac{\omega_K - \omega}{\gamma_3} \right)^{3/2} \right\}. \quad (29)$$

Если мы теперь учтем (14) и определение функции распределения частот $\nu(\omega)$, то на основании (29) сможем вычислить вклад в $\nu(\omega)$ тех состояний, которые отвечают окрестности конической точки:

$$\delta\nu(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 \gamma \sqrt{\gamma_3}} \left\{ \sqrt{\gamma_3} K_3 - \sqrt{\omega_K - \omega} \right\}, \quad \omega < \omega_K. \quad (30)$$

Вычислим теперь ту же функцию для $\omega > \omega_K$. Поскольку в этом случае изочастотная поверхность имеет форму однополостного гиперболоида, то

$$\delta\Omega(\omega) = \int_{-K_3}^{K_3} \pi (k_1^2 + k_2^2) dk_3 = 2\pi \left(\frac{\gamma_3}{\gamma} \right) \left\{ \frac{1}{3} K_3^3 + K_3 \frac{\omega - \omega_K}{\gamma_3} \right\}.$$

Следовательно, вклад в функцию $\nu(\omega)$ малой окрестности конической точки можно считать не зависящим от частоты:

$$\delta\nu(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2 \gamma} K_3, \quad \omega > \omega_K. \quad (31)$$

Вклад в плотность колебаний вблизи $\omega = \omega_K$ тех колебательных состояний, которые соответствуют точкам в k -пространстве, лежащем вне окрестности конической точки, описывается регулярной функцией частоты. Поэтому, сравнивая (31) и (30), мы видим, что, во-первых, функция $\nu(\omega)$ является непрерывной функцией частоты

в точке $\omega = \omega_K$, во-вторых, ее график терпит в этой точке излом, а в-третьих, ее производная имеет бесконечный скачок. Весьма характерно, что при подходе к точке $\omega = \omega_K$ со стороны, соответствующей замкнутым изочастотным поверхностям, производная $dv/d\omega$ обращается в бесконечность, а при подходе к той же точке с другой стороны эта производная остается ограниченной.

Ту же особенность в рассматриваемой точке имеет и плотность колебаний $g(\varepsilon)$, а именно:

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} g(\varepsilon_K) - A \sqrt{\varepsilon_K - \varepsilon} + O(\varepsilon_K - \varepsilon), & \varepsilon < \varepsilon_K; \\ g(\varepsilon_K) + O(\varepsilon - \varepsilon_K), & \varepsilon > \varepsilon_K, \end{cases} \quad (32)$$

где $\varepsilon_K = \omega_K^2$ — квадрат частоты в конической точке, A — положительная постоянная величина, а $O(x)$, как обычно, определяет малую величину порядка x (при малых x).

Спектральные функции $v(\omega)$ и $g(\varepsilon)$ могут обладать особенностями и в других точках, но последние всегда связаны с частотами, при которых происходят некоторые топологические изменения изочастотных поверхностей. Проведенный в самом начале параграфа анализ изочастотных поверхностей должен привести нас к выводу, что в интервале частот $(0, \omega_m)$ существует по крайней мере две частоты, при которых изочастотные поверхности изменяют

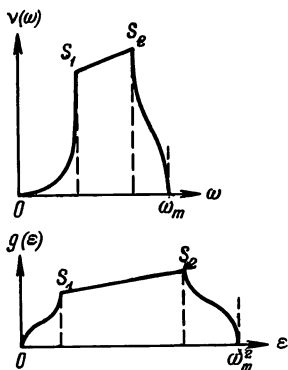


Рис. 11.

свою топологию. Это — частоты, отделяющие «слой» открытых изочастотных поверхностей от замкнутых поверхностей, и они, как правило, определяют поверхности, обладающие коническими точками. Следовательно, нужно ожидать по крайней мере двух критических частот, при которых спектральные функции имеют описанные выше особенности. Поэтому графики функций $v(\omega)$ и $g(\varepsilon)$ схематически должны изображаться кривыми, представленными на рис. 11.

В окрестности критических частот, связанных с коническими точками, функция $\omega_0(k)$ всегда представима в виде (5), где все коэффициенты γ_α ($\alpha = 1, 2, 3$) имеют одинаковые знаки. По принятой терминологии подобные частоты называются *аналитическими критическими точками типа S*. Различают критические точки типа S_1 , когда все коэффициенты γ_α положительны, и точки типа S_2 , когда γ_α отрицательны. Полученный нами стандартный вид сингулярностей функций $\nu(\omega)$ или $g(\varepsilon)$ в точках типа S , а также отмеченное выше минимальное число этих точек внутри интервала $(0, \omega_m)$ регламентируется следующим принципом, посвящим название *теоремы ван Хоа*.

Спектр частот колебаний кристалла должен содержать по крайней мере по одной критической точке обоих типов S_1 и S_2 . В малой окрестности точки типа S_1 функция распределения частот имеет вид

$$\nu(\omega) = \begin{cases} \nu(\omega_K) - B_1 \sqrt{\omega_K - \omega} + O(\omega_K - \omega), & \omega < \omega_K; \\ \nu(\omega_K) + O(\omega - \omega_K), & \omega > \omega_K, \end{cases}$$

где ω_K — критическая частота, а в окрестности точки типа S_2 для нее справедливо выражение

$$\nu(\omega) = \begin{cases} \nu(\omega_K) + O(\omega_K - \omega), & \omega < \omega_K, \\ \nu(\omega_K) - B_2 \sqrt{\omega - \omega_K} + O(\omega - \omega_K), & \omega > \omega_K, \end{cases}$$

где B_1 и B_2 — некоторые положительные постоянные величины.

Что же касается очевидных свойств плотности колебаний и числа ее критических точек, то мы можем резюмировать основные выводы последнего раздела в виде утверждения, что функция $g(\varepsilon)$ имеет по крайней мере четыре сингулярные точки: два конца полосы собственных частот и две критические точки типа S . Во всех этих точках особенностью $g(\varepsilon)$ является то, что с одной стороны от каждой из этих точек функция регулярна (в частности, может тождественно обращаться в нуль), а с другой стороны $g(\varepsilon)$ имеет вид

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon^*) \pm \text{const} \sqrt{|\varepsilon - \varepsilon^*|},$$

где ε^* обозначает квадрат частоты в соответствующей сингулярной точке.

§ 3. КВАНТОВАНИЕ КОЛЕБАНИЙ КРИСТАЛЛА

1. Нормальные координаты колебаний кристалла

Мы убедились, что собственные колебания кристалла могут быть представлены в виде плоских монохроматических волн

$$u(\mathbf{n}, t) = u_0 e^{i(\mathbf{k}r(\mathbf{n}) - \omega t)}, \quad (1)$$

в которых частота ω связана с квазиволновым вектором \mathbf{k} законом дисперсии $\omega = \omega_0(\mathbf{k})$.

В соответствии с обсужденными ранее свойствами периодичности в \mathbf{k} -пространстве будем считать векторы \mathbf{k} находящимися в одной элементарной ячейке обратной решетки. При таком условии колебания, соответствующие различным \mathbf{k} , ортогональны. Произведем нормировку собственных функций (1) и, выделив временной множитель $e^{-i\omega t}$, запишем их координатную зависимость в виде

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k}r(\mathbf{n})}. \quad (2)$$

Множитель $N^{-1/2}$ в правой части (2) однозначно вытекает из условия нормировки

$$\sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{n}) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{n}) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (3)$$

где звездочка, как обычно, является знаком комплексного сопряжения, а $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ — это трехмерный символ Кронекера.

Произвольное движение атомов кристаллической решетки может быть представлено как суперпозиция колебаний типа (2), а именно:

$$u(\mathbf{n}, t) = \sum_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}}(t) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}). \quad (4)$$

Величины $Q_{\mathbf{k}}(t) \equiv Q(\mathbf{k})$ называются комплексными нормальными координатами колебаний решетки. Поскольку смещения атомов (4) описываются вещественной функцией, нормальные координаты должны обладать очевидным свойством:

$$Q_{\mathbf{k}}^*(t) = Q_{-\mathbf{k}}(t). \quad (5)$$

Поэтому (4) эквивалентно записи

$$u(n) = \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_k (Q_k e^{ikr(n)} + Q_k^* e^{-ikr(n)}), \quad (6)$$

в которой явно видна вещественность смещений $u(n)$.

Выразим теперь механическую энергию колеблющегося кристалла через нормальные координаты. Для кинетической энергии K имеем

$$\begin{aligned} K &= \frac{m}{2} \sum_n \dot{u}^2(n) = \frac{m}{2} \sum_{k, k'} \dot{Q}_k \dot{Q}_{k'} \sum_n \psi_k(n) \psi_{k'}(n) = \\ &= \frac{m}{2} \sum_k \dot{Q}(k) \dot{Q}(-k) = \frac{m}{2} \sum_k |\dot{Q}(k)|^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Выполняя преобразования в (7), мы использовали определение (2), а также свойства (3) и (5).

Преобразуем теперь зависящую от квадратов смещений потенциальную энергию малых колебаний кристалла:

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \sum_{n, n'} \alpha(n - n') u(n) u(n') = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k, k'} Q(k) Q(k') \sum_{n, n'} \alpha(n - n') \psi_k(n) \psi_{k'}(n') = \\ &= \frac{1}{2} \sum_k Q(k) Q(-k) \sum_n \alpha(n) e^{-ikr(n)} = \frac{m}{2} \sum_k \omega_0^2(k) |Q(k)|^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Последнее из цепочки преобразований в (8) мы сделали, воспользовавшись формулой (12) из § 1, определяющей закон дисперсии.

Таким образом, энергия, а следовательно и функция Лагранжа колебаний кристалла, сводится к сумме слагаемых, относящихся к отдельным нормальным координатам. В частности, функция Лагранжа L имеет вид

$$L = K - U = \frac{m}{2} \sum_k \{ \dot{Q}_k^* \dot{Q}_k - \omega_0^2(k) Q_k^* Q_k \}. \quad (9)$$

Из (9) следует очевидное уравнение движения для каждой нормальной координаты:

$$\ddot{Q}(k) + \omega_0^2(k) Q(k) = 0. \quad (10)$$

Введем сопряженные координате $Q_{\mathbf{k}}$ обобщенный импульс

$$P(\mathbf{k}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}(\mathbf{k})} = m\dot{Q}^*(\mathbf{k})$$

и получим функцию Гамильтона для колебаний кристалла:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{1}{m} |P(\mathbf{k})|^2 + m\omega_0^2(\mathbf{k}) |Q(\mathbf{k})|^2 \right\}. \quad (11)$$

Мы видим, что функция Гамильтона малых колебаний также представима в виде суммы функций Гамильтона независимых гармонических осцилляторов с массами m и частотами $\omega_0(\mathbf{k})$.

Следует, конечно, заметить, что обычная запись функций Лагранжа и Гамильтона использует вещественные, а не комплексные обобщенные координаты. Переход в (11) к вещественным нормальным координатам не связан ни с какими трудностями, и его можно осуществить, например, посредством следующего канонического преобразования:

$$Q(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left\{ X(\mathbf{k}) + X(-\mathbf{k}) + \frac{i}{m\omega(\mathbf{k})} [Y(\mathbf{k}) - Y(-\mathbf{k})] \right\}, \quad (12)$$

$$P(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \{ Y(\mathbf{k}) + Y(-\mathbf{k}) - im\omega(\mathbf{k}) [X(\mathbf{k}) - X(-\mathbf{k})] \},$$

где $X(\mathbf{k})$ и $Y(\mathbf{k})$ — это вещественные нормальные координаты и сопряженные им обобщенные импульсы $Y(\mathbf{k}) = m\dot{X}(\mathbf{k})$.

Подставляя (12) в (11) и используя четность функции $\omega_0(\mathbf{k})$, мы приходим к обычному выражению для функции Гамильтона, реализующему разложение поля колебаний кристалла на независимые гармонические осцилляторы:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{m} Y_{\mathbf{k}}^2 + m\omega_0^2(\mathbf{k}) X_{\mathbf{k}}^2 \right). \quad (13)$$

Отдельные гармонические осцилляторы различаются значениями вектора \mathbf{k} и обладают частотами $\omega = \omega_0(\mathbf{k})$, определяемыми законом дисперсии. Число независимых осцилляторов равно числу физически неэквивалентных значений \mathbf{k} , т. е. совпадает с числом колебательных степеней свободы кристалла.

2. Квантование колебаний

Описывая колебания кристалла, мы исходили из классических уравнений движения атомов (или молекул), расположенных в узлах кристаллической решетки. Но хорошо известно, что внутренние движения в системе взаимодействующих атомов или молекул должны описываться не классической, а квантовой механикой. Поэтому на первый взгляд может показаться, что классическое описание колебаний кристалла является слишком грубым приближением, и с самого начала следовало бы исходить из квантовых законов. Однако малые колебания идеального кристалла представляют собой тот редкий случай физической системы, квазиклассическое рассмотрение которой приводит к результатам, совпадающим с таковыми при строго квантовом рассмотрении. Это связано с тем, что механика малых колебаний кристалла эквивалентна механике системы независимых гармонических осцилляторов. А квазиклассическая классификация состояний и расчет энергетического спектра гармонического осциллятора, как известно, являются квантовомеханически точными.

Поэтому квантование колебаний кристаллической решетки можно производить на некотором завершающем этапе, когда уже найден закон дисперсии колебаний и тем самым определены частоты гармонических осцилляторов, на которые раскладывается поле колебаний. В частности, за исходный пункт квантования можно принять функцию Гамильтона (13), записанную через канонически сопряженные обобщенные координаты $X(k)$ и импульсы $Y(k)$.

Согласно основному принципу квантовой механики функцию Гамильтона следует рассматривать как оператор (гамильтониан), в формальной записи которого (13) динамические переменные $X(k)$ и $Y(k)$ заменяются операторами со следующими перестановочными соотношениями:

$$\begin{aligned} [X(k), Y(k')] &= i\hbar\delta_{kk'}, \\ [X(k), X(k')] &= [Y(k), Y(k')] = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

где, как обычно, $[A, B] = AB - BA$. Мы не используем специальных обозначений для операторов физических величин, но будем внимательно следить за порядком их расположения во всех последующих выкладках.

Наиболее простым и распространенным приемом нахождения квантованного спектра системы многих частиц является запись и диагонализация ее гамильтониана в представлении вторичного квантования. Поскольку гамильтониан (13) уже диагонализирован по \mathbf{k} -состояниям, переход к операторам вторичного квантования можно осуществить с помощью следующих линейных преобразований:

$$X(\mathbf{k}) = u(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}} + u^*(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+, \quad Y(\mathbf{k}) = v(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}} + v^*(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+, \quad (15)$$

где $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^+$ — эрмитово сопряженные операторы, а $u(\mathbf{k})$ и $v(\mathbf{k})$ — некоторые комплексные функции вектора \mathbf{k} , выбор которых должен обеспечить выполнение требований (14), а также приведение гамильтониана к стандартному в методе вторичного квантования виду.

Преобразуем отдельное слагаемое в гамильтониане (13):

$$Y^2(\mathbf{k}) + m^2 \omega^2(\mathbf{k}) X^2(\mathbf{k}) = (|v|^2 + m^2 \omega^2 |u|^2) (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ + a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}) + + (v^2 + m^2 \omega^2 u^2) a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + [(v^*)^2 + m^2 \omega^2 (u^*)^2] a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+, \quad (16)$$

а также первое из условий (14):

$$[X(\mathbf{k}), Y(\mathbf{k}')] = u(\mathbf{k}) v^*(\mathbf{k}') [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^+] - u^*(\mathbf{k}) v(\mathbf{k}') [a_{\mathbf{k}'}, a_{\mathbf{k}}^+] + + u(\mathbf{k}) v(\mathbf{k}') [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] + u^*(\mathbf{k}) v^*(\mathbf{k}') [a_{\mathbf{k}}^+, a_{\mathbf{k}'}^+] = i \hbar \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (17)$$

Анализируя (16), легко прийти к выводу, что если выбрать функции $u(\mathbf{k})$ и $v(\mathbf{k})$ в виде

$$u(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\mathbf{k})}}, \quad v(\mathbf{k}) = -im\omega(\mathbf{k})u(\mathbf{k}), \quad (18)$$

то гамильтониан колебаний (13) сведется к выражению

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_0(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+). \quad (19)$$

А из (17) следует, что при этом будут удовлетворены также условия (14), если операторы $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^+$ подчиняются следующим правилам коммутации:

$$[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^+] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] = [a_{\mathbf{k}}^+, a_{\mathbf{k}'}^+] = 0. \quad (20)$$

Воспользуемся первым из правил (20) для упрощения записи гамильтониана (19):

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_0(\mathbf{k}) \left(a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right). \quad (21)$$

Одновременно заметим, что линейные преобразования (15) после специального выбора входящих в них функций (18) приобретают такую форму записи:

$$\begin{aligned} X(\mathbf{k}) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\mathbf{k})}} (a_{\mathbf{k}}^+ + a_{\mathbf{k}}), \\ Y(\mathbf{k}) &= im\omega(\mathbf{k}) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\mathbf{k})}} (a_{\mathbf{k}}^+ - a_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (22)$$

Из гамильтониана (21) следуют очень простые «уравнения движения» для операторов $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^+$. Действительно, по определению производной по времени от оператора имеем

$$\begin{aligned} \dot{a}_{\mathbf{k}} &\equiv \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, a_{\mathbf{k}}] = \frac{i}{\hbar} \hbar \omega(\mathbf{k}) [a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}] = \\ &= i\omega(\mathbf{k}) [a_{\mathbf{k}}^+, a_{\mathbf{k}}] a_{\mathbf{k}} = -i\omega(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}. \end{aligned}$$

Аналогично получается «уравнение движения» для оператора $a_{\mathbf{k}}^+$. Записывая эти уравнения одновременно, получаем

$$\dot{a}_{\mathbf{k}} = -i\omega(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}, \quad \dot{a}_{\mathbf{k}}^+ = i\omega(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+. \quad (23)$$

Использование операторов $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^+$, очевидно, наиболее эффективно в том представлении, где диагонален входящий в гамильтониан оператор $a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$. Оказывается, что если $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^+$ удовлетворяют перестановочным соотношениям (20), то оператор $a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$ имеет своими собственными значениями неотрицательные числа натурального ряда:

$$a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} = N_{\mathbf{k}} \quad (N_{\mathbf{k}} = 0, 1, 2, \dots). \quad (24)$$

Это свойство оператора $a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$ находит свое строгое обоснование в курсе квантовой механики, однако в нашем случае оно очевидным образом вытекает из записи (21). Действительно, уровни энергии гармонического осциллятора

с частотой ω известны:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (25)$$

поэтому собственные значения гамильтониана (13), являющегося суммой гамильтонианов независимых гармонических осцилляторов, можно представить в виде

$$\mathcal{E} = \sum_{\mathbf{k}} \left(N_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0(\mathbf{k}), \quad (26)$$

где $N_{\mathbf{k}}$ — неотрицательные целые числа. Сравнивая выражение для уровней энергии колеблющегося кристалла (26) с (21), мы убеждаемся в справедливости соотношения (24).

Числа $N_{\mathbf{k}}$ носят названия чисел заполнения состояний \mathbf{k} . При квантовомеханическом исследовании систем, состоящих из очень большого числа одинаковых частиц, бывает полезным математический метод рассмотрения, в котором числа заполнения играют роль независимых переменных. Это — так называемый *метод вторичного квантования*. В методе вторичного квантования различные колебательные состояния кристалла характеризуются разными наборами чисел $\{N_{\mathbf{k}}\}$, а операторы $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^+$ действуют именно на эти числа.

Чтобы определить действие операторов $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^+$ на числа заполнения, вспомним, как выглядят матрицы координаты и импульса одномерного гармонического осциллятора. Если m — масса, ω — частота, а n — номер состояния или номер уровня энергии (25) гармонического осциллятора, то отличные от нуля матричные элементы его координаты X и импульса Y имеют вид *)

$$\begin{aligned} X_{n-1, n} &= \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}} e^{-i\omega t}, & Y_{n-1, n} &= -i\omega m X_{n-1, n}, \\ X_{n, n-1} &= \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}} e^{i\omega t}, & Y_{n, n-1} &= i\omega m X_{n, n-1}. \end{aligned} \quad (27)$$

*) Мы пользуемся обычным представлением матричных элементов

$$A_{mn} \equiv \langle m | A | n \rangle = \int \psi_m^*(Q) A \psi_n(Q) dQ,$$

где $\psi_n(Q) \equiv |n\rangle$ — соответствующие нормированные волновые функции.

Используя выражения (27) и линейные соотношения (22), легко обнаружить, что матричные элементы операторов a_k^+ и a_k отличны от нуля только для переходов, при которых соответствующие числа заполнения N_k (с тем же значением k) изменяются на единицу. Более того, мы находим, что отличными от нуля являются лишь следующие матричные элементы этих операторов:

$$\begin{aligned} \langle N_k - 1 | a_k | N_k \rangle &= \sqrt{N_k} e^{-i\omega(k)t}, \\ \langle N_k + 1 | a_k^+ | N_k \rangle &= \sqrt{N_k + 1} e^{i\omega(k)t}. \end{aligned} \quad (28)$$

Из выражений (28) естественным образом вытекают диагональность оператора $a_k^+ a_k$ и формула (24).

3. Фононы

Рассмотрим основное состояние кристалла, отвечающее наименьшей энергии колебаний. Из вида уровней энергии (26) и того обстоятельства, что N_k являются неотрицательными числами, вытекает очевидное определение основного состояния: $N_k = 0$ при всех k . Энергия основного состояния

$$\mathcal{E}_0 = \frac{1}{2} \sum_k \hbar \omega_0(k) = \frac{\hbar}{2} \int_0^{\omega_m} \omega v(\omega) d\omega \quad (29)$$

носит название энергии нулевых колебаний, а колебания с $N_k = 0$ часто называют «нулевыми колебаниями» решетки. Естественно, что квадрат амплитуды каждого нулевого колебания определяется такой же формулой, как и для одномерного гармонического осциллятора, а именно:

$$X_0^2(k) = \frac{\hbar}{2m\omega_0(k)}. \quad (30)$$

Любое возбужденное состояние отвечает некоторому набору отличных от нуля целых чисел N_k . Если записать энергию колебаний (26) в виде двух слагаемых

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \sum_k \hbar \omega_0(k) N_k, \quad (31)$$

то станет ясным, что в энергетическом отношении слабо возбужденное (пока колебания малы) состояние кристалла эквивалентно идеальному газу квазичастиц, энергия каждой из которых равна $\hbar\omega_0(\mathbf{k})$, а числа которых в разных состояниях задаются набором $\{N_{\mathbf{k}}\}$.

На основании принципа де Бройля и общих положений волновой механики движение отдельной квазичастицы можно характеризовать скоростью $\mathbf{v} = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$ и квазиимпульсом

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (32)$$

Мы называем величину (32) квазиимпульсом, так как вектор \mathbf{k} есть квазиволновой вектор, и его специфические свойства в периодической структуре автоматически переносятся на вектор \mathbf{p} .

Введенные таким путем квазичастицы называют *фононами*. Оператор $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}}$ естественно назвать оператором числа фононов. Что же касается операторов $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$, то их названия являются непосредственным отражением свойств (28). Обозначим через

$$|\dots N_{\mathbf{k}} \dots\rangle = \Psi_{\{N_{\mathbf{k}}\}}(Q)$$

волновую функцию некоторого состояния кристалла, являющуюся собственной функцией оператора числа фононов и характеризующуюся некоторым набором фононов $\{N_{\mathbf{k}}\}$. Тогда на основании (28) мы получим

$$a_{\mathbf{k}}|\dots N_{\mathbf{k}} \dots\rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}}}e^{-i\omega(\mathbf{k})t}|\dots N_{\mathbf{k}} - 1 \dots\rangle,$$

$$a_{\mathbf{k}}^{\dagger}|\dots N_{\mathbf{k}} \dots\rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}} + 1}e^{i\omega(\mathbf{k})t}|\dots N_{\mathbf{k}} + 1 \dots\rangle.$$

Таким образом, оператор $a_{\mathbf{k}}$ уменьшает на единицу число фононов с квазиволновым вектором \mathbf{k} , а оператор $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ увеличивает на единицу число таких фононов в кристалле. Поэтому оператор $a_{\mathbf{k}}$ называют оператором *уничтожения* (или поглощения) фонона, а оператор $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ — оператором *рождения* (испускания) фонона.

Если операторы рождения и уничтожения частиц подчиняются перестановочным соотношениям (20), то соответствующие частицы описываются статистикой Бозе. В нашем случае это утверждение является констатацией факта, представленного в виде записи (24), из кото-

рой следует, что в состоянии с квазиволновым вектором k может находиться любое число фононов.

Резюмируя вышеизложенное, еще раз отметим, что в термодинамическом отношении слабо возбужденное состояние кристалла эквивалентно идеальному бозе-газу фононов, гамильтониан которого в методе вторичного квантования имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{E}_0 + \sum_k \hbar \omega_0(k) a_k^+ a_k.$$

В приложениях важно знать не только запись гамильтониана в терминах операторов a_k и a_k^+ , но и вид оператора смещений $u(\mathbf{n})$, который всегда является исходным в наших рассуждениях. Поэтому воспользуемся цепочкой преобразований (22) и (12), чтобы найти выражения для операторов комплексных нормальных координат:

$$Q(k) = X_0(k)(a_k + a_{-k}^+), \quad Q^+(k) = X_0(k)(a_k^+ + a_{-k}), \quad (33)$$

где $X_0(k)$ — амплитуда нулевых колебаний. Как всегда в подобных случаях, комплексно сопряженной нормальной координате $Q^*(k)$ соответствует эрмитово сопряженный оператор $Q^+(k)$.

На основании (33) и (6), получаем оператор смещения атомов

$$\begin{aligned} u(\mathbf{n}) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2mN}} \sum_k \frac{1}{\sqrt{\omega(k)}} (a_k e^{ikr(\mathbf{n})} + a_k^+ e^{-ikr(\mathbf{n})}) = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2mN}} \sum_k \frac{1}{\sqrt{\omega(k)}} (a_k + a_{-k}^+) e^{ikr(\mathbf{n})}, \end{aligned} \quad (34)$$

где N — число атомов в кристалле (а не число заполнения, у которого всегда будет писаться индекс соответствующего состояния).

Обратим внимание на весьма важное обстоятельство, отраженное в формуле (34). При переходе от смещений к операторам рождения и уничтожения фононов по формуле (34) в знаменателе всегда возникает множитель $\sqrt{\omega(k)}$, сопровождающий оператор a_k или a_k^+ .

4. Ангармонизм колебаний кристалла и взаимодействие фононов

В рассмотренном нами гармоническом приближении фононы являются невзаимодействующими квазичастицами. Однако ситуация меняется при учете ангармонизма колебаний кристалла, в результате чего газ фононов перестает быть идеальным.

Чтобы выяснить качественную роль ангармонизма, будем считать его малым и в разложении потенциальной энергии кристалла по степеням смещений ограничимся кубическими членами:

$$U = U_0 - \frac{1}{4} \sum_{n, n'} \alpha(n - n') [u(n) - u(n')]^2 + \\ + \sum_{n, n', n''} \gamma(n - n', n - n'') [u(n) - u(n')] \times \\ \times [u(n) - u(n'')] [u(n') - u(n'')]. \quad (35)$$

В записи (35) мы сразу явно учли инвариантность потенциальной энергии относительно перемещения кристалла как целого и приняли во внимание трансляционную симметрию неограниченного кристалла, считая коэффициент $\gamma(n, n') = -\gamma(n', n)$ функцией разности соответствующих номеров кристаллических узлов.

После введения нормальных координат и квантования колебаний квадратичное слагаемое из (35) войдет в гамильтониан идеального газа фононов. Кубический член в (35) мы проквантуем, перейдя по формулам (34) к операторам рождения и уничтожения фононов. Обозначив соответствующее слагаемое в гамильтониане через $\mathcal{H}_{вз}$, получим

$$\mathcal{H}_{вз} = \left(\frac{\hbar}{2mN} \right)^{3/2} \sum_{k, k', k''} \frac{(a_k + a_{-k}^+) (a_{k'} + a_{-k'}^+) (a_{k''} + a_{-k''}^+)}{\sqrt{\omega(k) \omega(k') \omega(k'')}} \times \\ \times \sum_{n', n''} \gamma(n', n'') (1 - e^{-ik'r'}) (1 - e^{-ik''r''}) (e^{-ik''r'} - \\ - e^{-ik'r''}) \sum_n e^{i(k+k'+k'')r}, \quad (36)$$

где принято $r = r(n)$, $r' = r(n')$, $r'' = r(n'')$.

Если учесть гамильтониан (36) при выводе уравнений движения для операторов a_k и a_k^+ , то вместо системы раз-

деляющихся уравнений для отдельных фононов типа (23) мы получим нелинейную систему «зацепляющихся» уравнений, которые будут связывать движение фонона в состоянии k с движением остальных фононов в других состояниях. На этом основании оператор $\mathcal{H}_{\text{вз}}$ можно считать гамильтонианом взаимодействия фононов. Таким образом, взаимодействие фононов — это проявление ангармонизма колебаний кристалла.

Обратим внимание на последний множитель в (36). Мы уже имели случай убедиться (во Введении), что сумма типа

$$\sum_n e^{ikr(n)}$$

отлична от нуля и равна N только для $k = 2\pi B$, где B — любой вектор обратной решетки. Поэтому выражение (36) может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{вз}} = & \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k+k'+k''=2\pi B} \frac{V(k, k', k'')}{\sqrt{\omega(k)\omega(k')\omega(k'')}} \times \\ & \times (a_k + a_{-k}^+) (a_{k'} + a_{-k'}^+) (a_{k''} + a_{-k''}^+), \end{aligned} \quad (37)$$

где суммируется по всем квазиволновым векторам при условии

$$k + k' + k'' = 2\pi B \quad (38)$$

и где введено обозначение

$$\begin{aligned} V(k, k', k'') = & \frac{1}{N} \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^{3/2} \sum_{n, n'} \gamma(n, n') (1 - e^{-ikr}) \times \\ & \times (1 - e^{-ik'r'}) (e^{-ik''r} - e^{-ik''r'}). \end{aligned} \quad (39)$$

Так как каждый из векторов k , k' и k'' не выходит своим концом из элементарной ячейки обратной решетки, то (38) сводится фактически к двум альтернативным условиям:

$$k + k' + k'' = 0, \quad (40)$$

$$k + k' + k'' = 2\pi B_0, \quad (41)$$

где B_0 — это вектор, который может быть составлен

только из трех основных векторов обратной решетки \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 и \mathbf{b}_3 . Если взаимодействие фононов происходит при условии (40), то его называют *нормальным* столкновением (или N -процессом). Если же выполняется условие (41), то взаимодействие называют аномальным столкновением или *процессом переброса* (U -процессом) *).

Отметим весьма важную особенность коэффициентов $V(k, k', k'')$ в гамильтониане взаимодействия (37), связанную с их поведением при малых значениях квазиволновых векторов. Из определения (39) вытекает, что функция трех независимых переменных $V(k, k', k'')$ обращается в нуль, если обращается в нуль хотя бы один из ее аргументов. Это свойство величин $V(k, k', k'')$ существенно используется при оценке вклада ангармонизма колебаний в различные макроскопические характеристики кристалла.

Обозначим временно $\bar{a}_k = a_k$ и проанализируем характерное произведение операторов рождения и уничтожения фононов, входящее в гамильтониан (37), а именно, произведение типа

$$a_k^\pm a_{k'}^\pm a_{k''}^\pm. \quad (42)$$

Из (28) следует, что отличные от нуля матричные элементы оператора (42) пропорциональны множителю

$$\exp(\pm i\omega t \pm i\omega' t \pm i\omega'' t),$$

где для сокращения записи обозначено $\omega = \omega(k)$, $\omega' = \omega(k')$, $\omega'' = \omega(k'')$.

Если мы теперь с помощью матричного элемента оператора (42) вычислим в первом приближении теории возмущений вероятность соответствующего столкновения, то она окажется пропорциональной δ -функции

$$\delta(\pm \omega \pm \omega' \pm \omega''). \quad (43)$$

Чередование знаков в аргументе этой функции повторяет чередование символов эрмитового сопряжения в операторе (42).

Поскольку мы определили частоту $\omega = \omega_0(k)$ как положительную величину, полученная нами δ -функция

*) От немецкого слова Umklappprozesse.

может отличаться от нуля только в том случае, когда слагаемые в ее аргументе имеют разные знаки. Из этого обстоятельства следует, что при описании реальных столкновений (сохраняющих энергию фононов) в кристалле с малым ангармонизмом вместо (37) можно ввести более простой эффективный гамильтониан взаимодействия. Действительно, если ограничиться только основными членами энергии взаимодействия фононов и иметь в виду приближение первого порядка теории возмущений (при рассмотрении реальных процессов рассеяния), в гамильтониане $\mathcal{H}_{\text{вз}}$ можно опустить слагаемые с произведениями операторов $a_k a_{k'} a_{k''}$ и $a_k^+ a_{k'}^+ a_{k''}^+$. Остальные слагаемые простой заменой индексов суммирования и некоторым преобразованием могут быть сведены к такому стандартному виду *):

$$\mathcal{H}_{\text{вз}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k, k', k''} \frac{W(k, k', k'')}{V \omega \omega' \omega''} (a_k^+ a_{k'}^+ a_{-k''} + a_k^+ a_{-k'} a_{-k''}), \quad (44)$$

где коэффициенты $W(k, k', k'')$ отличаются только численными множителями от $V(k, k', k'')$, а суммируется по всем квазиволновым векторам при условии (38).

Перестановка операторов a_k^+ и a_k , выполненная при получении формулы (44), не дает никаких дополнительных слагаемых в $\mathcal{H}_{\text{вз}}$, поскольку последние исчезают в силу закона сохранения (40) и сформулированного выше свойства функций $V(k, k', k'')$ при малых аргументах.

Анализ двух слагаемых в (44) весьма прост. Например, член с оператором $a_k^+ a_{k_1}^+ a_{-k_2}$ описывает процесс рождения двух фононов в состояниях k и k_1 и исчезновение фонона в состоянии $-k_2$. Он дает отличную от нуля вероятность при условии

$$\omega(k) + \omega(k_1) = \omega(k_2),$$

которое эквивалентно закону сохранения энергии при столкновении:

$$\hbar \omega(k) + \hbar \omega(k_1) = \hbar \omega(k_2). \quad (45)$$

*) В случае изучения физических явлений, при описании которых необходимо учитывать виртуальные переходы фононов (например, при расчете сдвига собственных частот колебаний кристалла за счет ангармонизма), отброшенные члены могут играть не меньшую роль, чем оставленные в (44). Тогда необходимо возвратиться к выражению (37).

В силу условий (38) и соотношения (32) столкновение может происходить либо при сохранении полного квазиимпульса (N -процесс):

$$p + p_1 = -p_2, \quad (46)$$

либо при изменении квазиимпульса «центра тяжести фононов» на величину $2\pi\hbar B_0$ (U -процесс):

$$p + p_1 = -p_2 + 2\pi\hbar B_0. \quad (47)$$

Столкновениям с законами (46) и (47) можно сопоставить графики на рис. 12, а и б.

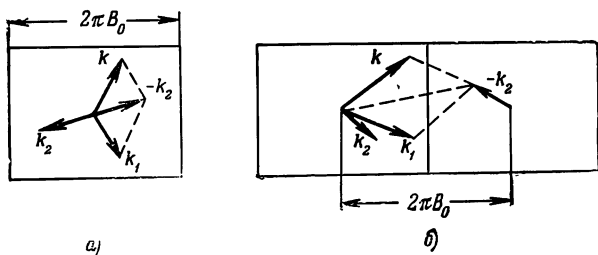


Рис. 12.

Аналогичные выводы можно сделать по поводу физического смысла члена с оператором $a_k^+ a_{-k_1} a_{-k_2}$ в гамильтониане взаимодействия.

§ 4. СВЯЗЬ СПЕКТРА ЧАСТОТ С ФУНКЦИЕЙ ГРИНА

1. Функция Грина и ее основные свойства

Уравнения свободных колебаний кристалла, как мы знаем, имеют вид

$$m\ddot{u}(n, t) + \sum_{n'} \alpha(n - n') u(n', t) = 0. \quad (1)$$

Функцией Грина для колебаний неограниченного кристалла, или функцией Грина уравнения (1), называют исчезающее на бесконечности сингулярное решение

следующего неоднородного уравнения:

$$m\ddot{u}(n, t | n_0) + \sum_{n'} \alpha(n - n') u(n', t | n_0) = -m\delta(t) \delta_{nn_0}, \quad (2)$$

где $\delta(t)$ — обычная δ -функция.

Заметим, что в силу пространственной однородности неограниченного кристалла решение уравнения (2) будет зависеть лишь от разности $n - n_0$, а потому, обозначая функцию Грина через $G(n, t)$, мы получим для нее такое уравнение:

$$m\ddot{G}(n, t) + \sum_{n'} \alpha(n - n') G(n', t) = -m\delta(t) \delta_{nn_0}. \quad (3)$$

Представим $G(n, t)$ в виде интеграла Фурье

$$G(n, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{\omega^2}(n) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (4)$$

$$G_{\omega^2}(n) = \int_{-\infty}^{\infty} G(n, t) e^{i\omega t} dt$$

и назовем функцию $G_{\varepsilon}(n)$, где $\varepsilon = \omega^2$, функцией Грина стационарных колебаний кристалла. Ясно, что эта функция определяется как исчезающее на бесконечности решение уравнения

$$\varepsilon G_{\varepsilon}(n) - \frac{1}{m} \sum_{n'} \alpha(n - n') G_{\varepsilon}(n') = \delta_{nn_0}. \quad (5)$$

Поскольку мы имеем полный анализ уравнений (1) и (5), то нахождение функции Грина для колебаний идеального кристалла не составляет труда. Действительно произведем следующее преобразование Фурье над функцией $G_{\varepsilon}(n)$:

$$G_{\varepsilon}(n) = \frac{1}{N} \sum_k G(\varepsilon, k) e^{ikr(n)}, \quad (6)$$

$$G(\varepsilon, k) = \sum_n G_{\varepsilon}(n) e^{-ikr(n)},$$

определяющее функцию Грина в (ε, k) -представлении

Прделаем теперь такое же преобразование с уравнением (5):

$$[\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k})]G(\varepsilon, \mathbf{k}) = 1, \quad (7)$$

где функция $\omega_0(\mathbf{k})$, как и раньше, дает закон дисперсии идеального кристалла:

$$\omega_0^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}} \alpha(\mathbf{n}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}(\mathbf{n})}.$$

Из (7) следует, что компоненты Фурье гриновской функции равны

$$G(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k})}. \quad (8)$$

Формула (8) определяет функцию Грина для колебаний кристалла в $(\varepsilon, \mathbf{k})$ -представлении. Для ряда методов теоретического расчета свойств идеального кристалла это представление является основным. В частности, применение методов квантовой теории поля существенно основано на использовании (ω, \mathbf{k}) -представления.

Вид функции (8), и, в частности, характерный знаменатель, не является специфичным только для колебаний кристалла (фононов), а отражает общие особенности функций Грина свободных частиц. (Вспомним, что фононы — это свободные квазичастицы, получающиеся в результате квантования колебаний кристалла.) Поэтому мы постараемся произвести подробный анализ функции $G(\varepsilon, \mathbf{k})$.

Обратим внимание прежде всего на то, что функция $G(\varepsilon, \mathbf{k})$, рассматриваемая как функция переменной ε , имеет полюс в точке $\varepsilon = \omega_0^2(\mathbf{k})$, т. е. в той точке, где ω (напоминаем, что $\varepsilon = \omega^2$) совпадает с частотой одного из собственных колебаний. Таким образом, мы приходим к следующему важному свойству функции Грина: полюсы компонент Фурье гриновской функции определяют спектр собственных частот кристалла, или, другими словами, закон дисперсии для фононов.

Отметив особенность компонент Фурье гриновской функции, перейдем по формулам (6) к функции Грина

стационарных колебаний:

$$G_{\varepsilon}(n) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}r(n)}}{\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k})}. \quad (9)$$

Используем квазинепрерывность спектра значений вектора \mathbf{k} и перепишем выражение (9) в виде интеграла

$$G_{\varepsilon}(n) = \frac{V_0}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}r(n)} d^3k}{\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k})}, \quad (10)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки кристалла.

Если значение параметра ε не попадает в полосу квадратов собственных частот кристалла (в нашем случае при $\varepsilon > \omega_m^2$), то выражение (10) однозначным образом определяет некоторую функцию n , зависящую от параметра ε .

Однако более интересен случай $0 < \varepsilon < \omega_m^2$, когда частота ω попадает в интервал сплошного фононного спектра. Отмеченное выше наличие полюса у компонент Фурье гриновской функции должно привести нас к заключению, что интеграл (10) в этом случае не имеет смысла (он расходится). Точнее, он не имеет смысла при буквальном его понимании, когда параметр ε считается вещественным. Но подобная особенность поведения колебательной системы характерна для любой резонансной ситуации, при которой пренебрежение затуханием (диссипацией) собственных колебаний всегда приводит к бесконечно большим амплитудам колебаний, как только частота возбуждающей силы совпадает с одной из собственных частот системы.

Известен выход из этого затруднения: следует учесть всегда имеющееся в системе хотя бы малое затухание собственных колебаний. В случае неограниченных систем с распределенными параметрами, собственные колебания которых имеют вид некоторых волн со сплошным спектром частот, нужная регуляризация выражений типа (10) может быть произведена выбором специальных условий на бесконечности. Формально это сводится к тому, что параметр ε следует считать не вещественным, а комплексным, но с исчезающе малой мнимой частью. Добав-

ление даже малой мнимой добавки к ε снимает вопрос о расходимости интеграла (10), однако порождает ряд новых проблем, усилия по разрешению которых являются «расплатой» за регуляризацию указанного интеграла. Ниже мы увидим, как этот прием используется и какой физический смысл имеет подобная процедура.

2. Связь плотности колебаний с функцией Грина

Вспомним одно из определений плотности колебаний $g(\varepsilon)$, приведенных в § 2, а именно, формулу (16) этого параграфа. Перепишем это определение в несколько ином виде, выполнив указанное в формуле дифференцирование:

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\varepsilon - i\gamma - \omega_0^2(\mathbf{k})}. \quad (11)$$

Сравним стоящую в правой части (11) сумму с выражением (9). Мы видим, что она определяет функцию Грина стационарных колебаний при $n = 0$, поэтому

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} G_{\varepsilon - i\gamma}(0). \quad (12)$$

Таким образом, значение мнимой части функции Грина стационарных колебаний, взятое в нуле, непосредственно связано с плотностью колебаний кристалла.

Чтобы яснее представить себе смысл указанных в (11) или (12) операций, перейдем в формуле (11) от суммирования к интегрированию:

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{V_0}{(2\pi)^3} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \int_{\mathcal{K}} \frac{d^3k}{\varepsilon - i\gamma - \omega_0^2(\mathbf{k})}, \quad (13)$$

где интегрирование производится по одной элементарной ячейке в \mathcal{K} -пространстве. Если мы теперь произведем в (13) замену переменной интегрирования $z = \omega_0^2(\mathbf{k})$, то эта формула превратится в очевидное равенство:

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \int_0^{\omega_m^2} \frac{g(z) dz}{\varepsilon - i\gamma - z}. \quad (14)$$

Действительно, для вещественной функции $g(\varepsilon)$ и действительных переменных ε и z всегда имеет место тождество

$$\lim_{\gamma \rightarrow +0} \int \frac{g(z) dz}{\varepsilon \pm i\gamma - z} = \int \frac{g(z) dz}{\varepsilon - z} \mp i\pi g(\varepsilon), \quad (15)$$

где интеграл в правой части понимается в смысле главного значения.

Необходимо подчеркнуть, что очень важное в приложениях соотношение (12) справедливо только для однородного кристалла. Но в дальнейшем нам предстоит анализировать спектр колебаний кристалла с дефектами, нарушающими пространственную однородность системы. Поэтому мы сейчас получим обобщение формулы (12) на неоднородный случай. Одновременно выясним некоторые формальные математические соображения, приводящие к соотношению типа (12).

Рассмотрим некоторую задачу на собственные значения для линейного эрмитового оператора \mathcal{L} в неограниченном кристалле:

$$\mathcal{L}\varphi - \lambda\varphi = 0. \quad (16)$$

Функцией Грина уравнения (16) называют функцию

$$G_\lambda(n, n') = \sum_s \frac{\varphi_s^*(n) \varphi_s(n')}{\lambda - \lambda_s}, \quad (17)$$

где $\varphi_s(n)$ и λ_s — нормированные собственные функции и собственные значения оператора \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}\varphi_s - \lambda_s\varphi_s = 0, \quad \sum_n |\varphi_s(n)|^2 = 1.$$

Если мы вспомним, что собственные функции в случае колебаний идеального кристалла определяются формулой (2) из § 3, то легко убедиться, что из (17) непосредственно следует (9).

Положим в (17) $n = n'$ и просуммируем полученное соотношение по всем узлам кристалла:

$$\sum_n G_\lambda(n, n) = \sum_s \frac{1}{\lambda - \lambda_s}. \quad (18)$$

Введем плотность собственных значений $g(\lambda)$ для оператора \mathcal{L} и, смещая параметр λ с вещественной оси, перепишем (18) в виде

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} G_{\lambda - i\gamma}(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = \int \frac{g(z) dz}{\lambda - i\gamma - z}. \quad (19)$$

Воспользуемся, наконец, тождеством (15) и применим его к правой части (19):

$$g(\lambda) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} G_{\lambda - i\gamma}(\mathbf{n}, \mathbf{n}). \quad (20)$$

Формула (20) является искомым обобщением соотношения (12) на случай пространственно неоднородной системы.

В обеих формулах (12) и (20) мы впервые столкнулись с некоторым вполне определенным рецептом выхода параметра ε (или λ) в комплексную плоскость. Этот рецепт сводится к тому, что компоненты Фурье гриновской функции задаются выражением

$$G(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k}) - i|\gamma|}, \quad (21)$$

где γ — бесконечно малая величина.

Естественно, можно предложить несколько иной рецепт построения функции Грина, регуляризующей выражение типа (10), а именно, можно исходить из определения

$$G^*(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k}) + i|\gamma|}. \quad (22)$$

Обе функции (21) и (22) переходят в (8) на действительной оси переменной ε , поэтому являются равноправными обобщениями выражения (8). Однако плотность колебаний $g(\varepsilon)$ будет определяться через функцию $G^*(\varepsilon, \mathbf{k})$ с помощью соотношения

$$g(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} G_{\varepsilon + i\gamma}^*(0), \quad (23)$$

где функция Грина стационарных колебаний $G_{\varepsilon}^*(\mathbf{n})$ строится с помощью выражения (22) по формуле (6).

3. Запаздывающая и опережающая функции Грина

Перейдем теперь к другим представлениям функции Грина. Запишем функцию Грина как функцию времени:

$$G(\mathbf{n}, t) = \frac{V_0}{(2\pi)^4} \iint \frac{e^{i\mathbf{k}r(\mathbf{n}) - i\omega t}}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) - i\gamma} d\omega d^3k. \quad (24)$$

В подынтегральном выражении (24) мы сразу явно выделили малую мнимую добавку γ , имея в виду последующий предельный переход $\gamma \rightarrow 0$.

Рассмотрим отдельно частотное преобразование, включенное в (24) и приводящее к интегралу

$$G_k(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t} d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2(k) - i\gamma}. \quad (25)$$

Интеграл (25) легко вычисляется с помощью метода вычетов. Будем производить интегрирование по замкнутому контуру, дополнив вещественную ось переменной ω бесконечно удаленной дугой полуокружности (рис. 13). Поскольку сходимость интеграла и исчезновение интеграла по бесконечной полуокружности обеспечиваются экспоненциальным множителем, то при $t < 0$ мы должны замыкать контур сверху действительной оси. Для $t > 0$ нужно замыкать контур интегрирования снизу действительной оси. Поэтому нетрудно понять, что при $t < 0$ интеграл (25) определяется вычетами в верхней полуплоскости комплексной переменной ω , а при $t > 0$ этот интеграл равен сумме вычетов в нижней полуплоскости.

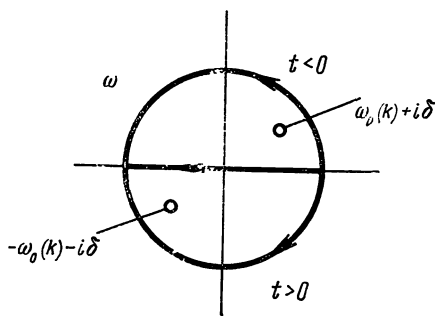


Рис. 13.

Поскольку на рис. 13 следует положить $\delta = \gamma/2\omega_0(k) \equiv \gamma/2 |\omega_0(k)|$, то распределение полюсов на плоскости ω ,

а значит, и результат интегрирования в (25), полностью определяется знаком параметра γ . Очень важной при этом является связь знака γ со знаком ω . Поскольку при записи (24) и (25) никаких специальных предположений относительно γ пока не делалось, то неоднозначность выбора зависимости знака γ от знака ω указывает на неоднозначность в определении функции Грина с помощью формулы (24). Ниже мы увидим, какого типа дополнительные физические соображения делают это определение однозначным.

При записи формул (21) и (22) мы считали, что знак γ вовсе не зависит от ω . Начнем с этого уже реализованного ранее случая и определим зависимость от времени функции Грина, порожденной компонентами Фурье (21), т. е. положим $\gamma > 0$ при всех ω . При этом на рис. 13 следует считать $\delta > 0$.

Подставим (21) в (25) и выполним интегрирование по частотам:

$$G_k(t) = \frac{i}{2\omega_0(k)} \begin{cases} e^{-i\omega_0(k)t}, & t < 0; \\ e^{+i\omega_0(k)t}, & t > 0. \end{cases} \quad (26)$$

Любопытно заметить, что если $\gamma < 0$ при всех ω , то на основании (22) получается функция Грина $G_k^*(t)$, являющаяся комплексно сопряженной по отношению к функции (26).

Координатное представление найденной функции Грина определяется очевидным преобразованием, содержащимся в (24):

$$G(n, t) = \frac{V_0}{(2\pi)^3} \int G_k(t) e^{ikr(n)} d^3k. \quad (27)$$

Предположим теперь, что знак γ изменяется вместе со знаком частоты ω , т. е. примем *)

$$\gamma = \gamma_0 \text{sign } \omega.$$

Тогда фурье-компоненты функции Грина, для которых мы вынуждены использовать новое обозначение $\tilde{G}(\omega, k)$,

*) Напоминаем определение символа $\text{sign } x$:

$$\text{sign } x = \begin{cases} +1, & x > 0; \\ -1, & x < 0. \end{cases}$$

принимает вид

$$\tilde{G}(\omega, k) = \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2(k) - i\gamma_0 \operatorname{sign} \omega}. \quad (28)$$

Легко видеть, что при $\gamma_0 < 0$ формула (28) определяет функцию комплексной переменной ω , аналитическую в верхней полуплоскости. При $\gamma_0 > 0$ соотношение (28) определяет аналитическую функцию в нижней полуплоскости.

Выполняя интегрирование (25), найдем зависимость от времени функций Грина, порожденных компонентами Фурье (28). При $\gamma_0 < 0$ имеем

$$G_k^R(t) = \begin{cases} 0, & t < 0; \\ -\frac{\sin[\omega_0(k)t]}{\omega_0(k)}, & t > 0. \end{cases} \quad (29)$$

Если воспользоваться теперь преобразованием (27), то получится так называемая *запаздывающая* функция Грина $G_R(n, t)$. Эта функция описывает возмущение, появляющееся в любой точке кристалла после приложения мгновенной силы в начале координат. На бесконечности ей соответствуют расходящиеся от начала волны.

Если $\gamma_0 > 0$, то мы приходим к выражению

$$G_k^A(t) = \begin{cases} \frac{\sin[\omega_0(k)t]}{\omega_0(k)}, & t < 0; \\ 0, & t > 0, \end{cases} \quad (30)$$

которое после применения формулы (27) дает *опережающую* функцию Грина $G_A(n, t)$. Опережающая функция Грина описывает такие возмущения в кристалле при $t < 0$, которые порождают сосредоточенную в начале координат силу и момент времени $t = 0$. На бесконечности ей соответствуют сходящиеся к началу волны.

Выбор между расходящимися на бесконечности (и более не возвращающимися к началу) и сходящимися волнами есть то дополнительное физическое соображение, которое, как уже упоминалось, может быть сформулировано в виде некоторых дополнительных условий на бесконечности и которое придает физический смысл определенному знаку параметра γ_0 .

4. Квантовомеханическое определение функций Грина

В квантовой теории поля обычно дают несколько иное, и на первый взгляд отличное от принятого выше, исходное определение функции Грина. Мы покажем, что это кажущееся различие является просто следствием необычных для теории колебаний кристалла обозначений. Начнем с запаздывающей функции Грина.

Квантовомеханическое выражение для запаздывающей функции Грина имеет вид

$$G_R(\mathbf{n} - \mathbf{n}', t) = -\frac{im}{\hbar} \Theta(t) \langle [u(\mathbf{n}, t), u(\mathbf{n}', 0)] \rangle, \quad (31)$$

где $u(\mathbf{n}, t)$ — оператор смещений атомов в момент времени t , а $\Theta(t)$ — разрывная единичная функция:

$$\Theta(t) = \begin{cases} 0, & t < 0; \\ 1, & t > 0. \end{cases} \quad (32)$$

Наличие функции $\Theta(t)$ в (31) связано с отмеченной ранее особенностью запаздывающей функции Грина, отраженной, например, в записи (29). Скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по равновесному термодинамическому состоянию, отвечающему некоторой температуре кристалла.

Следует напомнить, как определяются входящие в (31) операторы $u(\mathbf{n}, t)$. Поскольку зависимость оператора $u(\mathbf{n})$ от времени описывается уравнением

$$-i\hbar \dot{u} = [\mathcal{H}, u],$$

где \mathcal{H} — гамильтониан колебаний кристалла, то всегда можно записать

$$u(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} u(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t}. \quad (33)$$

Поскольку оператор $u(0)$ не коммутирует с \mathcal{H} , то из (33) следует, что при $t \neq 0$ он не коммутирует также с оператором $u(t)$. Однако всегда

$$[u(\mathbf{n}, t), u(\mathbf{n}', t)] = [u(\mathbf{n}, 0), u(\mathbf{n}', 0)] = 0. \quad (34)$$

Возьмем производную по времени от (31):

$$i\hbar\dot{G}_R(\mathbf{n} - \mathbf{n}', t) = m\delta(t)\langle[u(\mathbf{n}, t), u(\mathbf{n}', 0)]\rangle + \\ + \Theta(t)\langle[m\dot{u}(\mathbf{n}, t), u(\mathbf{n}', 0)]\rangle = \Theta(t)\langle[p(\mathbf{n}, t)u(\mathbf{n}', 0)]\rangle. \quad (35)$$

В записи (35) мы использовали (34) и ввели оператор импульса $p(\mathbf{n}) = m\dot{u}(\mathbf{n})$. Продифференцируем еще раз по времени полученное соотношение:

$$i\hbar\ddot{G}_R(\mathbf{n} - \mathbf{n}', t) = \\ = \delta(t)\langle[p(\mathbf{n}, 0), u(\mathbf{n}', 0)]\rangle + \Theta(t)\langle[m\ddot{u}(\mathbf{n}, t), u(\mathbf{n}', 0)]\rangle. \quad (36)$$

Поскольку операторы $u(\mathbf{n})$ и $p(\mathbf{n})$ в один и тот же момент времени являются канонически сопряженными, то

$$[p(\mathbf{n}, 0), u(\mathbf{n}', 0)] = -i\hbar\delta_{\mathbf{nn}'}. \quad (37)$$

С другой стороны, оператор $\ddot{u}(\mathbf{n}, t)$ может быть выражен через операторы $u(\mathbf{n}, t)$ с помощью уравнения (1). Воспользовавшись этим уравнением и соотношением (37), мы получим

$$i\hbar\ddot{G}_R(\mathbf{n} - \mathbf{n}', t) = \\ = -i\hbar\delta(t)\delta_{\mathbf{nn}'} - \sum_{\mathbf{n}''} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}'')\Theta(t)\langle[u(\mathbf{n}'', t), u(\mathbf{n}', 0)]\rangle. \quad (38)$$

Если мы теперь вспомним определение (31), то придем к следующему уравнению для функции $G_R(\mathbf{n}, t)$:

$$m\ddot{G}_R(\mathbf{n}, t) + \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}')G_R(\mathbf{n}', t) = -m\delta(t)\delta_{\mathbf{n}}, \quad (39)$$

которое в точности совпадает с уравнением (3).

Функция Грина, строящаяся с помощью компонент Фурье (21) и обычно не имеющая никаких «эпитетов», в квантовой теории поля определяется выражением

$$G(\mathbf{n} - \mathbf{n}', t) = -\frac{im}{\hbar}\langle T\{u(\mathbf{n}, t)u(\mathbf{n}', 0)\}\rangle, \quad (40)$$

где T — это символ операции упорядочения во времени:

$$T\{A(t)B(t')\} = \begin{cases} A(t)B(t'), & t > t'; \\ B(t')A(t), & t < t'. \end{cases} \quad (41)$$

Легко проверить, используя определение (41), что

$$T\{A(t)B(t')\} = \Theta(t-t')[A(t), B(t')] + B(t')A(t). \quad (42)$$

Вернемся к определению запаздывающей функции Грина (31) и преобразуем с помощью (42) выражение (40) для функции $G(n, t)$:

$$G(n - n', t) = G_R(n - n', t) - \frac{im}{\hbar} \langle u(n', 0)u(n, t) \rangle. \quad (43)$$

Второе слагаемое в правой части (43), как легко проверить, есть функция разности $n - n'$, которая удовлетворяет уравнению (1). Поэтому функция $G(n, t)$ также описывается уравнением (3) и отличается от запаздывающей функции Грина только слагаемым, которое является некоторым решением уравнения движения (1). Ясно, что добавление решения соответствующего однородного уравнения к функции Грина приводит только к иному ее поведению на бесконечности. Это соображение можно рассматривать как дополнительное разъяснение роли условий на бесконечности при выборе нужной функции Грина.

§ 5. КОЛЕБАНИЯ СЛОЖНОЙ РЕШЕТКИ

1. Оптические колебания

Сложная кристаллическая решетка отличается от простой тем, что в ее элементарной ячейке содержится более одного атома, или, говоря на формальном языке механики, более одной материальной точки. Другими словами, число механических степеней свободы, приходящихся на одну элементарную ячейку сложной решетки, обязательно больше трех. Последнее обстоятельство вносит не только количественные, но и качественные изменения в спектр колебаний кристалла. Специфические особенности колебаний сложной решетки мы изучим вначале на простейшей модели.

Будем считать, что в узлах кристаллической решетки находятся молекулы, центры тяжести которых могут смещаться только в одном направлении (как в рассмотренной ранее модели простой решетки). Каждая молекула, кроме того, обладает дополнительной степенью свободы, в принципе отсутствующей у одной материальной точки и

сводящейся к возможности вращения молекулы относительно элементарной ячейки, точнее, вокруг некоторой кристаллографической оси. Обозначим, как и раньше, смещение центра тяжести молекулы в узле n через $u(n)$, а поворот этой молекулы относительно указанной оси через $\varphi(n)$.

Считая смещения молекул $u(n)$ и их отклонения от равновесной ориентации $\varphi(n)$ малыми, представим потенциальную энергию колебаний кристалла в виде, соответствующем гармоническому приближению:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{n, n'} \alpha(n - n') u(n) u(n') + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n, n'} \beta(n - n') \varphi(n) \varphi(n') + \sum_{n, n'} \gamma(n - n') u(n) \varphi(n'), \quad (1)$$

где введены две новые силовые матрицы $\beta(n)$ и $\gamma(n)$. Очевидно, что матрица $\beta(n)$ всегда может быть выбрана симметричной: $\beta(n) = \beta(-n)$, но последнее не справедливо по отношению к матрице $\gamma(n)$. Однако легко представить себе модель, в которой матрица $\gamma(n)$, ответственная за взаимодействие смещений и поворотов, также является симметричной.

Кинетическая энергия обсуждаемой сложной решетки имеет стандартную форму

$$K = \frac{1}{2} \sum_n m \dot{u}^2(n) + \frac{1}{2} \sum_n I \dot{\varphi}^2(n), \quad (2)$$

где I — момент инерции одной молекулы. Используя (1) и (2), легко получить уравнения движения кристалла:

$$m \ddot{u}(n) = - \sum_{n'} [\alpha(n - n') u(n') + \gamma(n - n') \varphi(n')], \\ I \ddot{\varphi}(n) = - \sum_{n'} [\beta(n - n') \varphi(n') + \gamma(n' - n) u(n')]. \quad (3)$$

Из уравнений (3) непосредственно следуют накладываемые на элементы матриц α , β и γ связи, вытекающие из инвариантности энергии кристалла относительно его перемещения как целого. Действительно, полагая $\varphi(n) = 0$ и

$u(\mathbf{n}) = u_0 = \text{const}$, мы получим

$$\sum_{\mathbf{n}} \alpha(\mathbf{n}) = 0, \quad \sum_{\mathbf{n}} \gamma(\mathbf{n}) = 0. \quad (4)$$

Любопытно заметить, что элементы матрицы β не связаны условием типа (4), поскольку даже однородный по кристаллу поворот всех молекул относительно некоторого кристаллографического направления повышает энергию кристалла. Однако элементы матрицы β , как и элементы матриц α и γ , подчиняются ряду неравенств, обеспечивающих положительность энергии (1) при произвольных $u(\mathbf{n})$ и $\varphi(\mathbf{n})$. В частности,

$$\beta(0) > 0, \quad \alpha(0)\beta(0) > \gamma^2(0). \quad (5)$$

Как и в случае простой решетки, естественно искать решения уравнений (3) в виде бегущих по кристаллу колебаний с заданной частотой:

$$u(\mathbf{n}) = u_0 e^{i(\mathbf{k}r(\mathbf{n}) - \omega t)}, \quad \varphi(\mathbf{n}) = \varphi_0 e^{i(\mathbf{k}r(\mathbf{n}) - \omega t)}. \quad (6)$$

Подставляя (6) в (3) и выполняя уже проделанные однажды элементарные преобразования, мы получим

$$\begin{aligned} [A(\mathbf{k}) - m\omega^2] u_0 + \Gamma(\mathbf{k}) \varphi_0 &= 0, \\ \Gamma^*(\mathbf{k}) u_0 + [B(\mathbf{k}) - I\omega^2] \varphi_0 &= 0, \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$A(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} \alpha(\mathbf{n}) e^{-i\mathbf{k}r(\mathbf{n})}, \quad B(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} \beta(\mathbf{n}) e^{-i\mathbf{k}r(\mathbf{n})}, \quad (8)$$

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} \gamma(\mathbf{n}) e^{-i\mathbf{k}r(\mathbf{n})}.$$

Условие совместности однородных уравнений (7) для двух неизвестных u_0 и φ_0

$$\begin{vmatrix} A(\mathbf{k}) - m\omega^2 & \Gamma(\mathbf{k}) \\ \Gamma^*(\mathbf{k}) & B(\mathbf{k}) - I\omega^2 \end{vmatrix} = 0,$$

рассматриваемое как уравнение для нахождения квадратов возможных частот колебаний ω^2 , при фиксированном \mathbf{k}

имеет вид алгебраического уравнения второй степени:

$$[m\omega^2 - A(k)] [I\omega^2 - B(k)] = |\Gamma(k)|^2. \quad (9)$$

Таким образом, каждому значению квазиволнового вектора в нашей модели сложной решетки отвечают две частоты:

$$\omega = \omega_\alpha(k) \quad (\alpha = 1, 2). \quad (10)$$

В таком случае говорят, что закон дисперсии обладает двумя ветвями зависимостей ω от k . Характерные различия этих двух ветвей можно увидеть, рассмотрев их предельные свойства.

Наиболее существенные различия двух ветвей закона дисперсии имеют место при малых k ($ak \ll 1$). В этом случае, как мы уже видели в § 1, разложение функции $A(k)$ по степеням величины квазиволнового вектора начинается с квадратичных членов:

$$A(k) = ms_0^2(k) k^2. \quad (11)$$

В силу отмеченных выше свойств матрицы $\beta(n)$ разложение функции $B(k)$ начинается с нулевого члена и не содержит первой степени k :

$$B(k) = B(0) - b(k) k^2, \quad (12)$$

где

$$b(k) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (ka_\alpha)(ka_\beta) \sum_n \beta(n) n_\alpha n_\beta.$$

Наконец, для упрощения анализа, примем матрицу $\gamma(n)$ симметричной: $\gamma(n) = \gamma(-n)$. Тогда на основании (4) мы получим

$$\Gamma(k) = - \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 (ka_\alpha)(ka_\beta) \sum_n \gamma(n) n_\alpha n_\beta \right] k^2. \quad (13)$$

Следовательно, $|\Gamma(k)|^2 \propto (ak)^4$ при $ak \ll 1$, и в основном по малому параметру ak приближении уравнение (9)

расщепляется на два независимых:

$$\omega_1^2 = s_0^2(\kappa) k^2, \quad (14)$$

$$\omega_2^2 = \omega_0^2 - \frac{b(\kappa)}{I} k^2, \quad \omega_0^2 = \frac{B(0)}{I}. \quad (15)$$

Закон дисперсии (14) дает обсужденную ранее дисперсию звуковых колебаний. Своеобразие закона дисперсии (15) проявляется в том, что соответствующие колебания с бесконечно большой длиной волны обладают конечной частотой ω_0 . Из (7) и (6) вытекает, что при $k = 0$ это — колебания типа

$$u(\mathbf{n}) = 0, \quad \varphi(\mathbf{n}) = \varphi_0 e^{-i\omega_0 t}. \quad (16)$$

При таких колебаниях кристалла центры тяжести элементарных ячеек покоятся и все движение в решетке сводится к колебаниям молекул относительно элементарных ячеек. Наличием колебаний типа (16) сложная кристаллическая решетка отличается от простой.

При произвольных k вид закона дисперсии весьма сильно зависит от свойств силовых матриц. В простейших моделях обычно оказывается, что $\omega_1(k) < \omega_2(k)$. Тогда график зависимостей $\omega = \omega_\alpha(k)$ вдоль некоторого «хорошего» направления в обратной решетке схематически может быть представлен рис. 14, на котором b — это период обратной решетки в выбранном направлении. Низкочастотная ветвь закона дисперсии ($\omega < \omega_m$) описывает так называемые *акустические* колебания, а высокочастотная ($\omega_1 < \omega < \omega_0$) — *оптические* колебания кристалла. Итак, сложная кристаллическая решетка, помимо акустических фононов, обладает также оптическими фононами.

При условии $\omega_1(k) < \omega_2(k)$ для фиксированного направления k спектр частот оптических колебаний оказывается отделенным конечной щелью от спектра частот акустических колебаний. Однако вполне возможна ситуация, когда для некоторых k выполняется условие $\omega_1(k) \geq \omega_2(k)$. Тогда в k -пространстве имеются точки вырождения, где совпадают частоты акустических и оптических колебаний и происходит касание или пересечение двух ветвей.

Характерные частоты оптических колебаний, вообще говоря, имеют тот же порядок величины, что и предельная частота акустических колебаний, т. е. $\omega_0 \sim \omega_1 \sim \omega_m \sim \sim 10^{13} \text{ сек}^{-1}$. Но в кристалле могут существовать специальные физические причины, значительно повышающие частоты оптических колебаний. В частности, это имеет место в так называемых *молекулярных кристаллах*.

Молекулярным кристаллом принято называть такой кристалл со сложной решеткой, в котором при надлежащем выборе элементарной ячейки атомы внутри данной ячейки взаимодействуют друг с другом гораздо сильнее, чем с атомами соседних ячеек. Атомы, входящие в такую элементарную ячейку, можно считать образующими отдельную молекулу, влияние окружающей решетки на которую будет невелико.

Оптическая ветвь колебаний молекулярного кристалла описывает согласованные внутри-молекулярные движения сильно связанных атомов и характеризуется частотами, близкими к собственным частотам свободной молекулы. В такой ситуации обычно $\omega_0 \sim \omega_1 \gg \gg \omega_m$ и $\omega_0 - \omega_1 \ll \omega_0$, и оптическая ветвь колебаний обладает узкой полосой частот.

Приведенные в начале настоящего раздела расчеты можно отнести и к простейшей модели молекулярного кристалла, если считать каждую молекулу двухатомной и, наряду со смещением центра тяжести молекулы $u(n)$, ввести относительное смещение атомов в соответствующей молекуле $\xi(n)$ (происходящее лишь в одном на правлении).

Линейные уравнения движения подобного кристалла получатся из (3) путем замены $\varphi(n)$ на $\xi(n)$, а момента инерции I — на приведенную массу пары атомов в

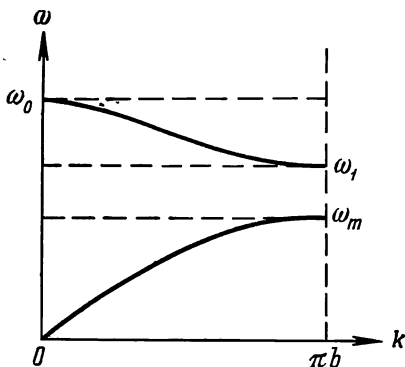


Рис. 14.

молекуле μ :

$$m\ddot{u}(n) = - \sum_{n'} [\alpha(n - n') u(n') + \gamma(n - n') \xi(n')],$$

$$\mu\ddot{\xi}(n) = - \sum_{n'} [\beta(n - n') \xi(n') + \gamma(n' - n) u(n')].$$

Предположение о сильной связи атомов внутри молекулы или о незначительном воздействии решетки на отдельную молекулу сводится к условиям

$$\begin{aligned} \beta(0) &\gg |\beta(n)|, & n \neq 0; \\ \frac{\beta(0)}{\mu} &\gg \frac{|\alpha(n)|}{m}, & \beta(0) \gg |\gamma(n)|. \end{aligned}$$

При таких условиях закон дисперсии оптических колебаний (15) действительно описывает узкую область частот, существенно отделенную от акустической полосы частот.

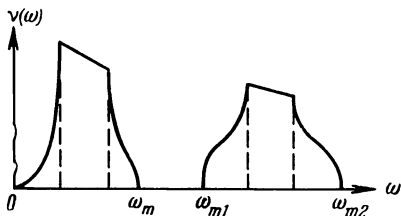


Рис. 15.

График на рис. 14 изображает, естественно, простейшую схему закона дисперсии сложной решетки и, в частности, его оптической ветви. В общем случае закон дисперсии опти-

ческих колебаний может быть весьма сложным, однако всегда соответствующие частоты лежат в полосе конечной ширины, и концы этой полосы обычно являются точками экстремума для функции $\omega = \omega_2(k)$. Последнее означает, что закон дисперсии вблизи концов оптической полосы квадратичен. Анализируя в § 2 спектр колебаний, мы видели, что квадратичный характер закона дисперсии у конца полосы частот приводит к «корневой особенности» у функции распределения частот или соответственно у плотности колебаний в окрестности этой точки. Следовательно, спектр оптических частот должен обладать именно этими особенностями на краях полосы дозволённых частот. Что же касается особенностей внутри интервала оптических частот, то они определяются сформулированными ранее теоремами ван Хова, поскольку в смысле приме-

нения указанных теорем оптическая полоса частот не отличается от акустической.

Таким образом, график функции распределения частот колебаний сложной решетки имеет вид, схематически представленный на рис. 15, где ω_{m1} и ω_{m2} — это соответственно минимальная и максимальная частоты оптических колебаний.

2. Поляризация колебаний

Рассмотрим, наконец, уравнения колебаний реального трехмерного кристалла, элементарная ячейка которого содержит q атомов. Будем нумеровать различные атомы в одной элементарной ячейке с помощью индекса s и обозначим через $u_s(\mathbf{n})$ — вектор смещения s -го атома в элементарной ячейке с «номером» \mathbf{n} , т. е. атома (\mathbf{n}, s) . Тогда функцию Лагранжа малых колебаний кристалла можно записать в виде

$$L = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, s} m_s \dot{u}_s^2(\mathbf{n}) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{n}, \mathbf{n}' \\ s, s'}} \alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u_s^i(\mathbf{n}) u_{s'}^k(\mathbf{n}'), \quad (17)$$

где силовая матрица обладает очевидными свойствами

$$\alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n}) = \alpha_{s's}^{ki}(-\mathbf{n}) \quad (i, k = 1, 2, 3)$$

и по дважды встречающимся координатным индексам i, k (а в дальнейшем и по j, l) подразумевается суммирование от 1 до 3.

Из (17) вытекают следующие уравнения движения:

$$m_s \ddot{u}_s^i(\mathbf{n}) = - \sum_{\mathbf{n}', s'} \alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u_{s'}^k(\mathbf{n}') \quad (s = 1, 2, 3, \dots, q). \quad (18)$$

Инвариантность (17) относительно перемещения кристалла как целого ($u_s^k(\mathbf{n}) = u_0^k$) приводит к следующим связям, накладываемым на элементы силовой матрицы:

$$\sum_{\mathbf{n}, s'} \alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n}) = \sum_{\mathbf{n}, s} \alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n}) = 0. \quad (19)$$

Соотношения (19) очевидным образом вытекают из (18) и являются обобщением полученных ранее требований, которым подчинялись силовые матрицы рассмотренной выше простой модели колебаний кристалла.

В случае стационарных колебаний с частотой ω мы имеем

$$\sum_{n', s'} \alpha_{ss'}^{ik} (\mathbf{n} - \mathbf{n}') u_s^k(\mathbf{n}') - \omega^2 m_s u_s^i(\mathbf{n}) = 0. \quad (20)$$

Положим, по аналогии с тем, что делалось раньше,

$$u_s(\mathbf{n}) = u_s e^{i\mathbf{k}r(\mathbf{n})} \quad (s = 1, 2, 3, \dots, q) \quad (21)$$

и получим для величин u_s следующую систему однородных алгебраических уравнений:

$$\sum_{s'} A_{ss'}^{ij}(\mathbf{k}) u_{s'}^j - \omega^2 m_s u_s^i = 0, \quad (22)$$

$$A_{ss'}^{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} \alpha_{ss'}^{ij}(\mathbf{n}) e^{-i\mathbf{k}r(\mathbf{n})}. \quad (23)$$

Условие совместности системы (22) определяет связь частоты колебаний ω с квазиволновым вектором:

$$\text{Det} \| A_{ss'}^{ij}(\mathbf{k}) - \omega^2 m_s \delta_{ss'} \delta_{ij} \| = 0. \quad (24)$$

Поскольку соотношение (24) является уравнением степени $3q$ относительно ω^2 , то его корни определяют $3q$ ветвей закона дисперсии для колебаний кристалла.

Чтобы различать смещения, отвечающие различным ветвям колебаний, запишем решение уравнения (22) в виде

$$u_s(\mathbf{n}, t) = e_s(\mathbf{k}, \alpha) e^{i(\mathbf{k}r(\mathbf{n}) - \omega t)}, \quad (25)$$

где α — номер ветви колебаний, а $e_s(\mathbf{k}, \alpha)$ — единичный вектор. Этот вектор называется вектором поляризации. Запись (25) означает, что атомы с различными номерами s , т. е. атомы, принадлежащие разным подрешеткам (разным решеткам Браве), могут колебаться по-разному. Наложим на векторы поляризации требование $e_s^*(\mathbf{k}, \alpha) =$

$= e_s(-k, \alpha)$ и выберем их так, чтобы удовлетворялись следующие условия нормировки:

$$\sum_{s=1}^q e_s^*(k, \alpha) e_s(k, \alpha') = \delta_{\alpha\alpha'},$$

$$\sum_{\alpha=1}^{3q} e_{si}^*(k, \alpha) e_{s'j}(k, \alpha) = \delta_{ss'} \delta_{ij}.$$
(26)

Заключенная в условиях (26) ортогональность векторов поляризации, принадлежащих разным ветвям колебаний, а также своеобразная ортогональность колебаний различных подрешеток кристалла реализуют линейную независимость собственных решений (25) и оправдывают смысл вектора поляризации.

Выделим временной множитель $e^{-i\omega t}$ и определим нормированные решения типа (25) формулой

$$\psi_{k,\alpha}(n, s) = \frac{1}{\sqrt{Nm_s}} e_s(k, \alpha) e^{ikr(n)}. \quad (27)$$

Основанные на условиях (26) свойства ортогональности и нормировки функций (27) имеют вид

$$\sum_{n,s} m_s \psi_{k\alpha}^*(n, s) \psi_{k'\alpha'}(n, s) = \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'}.$$

3. Общий анализ закона дисперсии

Последовательный анализ законов дисперсии сложной кристаллической решетки, определяемых в виде решений уравнения (24), затруднителен. Однако нетрудно осуществить качественное исследование, направляющей нитью в котором будут известные нам свойства колебаний простой модели кристалла.

Начнем с рассмотрения предельного случая $k = 0$. Положим $k = 0$ в уравнениях (22):

$$\sum_{s'} A_{ss'}^{ij}(0) u_s^j = \omega^2 m_s u_s^i. \quad (28)$$

Легко видеть, что система (28) при $\omega = 0$ имеет решение, для которого u_s не зависит от номера s . Действительно,

при $u_s = u_0$ ($s = 1, 2, 3, \dots, q$) левая часть (28) равна нулю на основании (19):

$$\sum_{s'} A_{ss'}^{ij}(0) u_{s'}^j = u_0^j \sum_{s'} A_{ss'}^{ij}(0) = u_0^j \sum_{n, s'} \alpha_{ss'}^{ij}(n) = 0.$$

Таким образом, уравнения (22) имеют решения, частота которых обращается в нуль вместе с величиной квазиволнового вектора. Поскольку имеются три независимые компоненты вектора смещений u_0^i ($i = 1, 2, 3$), то естественно считать, что существуют три ветви колебаний, в которых при $k = 0$ ($\lambda = \infty$) элементарная ячейка сложной решетки движется как целое с частотой $\omega = 0$.

Можно показать, что при $ak \ll 1$ для этих ветвей имеет место линейный закон дисперсии:

$$\omega(k) = s_\alpha(\kappa)k, \quad \kappa = k/k \quad (\alpha = 1, 2, 3),$$

где $s_\alpha(\kappa)$ — три скорости звука в соответствующей анизотропной среде. Следовательно, в сложной кристаллической решетке всегда имеются три акустические ветви колебаний. Длинноволновые колебания для этих ветвей совпадают с обычными звуковыми колебаниями кристалла.

Однако уравнения (28) имеют и другие решения, отвечающие $\omega \neq 0$ при $k = 0$. Чтобы получить такие колебания, исключим из рассмотрения обсужденные уже колебания элементарной ячейки как целого. С этой целью наложим на смещение атомов требование

$$\sum_s m_s u_s = 0, \quad (29)$$

которое является условием совместности уравнений (28) при $\omega \neq 0$.

Если использовать (29), то (28) сведется к системе $3q - 3$ однородных линейных алгебраических уравнений для определения стольких же независимых смещений. Приравнявая детерминант этой системы нулю, мы получим уравнение степени $3q - 3$ относительно ω^2 , которое даст нам $3q - 3$ отличных от нуля и, вообще говоря, различных значений частоты ω при $k = 0$:

$$\omega_\alpha(0) = \omega_\alpha^0 \neq 0 \quad (\alpha = 4, 5, 6, \dots, 3q). \quad (30)$$

Отличная от нуля частота этих колебаний с $k = 0$ обусловлена тем, что происходит конечное относительное смещение атомов в одной элементарной ячейке, требующее, естественно, конечной энергии.

Наличие конечной частоты для предельно длинноволновых колебаний является характерным для оптических ветвей кристалла. Поэтому мы можем заключить, что в сложной кристаллической решетке имеются $3q - 3$ оптические ветви колебаний. Поскольку при $k = 0$ для всех этих колебаний справедливо условие (29), то центр тяжести элементарной ячейки остается неподвижным при соответствующих оптических колебаниях.

Таким образом, предельно длинноволновые оптические колебания сложной решетки — это колебания различных простых подрешеток друг относительно друга.

Схема законов дисперсии в акустических и оптических ветвях сложной кристаллической решетки представлена на рис. 16, где изображена зависимость частоты от квази-волнового вектора вдоль некоторого направления в кристалле.

В заключение заметим, что наличие нескольких ветвей колебаний очень легко учесть как при введении нормальных координат кристалла, так и при квантовании колебаний. Действительно, переход к реальному трехмерному кристаллу формально сводится к добавлению лишних индексов (i, j — координатных индексов, s — номеров атомов в элементарной ячейке и α — номеров ветвей закона дисперсии). Например, разложение произвольных смещений $u(n, s)$ по функциям (28) примет вид

$$u(n, s) = \sum_{k, \alpha} Q(k, \alpha) \psi_{k\alpha}(n, s), \quad (31)$$

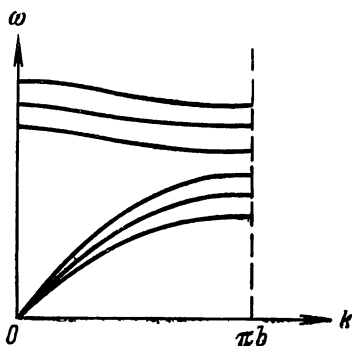


Рис. 16.

где величины $Q(\mathbf{k}, \alpha)$ являются комплексными нормальными координатами трехмерной решетки.

При квантовании колебаний вводятся операторы рождения и уничтожения фононов $a_\alpha(\mathbf{k})$ и $a_\alpha^+(\mathbf{k})$, принадлежащих различным ветвям законов дисперсии ($\alpha = 1, 2, \dots, 3q$). Их правила коммутации являются очевидным обобщением рассмотренных в § 3 перестановочных соотношений:

$$[a_\alpha(\mathbf{k}), a_{\alpha'}^+(\mathbf{k}')] = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'},$$

$$[a_\alpha(\mathbf{k}), a_{\alpha'}(\mathbf{k}')] = [a_\alpha^+(\mathbf{k}), a_{\alpha'}^+(\mathbf{k}')] = 0.$$

Операторы нормальных координат $Q(\mathbf{k}, t)$ связаны с операторами $a_\alpha(\mathbf{k})$ и $a_\alpha^+(\mathbf{k})$ обычными соотношениями:

$$Q(\mathbf{k}, \alpha) = \left(\frac{\hbar}{2\omega_\alpha(\mathbf{k})} \right)^{1/2} [a_\alpha(\mathbf{k}) + a_\alpha^+(-\mathbf{k})],$$

$$Q^+(\mathbf{k}, \alpha) = \left(\frac{\hbar}{2\omega_\alpha(\mathbf{k})} \right)^{1/2} [a_\alpha^+(\mathbf{k}) + a_\alpha(-\mathbf{k})].$$

Наконец, гамильтониан колебаний кристалла в гармоническом приближении сведется к выражению

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \hbar \omega_\alpha(\mathbf{k}) \left[a_\alpha^+(\mathbf{k}) a_\alpha(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right], \quad (32)$$

естественным образом обобщающему формулу (21) из § 3.

СПЕЦИАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ДИНАМИКИ КРИСТАЛЛОВ

§ 6. ДЛИННОВОЛНОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛА

1. Уравнения для полей смещений

При анализе закона дисперсии длинноволновых колебаний ($ak \ll 1$) мы отмечали его совпадение с законом дисперсии звуковых колебаний сплошной среды. Однако интересно проследить, как упрощаются сами уравнения движения кристалла в случае длинноволновых колебаний, т. е. каким образом реализуется предельный переход от уравнений механики кристаллической решетки к уравнениям сплошного твердого тела. Ясно, что в качестве одного из результатов такого предельного перехода мы должны получить известные уравнения теории упругости.

Вернемся к уравнениям движения трехмерной кристаллической решетки

$$m_s \ddot{u}_s^i(\mathbf{n}) = - \sum_{\mathbf{n}', s'} \alpha_{ss'}^{ik} (\mathbf{n} - \mathbf{n}') u_{s'}^k(\mathbf{n}'), \quad (1)$$

в которых матрица $\alpha(\mathbf{n})$ подчиняется уже обсуждавшимся ранее требованиям:

$$\sum_{\mathbf{n}, s} \alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n}) = \sum_{\mathbf{n}, s'} \alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n}) = 0, \quad (2)$$

$$\alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n}) = \alpha_{s's}^{ki}(-\mathbf{n}). \quad (3)$$

Помимо (2) и (3), имеются еще не упоминавшиеся ранее дополнительные связи, накладываемые на элементы силовой матрицы. В частности, определенные ограничения возникают в связи с тем, что внутреннее состояние решетки не зависит от поворота кристалла как целого. Действительно, допустим, что совершен такой поворот, и ось поворота проходит через начало координат, а сам

поворот описывается аксиальным вектором Ω . Тогда вектор смещения атома (n, s) будет иметь вид

$$u_s^i(n) = e_{ikl} X_s^k(n) \Omega_l, \quad (4)$$

где e_{ikl} — антисимметричный единичный тензор третьего ранга, а $X_s(n)$ радиус-вектор равновесного положения атома (n, s) :

$$X_s(n) = r(n) + \eta_s, \quad r(n) = \sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha n_\alpha. \quad (5)$$

Здесь η_s — радиус-вектор, определяющий положение s -го атома в элементарной ячейке.

Поскольку при таких смещениях в кристалле не должно возникать никаких сил, то подстановка (4) в уравнение (1) дает

$$e_{klm} \Omega_m \sum_{n', s'} \alpha_{ss'}^{ik} (n - n') X_{s'}^l(n') = 0. \quad (6)$$

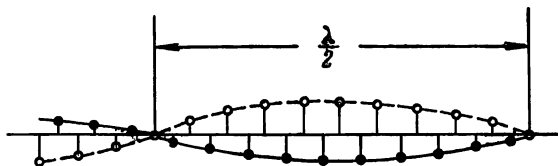
В силу произвольности вектора Ω и необходимого выполнения условий (2) и (3) из (6) следуют такие соотношения:

$$\sum_{n, s} \alpha_{ss'}^{ik} (n) X_s^l(n) = \sum_{n, s} \alpha_{ss'}^{il} (n) X_s^k(n), \quad (7)$$

которые и являются дополнительными условиями, связывающими элементы силовой матрицы.

Будем иметь в виду условия (7) и рассмотрим те решения уравнений (1), которые описывают слабо изменяющиеся в пространстве поля смещений. Если λ — характерная длина волны соответствующих смещений, то мы будем предполагать выполненным неравенство $\lambda \gg a$. Тогда различие в смещении эквивалентных (т. е. принадлежащих одной подрешетке и имеющих один и тот же номер s) атомов в соседних элементарных ячейках δu_s будет очень малым по сравнению с самим смещением: $\delta u_s \ll \ll u_s$. Схема смещений атомов одномерного кристалла при таких колебаниях показана на рис. 17, где выделено то обстоятельство, что смещения атомов различных подрешеток имеют, вообще говоря, разные амплитуды и фазы

(рисунок соответствует колебаниям атомов двух типов в противофазе). Так как естественный дискретный «шаг» в решетке также мал в силу условия $a \ll \lambda$, то для анализа слабо изменяющихся в пространстве смещений можно использовать такие упрощения. Будем считать, во-первых, что «координата» элементарной ячейки $r = r(n)$



[Рис. 17.

принимает непрерывный ряд значений, а во-вторых, что смещение $u_s(n)$ является непрерывной функцией $r(n)$. В дальнейшем мы сохраним ту же букву для обозначения этой новой функции, и потому уравнение (1) запишем в виде

$$m_s \ddot{u}_s^i(r) = - \sum_{n', s'} \alpha_{ss'}^{ik} (n - n') u_{s'}^k(r'), \quad (8)$$

где обозначено $r = r(n)$ и $r' = r(n')$.

Разложим функцию $u_{s'}^k(r')$ в ряд около точки $r(x_1, x_2, x_3)$, ограничившись членами второго порядка малости по $|x_h - x'_h|$:

$$u_s^k(r') = u_s^k(r) - (x_l - x'_l) \nabla_l u_s^k(r) + \\ + \frac{1}{2} (x_l - x'_l) (x_m - x'_m) \nabla_l \nabla_m u_s^k(r). \quad (9)$$

В записи (9) мы употребили обозначение

$$\nabla_i \Phi \equiv \frac{\partial \Phi}{\partial x_i},$$

которое в дальнейшем будет неоднократно встречаться.

Воспользуемся теперь быстрым убыванием коэффициентов $\alpha(n)$ с ростом n и подставим разложение (9) в (8), не учитывая членов с более высокими пространственными

производными от смещений:

$$m_s \ddot{u}_s^i = \sum_{s'} \{ C_{ss'}^{ik} u_{s'}^k + C_{ss'}^{ikl} \nabla_l u_{s'}^k + C_{ss'}^{iklm} \nabla_l \nabla_m u_{s'}^k \}. \quad (10)$$

Постоянные коэффициенты в уравнениях движения (10) следующим образом определяются через элементы силовой матрицы:

$$C_{ss'}^{ik} = C_{s's}^{ki} = - \sum_n \alpha_{ss'}^{ik}(n), \quad (11)$$

$$C_{ss'}^{ikl} = \sum_{n'} \alpha_{ss'}^{ik}(n - n') [x_l(n) - x_l(n')] = \sum_n \alpha_{ss'}^{ik}(n) x_l(n), \quad (12)$$

$$C_{ss'}^{iklm} = - \frac{1}{2} \sum_{n'} \alpha_{ss'}^{ik}(n - n') [x_l(n) - x_l(n')] \times \\ \times [\dot{x}_m(n) - \dot{x}_m(n')] = - \frac{1}{2} \sum_n \alpha_{ss'}^{ik}(n) x_l(n) x_m(n). \quad (13)$$

После произведенного нами преобразования уравнения движения (10) приняли вид дифференциальных уравнений. Таким образом, для описания длинноволновых (медленно меняющихся в пространстве) смещений кристалла мы получили систему дифференциальных уравнений второго порядка в частных производных (10). В принципе — это уравнения такого же типа, как и в теории упругости. Однако в теории упругости изучается одно поле смещений сплошного твердого тела и не фигурируют смещения отдельных подрешеток сложной кристаллической решетки. Легко сообразить, что входящее в уравнения теории упругости смещение есть среднее смещение центра тяжести элементарной ячейки, поскольку именно это смещение характеризует движение малого элемента объема тела как целого.

Имея в виду последнее замечание, введем смещение центра тяжести элементарной ячейки

$$u = \frac{1}{m} \sum_s m_s u_s, \quad m = \sum_s m_s, \quad (14)$$

и представим смещение каждой подрешетки в виде

$$\mathbf{u}_s = \mathbf{u} + \xi_s, \quad (15)$$

где ξ_s — смещение относительно центра тяжести. Смещения ξ_s связаны естественным условием

$$\sum_s m_s \xi_s = 0. \quad (16)$$

Подставим (15) в уравнение (10) и просуммируем (10) по s , обратив внимание на существенные для этой процедуры свойства коэффициентов уравнения. Прежде всего, заметим, что из определения (11) и требования (2) следует

$$\sum_s C_{ss'}^{ik} = \sum_{s'} C_{ss'}^{ik} = 0. \quad (17)$$

Далее, из определения (12) и свойства (3) вытекает условие

$$\sum_{ss'} C_{ss'}^{ikl} = - \sum_{ss'} C_{ss'}^{kil}. \quad (18)$$

Суммируя (7) по s , мы приходим к такому свойству симметрии:

$$\sum_{ss'} C_{ss'}^{ikl} = \sum_{ss'} C_{ss'}^{ilk}. \quad (19)$$

Но тензор третьего ранга, симметричный по одной паре индексов и антисимметричный — по другой, равен нулю. Поэтому

$$\sum_{ss'} C_{ss'}^{ikl} = 0. \quad (20)$$

Условия (17) и (20) определяют те свойства тензорных коэффициентов в преобразованных уравнениях движения, которые следует использовать при упомянутом суммировании. Выполним суммирование уравнений (10) по s и ограничимся только слагаемыми с наиболее низкими производными по координатам от каждой функции *).

*) При длинноволновых смещениях кристалла каждая производная более высокого порядка отличается от производной предыдущего порядка малым множителем: $a \nabla \varphi \sim (ak) \varphi$, $ak \sim a/\lambda \ll 1$.

Тогда из (10) получится уравнение

$$\rho \ddot{u}^i = c_{imkl} \nabla_k \nabla_l u^m + \sum_s \gamma_{ikl}^s \nabla_l \xi_s^k, \quad (21)$$

в котором *)

$$c_{iklm} = \frac{1}{V_0} \sum_{ss'} C_{ss'}^{iklm} = \frac{1}{V_0} \sum_{ss'} \sum_{\mathbf{n}} \alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n}) x_l(\mathbf{n}) x_m(\mathbf{n}), \quad (22)$$

$$\gamma_{ikl}^s = \frac{1}{V_0} \sum_{s'} C_{s's}^{ikl}, \quad (23)$$

а $\rho = m/V_0$ — средняя плотность кристалла (V_0 — объем элементарной ячейки).

Мы видим, что наряду со смещением центра тяжести \mathbf{u} в уравнение (21) входят относительные смещения ξ_s . Нетрудно путем несложного вычитания одного уравнения из другого вывести из (10) и (21) в том же приближении также следующую систему уравнений для относительных смещений:

$$m_s \ddot{\xi}_s^i = \sum_{s'} C_{ss'}^{rik} \xi_{s'}^k - V_0 \gamma_{kil}^s \nabla_l u^k. \quad (24)$$

Как и при записи уравнения (21), в правой части (24) оставлены только слагаемые с наиболее низкими пространственными производными от каждой функции.

Уравнения (21) и (24) составляют полную систему уравнений для медленно изменяющихся в пространстве смещений кристаллической решетки. То обстоятельство, что относительные смещения связаны условием (16), автоматически учитывается в (24) за счет свойств (17) и (20).

2. Вывод уравнений теории упругости

Произведем качественный анализ уравнений (21) и (24). Обратим, прежде всего, внимание на то, что в принятом нами приближении поля смещений центра тяжести \mathbf{u} и относительных смещений ξ_s связаны посредством тензора третьего ранга γ_{ikl}^s , элементы которого являются

*) У величин, определяющих макроскопические характеристики кристалла, координатные индексы (i, k, l и др.) будут писаться внизу.

некоторыми макроскопическими характеристиками кристалла. Но характеризующие свойства решетки тензоры третьего ранга могут отличаться от нуля лишь в решетке, не обладающей центром инверсии. Поэтому в рассматриваемом приближении взаимодействие полей u и ξ_s отсутствует в кристалле, где каждый атом является центром симметрии. В таком кристалле вместо (21) и (24) мы получим систему более простых и независимых уравнений для u и ξ_s :

$$\rho \ddot{u}^i = c_{iklm} \nabla_l \nabla_m u^k, \quad (25)$$

$$m_s \ddot{\xi}_s^i = \sum_{s'} C_{ss'}^{ik} \xi_{s'}^k. \quad (26)$$

Первое из этих уравнений по форме записи совпадает с уравнением теории упругости, а второе — является уравнением предельно длинноволновых оптических колебаний. Для гармонических колебаний с частотой ω уравнение (26) в точности совпадает с уравнением (28) из § 5, на решения которого наложено требование (29) из § 5. В этом легко убедиться, учтя, что из определения соответствующих матриц следует $A_{ss'}^{ik}(0) = -C_{ss'}^{ik}$. Отсутствие пространственных производных от смещений в (26) и, следовательно, отсутствие дисперсии для оптических колебаний являются следствием предельно длинноволнового приближения ($\lambda \gg a$). Если бы мы интересовались учетом дисперсии оптических колебаний, то при частотах $\omega \sim \omega_0$ (ω_0 — характерная частота оптических колебаний) уравнение (26) следовало бы заменить более точным уравнением типа

$$-m_s \omega^2 \xi_s^i = \sum_{s'} C_{ss'}^{ik} \xi_{s'}^k + \sum_{s'} b_{iklm}^{ss'} \nabla_k \nabla_l \xi_{s'}^m,$$

где тензорные коэффициенты $b_{iklm}^{ss'}$ очевидным образом могут быть построены с помощью коэффициентов $C_{ss'}^{iklm}$.

Возвращаясь к уравнению (25), заметим, что тензор c_{imkl} может быть идентифицирован с тензором упругих модулей λ_{iklm} только в том случае, если он обладает вполне определенными свойствами симметрии. В частности, сравнение уравнения (25) с обычным уравнением теории

упругости

$$\rho \ddot{u}^i = \lambda_{iklm} \nabla_k \nabla_l u^m, \quad (27)$$

коэффициенты которого обладают известной симметрией, приводит нас к выводу, что тензор c_{iklm} должен быть симметричным по отношению к перестановке первой и второй пары индексов:

$$c_{iklm} = c_{lmik}. \quad (28)$$

Действительно, в уравнение (27) входит лишь симметричная по индексам k, l часть тензора λ_{iklm} . Поэтому для совпадения уравнений (25) и (27) требуется

$$\frac{1}{2} (\lambda_{iklm} + \lambda_{ilk m}) = c_{imkl}. \quad (29)$$

Однако тензор λ_{iklm} симметричен относительно перестановки первой и второй пары индексов:

$$\lambda_{iklm} = \lambda_{lmik}, \quad (30)$$

поэтому соотношение (29) будет непротиворечивым только при наличии симметрии (28).

Свойство (28) не вытекает непосредственно из определения (22), поскольку последнее явно содержит в себе только такую симметрию коэффициентов c_{iklm} :

$$c_{iklm} = c_{kilm} = c_{ikml}. \quad (31)$$

Следовательно, требование (28) накладывает некоторые дополнительные связи на элементы силовой матрицы кристалла. Используем (22) и выпишем эти связи:

$$\sum_{ss'} \sum_n \alpha_{ss'}^{ik}(\mathbf{n}) x_l(\mathbf{n}) x_m(\mathbf{n}) = \sum_{ss'} \sum_n \alpha_{ss'}^{lm}(\mathbf{n}) x_i(\mathbf{n}) x_k(\mathbf{n}). \quad (32)$$

Напомним, что симметрия тензора упругих модулей (30) вытекает из предложений, что при малых деформациях справедлив закон Гука и что макроскопическое состояние деформированного кристалла описывается некоторым упругим потенциалом. Закон Гука устанавливает линейную зависимость упругих напряжений σ_{ik} от деформаций ε_{ik} :

$$\sigma_{ik} = \lambda_{iklm} \varepsilon_{lm}, \quad (33)$$

и является математическим оформлением известного экспериментального факта, всегда имеющего место при малых деформациях. Запись закона Гука не требует от тензора упругих модулей свойств (30), так как для непротиворечивости формулы (33) необходима лишь такая симметрия λ_{iklm} :

$$\lambda_{iklm} = \lambda_{iilm} = \lambda_{ikml}. \quad (34)$$

Второе предположение (о существовании соответствующего потенциала) сводится к естественному утверждению, что приходящаяся на единицу объема тела работа упругого деформирования

$$\delta R = -\sigma_{ik} \delta \varepsilon_{ik}$$

является полным дифференциалом, т. е. равна малому изменению некоторой функции состояния тела. Легко сообразить, что если справедлив закон Гука (33), то возможность выразить работу δR как изменение некоторого термодинамического потенциала однозначно связана с наличием свойств (30) у тензора λ_{iklm} .

Таким образом, необходимость дополнительных связей элементов силовой матрицы кристаллической решетки (32) есть условие того, что кристалл подчиняется известной нам термодинамике деформирования. Другими словами, соотношения (28) или (32) нужны для совместимости уравнений теории упругости с любой силовой матрицей в механике кристалла.

Найдем теперь связь тензоров λ_{iklm} и c_{iklm} . Соотношение (29) однозначно разрешается относительно тензора (λ_{iklm}^*):

$$\lambda_{iklm} = c_{imkl} + c_{kmil} - c_{lmki}. \quad (35)$$

Равенство (35) определяет упругие модули кристалла через элементы силовой матрицы, т. е. дает точные связи макроскопических механических характеристик монокристалла с микроскопическими свойствами кристаллической решетки.

*) Интересующее нас решение можно найти следующим образом: переставить индексы i и k в соотношении (29) и сложить полученное выражение с (29); после этого переставить индексы i и l в (29) и вычесть результат из полученной ранее суммы.

Напомним, что сформулированные выводы были получены в предположении, что каждый атом кристалла является центром инверсии. Если кристаллическая решетка не обладает такой симметрией, то при разделении уравнений для u и ξ_s мы сразу должны явно учесть, что характерные частоты упругих смещений всегда малы по сравнению с предельными оптическими частотами:

$$\omega \ll \omega_0. \quad (36)$$

Поскольку величины оптических частот в основном определяются коэффициентами $C_{ss'}^{ik}$ и по порядку величины $C_{ss'}^{ik} \sim m\omega_0^2$, то при условии (36) можно опустить динамический член в уравнениях (24) и свести последние к статическим уравнениям:

$$\sum_{s'} C_{ss'}^{ik} \xi_{s'}^k = V_0 \gamma_{kil}^s \nabla_l u^k. \quad (37)$$

Уравнения (37) разрешимы относительно ξ_s :

$$\xi_s^i = \sum_{s'} B_{ss'}^{ij} \gamma_{kjl}^{s'} \nabla_l u^k, \quad (38)$$

где матрица $B_{ss'}^{ik}$ обладает той же симметрией, что и $C_{ss'}^{ik}$. Подставив (38) в (21), мы снова получим уравнение теории упругости типа (25):

$$\rho \ddot{u}^i = c_{iklm}^* \nabla_l \nabla_m u^k,$$

тензорные модули в котором будут выражаться не только через тензор c_{iklm} , но и через тензор γ_{ikl}^s :

$$c_{iklm}^* = c_{iklm} + \frac{1}{2} \sum_{ss'} (\gamma_{ijl}^s \gamma_{knm}^{s'} + \gamma_{ijm}^s \gamma_{knl}^{s'}) B_{ss'}^{jn}.$$

3. Колебания ионного кристалла

Вывод уравнений (21) и (24) или (25) и (26), описывающих длинноволновые колебания кристалла, существенно опирался на предположение о быстром убывании взаимодействия колеблющихся атомов с увеличением расстояния между ними. Основываясь на этом предположе-

нии, можно было, раскладывая поля смещений в ряд, ограничиться главными членами такого разложения и свести уравнения движения кристалла к системе дифференциальных уравнений второго порядка. Однако в ионном кристалле такая процедура, вообще говоря, не проходит. Если сложная решетка состоит не из нейтральных атомов, а из ионов, то потенциал кулоновского взаимодействия между ними слабо спадает с расстоянием и обычный метод разложения в ряд неприемлем. Кроме того, при колебаниях решетки движущиеся ионы возбуждают динамические электромагнитные поля в кристалле, эффект запаздывания которых может иногда играть важную роль. Но в случае интересующих нас длинноволновых колебаний трудность учета электромагнитного взаимодействия легко преодолевается. Дело в том, что в этом случае мы можем фактически пользоваться макроскопическим рассмотрением и учитывать возникающие в кристалле электрические и магнитные поля только с помощью уравнений Максвелла для сплошной среды.

При таком подходе взаимодействие ионов (которые для простоты мы будем считать точечными зарядами) разделяется на две части существенно разной физической природы. Первая часть включает взаимодействия, однозначно определяемые локальными условиями, и описывается некоторой силовой матрицей $\alpha(n)$. Эта часть такая же, как и атомное взаимодействие, ответственное за упругие свойства неионных кристаллов. Вторая часть обусловлена воздействием среднего электрического поля в кристалле на заряд иона (воздействием среднего магнитного поля на движущиеся ионы можно пренебречь*). Эта часть, включающая в себя и упомянутое выше кулоновское взаимодействие ионов, не может быть определена одними лишь локальными условиями и описывается введением макроскопических полей. Поэтому в ионном кристалле вместо (24) можно записать следующие уравнения движения:

$$m_s \ddot{\xi}_s^i = \sum_{s'} C_{ss'}^{ik} \xi_{s'}^k - V_0 \gamma_{kil}^s \nabla_l u^k + e_s E^i, \quad (39)$$

*) Даже в области предельных частот колебаний ($\omega \sim 10^{13} \text{ сек}^{-1}$) скорости движения ионов меньше скорости звука в кристалле ($v < s \sim 10^5 \text{ см/сек}$) и сила Лоренца, порожденная магнитным полем, исчезающе мала по сравнению с электрической силой.

где e_s — заряд s -го иона в элементарной ячейке, а E — напряженность усредненного электрического поля в кристалле.

В силу электрической нейтральности элементарной ячейки ($\sum_s e_s = 0$) уравнение (21) для центров тяжести останется без изменений.

Уравнения (21) и (39) должны решаться совместно с системой макроскопических уравнений Максвелла, вид которых общеизвестен и выписывать которые нет необходимости. Но весьма важно отметить следующие обстоятельства, относящиеся к записи и решениям уравнений Максвелла. Во-первых, ионные кристаллы являются диэлектриками (изоляторами). Кроме того, мы ограничимся рассмотрением ионных кристаллов, не обладающих сколько-нибудь заметными магнитными свойствами. Поэтому единственной величиной,

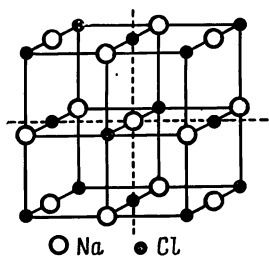


Рис. 18.

относящейся к характеристикам свойств среды и входящей в уравнения Максвелла, мы будем считать вектор поляризации кристалла P . Напомним, что вектор P входит в определение электрической индукции диэлектрика D :

$$D = E + 4\pi P.$$

Во-вторых, условившись рассматривать ионы как точечные заряды, мы должны связать вектор P только со смещением ионов из своих равновесных положений:

$$P = \frac{1}{V_0} \sum_s e_s u_s \equiv \frac{1}{V_0} \sum_s e_s \xi_s. \quad (40)$$

Произведем анализ уравнений колебаний ионных кристаллов на примере кристаллов типа NaCl, которые обладают кубической симметрией и содержат только два иона в элементарной ячейке, причем каждый из ионов является центром симметрии (рис. 18). Уравнение (21)

В этом случае заменится уравнением (25) и станет независимым от электромагнитных полей, а уравнения (39) сильно упростятся:

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{\xi}_1^i &= C_{11}^{ik} \xi_1^k + C_{12}^{ik} \xi_2^k + e_1 E^i, \\ m_2 \ddot{\xi}_2^i &= C_{21}^{ik} \xi_1^k + C_{22}^{ik} \xi_2^k + e_2 E^i. \end{aligned} \quad (41)$$

В силу кубической симметрии кристалла и свойств (17) все элементы матрицы $C_{ss'}^{ik}$ выражаются через одну скалярную величину:

$$C_{ss'}^{ik} = C_{ss'} \delta_{ik}, \quad C_{11} = C_{22} = -C_{12} = -C_{21} = -\alpha_0. \quad (42)$$

Припишем для определенности номер 1 положительному иону ($e_1 = e$, $e_2 = -e$). Тогда уравнения (41) с учетом (42) примут вид

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{\xi}_1 &= -\alpha_0 (\xi_1 - \xi_2) + eE, \\ m_2 \ddot{\xi}_2 &= -\alpha_0 (\xi_2 - \xi_1) - eE. \end{aligned} \quad (43)$$

Уравнения (43) могут быть заменены одним уравнением для относительного смещения $\xi = \xi_1 - \xi_2$:

$$\mu \ddot{\xi} = -\alpha_0 \xi + eE, \quad (44)$$

где μ — приведенная масса элементарной ячейки ($\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$). Через смещение ξ естественным образом выражается также поляризация кристалла:

$$P = \frac{e}{V_0} \xi. \quad (45)$$

Уравнение (44) вместе с (45) и уравнения Максвелла описывают совместные (иногда говорят: связанные) оптические колебания ионного кристалла и колебания электромагнитного поля. Таким образом, указанная система уравнений позволяет учесть в простейшем варианте взаимодействие оптических фононов с фотонами.

Из электродинамики известно, что поле смещений ξ может быть исключено из уравнений Максвелла путем введения диэлектрической проницаемости среды ϵ^* ,

*) Поскольку кристалл типа NaCl обладает кубической симметрией, тензор диэлектрической проницаемости такой среды сводится к одной константе.

связывающей временные фурье-компоненты векторов D и E :

$$D(\omega) = \varepsilon(\omega) E(\omega). \quad (46)$$

Чтобы найти диэлектрическую проницаемость, мы поступим стандартным образом: рассмотрим гармонические колебания всех полей. Для стационарных колебаний с частотой ω уравнение (44) превращается в алгебраическое:

$$(\omega_0^2 - \omega^2) \xi = \frac{e}{\mu} E, \quad (47)$$

где $\omega_0^2 = \alpha_0/\mu$ — квадрат характеристической частоты, являющейся предельной оптической частотой для кристалла, в котором отсутствует взаимодействие оптических фононов с электромагнитным полем.

Если $\omega \neq \omega_0$, то из (47), (45), (39) и (46) элементарным путем получается выражение для диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_{\text{п}}^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \equiv \frac{\omega_0^2 + \omega_{\text{п}}^2 - \omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2}, \quad (48)$$

где $\omega_{\text{п}}^2 = 4\pi e^2/\mu V_0$ есть квадрат так называемой плазменной частоты ($\omega_{\text{п}}$ — это частота собственных колебаний ионной плазмы, ионы которой взаимодействуют только через макроскопическое кулоновское поле), μ — приведенная масса пары ионов противоположного знака, а V_0 — объем, приходящийся на такую пару. Если взять $V_0 \sim 10^{-23} \text{ см}^3$ и положить $\mu \sim 5 \cdot 10^{-23} \text{ г}$, то легко видеть, что $\omega_{\text{п}} \sim 10^{13} \text{ сек}^{-1}$. Поэтому можно считать, что $\omega_{\text{п}} \sim \omega_0$.

Имея формулу (48) для диэлектрической проницаемости, мы сразу можем написать закон дисперсии поперечных колебаний системы «кристалл — электромагнитное поле» *). Действительно, поперечные электромагнитные колебания (электромагнитные волны) в среде с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\omega)$ имеют закон дисперсии

$$\omega = \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon(\omega)}}, \quad (49)$$

*) Возможность тривиального разделения электромагнитных колебаний на поперечные и продольные обусловлена симметрией кубического кристалла.

где c — скорость света в вакууме. Подставляя (48) в (49), придадим закону дисперсии поперечных колебаний такую форму записи:

$$c^2 k^2 = \omega^2 \frac{\omega^2 - \omega_0^2 - \omega_{\Pi}^2}{\omega^2 - \omega_0^2}. \quad (50)$$

Продольные электромагнитные колебания с отличной от нуля частотой возможны в среде только при условии $D = 0$ *), когда $E = -4\pi P$. Но при $E \neq 0$ из (46) следует, что частоты соответствующих колебаний являются нулями функции $\varepsilon(\omega)$:

$$\varepsilon(\omega) = 0. \quad (51)$$

Таким образом, продольные колебания могут происходить лишь при частотах

$$\omega = \omega_l, \quad \omega_l^2 = \omega_0^2 + \omega_{\Pi}^2,$$

поэтому их закон дисперсии сводится к тривиальной зависимости — постоянству частоты, совпадающей с величиной ω_l .

Приступая к краткому обсуждению полученных законов дисперсии, полезно начать с записи законов дисперсии для невзаимодействующих электромагнитных волн и оптических колебаний кристалла. В рассматриваемой нами системе фотонов и оптических фононов взаимодействие формально можно «выключить», положив $e = 0$. Тогда уравнения Максвелла сведутся к уравнениям поля в вакууме, и закон дисперсии электромагнитных волн примет простой вид:

$$\omega = ck. \quad (52)$$

Из уравнения (47) при $e = 0$ следует закон дисперсии оптических колебаний:

$$\omega = \omega_0, \quad (53)$$

*) Условие $D = 0$ при $\omega \neq 0$ является следствием уравнения Максвелла для диэлектрика:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} (\partial D / \partial t) = -i \frac{\omega}{c} \mathbf{D},$$

и продольного характера колебаний ($\operatorname{rot} \mathbf{H} = 0$).

предельная простота которого обусловлена предположением $ak \ll 1$.

Графики законов дисперсии (52) и (53) приведены на рис. 19, а в виде прямых 1 и 2 соответственно. Важной особенностью этих законов дисперсии является то, что их графики пересекаются. В точке пересечения графиков частоты и длины волн колебаний различной природы

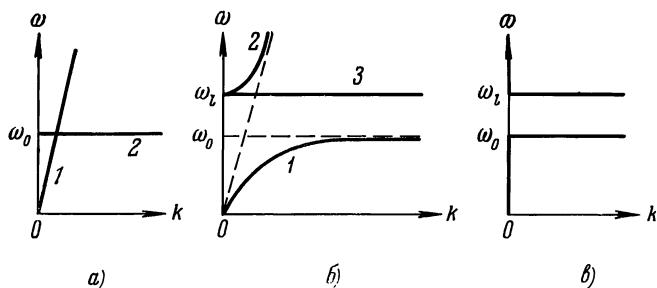


Рис. 19.

совпадают. Поэтому при включении даже малого взаимодействия между этими колебаниями должен наблюдаться некий резонанс, существенно влияющий как на электромагнитные, так и на механические процессы в изучаемой системе.

Действительно, вернемся к закону дисперсии поперечных колебаний (50), в котором мы учли требуемое взаимодействие. Если $\omega \ll \omega_0$, то формула (50) дает закон дисперсии электромагнитных волн в среде с некоторой статической диэлектрической проницаемостью:

$$\omega = \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon(0)}}, \quad \varepsilon(0) = 1 + \left(\frac{\omega_{\Pi}}{\omega_0}\right)^2.$$

При столь низкочастотных колебаниях решетка успевает полностью подстраиваться к электромагнитному полю, вызывая лишь уменьшение скорости электромагнитной волны.

Если $\omega \gg \omega_1$, то из (50) вытекает закон дисперсии электромагнитных волн в вакууме (52). Возникающие в кристалле электромагнитные волны с такими частотами

не могут вовлечь в движение решетку вследствие ее инертности. Поэтому прохождение волны через кристалл не сопровождается никакой реакцией со стороны последнего.

В области частот $\omega \sim \omega_0$ закон дисперсии перестает быть линейным, и его схематический график приведен на рис. 19, б. Кардинальная перестройка закона дисперсии при частотах $\omega \sim \omega_0$ является ярким проявлением упомянутого выше резонансного характера взаимодействия фотонов с оптическими фононами при $\omega = \omega_0$.

Кривые 1 и 2 на рис. 19, б относятся к поперечным колебаниям, а горизонтальная прямая 3 — к продольным колебаниям. Интервал частот (ω_0, ω_1) — это запрещенная полоса, в которой лежат частоты, не соответствующие рассматриваемым колебаниям кристалла. Из формулы (48) следует, что при этих частотах диэлектрическая проницаемость становится отрицательной (полное отражение волн от кристалла).

Наконец, рассмотрим предельный вид закона дисперсии поперечных колебаний в специальном случае полного пренебрежения запаздыванием электромагнитных волн ($c \rightarrow \infty$). В этом крайнем случае при $k \neq 0$ из (50) следует соотношение $\omega = \omega_0$, совпадающее с законом дисперсии оптических колебаний (53) для решетки, не взаимодействующей с полем. Если же $\omega \neq \omega_0$, то (50) остается непротиворечивым лишь для $k = 0$.

Продольные колебания не зависят от запаздывания (они квазистатичны), поэтому графики законов дисперсии в предположении $c = \infty$ принимают вид, изображенный на рис. 19, в.

Отличие графиков, изображенных на рис. 19, б и в, проявляется при длинах волн, для которых

$$ak \lesssim a \frac{\omega_0}{c} \sim \frac{s}{c},$$

где s — скорость звука в кристалле. Поскольку отношение s/c очень мало ($s/c \sim 10^{-5}$), то влияние запаздывания на спектр колебаний кристалла сказывается лишь в малой части разрешенного интервала значений k . Таким образом, во всех задачах, где основную роль играют колебания с длинами волн, удовлетворяющими условию

$$s/c \ll ak \ll 1,$$

запаздывание несущественно, и оптическим фононам в ионном кристалле следует приписывать частоту ω_0 для поперечных механических колебаний и частоту ω_l для продольных колебаний, связанных с чисто статическим электрическим полем.

Отношение частот поперечных и продольных колебаний простым образом связано с макроскопическими характеристиками ионного кристалла, а именно, с предельными значениями его диэлектрической проницаемости. Действительно, из выражения (48) непосредственно следует

$$\left(\frac{\omega_l}{\omega_0}\right)^2 = \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)}. \quad (54)$$

Хотя на основании (48) можно заключить, что $\varepsilon(\infty) = 1$, но в записи (54) мы умышленно не использовали это свойство рассматриваемой модели. Отсутствующий в изложенном выше анализе учет электрической структуры ионов, проявляющейся в их поляризуемости во внешнем поле, приводит к выводу, что $\varepsilon(\infty) \neq 1$, однако и в этом случае соотношение (54) остается справедливым *).

4. Волны «изгиба» в сильно анизотропном кристалле

В § 1 был рассмотрен пример закона дисперсии колебаний анизотропной кристаллической решетки. Однако это было сделано на упрощенной модели кристалла, смещения атомов которого описываются одной скалярной величиной. В реальной кристаллической решетке смещение атома является вектором, и последнее обстоятельство, как мы увидим ниже, может привести к существенной перестройке закона дисперсии сильно анизотропных кристаллов.

Рассмотрим кристалл с простой гексагональной решеткой, предполагая взаимодействия атомов в базисной плоскости xOy и вдоль оси шестого порядка (оси z) различными. Для определенности будем считать, что кристалл обладает слоистой структурой, т. е. примем, что

*) Под частотой $\omega = \infty$ в последнем случае понимается частота, удовлетворяющая условию $\omega \gg \omega_l$, но все же остающаяся малой по сравнению с характерными частотами внутриатомного движения электронов.

взаимодействие атомов в плоскости xOy намного больше взаимодействия между атомами в соседних базисных плоскостях. Для описания колебаний такого слоистого кристалла можно исходить из модели, в которой точно учитывается сильное взаимодействие между всеми атомами, лежащими в базисной плоскости, и в приближении ближайших соседей вдоль оси шестого порядка учитывается слабое взаимодействие между соседними атомными слоями.

Если a и b — межатомные расстояния соответственно в плоскости xOy и вдоль оси z , $an^{(1)}$ — набор двумерных векторов, соединяющих какой-либо атом со всеми остальными атомами в той же базисной плоскости, а n_3 — орт

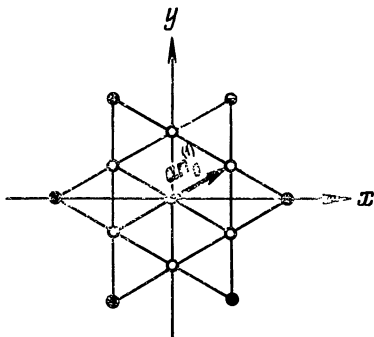


Рис. 20.

оси z , то отличными от нуля элементами силовой матрицы $\alpha^{ik}(n)$ подобного кристалла будут лишь $\alpha^{ik}(n^{(1)})$ и $\alpha^{ik}(n_3)$. Используя очевидную симметрию силовой матрицы в гексагональном кристалле, введем следующие обозначения для элементов $\alpha^{ik}(n_3)$, ответственных за слабое взаимодействие между атомными слоями:

$$\alpha^{ik}(n_3) = \alpha_1 \delta_{ik} \quad (i, k = 1, 2), \quad (55)$$

$$\alpha^{zz}(n_3) = \alpha_2, \quad \alpha^{xz}(n_3) = \alpha^{yz}(n_3) = 0.$$

Для характеристики величины сильного взаимодействия в базисной плоскости введем также обозначение

$$\alpha_3 = \alpha^{zz}(n_0^{(1)}), \quad (56)$$

где $n_0^{(1)}$ — единичный вектор, направленный от атома в сторону любого из шести его ближайших соседей в плоскости xOy (рис. 20). Теперь предположение о слоистой структуре кристалла может быть сформулировано в виде количественного соотношения:

$$|\alpha_1| \sim |\alpha_2| \ll |\alpha_3| \sim \alpha^{zz}(0). \quad (57)$$

Прежде всего, обратим внимание на одну важную особенность колебаний анизотропного кристалла, вектор смещений которых u перпендикулярен слоям сильного взаимодействия (перпендикулярен плоскости xOy). В случае очень слабого взаимодействия между слоями эти колебания должны напоминать волны «изгиба» в невзаимодействующих слоях *), поэтому условно будем называть их «изгибными колебаниями». Так вот, можно показать, что, предполагая одновременно сильную анизотропию межатомных взаимодействий (57) и одинаковый порядок величин постоянных решетки ($a \sim b$), при описании изгибных колебаний в принципе нельзя ограничиться взаимодействием только ближайших соседей в базисной плоскости.

Вспомним, что характер изгибных колебаний в первую очередь определяется элементами $\alpha^{zz}(n^{(1)})$ силовой матрицы, и учтем накладываемые на элементы матрицы $\alpha(n)$ условия (32), полагая в них $i, k = x$ или $i, k = y$ и $l, m = z$:

$$2\alpha_1 b^2 = \sum_{n^{(1)}} \alpha^{zz}(n^{(1)}) n_x^2 a^2 = \sum_{n^{(1)}} \alpha^{zz}(n^{(1)}) n_y^2 a^2. \quad (58)$$

Если оставить в (58) суммирование лишь по векторам $n_0^{(1)}$, то получится равенство

$$2\alpha_1 b^2 = 3\alpha_3 a^2, \quad (59)$$

которое невозможно при одновременном выполнении требований $|\alpha_1| \ll |\alpha_3|$ и $a \sim b$.

Таким образом, подобная модель слоистого кристалла с взаимодействием только между ближайшими соседями действительно внутренне противоречива. Для того чтобы описать кристаллическую решетку с характерной слоистой структурой, обладающей волнами изгиба, необходимо, сохранив соотношения типа (57), учесть более далекие межатомные взаимодействия в базисной плоскости. Физический смысл этого утверждения легко понять, обратившись к предельному случаю невзаимодействующих слоев,

*) На необходимость учета колебаний типа волн изгиба в слоистых кристаллах со слабым взаимодействием между слоями впервые обратил внимание И. М. Лифшиц (1952).

обладающих изгибной жесткостью. В этом случае достаточно рассмотреть один атомный слой, и тогда станет ясным, что взаимодействие смещающихся вдоль оси z атомов (рис. 21) определяется не относительным смещением двух соседних атомов, а разностью парных относительных смещений по крайней мере тройки атомов. На рис. 21 изображены смещения соседних атомов вдоль оси z (атом с номером $n - 1$ имеет смещение, равное нулю) и отмечена величина

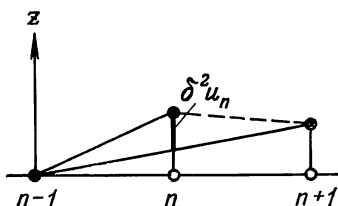


Рис. 21.

$$\delta^2 u_n = \frac{1}{2} [(u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1})] = u_n - \frac{1}{2} (u_{n-1} + u_{n+1}),$$

от которой зависит энергия взаимодействия атомов при изгибных колебаниях плоского слоя.

Возвратимся теперь к условию (58) и заметим, что в своей полной записи оно не противоречит предположению о сильной анизотропии кристалла, поскольку элементы матрицы $\alpha^{zz}(n^{(1)})$, описывающей взаимодействие атомов в нескольких ближайших координатных слоях в плоскости xOy , могут быть одного порядка величины и иметь противоположные знаки. Знаки каждого из них в отдельности подчиняются лишь условию

$$\sum_n \alpha^{zz}(n) \equiv \alpha^{zz}(0) + \sum_{n^{(1)} \neq 0} \alpha^{zz}(n^{(1)}) + 2\alpha^{zz}(n_3) = 0. \quad (60)$$

Имея в виду неравенство (57), из (60) можно вывести заключение, что

$$\sum_{n^{(1)} \neq 0} \alpha^{zz}(n^{(1)}) < 0. \quad (61)$$

Для нахождения закона дисперсии колебаний в предложенной модели нужно вычислить тензорные функции

$$A^{ij}(k) = \sum_n \alpha^{ij}(n) e^{-ikr(n)} \equiv \sum_n \alpha^{ij}(n) (\cos kr(n) - 1). \quad (62)$$

Легко проверить, что в гексагональной решетке

$$\alpha^{xz}(0) = \alpha^{yz}(0) = \alpha^{xz}(\mathbf{n}^{(1)}) = \alpha^{yz}(\mathbf{n}^{(1)}) = 0,$$

из чего (а также из (55)) следует $A^{xz}(\mathbf{k}) = A^{yz}(\mathbf{k}) = 0$, и потому колебания с вектором смещений \mathbf{u} , лежащим в плоскости xOy , оказываются независимыми от колебаний с вектором \mathbf{u} , параллельным оси z .

Колебания вектора \mathbf{u} в плоскости xOy обладают двумя ветвями закона дисперсии, качественно не отличающимися от закона дисперсии слоистого кристалла, проанализированного в § 1. Поскольку не эти колебания представляют основной интерес, то их длинноволновый (при $ak_x \ll 1$, $ak_y \ll 1$ и $bk_z \ll 1$) закон дисперсии мы запишем в наиболее простом виде:

$$\omega_\alpha^2(\mathbf{k}) = s_{1\alpha}^2(k_x^2 + k_y^2) + s_{2\alpha}^2 k_z^2 \quad (\alpha = 1, 2), \quad (63)$$

где

$$s_{1\alpha}^2 \sim |\alpha_1| a^2/m, \quad s_{2\alpha}^2 \sim |\alpha_3| b^2/m \ll s_{1\alpha}^2.$$

Рассмотрим колебания третьего типа, а именно, изгибные колебания. Закон дисперсии таких колебаний находится стандартным путем и имеет вид

$$m\omega^2 = A^{zz}(\mathbf{k}).$$

Полагая в (62) $i, j = z$ и производя элементарные вычисления, получаем

$$m\omega^2 = \sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}) (\cos a\mathbf{k}\mathbf{n}^{(1)} - 1) + 2\alpha_2 (\cos bk_z - 1). \quad (64)$$

По предположению $|\alpha_2| \ll |\alpha_3| \sim |\alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)})|$, поэтому формула (64) дает сильно анизотропный закон дисперсии, в который входят две характерные частоты ω_0 и ω_1 , определяемые соотношениями *):

$$\omega_0^2 = -\frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}), \quad \omega_1^2 = -\frac{4}{m} \alpha_2 \sim \frac{|\alpha_1|}{m},$$

$$\omega_1 \ll \omega_0.$$

*) Ясно, что $\alpha^{zz}(\mathbf{n}_3) < 0$, иначе частота колебаний не оставалась бы вещественной при $k_x = k_y = 0$ и $k_z \rightarrow 0$.

Выведем из (64) закон дисперсии для волн изгиба при малых частотах, когда $\omega \ll \omega_0$. При таких частотах косинусы в первой сумме правой части формулы (64) можно разложить по степеням ak_x и ak_y , ограничившись несколькими первыми членами разложения. Как будет видно из дальнейшего, наличие в законе дисперсии двух характерных частот разного порядка величины требует оставлять в таком разложении члены вплоть до четвертых степеней ak_x и ak_y :

$$m\omega^2 = -\frac{a^2}{2} \sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}) (k\mathbf{n}^{(1)})^2 + \\ + \frac{a^4}{4!} \sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}) (k\mathbf{n}^{(1)})^4 - 4\alpha_2 \sin^2 \frac{bk_z}{2}.$$

Учитывая симметрию тензоров второго и четвертого ранга при наличии оси симметрии шестого порядка *), запишем закон дисперсии длинноволновых колебаний в виде

$$\omega^2 = -\frac{a^2}{2m} \left(\sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}) n_x^2 \right) k_{\perp}^2 + \\ + \frac{a^4}{24m} \left(\sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}) n_x^4 \right) k_{\perp}^4 + \omega_1^2 \sin^2 \frac{bk_z}{2},$$

где $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$ и запись первого слагаемого позволяет непосредственно учесть связь (58).

*) В гексагональном кристалле

$$\sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}) n_i^{(1)} n_k^{(1)} = \delta_{ik} \sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}) n_x^2,$$

$$\sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}) n_i^{(1)} n_k^{(1)} n_l^{(1)} n_m^{(1)} = \\ = \frac{1}{3} (\delta_{ik}\delta_{lm} + \delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}) \sum_{\mathbf{n}^{(1)}} \alpha^{zz}(\mathbf{n}^{(1)}) n_x^2$$

где $i, k, l, m = 1, 2$.

Воспользуемся соотношением (58) и упростим формулу для закона дисперсии, введя новые обозначения:

$$\omega^2 = s_{\perp}^2 k_{\perp}^2 + A^2 a^2 k_{\perp}^4 + \omega_1^2 \sin^2 \frac{bk_z}{2}, \quad (65)$$

$$s_{\perp}^2 = -\frac{\alpha_1}{m} b^2 \sim \omega_1^2 b^2,$$

$$A^2 = \frac{a^2}{24m} \sum_{n(1)} \alpha^{zz} (n^{(1)}) n_x^4 \sim \omega_0^2 a^2, \quad A \gg s_{\perp}.$$

Очень важно, что колебания с подобными низкими частотами ($\omega \ll \omega_0$) могут обладать большими значениями составляющей квазиволнового вектора вдоль оси z . Это означает, что уже в низкочастотной области происходит изменение топологии изочастотных поверхностей. Элементарные соображения приводят нас к заключению, что при $\omega < \omega_1$ поверхности $\omega = \text{const}$ являются замкнутыми, а при $\omega > \omega_1$ — открытыми. В самом деле, при $\omega < \omega_1 \ll \omega_0$ по условию $k_{\perp} \ll \pi/a$, а величина k_z ограничена значениями, при которых $|\sin(bk_z/2)| < \omega/\omega_1$, и изочастотная поверхность не доходит до границ элементарной ячейки в обратном пространстве (в частности, до границы $k_z = \pm \pi/b$), т. е. является замкнутой. В случае $\omega_1 < \omega \ll \omega_0$ величина k_z принимает любые возможные значения, включая $k_z = \pm \pi/b$, следовательно, соответствующая изочастотная поверхность пересекает границу элементарной ячейки в k -пространстве и по определению является открытой.

Функция распределения частот колебаний $\nu(\omega)$, порожденная законом дисперсии (65), имеет в точке $\omega = \omega_1$ особенность. На основании теорем, изложенных в § 2, можно утверждать, что при $|\omega - \omega_1| \ll \omega_1$ поведение функции $\nu(\omega)$ описывается формулами

$$\nu(\omega) - \nu(\omega_1) = \begin{cases} \text{const} \sqrt{\omega_1 - \omega}, & \omega < \omega_1; \\ O(\omega - \omega_1), & \omega > \omega_1, \end{cases} \quad (66)$$

в которых постоянные величины находятся при непосредственном расчете функции $\nu(\omega)$.

Вернемся к закону дисперсии (65). Поскольку отношение

$$\frac{s_{\perp}}{A} \sim \frac{\omega_1}{\omega_0} = \eta \ll 1$$

является малым параметром в рассматриваемой модели, то при $\eta^2 \lesssim (ak_{\perp})^2 \ll 1$ слагаемое с четвертой степенью k_{\perp} в (65) играет такую же роль, как и квадратичное слагаемое. Более того, при достаточно малых η всегда найдется широкий интервал частот, где член с k_{\perp}^4 будет являться определяющим. Для иллюстрации этой возможности проанализируем (65) в разных частотных интервалах при условии $\eta^2 \ll \eta \ll 1$.

1) $\omega \ll \eta\omega_1 = \eta^2\omega_0$. Значения волновых векторов при столь низких частотах ограничены неравенствами $ak_{\perp} \ll \eta$, $bk_z \ll \eta$, означающими, что в формуле (65) можно оставить только квадратичные по k члены:

$$\omega^2 = s_{\perp}^2 k_{\perp}^2 + s_z^2 k_z^2, \quad s_z = \omega_1 b. \quad (67)$$

Соотношение (67) является естественной формой закона дисперсии упругих колебаний в длинноволновом пределе. Функция распределения частот таких колебаний равна

$$\nu(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2 s_{\perp}^2 s_z}, \quad (68)$$

т. е. обладает стандартной зависимостью от ω при $\omega \rightarrow 0$.

2) $\eta^2\omega_0 \ll \omega \ll \eta\omega_0 = \omega_1$. При этих частотах можно ограничиться квадратичным приближением по k_z и в большом интервале значений k_{\perp} , определяемых условием $\eta^2 \ll (ak_{\perp})^2 \ll \eta$, можно опустить первое слагаемое в правой части (65). Тогда мы будем иметь такой закон дисперсии:

$$\omega^2 = A^2 a^2 k_{\perp}^4 + s_z^2 k_z^2. \quad (69)$$

Чтобы найти функцию распределения частот для закона дисперсии (69), продифференцируем (69) при фиксированном k_{\perp} :

$$dk_z = \psi(\omega, k_{\perp}) d\omega = \frac{1}{s_z} \frac{\omega d\omega}{\sqrt{\omega^2 - A^2 a^2 k_{\perp}^4}}. \quad (70)$$

Ясно, что функция $\nu(\omega)$ пропорциональна интегралу от $\psi(\omega, k)$ по всем допустимым значениям k при фиксированной частоте:

$$\nu(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int \psi(\omega, k) k dk = \frac{V\omega}{4\pi s_z A a}. \quad (71)$$

Таким образом, в рассматриваемом интервале частот $\nu(\omega)$ является линейной функцией частоты.

Заметим, что при частотах $\omega \ll \omega_1$ для колебаний, вектор смещения которых лежит в базисной плоскости, справедлив закон дисперсии (63), поэтому их функции распределения частот являются квадратичными функциями частоты, т. е. имеют вид (68).

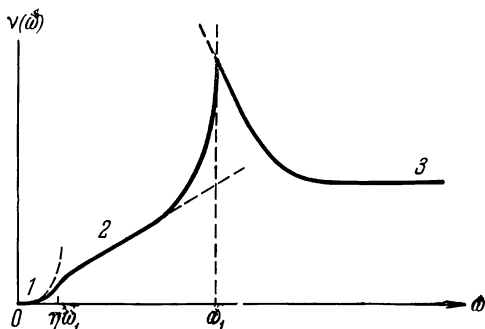


Рис. 22.

3. $\omega_1 \ll \omega \ll \omega_0$. В этой области частот первое и третье слагаемые в (69) могут быть опущены, и мы приходим к формуле

$$\omega = Aak_{\perp}^2, \tag{72}$$

определяющей закон дисперсии волн изгиба, распространяющихся вдоль невзаимодействующих слоев (закон (72) можно получить, положив в (65) $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$).

Частоты (72) вырождены по k_z , причем ясно, что степень их вырождения конечна, так как k_z изменяется в пределах $|k_z| \leq \pi/b$. Функция распределения частот для «двухмерного» закона дисперсии (72) не зависит от частоты:

$$\nu(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\frac{2\pi}{b} \right) 2\pi k_{\perp}(\omega) \frac{dk_{\perp}}{d\omega} = \frac{V}{4\pi Aab}. \tag{73}$$

Закон дисперсии колебаний, при которых вектор смещений лежит в плоскости слоев, в этой же области частот

дается формулой (36) из § 1 и имеет вид

$$\omega = sk_{\perp}, \quad s \sim a\omega_0. \quad (74)$$

Любопытно заметить, что этому закону дисперсии для «двухмерных фононов» соответствует линейная зависимость функции $v(\omega)$ от частоты:

$$v(\omega) = \frac{V\omega}{2\pi bs^2}, \quad (75)$$

однако она справедлива не в той области частот, где верна формула (71).

Общее представление о функции распределения частот изгибных колебаний можно получить при рассмотрении ее схематического графика, изображенного на рис. 22. Участок 1 на графике соответствует квадратичной зависимости $v(\omega)$ от частоты, участок 2 — линейной зависимости, а участок 3 — постоянному значению $v(\omega)$ при $\omega \gg \omega_1$. На графике отмечена «корневая особенность» функции $v(\omega)$ при частоте $\omega = \omega_1$. Для сравнения на рис. 23 приведен схематический график для функции распределения частот колебаний с вектором смещений, лежащим в базисной плоскости. В качестве иллюстрации этим колебаниям сопоставлен закон дисперсии

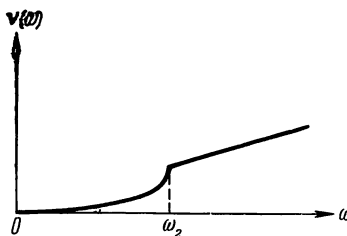


Рис. 23.

$$\omega^2 = s^2 k_{\perp}^2 + \omega_2^2 \sin^2 \frac{bk_z}{2}, \quad (76)$$

где $\omega_2 \sim \omega_1$, $sa \sim \omega_0 \gg \omega_2$. Естественно, что частота $\omega = \omega_2$ является особой точкой для функции $v(\omega)$ таких колебаний.

Различие законов дисперсии (69) и (63), а также (72) и (74) (в соответствующих интервалах частот) и связанная с этим различная зависимость функции $v(\omega)$ от частоты демонстрируют возможность одновременного существования в сильно анизотропных кристаллах длинноволновых колебаний, качественно отличающихся по своим свойствам.

Ясно, что подобная ситуация возникает и в кристалле, обладающем «игольчатой» структурой. «Игольчатой»

обычно называют структуру кристалла, который может быть представлен как состоящий из слабо взаимодействующих параллельных линейных цепочек. Если взаимодействие между атомами вдоль отдельной цепочки значительно превосходит взаимодействие между ними в соседних цепочках, то динамика такого кристалла в некотором смысле подобна динамике слоистого кристалла.

Для одноосного игольчатого кристалла с главной осью (осью z), параллельной упомянутым цепочкам, и с взаимодействием только между ближайшими соседями в базисной плоскости имеются следующие два вида длинноволновых колебаний. Существуют одно обычное звуковое колебание с законом дисперсии типа (63) и два изгибных колебания, законы дисперсии которых при $ak_z \ll 1$ описываются формулами

$$\omega_\alpha^2(\mathbf{k}) = s_3^2 k_z^2 + B^2 a^2 k_z^4 + \omega_3^2 \varphi_\alpha(k_x, k_y) \quad (\alpha = 1, 2), \quad (77)$$

где φ_α — положительные функции порядка единицы, которые при $ak_\perp \ll 1$ пропорциональны $(ak_\perp)^2$. Основные параметры в (77) связаны соотношениями

$$s_3 \sim \omega_3 a, \quad B \sim \omega_0 b, \quad \omega_3 \ll \omega_0.$$

Здесь, как и раньше, ω_0 — это большая частота, характеризующая основное взаимодействие в кристалле, а ω_3 — частота, характеризующая слабое взаимодействие соседних линейных цепочек.

§ 7. ТЕРМОДИНАМИКА И КИНЕТИКА ФОНОННОГО ГАЗА *)

1. Равновесная плотность фононов в кристалле

Произведенное в § 3 квантование колебаний кристалла привело нас к заключению, что энергия кристаллической решетки может быть представлена в виде

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \sum_{\alpha, \mathbf{k}} N_\alpha(\mathbf{k}) \hbar \omega_\alpha(\mathbf{k}), \quad (1)$$

*) Для более полного изучения затронутых в настоящем параграфе проблем можно обратиться к следующим источникам:

1. Дж. З а й м а н, Электроны и фононы, ИЛ, 1962.
2. Р. Н. Г у р ж и, Гидродинамические [эффекты в твердых телах при низких температурах, УФН 94, 689 (1968).
3. И. М. Л и ф ш и ц, О тепловых свойствах цепных и слоистых структур при низких температурах, ЖЭТФ 22, 475 (1952).

где $\mathcal{E}_0 = \text{const}$, $N_\alpha(\mathbf{k})$ — число фононов α -й ветви колебаний с квазиволновым вектором \mathbf{k} .

Если механические колебания атомов (или ионов) исчерпывают все возможные виды внутренних движений в кристалле, то (1) определяет полную энергию возбужденного (находящегося не в основном состоянии) кристалла. Если же в кристалле существуют также иные виды движений (движение электронов, изменение спинового магнитного момента или подобные им), формула (1) определяет только так называемую решеточную часть энергии кристалла. В последнем случае буквальное применение всех нижеследующих результатов возможно лишь при условии очень слабого взаимодействия фононов с элементарными возбуждениями других типов. Имея в виду эту оговорку, будем обсуждать только механическую энергию кристалла.

Известно, что термодинамически определяемая внутренняя энергия кристалла является средним значением величины (1) по всевозможным значениям чисел заполнения $N_\alpha(\mathbf{k})$ при заданной температуре T и фиксированных внешних параметрах.

Обозначим среднее число фононов в соответствующем состоянии через $f_\alpha(\mathbf{k})$ и будем называть $f_\alpha(\mathbf{k})$ *функцией распределения* фононов.

Определим плотность фононов n_α как среднее число фононов в единице объема кристалла. Тогда величина n_α будет выражаться через функцию $f_\alpha(\mathbf{k})$ очевидной формулой

$$n_\alpha = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} f_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int f_\alpha(\mathbf{k}) d^3k. \quad (2)$$

В состоянии термодинамического равновесия функция распределения частиц любого идеального газа является функцией только энергии соответствующей частицы и температуры газа. Поэтому в равновесии

$$f_\alpha(\mathbf{k}) = f_0[\omega_\alpha(\mathbf{k})],$$

где учтено, что энергия фонона равна $\hbar\omega$, и равновесная функция распределения фононов может считаться функцией частоты.

Сохраняя для внутренней энергии кристалла обозначение \mathcal{E} и опуская не дающее вклада в термодинамические величины постоянное слагаемое \mathcal{E}_0 в (1), мы можем теперь записать

$$\mathcal{E} = \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \hbar \omega_{\alpha} f_{\alpha}(\omega_{\alpha}) = \sum_{\alpha} \int \hbar \omega f_{\alpha}(\omega) \nu_{\alpha}(\omega) d\omega \quad (3)$$

и аналогично

$$n_{\alpha} = \frac{1}{V} \int f_{\alpha}(\omega) \nu_{\alpha}(\omega) d\omega. \quad (4)$$

Поскольку фононы являются бозе-частицами, число которых не сохраняется (интенсивность колебаний зависит от степени механического возбуждения кристалла), то равновесная функция распределения для них имеет вид

$$f_{\alpha}(\omega) = \frac{1}{e^{\hbar \omega / kT} - 1}. \quad (5)$$

Важно отметить, что при частотах, энергии которых малы по сравнению с температурой ($\hbar \omega \ll kT$), распределение фононов описывается следующей простой формулой:

$$f_{\alpha}(\omega) = \frac{kT}{\hbar \omega}. \quad (6)$$

Используем явный вид функции (5) и вычислим плотность фононов в предельных случаях низких и высоких температур.

Низкими температурами кристаллической решетки принято называть температуры, подчиняющиеся ограничению $kT \ll \hbar \omega_m$. При таких температурах плотности акустических и оптических фононов сильно отличаются друг от друга и имеют качественно различную температурную зависимость. Для акустических фононов ($\alpha = 1, 2, 3$) при расчетах с формулой (4) можно воспользоваться выражением для $\nu_{\alpha}(\omega)$ в низкочастотной области и, учтя быстрое убывание функции $f_{\alpha}(\omega)$ с ростом ω , продлить интегрирование по частотам до бесконечности:

$$n_{\alpha}(T) = \frac{1}{2\pi^2 s_{\alpha}^3} \int_0^{\infty} f_{\alpha}(\omega) \omega^2 d\omega = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} \left(\frac{kT}{\hbar s_{\alpha}} \right)^3. \quad (7)$$

В целях наглядности перепишем (7) в более простом виде:

$$n_{\alpha}(T) = \text{const} \left(\frac{kT}{\hbar s_{\alpha}} \right)^3 \sim \frac{1}{V_0} \left(\frac{kT}{\hbar \omega_m} \right)^3 \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (8)$$

В последней части соотношения (8) принята очевидная оценка $s_{\alpha} \sim a\omega_m$.

Таким образом, плотность акустических фононов при низких температурах пропорциональна кубу температуры. Важно помнить, что это свойство плотности акустических фононов однозначно связано с видом функций $\nu_{\alpha}(\omega)$ в низкочастотной области.

Для оптических фононов оценка делается иначе, поскольку в формуле

$$n_{\alpha}(T) = \frac{1}{V} \int_{\omega_{\alpha}^{\text{H}}}^{\omega_{\alpha}^{\text{B}}} f_0(\omega) \nu_{\alpha}(\omega) d\omega \quad (\alpha = 4, 5, 6, \dots, 3q) \quad (9)$$

нижняя граница интервала интегрирования $\omega_{\alpha}^{\text{H}}$ (и, естественно, верхняя граница $\omega_{\alpha}^{\text{B}}$) соответствует энергии, много большей величины температуры:

$$\hbar\omega_{\alpha}^{\text{B}} > \hbar\omega > \hbar\omega_{\alpha}^{\text{H}} \sim \hbar\omega_m \gg kT. \quad (10)$$

На основании (10) мы можем упростить формулу (4), опустив единицу в определении функции распределения (5):

$$n_{\alpha}(T) = \frac{1}{V} \int_{\omega_{\alpha}^{\text{H}}}^{\omega_{\alpha}^{\text{B}}} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \nu_{\alpha}(\omega) d\omega. \quad (11)$$

Воспользуемся теперь для оценки интеграла (11) теоремой о среднем и учтем принятую нами нормировку функции $\nu_{\alpha}(\omega)$:

$$n_{\alpha}(T) = \frac{N}{V} e^{-\frac{\hbar\omega_{\alpha}}{kT}} = \frac{1}{V_0} e^{-\frac{\hbar\omega_{\alpha}}{kT}} \quad (\alpha = 4, 5, 6, \dots, 3q),$$

где $\omega_{\alpha}^{\text{H}} < \omega_{\alpha} < \omega_{\alpha}^{\text{B}}$, N — число элементарных ячеек в кристалле.

Мы видим, что плотность оптических фононов, независимо от конкретного вида их закона дисперсии, экспоненциально мала при низких температурах. Следовательно, вклад оптических фононов в полную плотность всех фононов и в большинство физических характеристик кристалла при низких температурах может не учитываться.

Иная ситуация имеет место при высоких температурах, которые определяются условием *) $\hbar \omega_m \ll kT$. При таких температурах можно ограничиться выражением (6) для функции распределения фононов во всех ветвях колебаний. Тогда окажется, что

$$n_\alpha(T) = \frac{kT}{\hbar V} \int \frac{v_\alpha(\omega) d\omega}{\omega} = \frac{1}{V_0} \frac{kT}{\hbar \omega_\alpha^*}, \quad (12)$$

где мы ввели обозначение

$$\frac{1}{\omega_\alpha^*} = \frac{1}{N} \int \frac{v_\alpha(\omega) d\omega}{\omega}.$$

Из (12) следует вывод: при высоких температурах плотность фононов пропорциональна первой степени температуры.

В заключение настоящего раздела нам представляется необходимым разъяснить один принципиальный момент, связанный с истолкованием физического смысла числа фононов. Определим на основании (12) число всех фононов, приходящихся на одну элементарную ячейку:

$$nV_0 = \sum_\alpha n_\alpha V_0 = 3q \frac{kT}{\hbar \omega^*}, \quad \frac{1}{\omega^*} = \frac{1}{3q} \sum_\alpha \frac{1}{\omega_\alpha^*}. \quad (13)$$

Очевидно, $\omega^* \sim \omega_m$, поэтому в меру большого множителя $kT/\hbar \omega^* \sim kT/\hbar \omega_m \gg 1$ число фононов превышает число степеней свободы кристаллической решетки.

Последнее обстоятельство не является ни в какой мере критичным, поскольку число степеней свободы кристалла

*) Если почему-либо частоты оптических фононов намного превышают предельную частоту акустических фононов, приведенное определение высоких температур должно заменяться таким: при высоких температурах энергии фононов всех ветвей значительно меньше kT .

задает число независимых гармонических осцилляторов (с частотами $\omega_\alpha(\mathbf{k})$), совокупность которых в термодинамическом отношении эквивалентна исходному кристаллу. А число фононов $N_\alpha(\mathbf{k})$ определяет лишь уровень возбуждения соответствующего осциллятора. При высоких температурах все осцилляторы находятся в сильно возбужденных состояниях, проявлением чего и является формула (12).

2. Средняя энергия фононов и теплоемкость кристалла

Совершенно ясно, что при известной функции распределения (5) с помощью аппарата статистической термодинамики идеального газа могут быть рассчитаны любые термодинамические характеристики кристалла. В качестве иллюстрации такой возможности мы рассмотрим теплоемкость кристаллической решетки, анализ которой представляет также большой самостоятельный интерес.

Теплоемкость системы при постоянном объеме вычисляется как производная внутренней энергии по температуре:

$$C = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T}, \quad (14)$$

и потому всецело определяется температурной зависимостью \mathcal{E} . Последняя дается формулой (3), из которой следует, что эта зависимость чувствительна к виду функций $\nu_\alpha(\omega)$ и, вообще говоря, весьма сложна. Однако пример рассмотрения плотности фононов показывает, что можно надеяться на значительные упрощения зависимостей в предельных случаях низких и высоких температур.

При низких температурах ($kT \ll \hbar \omega_m$) плотность оптических фононов исчезающе мала и в формуле (3) можно оставить суммирование только по акустическим ветвям и проделать те же упрощения, которые мы сделали при анализе плотности фононов:

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar}{2\pi^2} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{1}{s_\alpha^3} \int_0^\infty f_0(\omega) \omega^3 d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{kT}{\hbar s_\alpha} \right)^3 kT. \quad (15)$$

Введем обозначение

$$\frac{3}{s_0^3} = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{1}{s_{\alpha}^3}$$

и подставим в (15) численное значение определенного интеграла:

$$\mathcal{E} = \frac{\pi^2}{10} V \left(\frac{kT}{\hbar s_0} \right)^3 kT. \quad (16)$$

Дифференцируя (16) по температуре, мы получим на основании (14)

$$C = \text{const} Nk \left(\frac{kT}{\hbar \omega_m} \right)^3, \quad (17)$$

где, как и в формуле (8), принята оценка $s_0 \sim a\omega_m$.

Итак, решеточная теплоемкость кристалла при низких температурах пропорциональна кубу температуры. Еще раз отметим, что эта характерная зависимость (T^3) является следствием специфического вида функций $\nu_{\alpha}(\omega)$ для акустических фононов в низкочастотной области.

Сравнивая (16) с полученным ранее выражением для плотности фононов (7) или (8), мы видим, что средняя энергия одного фонона $\hbar\bar{\omega}$ при низких температурах порядка величины kT :

$$\hbar\bar{\omega} = \mathcal{E}/nV \sim kT, \quad kT \ll \hbar\omega_m.$$

Таким образом, в смысле средней тепловой энергии отдельной частицы фононы при низких температурах аналогичны частицам обычного классического газа, подчиняющегося распределению Максвелла.

Переходя к случаю высоких температур ($kT \gg \hbar\omega_m$), мы используем уже упоминавшееся при выводе формулы (12) приближение, заключающееся в замене функции $f_0(\omega)$ ее предельным выражением (6). Подставим (6) в (3) и получим для внутренней энергии такое простое выражение

$$\mathcal{E} = kT \sum_{\alpha=1}^{3q} \int \nu_{\alpha}(\omega) d\omega = 3qNkT, \quad (18)$$

где qN — число атомов в кристалле. Следовательно, теплоемкость кристалла при высоких температурах подчиняется, как и должно быть, закону Дюлонга и Пти:

$$C = 3qNk.$$

С помощью (18) и (13) нетрудно вычислить среднюю энергию одного фонона при высоких температурах:

$$\begin{aligned} \hbar\bar{\omega} &= \hbar\omega^* \sim \hbar\omega_m, \\ kT &\gg \hbar\omega_m. \end{aligned} \quad (19)$$

Содержащийся в формуле (19) результат имеет простой физический смысл: при очень высокой температуре примерно с одинаковой интенсивностью возбуждаются фононы со всеми частотами колебательного спектра кристалла, и потому средняя энергия одного фонона не зависит от температуры.

На анализ тепловых свойств кристаллической решетки при высоких температурах можно смотреть с иной точки зрения. Поскольку произведение $3qN$ совпадает с числом степеней свободы кристалла, то, сопоставив каждой степени свободы некоторый гармонический осциллятор, мы можем истолковать (18) как вывод о справедливости при высоких температурах классического закона равнораспределения энергии в системе этих осцилляторов. Замена кристалла системой $3qN$ невзаимодействующих эквивалентных гармонических осцилляторов сводится модель кристалла, предложенная Эйнштейном.

В модели Эйнштейна эта система осцилляторов обладает такими свойствами: во-первых, все осцилляторы имеют одну и ту же частоту ω_0 порядка величины характеристической частоты кристалла (10^{13} сек⁻¹) и, во-вторых, средняя энергия осциллятора определяется формулой Планка:

$$\langle \hbar\omega \rangle = \frac{\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0/kT} - 1}. \quad (20)$$

Внутренняя энергия системы осцилляторов Эйнштейна равна

$$\mathcal{E} = 3qN \langle \hbar\omega \rangle = \frac{3qN\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0/kT} - 1}. \quad (21)$$

При $kT \gg \hbar\omega_0$ из (20) вытекает

$$\langle \hbar\omega \rangle = kT$$

и формула (21) переходит в выражение (18). Но в области низких температур из (21) следует температурная зависимость, отличающаяся от (16), и, следовательно, модель Эйнштейна дает неправильную теплоемкость кристалла при $kT \ll \hbar\omega_0$. Поэтому соотношение (21) может служить хорошим приближением для внутренней энергии кристалла лишь при высоких температурах.

Однако известна интерполяционная формула (так называемая формула Дебая), которая дает правильные температурные зависимости как в высокотемпературном, так и в низкотемпературном пределе. Теория Дебая основана на формуле (3) и следующих дополнительных модельных предположениях. Во-первых, функция распределения частот берется в виде

$$\sum_{\alpha} \nu_{\alpha}(\omega) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi^2 s_0^3} V \omega^2, & \omega \leq \omega_D; \\ 0, & \omega > \omega_D. \end{cases} \quad (22)$$

Во-вторых, предельная частота ω_D находится из условия

$$\int_0^{\omega_D} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}(\omega) d\omega = 3qN, \quad (23)$$

учитывающего правильную нормировку функции распределения частот.

Из (22) сразу же вытекает, что дебаевский спектр колебаний дает нужную температурную зависимость (T^3) при низких температурах, а требование (23) обеспечивает «включение» (возбуждение) всех степеней свободы при высоких температурах.

Чтобы получить формулу Дебая, подставим (22) в (3):

$$\mathcal{E} = \frac{3\hbar V}{2\pi^2 s_0^3} \int_0^{\omega_D} f_0(\omega) \omega^3 d\omega = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{(kT)^4}{(\hbar s_0)^3} \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (24)$$

В записи выражения (24) мы ввели новую величину Θ ,

которая называется *дебаевской* или *характеристической температурой* и определяется равенством

$$k\Theta = \hbar\omega_D. \quad (25)$$

В соответствии с этим определением будем называть ω_D дебаевской частотой.

Из (23) и (22) следует связь дебаевской частоты с макроскопическими характеристиками кристалла:

$$\omega_D^3 = 6\pi^2 q \frac{N}{V} s_0^3. \quad (26)$$

Используем (26) для преобразования формулы (24):

$$\mathcal{E} = 3qNkTD \left(\frac{\Theta}{T} \right), \quad (27)$$

где $D(\xi)$ — функция Дебая, определяемая посредством соотношения

$$D(\xi) = \frac{3}{\xi^3} \int_0^{\xi} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (28)$$

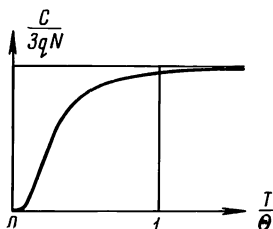


Рис. 24.

Формула (27) является искомой интерполяционной формулой Дебая.

Легко убедиться, что функции Дебая свойственно такое поведение при предельных значениях ее аргумента:

$$\begin{aligned} D(\xi) &\approx 1 && \text{при } \xi \ll 1; \\ D(\xi) &\approx \frac{3}{\xi^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{5\xi^3} && \text{при } \xi \gg 1. \end{aligned} \quad (29)$$

Соотношения (29) позволяют непосредственно проверить, что при низких температурах формула (27) дает закон (16), а при высоких — переходит в (18).

Рассчитанная с помощью выражения (27) теплоемкость кристалла имеет температурную зависимость, график которой приведен на рис. 24, где изображена величина $C/3qN$ как функция T/Θ .

3. Низкотемпературная теплоемкость кристаллов со слоистой структурой

При качественном анализе теплоемкости кристалла, проведенном в предыдущем разделе, мы неявно исходили из предположения, что кристалл обладает единственной характерной частотой ω_D (или единственной характеристической температурой Θ) и все типичные параметры размерности частоты имеют порядок величины ω_D :

$$\omega_m \sim \omega^* \sim \omega_D \sim 10^{13} \text{ сек}^{-1}.$$

Это позволило выделить два предельных случая низких и высоких температур, в которых теплоемкость кристалла обладает универсальной температурной зависимостью. В промежуточной области температур никаких стандартных закономерностей не существует, и они обычно заменяются интерполяционной формулой Дебая.

Однако в сильно анизотропных кристаллах спектр колебаний может содержать больше одной характерной частоты, и тогда в термодинамических формулах будет фигурировать больше чем одна характеристическая температура. Поэтому при изучении термодинамики такого кристалла появляется возможность выделить дополнительные температурные интервалы со специфическими предельными зависимостями.

С целью проиллюстрировать последнее утверждение рассмотрим теплоемкость кристалла со слоистой структурой, низкочастотные колебания которого мы уже исследовали частично в § 1 и более полно в § 6. Спектр колебаний такого кристалла имеет две характерные частоты ω_0 и ω_1 , первая из которых связана с величиной сильного взаимодействия атомов в каждом слое, а вторая — с величиной слабого атомного взаимодействия между соседними слоями. По определению слоистого кристалла $\eta = \omega_1/\omega_0 \ll 1$. Указанным частотам по обычным правилам можно сопоставить две температуры T_0 и T_1 ($kT_0 = \hbar\omega_0$ и $kT_1 = \hbar\omega_1$). Роль температуры Дебая, естественно, исполняет T_0 , поскольку именно она соответствует максимальным частотам колебаний решетки.

Предположим, что температура кристалла низка, т. е. $T \ll T_0$. Напомним, что при низких температурах средняя энергия фонона порядка величины kT и основной

вклад в термодинамику кристалла дают фононы с частотами $\omega \sim kT/\hbar$. Поэтому при $T \ll T_0$ в термодинамических величинах достаточно учесть вклад фононов с частотами $\omega \ll \omega_0$. Однако в слоистом кристалле область частот $\omega \ll \omega_0$ разбивается на несколько интервалов, в которых функция распределения частот имеет различный вид. В связи с этим и область низких температур $T \ll T_0$ будет состоять из нескольких интервалов с различной температурной зависимостью теплоемкости кристалла. Рассмотрим эти интервалы каждый в отдельности.

1) $T \ll \eta T_1 \ll T_1$. В столь низкотемпературной области все тепловые колебания кристалла имеют обычный фононный спектр, для которого

$$\nu(\omega) = \text{const} \frac{V}{s^3} \omega^2, \quad (30)$$

где s — некоторым образом усредненная скорость звука в кристалле. Величина s будет наименьшей для изгибных колебаний, поскольку для них $s^3 \sim s_{\perp}^2 s_z \sim \omega_1^3 a^2 b$, в то время как для колебаний с вектором смещений, лежащим в плоскости слоя (будем называть их «колебаниями в плоскости слоя»), $s^3 \sim s_0^2 s_z \sim \omega_0^2 \omega_1 a^2 b \gg \omega_1^3 a^2 b$. Следовательно, волны изгиба внесут основной вклад в теплоемкость кристалла. Температурная зависимость теплоемкости кристалла со спектром частот (30) нами уже изучалась, и мы сразу можем записать

$$C = \text{const} Nk \left(\frac{kT}{\hbar \omega_1} \right)^3, \quad T \ll \eta T_1. \quad (31)$$

Таким образом, наличие сильной анизотропии кристалла не изменяет обычной температурной зависимости его решеточной теплоемкости (T^3) в области предельно низких температур.

2) $\eta T_1 \ll T \ll T_1$. При таких температурах вклад колебаний с частотами $\omega \lesssim \eta \omega_1$ в термодинамические величины кристалла пренебрежимо мал и достаточно учесть колебания с частотами $\eta \omega_1 \ll \omega \ll \omega_1$. Изгибные колебания с такими частотами имеют функцию $\nu(\omega)$, линейно растущую с частотой (см. (71) из § 6), а для колебаний в плоскости слоя по-прежнему верна формула (30). Каждый тип колебаний связан с некоторым слагаемым

в теплоемкости, характеризующимся специфической температурной зависимостью. Однако легко убедиться, что плотность колебаний в плоскости слоя исчезающе мала по сравнению с плотностью изгибных колебаний. Действительно, возьмем отношение соответствующих функций $\nu(\omega)$ при одной и той же частоте:

$$\frac{(\omega^2/s_0^2 s_z)}{(\omega/s_z Aa)} = \frac{Aa\omega}{s_0^2} \sim \left(\frac{A}{s_0}\right) \frac{\omega}{\omega_0} \sim \frac{\omega}{\omega_0} \ll \frac{\omega_1}{\omega_0} \ll 1.$$

Таким образом, мы снова имеем право ограничиться учетом вклада только волн изгиба в теплоемкость кристалла. Не повторяя выкладок, связанных с вычислением теплоемкости, воспользуемся очевидной оценкой для нее. Если функция $\nu(\omega)$ не имеет особенностей в соответствующем интервале частот, то при низких температурах, когда справедлив закон равномерного распределения тепловой энергии между фонами, имеет место следующая оценка величины и температурной зависимости теплоемкости:

$$C \sim k \int f_0(\omega) \nu(\omega) d\omega \sim f_0(\bar{\omega}) \nu(\bar{\omega}) \bar{\omega} k \sim \nu(\bar{\omega}) \bar{\omega} k. \quad (32)$$

В последнем звене оценок (32) использовано соотношение $f_0(\bar{\omega}) \sim 1$.

Подставляя в (32) выражение для $\nu(\omega)$ по формуле (71) из § 6 и помня, что $\hbar\bar{\omega} \sim kT$, получаем

$$C = \text{const} \frac{Nk}{\omega_0\omega_1} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2, \quad \eta T_1 \ll T \ll T_1. \quad (33)$$

Квадратичная температурная зависимость для решеточной теплоемкости в области низких температур не свойственна обычным кристаллам и является проявлением сильной анизотропии сил межатомного взаимодействия.

3) $T_1 \ll T \ll T_0$. Изложенные выше аргументы приводят к заключению, что в этой температурной области следует учитывать лишь колебания с частотами $\omega_1 \ll \omega \ll \ll \omega_0$, при которых отношение функций $\nu(\omega)$ для колебаний в плоскости слоя к таковой для волн изгиба имеет порядок величины (см. (75) и (73) из § 6)

$$\frac{(\omega/bs_0^2)}{(1/Aab)} \sim \frac{Aa\omega}{s_0^2} \sim \frac{\omega}{\omega_0} \ll 1.$$

Следовательно, колебания в плоскости слоя по-прежнему играют незначительную роль, и при расчете термодинамических величин кристалла их можно не учитывать. В таком случае при оценке решеточной теплоемкости по формуле (32) достаточно использовать выражение (73) из § 6 для функции распределения частот изгибных колебаний:

$$C = \text{const } Nk \frac{kT}{\hbar\omega_0}, \quad T_1 \ll T \ll T_0. \quad (34)$$

Таким образом, в температурной зависимости теплоемкости слоистого кристалла закон T^3 при предельно низких температурах ($T \ll \eta T_1$) сменяется законом T^2 в интервале $\eta T_1 \ll T \ll T_1$, а последний заменяется линейной зависимостью при «средних» температурах $T_1 \ll T \ll T_0$.

Сильная анизотропия кристалла иного типа (например, наличие так называемой «игольчатой» структуры), связанная с появлением некоторых других характерных частот в спектре колебаний кристалла, по-видимому, всегда приводит к выделению нескольких интервалов температур со специфическими температурными зависимостями.

4. Уравнение движения фонона и кинетическое уравнение

Фононы обладают бозевской функцией распределения (5) только в термодинамически равновесном кристалле. Если же кристалл находится в неравновесном состоянии (например, температура кристалла различна в разных его точках), то функция распределения фононов не может быть представлена в стандартном виде и должна находиться как решение так называемого кинетического уравнения. Ниже мы укажем основную идею вывода и приведем запись этого уравнения. Но прежде следует обсудить принципиальную возможность описания пространственно неоднородных состояний кристалла в терминах фононов.

Допустим, что макроскопические характеристики кристалла существенно изменяются на расстояниях порядка δL . Возникает вопрос, каким образом, сохранив обычное представление о фононах, можно учесть эту неоднородность. Фононы были введены при квантовании колебаний однородного кристалла, и последнее отразилось

в том, что состояние отдельного фонона характеризуется квазиволновым вектором k . Легко понять, что если величина δL велика по сравнению со средней длиной волны фонона:

$$\delta L \gg \bar{\lambda}, \quad (35)$$

то представление о газе фононов можно сохранить и в неоднородном кристалле. Действительно, для описания возбуждений кристалла с подобными неоднородностями вместо отдельных нормальных координат следует брать волновые пакеты, принадлежащие интервалу волновых векторов δk , где

$$\delta L \gtrsim \frac{1}{\delta k} \gg \bar{\lambda}. \quad (36)$$

Анализируя (36) и учитывая связь длины волны λ с величиной волнового вектора, мы приходим к неравенству $\delta k \ll k$, означающему, что рассматриваемые волновые пакеты состоят из нормальных координат, разброс волновых векторов которых значительно меньше величин самих волновых векторов.

Из последнего утверждения вытекает несколько важных для дальнейшего выводов.

1) Описанному волновому пакету с достаточной точностью можно сопоставить колебание с квазиволновым вектором k , эквивалентное отдельному фонону в состоянии с заданным k .

2) Скорость понимаемого в новом смысле «фонона» определяется групповой скоростью пакета

$$v = \frac{\partial \omega}{\partial k}. \quad (37)$$

3) Если производить измерение пространственных положений с точностью δx , где $\bar{\lambda} \ll \delta x \ll \delta L$, то можно говорить о фононе*), обладающем квазиволновым вектором k и находящемся в точке r . При этом может оказаться, что неоднородность состояния кристалла проявляется, помимо прочего, в неоднородности «коэффициента преломления» для фонона, т. е. в зависимости частоты фонона от

*) Очевидное условие $\delta k \delta x \sim 1$ допускается неравенством (36).

координаты r_α : $\omega_\alpha = \omega_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{r})$. Тогда вектор \mathbf{k} соответствующего пакета будет изменяться со временем:

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\nabla\omega(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \equiv -\frac{\partial\omega}{\partial\mathbf{r}}. \quad (38)$$

4) Число таких фононов должно быть, вообще говоря, различным в разных точках кристалла.

Из последних двух выводов вытекает, что функция распределения фононов может рассматриваться как функция не только \mathbf{k} , но и пространственных координат. Тогда произведение

$$f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{k}) d^3k dV$$

будет определять число фононов α -й ветви, обладающих волновыми векторами в области d^3k вблизи \mathbf{k} и находящихся в объеме dV вблизи точки \mathbf{r} .

Кроме того, в процессе изменения макроскопического состояния кристалла эта функция будет меняться со временем: $f_\alpha = f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$. Изменение функции f_α со временем может быть найдено на основе следующих «гидродинамических» соображений. Рассмотрим фононы, движущиеся вдоль некоторой «траектории»

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t), \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}(t) \quad (39)$$

в фазовом пространстве (\mathbf{r}, \mathbf{k}) . Траектория (39) находится путем решения уравнений движения, которые непосредственно следуют из (37) и (38):

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial\omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial\mathbf{k}}, \quad \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{\partial\omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}. \quad (40)$$

Уравнения движения фонона (40) иногда представляют самостоятельный интерес, поэтому обратим внимание на то, что они могут быть выведены не только на основе волновых свойств фонона, использованных при конструировании волновых пакетов. С точки зрения корпускулярных представлений фонон является квазичастицей с энергией $\hbar\omega$ и квазиимпульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, поэтому функция $\omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ может рассматриваться как гамильтониан фонона, и тогда (40) есть не что иное, как гамильтонова запись уравнений движения этой квазичастицы.

Возвратимся теперь к фононам, перемещающимся по траектории (39). Их число может измениться только за счет причин, не учтенных в уравнениях движения (40), т. е. за счет столкновений, при которых фонон скачкообразно переходит из состояния с одним квазиволновым вектором \mathbf{k} в состояние с другим \mathbf{k} . Процессы столкновений вызваны в первую очередь взаимодействием фононов друг с другом, описанным ранее при учете ангармонизма колебаний решетки. Однако возможны процессы рассеяния фононов и другой природы. Например, взаимодействие фонона с внешней поверхностью кристалла тоже может рассматриваться как процесс столкновения, при котором происходит «отражение» фонона от поверхности.

Не уточняя конкретный механизм взаимодействия, обозначим через $[df/dt]_{\text{ст}}$ изменение функции распределения в единицу времени за счет столкновений. Тогда, помня, что изменение функции распределения связано не только с ее явной зависимостью от времени, но и с «дрейфом» частицы вдоль траектории в фазовом пространстве, мы можем написать равенство

$$\frac{df}{dt} \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \dot{\mathbf{k}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} = \left[\frac{df}{dt} \right]_{\text{ст}}. \quad (41)$$

Воспользуемся уравнениями движения (40) и перепишем (41) в стандартном виде:

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v} - \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \mathbf{k}} \nabla_{\omega} = \left[\frac{df_{\alpha}}{dt} \right]_{\text{ст}}. \quad (42)$$

При известном механизме столкновений правая часть (42) является вполне определенным функционалом от функции распределения фононов f . Обычно этот функционал сводится к некоторому интегралу, поэтому его принято называть *интегралом столкновений*. А уравнение (42) при известном интеграле столкновений называется *кинетическим уравнением* или *уравнением Больцмана*.

Основной характеристикой интеграла столкновений является средняя частота столкновений, которую мы будем обозначать как $1/\tau$, понимая под τ время свободного пробега между столкновениями. Очень часто интенсивность столкновений между частицами или квазичастицами удобно характеризовать не временем τ , а длиной свободного

пробега l . Однако для фононов эти величины содержат одинаковую информацию, поскольку средняя скорость фононов в кристалле всегда порядка скорости звука s и потому $l \sim st$.

Различные механизмы взаимодействия приводят к разным частотам столкновений, а так как все они могут действовать одновременно, то интеграл столкновений обычно имеет вид

$$\left[\frac{df}{dt} \right]_{\text{ст}} = \sum_j \frac{1}{\tau_j} I_j(f), \quad (43)$$

где $1/\tau_j$ — частоты столкновений, обусловленные соответствующими процессами, а $I_j(f)$ — функционалы, размерность и порядок величины которых такие же, как у функции f .

5. Частоты столкновений фононов при низких температурах

Мы не ставим своей целью количественное изучение кинетических явлений в кристалле, поэтому постараемся избежать полной записи различных типов интегралов столкновений. Однако даже для качественного анализа ряда неравновесных процессов требуется некоторая детализация выражения (43).

Рассмотрим в качестве примера подобной конкретизации записи (43) те столкновения фононов, которые играют главную роль в очень чистых диэлектрических кристаллах. В идеальной кристаллической решетке единственной причиной взаимодействия фононов является ангармонизм колебаний, приводящий к столкновениям двух типов: к нормальным столкновениям с характерным временем τ_N и процессам переброса с характерным временем τ_U . В кристаллических образцах конечных размеров появляется дополнительный механизм рассеяния — столкновения с поверхностью кристалла. Если τ_S — время свободного пробега между столкновениями с поверхностью, то ясно, что $\tau_S \sim d/s$, где d — поперечные размеры образца, а s — скорость звука.

В отсутствие макроскопических искажений кристаллической решетки всегда можно положить $\nabla\omega = 0$, и тогда

кинетическое уравнение (42) примет вид (для упрощения формул мы опускаем индекс α)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v} = \frac{1}{\tau_N} I_N(f) + \frac{1}{\tau_U} I_U(f) + \frac{1}{\tau_S} I_S(f). \quad (44)$$

Средние времена столкновений τ_N и τ_U имеют весьма сложную температурную зависимость, которая только при низких температурах является в определенном смысле универсальной. Поэтому, для того чтобы получить некоторые хотя бы качественные, но стандартные оценки времен τ_N и τ_U , мы ограничимся низкотемпературной областью, т. е. положим $T \ll \Theta$. Все рассмотрение будет вестись в предположении, что кристалл находится в слабо неравновесном состоянии и функция f мало отличается от бозевской функции (5).

Начнем с более трудного для анализа процесса нормальных столкновений. Порядок величины $1/\tau_N$ совпадает с полной вероятностью в единицу времени того, что фонон участвует хотя бы в каком-то нормальном процессе рассеяния. Известно, что если система под воздействием возмущения H' совершает переход из состояния α с энергией E_α в состояние β с энергией E_β , то вероятность в единицу времени совершить такой переход равна

$$w_{\alpha\beta} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{\alpha\beta}|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta), \quad (45)$$

где $H'_{\alpha\beta}$ — соответствующий матричный элемент гамильтониана возмущения.

Нас интересуют процессы, при которых фонон переходит из состояния k в любое другое состояние k' путем нормального столкновения. Это — процессы исчезновения фонона в состоянии k и появления фонона в состоянии k' , сопровождающиеся либо «гибелью», либо «рождением» третьего фонона (мы будем учитывать, естественно, только «трехфононные» процессы, изученные в § 3). Оба указанных процесса имеют вероятность одного порядка величины, поэтому достаточно рассмотреть один из них, например процесс с «гибелью» третьего фонона в некотором состоянии k'' . Тогда соответствующее изменение энергии в формуле (45) будет равно

$$E_\alpha - E_\beta = \hbar\omega(k) - \hbar\omega(k') + \hbar\omega(k''),$$

а матричный элемент $H'_{\alpha\beta}$ должен быть построен с помощью второго слагаемого в гамильтониане (44) из § 3. Если учесть явный вид матричных элементов операторов a_k и a_k^\dagger для переходов с изменением числа фононов, то нетрудно вычислить интересующую нас вероятность перехода $k \rightarrow k'$:

$$w_{kk'} = \frac{2\pi}{\hbar^2 N} \frac{|W(k, k', k'')|^2}{\omega\omega'\omega''} N_k (N_{k'} + 1) N_{k''} \delta(\omega - \omega' + \omega''), \quad (46)$$

где $k'' = k' - k$, $\omega = \omega(k)$, $\omega' = \omega(k')$, $\omega'' = \omega(k'') = \omega(k' - k)$.

Для использования (46) в макроскопических оценках мы должны заменить числа заполнения N_k их средними значениями, т. е. функциями распределения фононов $f(k)$, а последние (в случае слабо неравновесных состояний) — функциями Бозе (5). Тогда полная вероятность того, что фонон в единицу времени изменит свое состояние, очевидно, будет равна

$$w(k) = \sum_{k'} w_{kk'} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int w_{kk'} d^3k' = \frac{V_0}{(2\pi\hbar)^2} \frac{f_0(\omega)}{\omega} \times \\ \times \int \frac{|W(k, k', k'')|^2}{\omega'\omega''} [f_0(\omega') + 1] f_0(\omega'') \delta(\omega - \omega' + \omega'') d^3k'. \quad (47)$$

При низких температурах основную роль играют фононы с энергиями $\hbar\omega \sim kT \ll k\Theta$, соответствующими длинным волнам ($ak \ll 1$), для которых $\omega \approx sk$. Но, как пояснялось в § 3, функция трех независимых переменных $W(k, k', k'')$ становится равной нулю, если обращается в нуль хотя бы один из ее аргументов. Поэтому при малых величинах квазиволновых векторов эту функцию можно представить в виде разложения:

$$W(k, k', k'') = A\omega\omega'\omega'', \quad (48)$$

где A — функция направлений векторов k , k' и k'' . Подставим (48) в (47):

$$w(k) = \frac{V_0}{(2\pi\hbar)^2} \omega f_0(\omega) \times \\ \times \int |A|^2 \omega'\omega'' [f_0(\omega') + 1] f_0(\omega'') \delta(\omega - \omega' + \omega'') d^3k'. \quad (49)$$

Наличие δ -функции в подынтегральном выражении (49) позволяет сразу выполнить одно интегрирование:

$$w(\mathbf{k}) \sim \frac{V_0}{(2\pi\hbar)^2} \frac{\omega}{s} f_0(\omega) \times \\ \times \int |A|^2 \omega' (\omega' - \omega) [f_0(\omega') - 1] f_0(\omega' - \omega) d^2k', \quad (50)$$

при осуществлении которого учтена производная от сложного аргумента δ -функции: $\partial\omega/\partial k \sim s$.

Наконец, для оценки средней вероятности изменения состояния фонона в единицу времени $\bar{w} = 1/\tau_N$ можно заменить частоту ω на ее среднее значение ($\hbar\bar{\omega} \sim kT$), для которого $f_0(\bar{\omega}) \sim 1$. Но тогда температурная зависимость интеграла в (50) «извлекается» методом, использованным при расчете низкотемпературной теплоемкости решетки. Введем путем замены типа $k' = (kT/\hbar s) x$ новую переменную интегрирования x с практически неограниченными пределами изменения и вспомним, что $|A|^2$ зависит лишь от углов между соответствующими квазиволновыми векторами. После такой замены температура вынесется из-под знака интеграла за счет второй степени частоты в подынтегральном выражении (T^2) и за счет двухмерного дифференциала (T^2), а оставшийся определенный интеграл будет иметь порядок величины $|A|^2$. Следовательно,

$$\frac{1}{\tau_N} \sim \frac{V_0}{\hbar^2} \left(\frac{kT}{\hbar s}\right)^3 \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 |A|^2. \quad (51)$$

После элементарных преобразований, при которых учитывается, что $\hbar s/a \sim k\Theta$, получаем окончательную оценку:

$$\frac{1}{\tau_N} \sim \left(\frac{s|A|}{\hbar a}\right)^2 \left(\frac{T}{\Theta}\right)^5. \quad (52)$$

Таким образом, частота нормальных столкновений фононов при низких температурах пропорциональна пятой степени температуры.

Значительно проще определить основную температурную зависимость τ_U .

Вспомним, что для процесса переброса характерен закон сохранения:

$$k + k' + k'' = 2\pi B_0, \quad (53)$$

где B_0 — это вектор обратной решетки, построенный на основных обратных векторах трансляции b_1, b_2, b_3 . Поскольку каждый из квазиволновых векторов ограничен выбором начала отсчета в k -пространстве ($|k| \leq \pi B_0$), то закон (53) может выполняться только при условии, что хотя бы для двух фононов $k \sim \pi B_0$. Но при низких температурах, когда

$$\bar{k} \sim \frac{\bar{\omega}}{s} \sim \frac{kT}{\hbar s} \sim \frac{1}{a} \left(\frac{T}{\Theta} \right) \sim B_0 \left(\frac{T}{\Theta} \right) \ll B_0,$$

это невозможно для фононов со средними энергиями.

Таким образом, по крайней мере два из участвующих в U -процессе фононов обладают энергиями, намного превышающими среднюю тепловую энергию фононов:

$$\hbar\omega \sim \hbar s \pi B_0 \sim \hbar\omega_D \gg kT.$$

Функция распределения для таких фононов дает исчезающе малое среднее заполнение:

$$f_0(\omega) \approx e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \sim e^{-\frac{\Theta}{T}} \ll 1,$$

что делает очень маловероятными их столкновения.

Вероятность столкновения двух подобных фононов с $\omega \sim \omega_D$ и $\omega' \sim \omega_D$ пропорциональна произведению

$$f_0(\omega) f_0(\omega') \sim e^{-\frac{\hbar\omega + \hbar\omega'}{kT}},$$

поэтому частота трехфононных процессов переброса при низких температурах экспоненциально мала:

$$\frac{1}{\tau_U} \sim e^{-\gamma \frac{\Theta}{T}}, \quad (54)$$

где γ — множитель порядка единицы.

6. Теплопроводность кристаллической решетки при низких температурах

В идеальном диэлектрике основной причиной переноса тепла является нарушение равновесия кристаллической решетки, вызванное градиентом температуры. Как результат соответствующей неравновесности фононного газа возникает направленное движение фононов, связанное с тепловым потоком. Для грубой оценки коэффициента теплопроводности фононного газа κ можно воспользоваться известной из кинетической теории формулой

$$\kappa = Cv_T l, \quad (55)$$

где C — теплоемкость газа, v_T — средняя величина тепловой скорости частиц (в нашем случае — фононов), а l — их эффективная длина свободного пробега. Средняя скорость фононов при низких температурах порядка величины скорости звука s , поэтому формула (55) для теплопроводности решетки при низких температурах сводится к соотношению

$$\kappa = sCl. \quad (56)$$

Следовательно, температурная зависимость κ определяется произведением теплоемкости кристалла C и эффективной длины свободного пробега l . Под эффективной длиной свободного пробега понимается средняя длина между столкновениями фононов, влияющими на перенос тепла. Дело в том, что не все процессы взаимодействия, вызывающие рассеяние фононов, дают вклад в теплоспротивление кристалла. Действительно, предположим, что в кинетическом уравнении (44) $\tau_N \ll \tau_S, \tau_U$. Тогда, казалось бы, в интеграле столкновений можно пренебречь процессами переброса и рассеянием фононов на внешней поверхности кристалла:

$$\frac{df}{dt} = \frac{1}{\tau_N} I_N(f). \quad (57)$$

Пусть в кристалле с распределением фононов, подчиняющимся кинетическому уравнению (57), возбуждено

состояние с отличным от нуля полным квазиимпульсом

$$P = \sum_k \hbar k f(k). \quad (58)$$

Такое состояние связано с некоторым направленным движением фононов и соответствует определенному потоку тепла через кристалл. Легко сообразить, что нормальные столкновения фононов (N -процессы) не изменяют величины (58), а приводят лишь к перераспределению квазиимпульса и энергии между фононами. Поэтому в том случае, когда в кинетическом уравнении пренебрегают U -процессами и рассеянием фононов на поверхностях кристаллического образца, вектор P является интегралом движения даже при учете ангармонизма колебаний решетки:

$$\frac{dP}{dt} = \sum_k \hbar k \frac{df}{dt} = \frac{\hbar}{\tau_N} \sum_k k I_N(f) = 0. \quad (59)$$

Таким образом, нормальные столкновения не могут изменить состояния кристалла с заданным вектором P и с некоторым потоком тепла. Иными словами, N -процессы не дают вклада в тепловое сопротивление неограниченного однородного кристалла.

Сформулированное в такой форме утверждение означает, что даже в случае $\tau_N \ll \tau_S, \tau_U$ при объяснении явлений теплопроводности мы не можем ограничиться упрощенным кинетическим уравнением (57), поскольку как раз те слагаемые в интеграле столкновений, которые были выброшены при «упрощении» кинетического уравнения, определяют эффективную длину свободного пробега l . Для качественной оценки и анализа роли опущенных слагаемых в кинетическом уравнении введем длины пробега

$$l_N \sim \tau_N, \quad l_U \sim \tau_U, \quad (60)$$

температурные зависимости которых при низких температурах определяются законами (52) и (54).

Приняв во внимание последние замечания, перейдем к анализу температурной зависимости κ при $T \ll \Theta$. Из (52), (54) и (60) следует, что всегда существует область

очень низких температур, в которой

$$d \ll l_N \ll l_U, \quad (61)$$

где, как и раньше, d — это поперечный размер образца.

Ясно, что неравенства (61) соответствуют наличию кнудсеновской ситуации в фоновом газе, когда фононы, двигаясь от границы к границе кристалла, практически не сталкиваются в объеме. При такой ситуации можно положить $l \sim d$, и температурная зависимость коэффициента теплопроводности всецело определяется таковой для теплоемкости кристалла:

$$\kappa \sim sC(T)d = \text{const} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 d. \quad (62)$$

С повышением температуры длины пробега l_N и l_U убывают, поэтому в достаточно массивном образце неравенства (61) могут замениться на такие:

$$l_N \ll d \ll l_U. \quad (63)$$

Условия (63) позволяют по-прежнему пренебречь процессами переброса, но, к сожалению, не дают возможности заменить l на l_N , поскольку нормальные столкновения непосредственно не влияют на теплопроводность кристалла. Теплосопrotивление в такой ситуации опять должно определяться взаимодействием фононов с поверхностью образца *). Однако фонон, прежде чем дойдет до границы кристалла, испытает множество нормальных столкновений ($l_N \ll d$). Движение фонона будет напоминать броуновские случайные блуждания частицы, и хотя эффективная длина пробега будет определяться рассеянием на границах, проходимый фононом путь между столкновениями с границей существенно увеличится по сравнению с d . Из теории броуновского движения известно, что если l_N — средний «шаг» случайных блужданий, то

*) Заметим, что подобная ситуация может реализоваться лишь в рекордно чистых монокристаллах, поскольку для ее возникновения наряду с (63) одновременно требуется выполнение трудно достижимого при низких температурах условия $l_N \ll d \ll l_{\text{пр}}$, где $l_{\text{пр}}$ — длина свободного пробега, связанная с рассеянием фононов на примесях в кристалле.

частица, ушедшая на расстояние d , совершит число «шагов», равное $(d/l_N)^2$. Поэтому длина ее траектории (в нашем случае — эффективная длина свободного пробега) имеет порядок величины

$$l \sim l_N (d/l_N)^2 = d^2/l_N. \quad (64)$$

Итак, хотя N -процессы не могут непосредственно влиять на теплосоппротивление кристалла, их наличие существенно изменяет эффективную длину свободного пробега в интервале температур, где справедливы неравенства (63). Подставим (64) в (56) и учтем температурную зависимость частоты нормальных столкновений (52):

$$\kappa \sim sC \frac{d^2}{l_N} = \text{const} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^8 d^2. \quad (65)$$

Наряду с иной, чем в (62), температурной зависимостью коэффициент теплопроводности (65) имеет другой закон изменения с толщиной образца.

Рассмотренный механизм фононной теплопроводности в условиях, определяемых неравенствами (63), по существу, ничем не отличается от течения вязкой жидкости, роль градиента давления в которой играет градиент температуры фононного газа, а кинетическая вязкость которой ν равна $\nu = \nu_T l_N \sim s l_N$, где ν_T — средняя тепловая скорость фононов. Следовательно, наличие малой длины свободного пробега фононов между нормальными столкновениями ($l_N \ll d$) в достаточно массивных образцах кристалла при низких температурах приводит к появлению вязкости фононного газа.

Так как величина l_U убывает с ростом температуры по экспоненциальному закону (54), то с повышением температуры неизбежно возникнут условия, когда $l_U \ll d^2/l_N$. При таких температурах в идеальной кристаллической решетке эффективная длина свободного пробега l будет определяться величиной l_U и формула (56) примет вид

$$\kappa = sC l_U \propto e^{\gamma \frac{\Theta}{T}}. \quad (66)$$

В законе (66) не фигурируют размеры образца, поскольку теплопроводность при соответствующих температу-

рах всецело определяется U -процессами в объеме кристалла.

Примерный ход температурной зависимости коэффициента теплопроводности диэлектрика в достаточно широком интервале температур изображен сплошной кривой на рис. 25. В области самых низких температур (участок 1), пока $d \ll l_N$, имеет место кнудсеновский случай, когда $\kappa \propto dT^3$. Затем, начиная с температуры T_1 ,

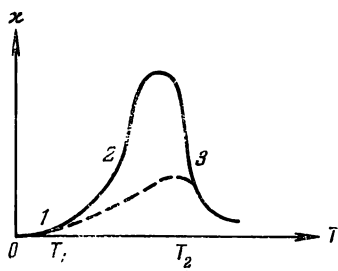


Рис. 25.

при которой $l_N \sim d$, и вплоть до температуры T_2 , при которой $l_N l_U \sim d^2$, преобладают «броуновские блуждания» фононов, и в интервале $T_1 \ll T \ll T_2$ (участок 2) имеем $\kappa \propto d^2 T^3$. Далее, с ростом температуры начинается экспоненциальный спад теплопроводности, лимитируемой процессами переброса. При $T \gg T_2$ (участок 3) зависимость $\kappa = \kappa(T)$ дается формулой (66).

Следует, однако, иметь в виду, что в образцах очень малых поперечных размеров интервал температур $T_1 < T < T_2$ может отсутствовать. Дело в том, что в соответствии с формулой (54) длина свободного пробега между процессами переброса l_U очень резко убывает с повышением температуры. Поэтому вполне возможно, что в кристаллах очень малых размеров величина l_U раньше сравняется с l_N , чем l_N станет меньше d : $l_U \sim l_N > d$. В таких образцах после участка 1 сразу будет следовать область с экспоненциальным спадом коэффициента теплопроводности (66) и график зависимости $\kappa = \kappa(T)$ будет иметь вид пунктирной кривой на рис. 25.

7. Второй звук в кристаллах

Фононный газ во многих отношениях подобен газу обычных частиц. Это сходство с обычным газом особенно велико при низких температурах, когда частота процессов переброса (54) исчезающе мала по сравнению с частотой нормальных столкновений фононов (52), и потому

можно считать, что столкновения фононов подчиняются известным законам сохранения энергии и импульса. Но мы знаем, что в обычном газе легко возбуждаются и распространяются звуковые колебания, представляющие собой колебания плотности частиц газа. Поэтому появляется естественный вопрос, не могут ли в фононном газе возникнуть и распространяться коллективные возбуждения типа колебаний плотности фононов. Как мы сейчас увидим, на такой вопрос существует положительный ответ. Поскольку сами фононы появляются в результате квантования упругих (звуковых) колебаний кристалла, то волны плотности фононов называют *вторым звуком*.

Представление о втором звуке, т. е. о звуковых колебаниях в газе квазичастиц, имеет смысл лишь при условии, что за время, меньшее периода колебаний, и на расстояниях, меньших длины волны второго звука, в кристалле успевает устанавливаться некоторое распределение фононов с локальной равновесной функцией распределения, характеризующейся локальными температурой и скоростью упорядоченного движения фононов, зависящими от координат и времени. Для выполнения указанного условия период колебаний и длина волны второго звука должны быть велики по сравнению со временем и длиной свободного пробега фононов соответственно.

Рассмотрим идеальный неограниченный кристалл ($\tau_S = \infty$) при низких температурах, когда роль процессов переброса очень мала ($\tau_N \ll \tau_U$) и когда в законе дисперсии для фононов со средними энергиями ($\hbar\omega \sim \sim kT \ll k\Theta$) можно ограничиться длинноволновым приближением. Для упрощения выкладок будем учитывать только одну ветвь колебаний, предполагая у нее изотропный закон дисперсии: $\omega = sk$. Тогда функция распределения фононов будет подчиняться кинетическому уравнению (57), которое мы перепишем в развернутом виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + s \frac{k_i}{k} \frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{1}{\tau_N} I_N(f). \quad (67)$$

Введем по формулам, аналогичным (3) или (58), плотность энергии \mathcal{E} и плотность квазиимпульса P фононного

газа *):

$$\mathcal{E} = \int \hbar \omega(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}, \quad \mathbf{P} = \int \hbar \mathbf{k} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (68)$$

Поскольку при нормальных столкновениях энергия и импульс сохраняются, то подобно (59) можно записать

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{E}}{dt} &= \frac{\hbar}{\tau_N} \int \omega(\mathbf{k}) I_N(f) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = 0, \\ \frac{d\mathbf{P}}{dt} &= \frac{\hbar}{\tau_N} \int \mathbf{k} I_N(f) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = 0. \end{aligned} \quad (69)$$

Учтя (69), а также обозначения (68), сначала умножим (67) на $\hbar \omega = \hbar s k$ и проинтегрируем по всем квазиимпульсам, а затем умножим на $\hbar \mathbf{k}$ и проинтегрируем:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \hbar s^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \int k_i f \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \equiv \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + s^2 \operatorname{div} \mathbf{P} = 0, \quad (70)$$

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} + \hbar s \frac{\partial}{\partial x_j} \int \frac{k_i k_j}{k} f \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = 0. \quad (71)$$

При анализе второго члена в (71) естественно предположить, что малые возмущения, вносимые вторым звуком в фоновый газ, не нарушают изотропию распределения фононов по квазиволновым векторам: $f(\mathbf{k}) \rightarrow f(k)$. Тогда

$$\hbar s \int \frac{k_i k_j}{k} f(k) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \int \hbar s k f(k) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathcal{E}. \quad (72)$$

Подставим (72) в (71):

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \frac{1}{3} \operatorname{grad} \mathcal{E} = 0. \quad (73)$$

Объединяя (70) и (73), получим

$$\Delta \mathcal{E} - \frac{1}{s_2^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial t^2} = 0, \quad s_2^2 = \frac{1}{3} s^2. \quad (74)$$

*) В предыдущих разделах буквы \mathcal{E} и \mathbf{P} были использованы для обозначения полной энергии и квазиимпульса фононного газа. Мы надеемся, что применение тех же обозначений для соответствующих плотностей не приведет к недоразумению, поскольку последние фигурируют только в настоящем разделе.

Уравнение (74) есть волновое уравнение, описывающее возмущения, распространяющиеся в кристалле со скоростью $s_2 = s/\sqrt{3}$. Это и есть уравнение для второго звука.

Таким образом, мы убедились, что в фоновом газе действительно могут распространяться колебания плотности энергии, а следовательно, — температуры и плотности фононов. Любопытно, что скорость волн плотности фононного газа по порядку величины не отличается от скорости обычных звуковых колебаний кристалла.

§ 8. КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛА С ТОЧЕЧНЫМ ДЕФЕКТОМ

1. Локальные колебания решетки вблизи изолированного точечного дефекта

Любой дефект в кристалле, нарушающий идеальность кристаллической решетки, естественно, влияет на колебания атомов, т. е. изменяет уравнение движения, а следовательно, и спектр частот колебаний. Характер влияния дефекта кристалла на его спектр колебаний существенно зависит от «размерности» дефекта.

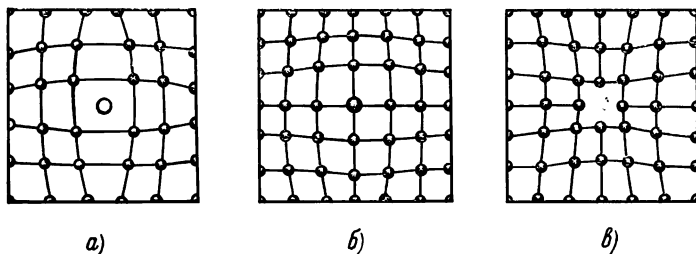


Рис. 26.

Под «размерностью» дефекта мы понимаем количество измерений, по которым дефект имеет макроскопические размеры.

Дефект, созданный неправильным положением какого-либо отдельного атома в решетке (рис. 26, а), замещением атома основного элемента «чужим» атомом (рис. 26, б) или отсутствием атома в узле (вакансией, рис. 26, в), мы будем называть *точечным* (или нульмерным) дефектом. Если правильное расположение атомов

нарушается лишь в малой окрестности некоторой линии, то соответствующий дефект мы будем называть *линейным* (или одномерным). Наконец, когда нарушение правильного расположения атомов в решетке сосредоточено вдоль участка некоторой поверхности внутри тела, захватывая слой толщиной порядка межатомных расстояний, то в кристалле существует *поверхностный* (или двухмерный) дефект.

При исследовании влияния дефектов на колебания решетки мы снова вернемся к упрощенной модели кристалла, свободной от излишней и не имеющей принципиального характера громоздкости, но обеспечивающей достаточную общность и физическую разумность результатов. Основное упрощение в этой модели сводится, по существу, к независимому рассмотрению только одной ветви колебаний кристалла. Уравнение стационарных колебаний с частотой ω в такой модели имеет вид (см. § 1)

$$\omega^2 u(\mathbf{n}) - \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') = 0. \quad (1)$$

Из (1) следует обсужденный ранее закон дисперсии для идеальной решетки:

$$\omega^2 = \omega_0^2(k) \equiv \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}} \alpha(\mathbf{n}) \cos k\mathbf{r}(\mathbf{n}). \quad (2)$$

В § 1 мы описывали уравнением (1) акустические колебания кристалла, для которых

$$\omega_0^2(0) \equiv \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}} \alpha(\mathbf{n}) = 0, \quad (3)$$

и возможные частоты колебаний лежат в конечном интервале $(0, \omega_m)$.

Однако то же уравнение (1) можно использовать для качественного анализа оптических колебаний решетки. Достаточно снять требование (3), определив предельно длинноволновую частоту колебаний формулой

$$\omega_0^2(0) = \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}} \alpha(\mathbf{n}) \neq 0. \quad (4)$$

Тогда собственные частоты уравнения (1) будут лежать в некотором интервале (ω_1, ω_2) , где $\omega_1 > 0$.

Наиболее простой точечный дефект возникает в том случае, когда один из узлов кристаллической решетки занят атомом изотопа основного элемента, образующего кристалл. Так как атом изотопа отличается от основного атома только своей массой, то естественно считать, что возмущение кристалла при этом не меняет постоянных упругой связи атомов и сводится только к изменению массы в узле, занятом изотопом. Пусть изотоп занимает узел в начале координат ($\mathbf{n} = 0$), обладая массой M , отличной от массы основного атома m . При наличии такого дефекта вместо уравнения (1) мы получим

$$\begin{aligned} \omega^2 M u(0) - \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n}') u(\mathbf{n}') &= 0, & \mathbf{n} = 0; \\ \omega^2 m u(\mathbf{n}) - \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') &= 0, & \mathbf{n} \neq 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнения (5) можно объединить в единой записи:

$$m \omega^2 u(\mathbf{n}) - \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') = (m - M) \omega^2 u(0) \delta_{\mathbf{n}0}, \quad (6)$$

введя трехмерный символ Кронекера $\delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'}$. Обозначим

$$\Delta m = M - m, \quad U_0 = \frac{\Delta m}{m} \omega^2 \quad (7)$$

и перепишем (6) в стандартной для подобных задач форме:

$$\omega^2 u(\mathbf{n}) - \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') = -U_0 u(0) \delta_{\mathbf{n}0}. \quad (8)$$

Ясно, что если дефект решетки имеет более сложную структуру, то вместо (8) всегда можно записать

$$\omega^2 u(\mathbf{n}) - \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') + \sum_{\mathbf{n}'} U(\mathbf{n}, \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') = 0, \quad (9)$$

где $U(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ — матрица возмущения, созданного дефектом в кристалле. В случае атома изотопа, когда

уравнение (9) сводится к (8),

$$U(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = U_0 \delta_{\mathbf{n}0} \delta_{\mathbf{n}'0}. \quad (10)$$

Запишем формальное решение уравнения (8) в виде

$$u(\mathbf{n}) = -U_0 G_\varepsilon^0(\mathbf{n}) u(0), \quad (11)$$

где $G_\varepsilon^0(\mathbf{n})$ — функция Грина для колебаний идеальной решетки, а $\varepsilon = \omega^2$. Величина $u(0)$ в (11) должна рассматриваться как неопределенный постоянный множитель, появление которого характерно для решений любых однородных уравнений. Полагая в (11) $\mathbf{n} = 0$, мы видим, что формула (11) непротиворечива лишь при условии

$$1 + U_0 G_\varepsilon^0(0) = 0. \quad (12)$$

Вспомним полученное в § 3 явное выражение для функции Грина и подставим его в (12):

$$1 + \frac{U_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k})} = 0. \quad (13)$$

Наконец, тому же соотношению можно придать третью форму записи, перейдя от суммирования к интегрированию по квазиволновым векторам и заменив последнее интегрированием по частотам:

$$1 + U_0 \int \frac{g_0(z) dz}{\varepsilon - z} = 0. \quad (14)$$

Здесь $g_0(\varepsilon)$ — плотность колебаний идеальной решетки.

Поскольку соотношение (12) является условием разрешимости соответствующего уравнения движения, то оно является уравнением для определения квадратов частот ε , при которых смещение атомов вокруг изотопа имеет вид (11). Уравнение типа (12)—(14) было впервые получено *И. М. Лифшицем* (1947), поэтому мы будем называть его *уравнением Лифшица*.

Начнем анализ уравнения Лифшица со случая акустических колебаний, когда частоты невозмущенного кристалла лежат в интервале $(0, \omega_m)$. Ясно, что в этом случае уравнение (14) имеет смысл лишь для $\varepsilon > \varepsilon_m =$

$= \omega_m^2$. Но тогда знаменатель в интеграле (14) всегда положителен, и уравнение (14) может обладать решением только при $U_0 < 0$, т. е. для легкого изотопа ($M < m$). Однако наличие нужного знака возмущения еще не гарантирует существование решения уравнения (14). В последнем легко убедиться, произведя графический анализ уравнения (14). Для облегчения такого анализа перепишем (14), учтя определение (7) и записав в компактной форме левую часть уравнения:

$$F(\varepsilon) = -\frac{m}{\Delta m}, \quad F(\varepsilon) = \varepsilon \int \frac{g_0(z) dz}{\varepsilon - z}. \quad (15)$$

Поскольку $g_0(z) \propto \sqrt{\varepsilon_m - z}$ при $z \rightarrow \varepsilon_m$, то в точке $\varepsilon = \varepsilon_m$ функция $F(\varepsilon)$ конечна и положительна ($F(\varepsilon_m) = F_m > 0$), а в малом интервале $\varepsilon - \varepsilon_m \ll \varepsilon_m$ имеет отрицательную производную:

$$F'(\varepsilon) \approx -\varepsilon_m \int \frac{g_0(z) dz}{(\varepsilon - z)^2} < 0.$$

При $\varepsilon \gg \varepsilon_m$ в силу выбранной нами нормировки плотности колебаний $F(\varepsilon) \approx 1$, поэтому график функции $F(\varepsilon)$ обычно имеет вид кривой, изображенной на рис. 27. Изобразив на том же рисунке горизонтальную прямую, соответствующую правой части (15), мы приходим к выводу, что решение $\varepsilon = \varepsilon_{\text{л}}$ существует лишь при условии $|\Delta m/m| F_m > 1$. Если это условие выполнено, то решение уравнения (14) дает дискретную частоту $\omega_{\text{л}}$, лежащую вне полосы непрерывного спектра ($\varepsilon_{\text{л}} = \omega_{\text{л}}^2$). Колебание кристалла с такой частотой носит название *локального колебания*, а сама частота $\omega_{\text{л}}$ — *локальной частоты*.

Таким образом, для возникновения локального колебания с частотой, расположенной вблизи акустической полосы, изотоп должен обладать массой M , удовлетворяющей условию $M < m(1 - 1/F_m) < m$.

Перейдем к обсуждению уравнения Лифшица в том случае, когда его решения определяют локальные частоты вблизи оптической полосы идеальной решетки.

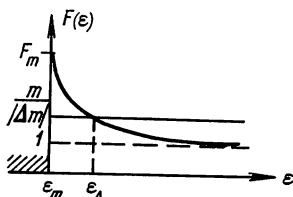


Рис. 27.

Пусть сплошной спектр идеального кристалла занимает интервал (ϵ_1, ϵ_2) , где $\epsilon_1 = \omega_1^2$ и $\epsilon_2 = \omega_2^2$. Тогда функция $F(\epsilon)$ определена при $\epsilon < \epsilon_1$ и $\epsilon > \epsilon_2$, а ее схематический график изображен на рис. 28, где $F_1 = F(\epsilon_1) < 0$,

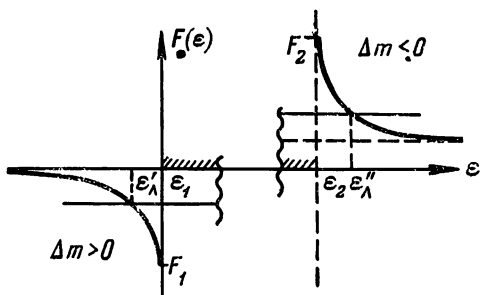


Рис. 28.

$F_2 = F(\epsilon_2) > 0$. Элементарные рассуждения приводят нас к выводу, что существование дискретных решений уравнения (15) обеспечивается лишь изотопами, массы

которых либо достаточно велики: $M > t(1 - 1/F_1) > t$, либо достаточно малы: $M < t(1 - 1/F_2) < t$. В первом случае $\Delta m > 0$ и решение $\epsilon_{\text{л}}'$ лежит левее точки ϵ_1 (рис. 28), а во втором случае $\Delta m < 0$ и решение $\epsilon_{\text{л}}''$ расположено правее точки ϵ_2 .



Рис. 29.

Следовательно, в зависимости от знака разности Δm локальные частоты могут возникать либо левее полосы сплошного спектра ($\omega_{\text{л}}' < \omega_1$ при $M > t$), либо правее этой полосы ($\omega_{\text{л}}'' > \omega_2$ при $M < t$). Схема расположения локальных частот изображена на рис. 29.

Наконец, необходимо оправдать название «локальные колебания» и показать, что амплитуда соответствующего колебания действительно отлична от нуля лишь в некоторой окрестности вблизи точечного дефекта. Проанализируем последний из рассмотренных случаев и примем $M > t$, предполагая локальную частоту $\omega_{\text{л}}$ расположенной левее полосы сплошного спектра ($\omega_{\text{л}} <$

$< \omega_1$). Амплитуда локальных колебаний дается формулой (11), которая имеет вид следующего интеграла:

$$u(n) = - \frac{U_0}{N} \sum_k \frac{e^{ikr(n)}}{\varepsilon_{\text{л}} - \omega_0^2(k)} u(0) = \\ = U_0 u(0) \frac{V_0}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{ikr(n)}}{\omega_0^2(k) - \varepsilon_{\text{л}}} . \quad (16)$$

Как всегда в подобных интегралах, поведение амплитуды (16) на больших расстояниях от дефекта ($r \gg a$) в основном определяется видом подынтегральной функции при малых значениях k ($ak \ll 1$). Другими словами, основной вклад в интеграл (16) при больших r дает интегрирование по области малых волновых векторов, где закон дисперсии идеального кристалла квадратичен по k . Избегая возможных усложнений, запишем квадратичный закон дисперсии в изотропной модели:

$$\omega_0^2(k) = \omega_1^2 + \gamma^2 k^2, \quad \gamma^2 \sim (\omega_2^2 - \omega_1^2) a^2. \quad (17)$$

Учтем (17), заменив $\varepsilon_{\text{л}}$ на $\omega_{\text{л}}^2$, и выполним требуемое в (16) интегрирование:

$$\int \frac{e^{ikr} d^3k}{\omega_1^2 - \omega_{\text{л}}^2 + \gamma^2 k^2} = 2\pi \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{\omega_1^2 - \omega_{\text{л}}^2 + \gamma^2 k^2} \int_0^\pi e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta = \\ = \frac{2\pi^2}{r\gamma^2} \exp\left(-\frac{r}{\gamma} \sqrt{\omega_1^2 - \omega_{\text{л}}^2}\right). \quad (18)$$

Подставим полученный результат в формулу (16) и обозначим $r = r(n)$:

$$u(n) = V_0 \frac{U_0}{4\pi\gamma^2} \frac{u(0)}{r} \exp\left(-\sqrt{\omega_1^2 - \omega_{\text{л}}^2} \frac{r}{\gamma}\right). \quad (19)$$

Из (19) следует, что амплитуда колебаний действительно быстро убывает с ростом расстояния r , и характерная длина убывания l имеет следующий порядок величины:

$$l = \frac{\gamma}{\sqrt{\omega_1^2 - \omega_{\text{л}}^2}} \sim a \sqrt{\frac{\omega_2^2 - \omega_1^2}{\omega_1^2 - \omega_{\text{л}}^2}} \sim a \sqrt{\frac{\omega_2 - \omega_1}{\delta\omega}},$$

где $\omega_2 - \omega_1$ — ширина полосы частот непрерывного спектра, а $\delta\omega = \omega_1 - \omega_{\text{л}}$.

Таким образом, локализация колебаний определяется отношением величины щели $\delta\omega$, отделяющей дискретную частоту от края непрерывного спектра, к ширине полосы сплошного спектра.

2. Функция Грина для кристалла с точечным дефектом

Колебания кристалла с дефектом описываются уравнением (9) с некоторой матрицей возмущения $U(n, n')$. В том случае, когда эта матрица не зависит от частоты, уравнение (9) имеет вид уравнения для собственных функций и собственных частот «дефектного» кристалла, и соответствующее уравнение для функции Грина составляется стандартным образом. Однако при наличии в решетке дефекта-изотопа, как следует из формул (10) и (7), матрица $U(n, n')$ зависит от ω . Поэтому, для того чтобы построить функцию Грина для задачи типа проблемы собственных значений, мы должны прежде всего привести уравнение колебаний (8) к каноническому в подобных задачах виду. В частности, необходимо произвести некоторую «перенормировку» возмущения, после которой соответствующая матрица не будет содержать в своем определении собственного значения (частоты).

Положим, что изотоп находится в узле с «номером» n_0 , и представим матрицу возмущения (10) в виде

$$U(n, n') = \left(\frac{\Delta m}{m}\right) \omega^2 J(n, n'), \quad J(n, n') = \delta_{nn_0} \delta_{n'n_0}. \quad (20)$$

Входящая в (20) матрица I с элементами $J(n, n')$ обладает очевидным свойством:

$$I^2 = I. \quad (21)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} I^2 &= I \cdot I = \sum_{n''} J(n, n'') J(n'', n') = \\ &= \delta_{nn_0} \sum_{n''} \delta_{n''n_0} \delta_{n''n_0} \delta_{n'n_0} = \delta_{nn_0} \delta_{n'n_0} = I. \end{aligned}$$

Подставим (20) в (9), используя сокращенные матричные обозначения:

$$\omega^2 \left(1 + \frac{\Delta m}{m} \mathbf{I} \right) u(\mathbf{n}) - \frac{1}{m} \mathbf{A} u(\mathbf{n}) = 0, \quad (22)$$

где \mathbf{A} — силовая матрица идеальной решетки с элементами $\alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}')$. Умножим (22) на матрицу, обратную матрице $1 + (\Delta m/m)\mathbf{I}$:

$$\omega^2 u(\mathbf{n}) - \left(1 + \frac{\Delta m}{m} \mathbf{I} \right)^{-1} \frac{1}{m} \mathbf{A} u(\mathbf{n}) = 0. \quad (23)$$

Обратим теперь внимание на равенство

$$\left(1 + \frac{\Delta m}{m} \mathbf{I} \right)^{-1} = 1 - \frac{(\Delta m/m) \mathbf{I}}{1 + \Delta m/m} = 1 - \frac{\Delta m}{M} \mathbf{I}, \quad (24)$$

в справедливости которого легко убедиться путем умножения (24) на матрицу $1 + (\Delta m/m)\mathbf{I}$ с последующим использованием свойства (21). Учтем (24) в уравнении (23) и возвратимся к обычным обозначениям матричных операций:

$$\omega^2 u(\mathbf{n}) - \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') + \frac{\Delta m}{M} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_0} \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') = 0. \quad (25)$$

Уравнение (25) отличается от уравнения колебаний идеальной решетки (1) возмущением, матрица которого $\tilde{U}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ не зависит от частоты:

$$\tilde{U}(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \frac{\Delta m}{mM} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_0} \alpha(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}').$$

Таким образом, мы произвели упомянутую вначале «перенормировку» возмущения и придали уравнению колебаний «дефектного» кристалла каноническую форму.

После этого преобразования нужное нам уравнение для функции Грина получается стандартным способом:

$$\varepsilon G(\mathbf{n}) - \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') G(\mathbf{n}') + \frac{\Delta m}{mM} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_0} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}') G(\mathbf{n}') = \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_0}, \quad (26)$$

где $\varepsilon = \omega^2$ и для сокращения записи обозначено $G(\mathbf{n}) = G_\varepsilon(\mathbf{n})$. Функция Грина в решетке с дефектом, нарушающим однородность кристалла, в отличие от функции Грина идеальной решетки $G^0(\mathbf{n} - \mathbf{n}_1)$, зависит от каждого из двух переменных \mathbf{n} и \mathbf{n}_1 в отдельности. Кроме того, она зависит от \mathbf{n}_0 как от параметра. Последнюю зависимость мы не будем фиксировать в записи функции Грина, обозначая ее в дальнейшем как $G(\mathbf{n}, \mathbf{n}_1)$.

Перенесем последнее слагаемое в левой части (26) направо и запишем формальное решение полученного уравнения с помощью функции Грина идеальной решетки:

$$G(\mathbf{n}, \mathbf{n}_1) = G^0(\mathbf{n} - \mathbf{n}_1) - \frac{\Delta m}{M} G^0(\mathbf{n} - \mathbf{n}_0) \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}') G(\mathbf{n}', \mathbf{n}_1). \quad (27)$$

Введем обозначение

$$\chi(\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1) = \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}') G(\mathbf{n}', \mathbf{n}_1)$$

и получим для величины $\chi(\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1)$ алгебраическое уравнение путем умножения (27) на $(1/m) \alpha(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n})$ и последующего суммирования по \mathbf{n} :

$$\chi(\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1) = \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}} \alpha(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}) G^0(\mathbf{n} - \mathbf{n}_1) - \frac{\Delta m}{M} \chi(\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1) \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}} \alpha(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}) G^0(\mathbf{n} - \mathbf{n}_0). \quad (28)$$

Вспомним, что функция Грина для идеального кристалла является решением уравнения

$$\varepsilon G^0(\mathbf{n} - \mathbf{n}_1) - \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}'} \alpha(\mathbf{n} - \mathbf{n}') G^0(\mathbf{n}' - \mathbf{n}_1) = \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}_1},$$

поэтому вместо (28) получается

$$\chi(\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1) \left\{ 1 + \frac{\Delta m}{m} \varepsilon G^0(0) \right\} = \frac{M}{m} (\varepsilon G^0(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}_1) - \delta_{\mathbf{n}_0\mathbf{n}_1}). \quad (29)$$

Подставим найденную из (29) величину $\chi(\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1)$ в (27) и получим окончательное выражение для функции

Грина стационарных колебаний кристалла с дефектом-изотопом:

$$G_\varepsilon(\mathbf{n}, \mathbf{n}_1) = G_\varepsilon^0(\mathbf{n} - \mathbf{n}_1) - \frac{\Delta m/m}{D(\varepsilon)} G_\varepsilon^0(\mathbf{n} - \mathbf{n}_0) [\varepsilon G_\varepsilon^0(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}_1) - \delta_{\mathbf{n}_0 \mathbf{n}_1}], \quad (30)$$

где мы обозначили

$$D(\varepsilon) = 1 + \frac{\Delta m}{m} \varepsilon G_\varepsilon^0(0). \quad (31)$$

В свое время (§ 4) было отмечено, что полюсы функции Грина как функции переменной ε определяют квадраты собственных частот колебаний соответствующей системы. Из (30) следует, что функция Грина для кристалла с точечным дефектом может обладать дополнительным полюсом в точке, где имеет нуль функция $D(\varepsilon)$, т. е. при тех значениях ε , которые находятся из уравнения $D(\varepsilon) = 0$, совпадающего с (12). Следовательно, дополнительные (по отношению к функции Грина идеального кристалла) полюсы функции Грина определяют рассмотренные в предыдущем разделе частоты локальных колебаний кристалла с дефектом.

3. Квазилокальные колебания

Имея функцию Грина (30), по изложенному в § 4 рецепту можно определить плотность колебаний решетки с точечным дефектом. Согласно этому рецепту плотность колебаний $g(\varepsilon)$ равна

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} G_{\varepsilon - i\gamma}(\mathbf{n}, \mathbf{n}). \quad (32)$$

Следовательно, для ее нахождения нужно прежде всего положить в (30) $\mathbf{n}_1 = \mathbf{n}$ и просуммировать по \mathbf{n} :

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} G(\mathbf{n}, \mathbf{n}) &= \\ &= G^0(0) - \frac{\Delta m/m}{ND(\varepsilon)} \left[\varepsilon \sum_{\mathbf{n}} G^0(\mathbf{n}) G^0(-\mathbf{n}) - G^0(0) \right]. \quad (33) \end{aligned}$$

Легко проверить, используя k -представление функции Грина идеальной решетки, что

$$\sum_{\mathbf{n}} G_{\varepsilon}^0(\mathbf{n}) G_{\varepsilon}^0(-\mathbf{n}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{[\varepsilon - \omega_0^2(\mathbf{k})]} = -\frac{d}{d\varepsilon} G_{\varepsilon}^0(0). \quad (34)$$

Подставим (34) в (33):

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} G_{\varepsilon}(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = G_{\varepsilon}^0(0) + \frac{\Delta m/m}{ND(\varepsilon)} \frac{d}{d\varepsilon} [\varepsilon G_{\varepsilon}^0(0)]. \quad (35)$$

Вспомнив определение (31) для $D(\varepsilon)$, возвратимся к формуле (32):

$$g(\varepsilon) = g_0(\varepsilon) + \frac{1}{\pi N} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \frac{d}{d\varepsilon} \ln D(\varepsilon - i\gamma), \quad (36)$$

где $g_0(\varepsilon)$ — плотность колебаний идеального кристалла.

Реальный физический интерес обычно представляет плотность колебаний кристалла, содержащего не один, а большое число эквивалентных точечных дефектов. В том случае, когда среднее расстояние между дефектами велико (их концентрация мала), соответствующая плотность колебаний будет отличаться от (36) только тем, что второе слагаемое в (36) умножится на число точечных дефектов.

Введя концентрацию c , равную отношению числа точечных дефектов к N ($c \ll 1$), мы сможем обобщить (36) на случай кристалла с малой концентрацией дефектов-изотопов:

$$\delta g(\varepsilon) \equiv g(\varepsilon) - g_0(\varepsilon) = \frac{c}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \frac{d}{d\varepsilon} \ln D(\varepsilon - i\gamma). \quad (37)$$

Формула (37) определяет в линейном по концентрации приближении изменение плотности колебаний кристалла, обусловленное наличием точечных дефектов.

Если значение ε лежит вне полосы сплошного спектра идеальной решетки, то $g_0(\varepsilon) = 0$ и $G_{\varepsilon}^0(0)$ является вещественной функцией действительного переменного ε :

$$\lim_{\gamma \rightarrow +0} G_{\varepsilon - i\gamma}^0(0) = G_{\varepsilon}^0(0) \equiv \operatorname{Re} G_{\varepsilon}^0(0).$$

Но в таком случае плотность колебаний кристалла с точечными дефектами может отличаться от нуля вне сплошного спектра лишь в точках, где аргумент логарифма в (37) обращается в нуль: $D(\varepsilon) = 0$, т. е. при значениях ε , совпадающих с квадратами локальных частот.

Представим в малой окрестности точки $\varepsilon = \varepsilon_n$ функцию $D(\varepsilon - i\gamma)$ в виде

$$D(\varepsilon - i\gamma) = (\varepsilon - \varepsilon_n - i\gamma) \frac{dD(\varepsilon_n)}{d\varepsilon}, \quad (38)$$

помня, что ε_n является корнем уравнения Лифшица $D(\varepsilon) = 0$. Тогда из (37) следует

$$\delta g(\varepsilon) = \frac{c}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_n - i\gamma}. \quad (39)$$

Но предел в правой части (39) совпадает с δ -функцией. Поэтому в соответствующем интервале частот плотность колебаний обладает δ -образным характером:

$$g(\varepsilon) = c\delta(\varepsilon - \varepsilon_n), \quad (40)$$

что является проявлением дискретности локальной частоты.

Результат, содержащийся в (40), мы уже обсуждали, поэтому перейдем к анализу плотности колебаний «дефектного» кристалла в интервале непрерывного спектра идеальной решетки ($\varepsilon_1 < \varepsilon < \varepsilon_2$).

В § 4 было показано, что в области непрерывного спектра

$$\lim_{\gamma \rightarrow +0} G_{\varepsilon - i\gamma}^0(0) = \int \frac{g_0(z) dz}{\varepsilon - z} + i\pi g_0(\varepsilon), \quad (41)$$

где интеграл понимается в смысле главного значения. При всех ε , кроме попадающих в малые окрестности концов интервала непрерывного спектра и особых точек ван Хова, где функция $g_0(\varepsilon)$ теряет свою аналитичность, для выделения вещественной и мнимой частей производной $dG_{\varepsilon}^0(0)/d\varepsilon$ достаточно продифференцировать (41) по ε .

Следовательно,

$$\lim_{\gamma \rightarrow +0} D(\varepsilon - i\gamma) = R(\varepsilon) + i\pi \frac{\Delta m}{m} \varepsilon g_0(\varepsilon), \quad (42)$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow +0} \frac{d}{d\varepsilon} D(\varepsilon - i\gamma) = \frac{dR(\varepsilon)}{d\varepsilon} + i\pi \frac{\Delta m}{m} \frac{d}{d\varepsilon} [\varepsilon g_0(\varepsilon)],$$

где

$$R(\varepsilon) = \frac{\Delta m}{m} \varepsilon \oint \frac{g_0(z) dz}{\varepsilon - z}.$$

Выполняя указанные в (37) операции, легко получить

$$\delta g(\varepsilon) = \frac{c \Delta m/m}{|D(\varepsilon)|^2} \left\{ R(\varepsilon) \frac{d}{d\varepsilon} [\varepsilon g_0(\varepsilon)] - \varepsilon g_0(\varepsilon) \frac{dR(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right\}. \quad (43)$$

Выражение (43) имеет нефизические особенности в точках, где нарушается аналитичность функции $g_0(\varepsilon)$, и последняя имеет «корневые» сингулярности. Но мы оговаривали применимость формулы (43) только вне малых окрестностей этих точек. Причина появления особенностей в (43) связана с тем, что для рассмотрения деформации спектра у его особых точек недостаточно использованного нами линейного по концентрации приближения.

Однако функция $\delta g(\varepsilon)$ может обладать другой особенностью, имеющей физический смысл и представляющей несомненный интерес. Может случиться, что для некоторого значения $\varepsilon = \varepsilon_K$, лежащего внутри непрерывного спектра, обращается в нуль вещественная часть $D(\varepsilon)$:

$$R(\varepsilon_K) \equiv 1 + \frac{\Delta m}{m} \varepsilon_K \oint \frac{g_0(z) dz}{\varepsilon_K - z} = 0. \quad (44)$$

Вообще говоря, при $\varepsilon = \varepsilon_K$ функция $\delta g(\varepsilon)$ не имеет никаких особенностей в формально математическом смысле. Но если точка $\varepsilon = \varepsilon_K$ оказывается вблизи краев полосы сплошного спектра, где плотность состояний $g_0(\varepsilon)$ очень мала, то в окрестности ε_K знаменатель в формуле (43) становится аномально малым и функция $\delta g(\varepsilon)$ возрастает резонансным образом. Для определения вида резонансного пика функции $\delta g(\varepsilon)$ используем

разложение типа (38)

$$R(\varepsilon) = (\varepsilon - \varepsilon_K) \frac{dR(\varepsilon_K)}{d\varepsilon}$$

и, ограничившись малой окрестностью интересующей нас точки, положим $\varepsilon = \varepsilon_K$ в числителе правой части (43):

$$\delta g(\varepsilon) = \frac{c}{\pi} \frac{\Gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_K)^2 + \Gamma^2}, \quad (45)$$

$$\Gamma = \pi \frac{\Delta m}{m} \frac{\varepsilon_K g_0'(\varepsilon_K)}{R_0'(\varepsilon_K)}.$$

Формула (45) имеет характерный вид выражения, описывающего распределение частот квазистационарного состояния системы, причем параметр Γ дает полуширину соответствующей резонансной кривой. При малых Γ выражение (45) приводит к острому пику в плотности колебаний. Частота $\omega_K = \sqrt{\varepsilon_K}$ носит название *квазилокальной частоты*, а отвечающее ей колебание — *квазилокального колебания*.

Наиболее интересны квазилокальные колебания, частоты которых оказываются у длинноволнового края акустического спектра (как мы сейчас увидим, такие колебания порождаются тяжелыми изотопами с $\Delta m \gg \gg m$). Если $\varepsilon_1 = 0$ и $\varepsilon_2 = \omega_m^2 \sim \omega_D^2$, где ω_D — дебаевская частота, то для $\varepsilon \ll \omega_D^2$ главная часть разложения функции $R(\varepsilon)$ по степеням ε имеет вид

$$R(\varepsilon) = 1 - \frac{\Delta m}{m} \frac{\varepsilon}{\varepsilon_*}, \quad \frac{1}{\varepsilon_*} = \int \frac{g_0(z) dz}{z} \sim \frac{1}{\omega_D^2}. \quad (46)$$

Подставляя выражение (46) в (44), мы видим, что при достаточно большой величине отношения $\Delta m/m$ обязательно имеется решение уравнения (44) в области малых ε :

$$\varepsilon_K = \frac{m}{\Delta m} \varepsilon_* \sim \frac{m}{\Delta m} \omega_D^2, \quad \Delta m \gg m. \quad (47)$$

Из (47) следует, что с ростом $\Delta m/m$ положение квазилокальной частоты приближается к длинноволновому

краю сплошного спектра колебаний ($\epsilon_K \rightarrow 0$). Одновременно с этим происходит сужение соответствующего пика на спектральной плотности. Действительно, поскольку при малых ϵ ($\epsilon \ll \omega_D^2$)

$$g_0(\epsilon) = \frac{V_0 \sqrt{\epsilon}}{(2\pi)^2 s_0^3} \sim \frac{\sqrt{\epsilon}}{\omega_D^3},$$

то полуширина резонансного пика равна

$$\Gamma = \pi \epsilon_* g_0(\epsilon_*) \sim \left(\frac{m}{\Delta m}\right)^{3/2} \epsilon_*.$$

Таким образом, относительная полуширина лоренцевской кривой (45) в случае тяжелых изотопов определяется выражением

$$\frac{\Gamma}{\epsilon_K} = \pi \epsilon_* g_0(\epsilon_*) \sim \sqrt{\frac{m}{\Delta m}} \ll 1, \quad (48)$$

подтверждающим сужение резонансного пика с возрастанием $\Delta m/m$. Следовательно, с ростом $\Delta m/m$ резонансный пик приобретает все более четко выраженный δ -образный характер.

Естественно, что точно такой же пик лоренцевского типа (45) возникнет на графике кривой функции распределения частот:

Естественно, что точно такой же пик лоренцевского типа (45) возникнет на графике кривой функции распределения частот:

$$\delta v(\omega) = c \frac{2\omega_K}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega^2 - \omega_K^2)^2 + \Gamma^2}, \quad (49)$$

где $\omega_K^2 = \epsilon_K$.

Примерный график функции

$$v(\omega) = v_0(\omega) + \delta v(\omega)$$

при $\omega \ll \omega_D$ приведен на рис. 30, где плавная кривая l изображает функцию

$$v_0(\omega) = \text{const } \omega^2.$$

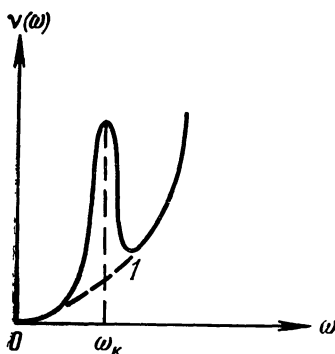


Рис. 30.

§ 9. ДЛИННОВОЛНОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛА ВБЛИЗИ ЛИНЕЙНОГО ИЛИ ПЛОСКОГО ДЕФЕКТА

1. Локализация колебаний у одномерного (линейного) дефекта

Любой макроскопический образец реального кристалла обязательно обладает дефектами, называемыми дислокациями. Своеобразие дислокации как дефекта кристаллической решетки заключается в том, что она, являясь довольно протяженным образованием, вызывает нарушение регулярности решетки лишь в малой окрестности некоторой линии — оси дислокации. Если окружить ось дислокации трубкой с радиусом порядка величины постоянной решетки a , то вне этой трубки кристалл может считаться идеальным *). Поэтому в соответствии с предложенной выше классификацией дислокация является одномерным дефектом решетки.

Нас будут интересовать малые колебания атомов (вблизи их новых положений равновесия в присутствии дислокации), и потому в первом приближении ось дислокации можно считать фиксированной. Предположим, что дислокация прямолинейна и ее ось перпендикулярна плоскости симметрии кристалла. Направим ось z вдоль линии дислокации и обозначим через ξ двухмерный радиус-вектор в плоскости xOy : $r = (\xi, z)$, $\xi = (x, y)$.

Если принять, что дислокация не изменяет плотности вещества вдоль своей оси, то вносимое дислокацией возмущение будет связано с локальным изменением силовой матрицы. При анализе длинноволновых колебаний кристалла ($\lambda \gg a$) это возмущение естественно считать сосредоточенным на оси дислокации. Тогда, рассматривая смещение атомов кристалла как непрерывную функцию координат: $u = u(\xi, z)$, можно представить уравнение колебаний в виде

$$\omega^2 u(\xi, z) - \frac{1}{m} \sum_{r'} \alpha(n - n') u(\xi', z') = \delta(\xi) \sum_{z'} U(z - z') u(0, z'), \quad (1)$$

*) Строгое определение дислокации в кристалле и атомные модели ее простейших типов см. в п. 3 § 11.

где $\delta(\xi)$ — двумерная δ -функция ($\delta(\xi) = \delta(x)\delta(y)$), а суммирование по узлам кристаллической решетки может быть заменено интегрированием:

$$\sum_z \dots = \frac{1}{a} \int dz \dots, \quad \sum_r \dots = \frac{1}{V_0} \int dV \dots \quad (2)$$

Функция $U(z)$ в (1), описывающая возмущение силовой матрицы, не зависит от частоты и обладает такими свойствами: во-первых, является четной функцией z , а во-вторых, удовлетворяет очевидному требованию

$$\sum_z U(z) = 0. \quad (3)$$

Используем однородность кристалла вдоль направления Oz и применим одномерное преобразование Фурье относительно координаты z :

$$u(\xi, z) = \frac{a}{2\pi} \int \chi_k(\xi) e^{ikz} dk, \quad \chi_k(\xi) = \sum_z u(\xi, z) e^{-ikz}. \quad (4)$$

Уравнение для $\chi_k(\xi)$ выводится стандартным путем из (1)

$$\omega^2 \chi_k(\xi) - \sum_{\xi'} \Lambda_k(\xi - \xi') \chi_k(\xi') = \delta(\xi) U_k \chi_k(0), \quad (5)$$

где обозначено

$$\Lambda_k(\xi) = \frac{1}{m} \sum_{nz} \alpha(n) e^{-ikanz}, \quad U_k = \sum_z U(z) e^{-ikz}. \quad (6)$$

Уравнение (5) является уравнением колебаний двумерного кристалла со специфическим «точечным» дефектом в начале координат. Компонента волнового вектора $k = k_z$ входит в это уравнение как параметр и определяет интенсивность локального возмущения U_k . В случае $ak \ll 1$ для функции U_k имеет место очевидное разложение, вытекающее из (6) и (3):

$$U_k = -k^2 W_0, \quad W_0 = \frac{1}{2} \sum_z U(z) z^2. \quad (7)$$

Для нахождения функции $\chi_k(\xi)$ воспользуемся двухмерным разложением Фурье:

$$\chi_k(\xi) = \frac{a^2}{(2\pi)^2} \int \chi(\mathbf{x}, k) e^{i\mathbf{x}\xi} d^2\mathbf{x}, \quad (8)$$

где \mathbf{x} — двухмерный волновой вектор: $\mathbf{x} = (k_x, k_y)$. Компоненты Фурье $\chi(\mathbf{x}, k)$ определяются из соотношения

$$[\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{x}, k)] \chi(\mathbf{x}, k) = - (ak)^2 W_0 \chi_k(0), \quad (9)$$

в котором функция $\omega_0^2(\mathbf{x}, k)$ дает закон дисперсии идеального кристалла.

Предположим для дальнейшего упрощения выкладок, что ось z является осью симметрии четвертого или шестого порядка. Тогда в длинноволновом пределе

$$\omega_0^2(\mathbf{x}, k) = s_0^2 \mathbf{x}^2 + s^2 k^2. \quad (10)$$

Зависимость амплитуды колебаний от ξ следует непосредственно из (8), (9) и (10):

$$\chi_k(\xi) = - (ak^2) \frac{W_0}{(2\pi)^2} \chi_k(0) \int \frac{\cos(\mathbf{x}\xi) d^2\mathbf{x}}{\omega^2 - s^2 k^2 - s_0^2 \mathbf{x}^2}. \quad (11)$$

Если положить в (11) $\xi = 0$, то получится уравнение для частот колебаний, амплитуда которых описывается формулой (11):

$$1 + (ak)^2 \frac{W_0}{2\pi} \int_0^{x_0} \frac{x dx}{\omega^2 - s^2 k^2 - s_0^2 x^2} = 0. \quad (12)$$

Верхний предел интегрирования в (12) имеет порядок величины $x_0 \sim 1/a$. То обстоятельство, что предел интегрирования в формуле (12) определяется лишь по порядку величины и имеет характер некоторого параметра «обрезания», связано с модельным предположением о точечном характере возмущения в уравнении (5). Предположение (1) о δ -образной локализации возмущения на оси дислокации, точно так же как и закон дисперсии (10), справедливо только для длинноволновых колебаний ($ak \ll 1$). В то же время интегрирование в (11) и (12) должно распространяться на весь интервал непре-

рывного спектра частот. А поскольку подынтегральное выражение в (11) не обладает нужным для сходимости интеграла убыванием на бесконечности, мы вынуждены формально ввести естественный верхний предел интегрирования по квазиволновым векторам ($ak_0 \sim \pi$).

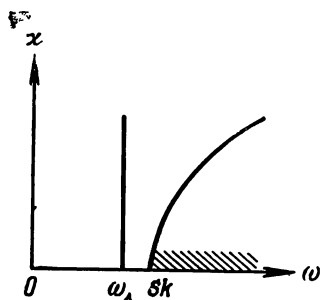


Рис. 31.

Как и в предыдущем параграфе, уравнение (12) относительно ω^2 имеет решение только при определенном знаке W_0 , а именно для $W_0 > 0$, причем обязательно $\omega^2 < s^2 k^2$. Если условие $W_0 > 0$ выполнено, то (12) всегда имеет решение, так как оно эквивалентно уравнению

$$1 - (ak)^2 \frac{W_0}{4\pi s_0^2} \ln \frac{s_0^2 \kappa_0^2}{s^2 k^2 - \omega^2} = 0, \quad (13)$$

при записи которого опущены малые члены порядка величины

$$\frac{s^2 k^2 - \omega^2}{s_0^2 \kappa_0^2} \sim \frac{s^2 k^2}{s_0^2 \kappa_0^2} \sim (ak)^2 \ll 1.$$

Решение уравнения (13) очевидно:

$$\omega^2 = s^2 k^2 - s_0^2 \kappa_0^2 \exp \left\{ - \frac{4\pi s_0^2}{(ak)^2 W_0} \right\}. \quad (14)$$

Напомним, что в формуле (14) $W_0 > 0$ и $s_0 \kappa_0 \sim \omega_D$.

Частоты (14) обладают характерной для двумерных задач экспоненциальной зависимостью от интенсивности возмущения, т. е. от величины U_k . В их определении отсутствует свойственное точечным дефектам «критическое» значение интенсивности возмущения, начиная с которого происходит отщепление частоты локальных колебаний. Существование локализованных вблизи дислокации колебаний требует определенного знака возмущения ($W_0 > 0$), и при нужном знаке соответствующая частота всегда отделена некоторой конечной щелью $\delta\omega$ от начала спектра объемных колебаний

кристалла:

$$\delta\omega = sk - \omega_{\text{л}} \sim \frac{\omega_{\text{D}}^2}{sk} \exp\left\{-\frac{4\pi s_0^2}{(ak)^2 W_0}\right\}.$$

На рис. 31 приведена схема расположения частот локализованных на дислокации колебаний $\omega_{\text{л}}$ при фиксированном значении k . В качестве характеристики сплошного спектра частот на рис. 31 выбрана величина $\kappa = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$.

Наконец, убедимся, что частотам (14) действительно соответствуют локализованные вблизи линейного дефекта колебания. Вернемся к формуле (11) и выполним содержащееся в ней интегрирование:

$$\chi_k(\xi) = - (ak)^2 \frac{W_0}{2\pi} \chi_k(0) \int_0^{\infty} \frac{\kappa d\kappa}{\omega^2 - s^2 k^2 - s_0^2 \kappa^2} \times \\ \times \oint \cos(\kappa \rho \cos \varphi) d\varphi, \quad (15)$$

где $\rho^2 = x^2 + y^2$ и верхний предел интегрирования по κ сдвинут на бесконечность, поскольку при $\rho \neq 0$ интеграл в (15) сходится.

Входящие в правую часть формулы (15) определенные интегралы могут быть взяты из любого справочника, поэтому мы приведем лишь окончательные выражения для амплитуды колебаний:

$$\chi_k(\xi) \equiv \chi_k(\rho) = (ak)^2 \frac{W_0}{2\pi s_0^2} K_0\left(\sqrt{s^2 k^2 - \omega_{\text{л}}^2} \frac{\rho}{s_0}\right) \chi_k(0), \quad (16)$$

где $K_0(x)$ — цилиндрическая функция Ханкеля нулевого порядка (мнимого аргумента). Поведение функции $K_0(x)$ при малых и больших значениях своего аргумента хорошо известно:

$$K_0(x) = -\ln \frac{x}{2}, \quad x \ll 1; \\ K_0(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}, \quad x \gg 1. \quad (17)$$

Таким образом, вдали от оси дислокации, когда

$$\rho \gg s_0 (s^2 k^2 - \omega_{\text{п}}^2)^{-1/2} \sim a \exp \left\{ \frac{2\pi s_0^2}{(ak)^2 W_0} \right\},$$

амплитуда колебаний обладает характерным экспоненциальным убыванием, подтверждающим локализацию колебаний вблизи дислокации.

Предельная зависимость (17) для $x \ll 1$ показывает, что амплитуда колебаний имеет логарифмическую особенность при $\rho \rightarrow 0$. Это связано с тем, что выведенная в длинноволновом приближении формула (16) справедлива лишь при $\rho \gg a$. Поэтому предельно малое расстояние ρ , на котором формула (16) верна хотя бы по порядку величины, не может быть меньше a . Любопытно заметить, что если в (16) положить $\rho = r_0 \sim a$ и принять $r_0 \kappa_0 = 2$, а также $\chi_k(r_0) = \chi_k(0)$, то получится уравнение (13) для определения локальных частот.

2. Частоты локальных колебаний при наличии двумерного (плоского) дефекта

При наличии двумерного дефекта кристалла нарушение регулярности решетки сосредоточено вдоль не-

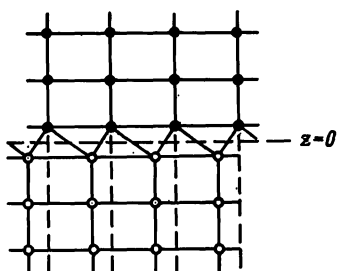


Рис. 32.

которой поверхности внутри тела. Если характер искажений кристаллической структуры одинаков вдоль указанной поверхности (чаще всего плоскости), то подобное нарушение строгой периодичности решетки называют *дефектом упаковки*. Схематическое изображение определенного плоского дефекта упаковки, перпендикулярного оси z , представленное на рис. 32, иллюстрирует

характер изменения расположения атомов вблизи дефекта. Возможные типы дефектов упаковки полностью определяются кристаллографией конкретной решетки.

Будем рассматривать безгранично протяженный плоский дефект, считая его совпадающим с плоскостью $z = 0$, параллельной некоторой кристаллографической плоскости. Как и в предыдущем разделе, ограничимся рассмотрением достаточно симметричной решетки и предположим ось z совпадающей с осью симметрии четвертого порядка.

Дефект упаковки не изменяет масс атомов, поэтому его влияние на колебания решетки может быть описано только соответствующими возмущениями силовой матрицы. Так как плоский дефект, проходящий через весь кристалл, не нарушает однородности решетки в плоскости, перпендикулярной оси z , то матрица возмущения $U(n, n')$ в таком кристалле должна зависеть от разностей $n_x - n'_x$ и $n_y - n'_y$. Поэтому уравнения колебаний решетки с подобным возмущением будет иметь вид

$$\begin{aligned} \omega^2 u(n) - \frac{1}{m} \sum_{n'} \alpha(n - n') u(n') = \\ = \sum_{n'} U(n_x - n'_x, n_y - n'_y, n_z, n'_z) u(n'), \end{aligned} \quad (18)$$

где матрица $U(n, n')$ подчиняется требованию

$$\sum_n U(n_x, n_y, n_z, n'_z) = \sum_n U(n_x, n_y, n'_z, n_z) = 0. \quad (19)$$

Представим амплитуду колебаний в виде

$$u(n) = \chi_{\mathbf{x}}(n_z) e^{ia(k_x n_x + k_y n_y)}, \quad \mathbf{x} \equiv (k_x, k_y), \quad (20)$$

и перепишем уравнение (18) в \mathbf{x} -представлении:

$$\omega^2 \chi_{\mathbf{x}}(n_z) - \sum_{n'_z} \Lambda_{\mathbf{x}}(n_z - n'_z) \chi_{\mathbf{x}}(n'_z) = \sum_{n'_z} U_{\mathbf{x}}(n_z, n'_z) \chi_{\mathbf{x}}(n'_z), \quad (21)$$

где обозначено

$$\Lambda_{\mathbf{x}}(n_z) = \frac{1}{m} \sum_{n_x, n_y} \alpha(n) e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y)}, \quad (22)$$

$$U_{\mathbf{x}}(n_z, n'_z) = \sum_{n_x, n_y} U(n_x, n_y, n_z, n'_z) e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y)},$$

Очень важно, что величина κ входит в уравнение (21) как параметр. Если считать этот параметр фиксированным и интересоваться только зависимостью амплитуды колебаний от z , то, опустив индекс κ у всех величин в (21), мы получим уравнение колебаний одномерного кристалла

$$\omega^2 \chi(n) - \sum_{n'} \Lambda(n - n') \chi(n') = \sum_{n'} U(n, n') \chi(n'), \quad (23)$$

где принято $n = n_z$, а матрица $\Lambda(n)$ обладает таким свойством:

$$\sum_n \Lambda(n) = \omega_0^2(\kappa, 0). \quad (24)$$

Напомним, что функция $\omega_0(\kappa, k_z)$ определяет закон дисперсии идеального кристалла.

В длинноволновом приближении амплитуды колебаний могут рассматриваться как непрерывные функции z , а дефект упаковки может считаться сосредоточенным в плоскости $z = 0$:

$$U(n, n') = U_0 \delta(z) \delta(z'), \quad U_0 = U_0(\kappa). \quad (25)$$

В силу условия (19) и симметрии задачи функция $U_0(\kappa)$ имеет следующее разложение по степеням κ :

$$U_0(\kappa) = -\kappa^2 W_1. \quad (26)$$

Подставим (25) в (23):

$$\omega^2 \chi(z) - \sum_{z'} \Lambda(n - n') \chi(z') = U_0 \chi(0) \delta(z) \quad (27)$$

и воспользуемся обычным разложением Фурье:

$$\chi(z) = \frac{a}{2\pi} \int \chi_k e^{ikz} dk, \quad \chi_k = \sum_z \chi(z) e^{-ikz}. \quad (28)$$

Тогда уравнение для фурье-компонент сведется к соотношению

$$[\omega^2 - \omega_0^2(\kappa, k)] \chi_k = U_0 \chi(0). \quad (29)$$

В длинноволновом приближении закон дисперсии рассматриваемого нами кристалла дается формулой (10).

Из (28), (29) и (10) сразу получается зависимость амплитуды колебаний от координаты z :

$$\chi(z) = \frac{aU_0}{2\pi} \chi(0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos kz \, dk}{\omega^2 - s_0^2 k^2 - s^2 k^2}. \quad (30)$$

Полагая в (30) $z = 0$, мы получаем уравнение для возможных частот таких колебаний:

$$1 + \frac{aU_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{s^2 k^2 + s_0^2 k^2 - \omega^2} = 0. \quad (31)$$

Если $U_0 < 0$, то уравнение (31) обязательно имеет решение при $\omega < s_0 k$:

$$\omega^2 = s_0^2 k^2 - \left(\frac{aU_0}{2s}\right)^2. \quad (32)$$

Подставим (26) в (32) и получим зависимость частоты изучаемых колебаний от k :

$$\omega_{\text{л}}^2 = s_0^2 k^2 - (ak)^2 \left(\frac{kW_1}{2s}\right)^2. \quad (33)$$

Таким образом, имеется некоторый спектр частот $\omega_{\text{л}}$, локализованных вблизи плоского дефекта колебаний. Особенностью этого спектра является то, что при фиксированном k частота соответствующих колебаний отделена от спектра обычных объемных колебаний кристалла щелью, исчезающей при $k \rightarrow 0$. Из (33) следует, что при $k \rightarrow 0$ стремится к нулю не только ширина щели, но и ее относительная величина

$$\frac{\delta\omega}{\omega_{\text{л}}} = \frac{s_0 k - \omega_{\text{л}}}{\omega_{\text{л}}} \sim (ak)^2 \left(\frac{W_1}{s_0 s}\right)^2. \quad (34)$$

Легко убедиться, что рассмотренные колебания локализованы вблизи плоского дефекта. Действительно, выполним указанное в (30) интегрирование, учитывая (32);

$$\chi_{k*}(z) = \chi(0) \exp \left\{ -\sqrt{s_0^2 k^2 - \omega_{\text{л}}^2} \frac{|z|}{s} \right\}, \quad (35)$$

Мы видим, что амплитуда $\chi(z)$ действительно обладает характерным для поверхностных волн экспоненциальным спадом.

В заключение остановимся на краткой качественной характеристике локализованных у плоского дефекта колебаний реальной кристаллической решетки, обладающей тремя поляризациями вектора смещений с тремя ветвями закона дисперсии.

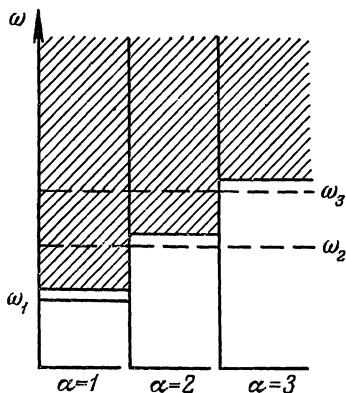


Рис. 33.

дающей тремя поляризациями вектора смещений с тремя ветвями закона дисперсии. Как мы знаем, в анизотропной среде существуют три ветви независимых акустических колебаний с различными законами дисперсии $\omega^2 = s_\alpha^2(k)(k^2 + k_z^2)$, где $\alpha = 1, 2, 3$ и $s_\alpha(k)$ определяется только направлением волнового вектора и не зависит от его величины. При фиксированной составляющей волнового вектора в плоскости дефекта k имеются три полосы непрерывных значений частот объемных колебаний кристалла

(рис. 33).

Если в кристалле имеется плоский дефект, то независимость трех типов колебаний ($\alpha = 1, 2, 3$) нарушается и происходит «перепутывание» колебаний разных поляризаций. Кроме того, что наиболее важно, при нужном знаке возмущения, вызванного дефектом, от нижнего края каждой из полос может «отщепиться» частота, отстоящая на расстояние $\delta\omega \sim k^3$ от границы соответствующей полосы. Одна из этих частот (наиболее низкая и обозначенная ω_1 на рис. 33) отвечает локализованному вблизи плоского дефекта колебанию. Что же касается частот, «отщепляющихся» от более высоких границ других полос спектра, то они оказываются дискретными только в меру пренебрежения взаимодействием между разными ветвями колебаний. Поскольку частоты ω_2 и ω_3 на рис. 33 лежат в области сплошного спектра «соседних» ветвей колебаний, то учет даже малого взаимодействия между ветвями, обусловленного на-

личием дефекта, принципиально изменяет ситуацию. Как результат такого взаимодействия, колебания, отвечающие частотам ω_2 и ω_3 , оказываются квазилокальными.

3. Свободная поверхность кристалла как плоский дефект

Обычно атомное взаимодействие в кристалле быстро убывает с ростом расстояния между атомами, и потому при анализе уравнений колебаний решетки можно учитывать только элементы силовой матрицы $\alpha(n)$ со срав-

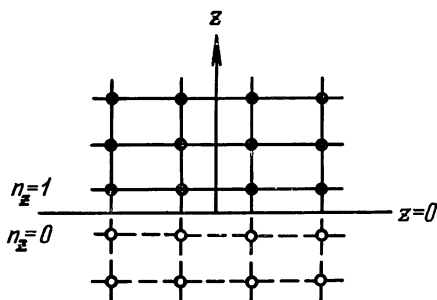


Рис. 34.

нительно малыми n . Но легко понять, что в модели, где отлично от нуля лишь небольшое число элементов $\alpha(n)$, свободная поверхность кристалла эквивалентна некоторому плоскому дефекту *). Чтобы проиллюстрировать эту эквивалентность, мы по-прежнему будем считать решетку достаточно симметричной, а плоскую поверхность полуограниченного кристалла параллельной «хорошей» кристаллографической плоскости. Схема такой поверхности, совпадающей с плоскостью $z=0$, изображена на рис. 34.

Мы сейчас покажем, что стационарные колебания кристалла, отвечающие некоторому фиксированному n , при наличии свободной поверхности действительно

*) Впервые это было отмечено и использовано И. М. Лифшицем и Л. Н. Розенцвейгом (1948).

описываются «одномерным» уравнением (23) со специально подобранной матрицей возмущения $U(n, n')$. Ограничимся случаем взаимодействия между ближайшими атомными плоскостями $z = an_z = \text{const}$, оставив лишь элементы $\Lambda(0)$ и $\Lambda(1) = \Lambda(-1)$ матрицы $\Lambda(n)$. Тогда закон дисперсии колебаний идеального кристалла будет иметь вид

$$\omega_0^2(\kappa, k_z) = \Lambda(0) + 2\Lambda(1) \cos ak_z. \quad (36)$$

В длинноволновом пределе ($ak_z \ll 1$)

$$\omega_0^2(\kappa, k_z) = \Lambda(0) + 2\Lambda(1) - \Lambda(1)(ak_z)^2. \quad (37)$$

Но поскольку зависимость от малых κ ($a\kappa \ll 1$) также квадратична, то, сравнивая (37) с (10) и учитывая (24), легко получить

$$\Lambda(0) = 2\varepsilon_0 + s_0^2\kappa^2, \quad \Lambda(1) = -\varepsilon_0 \equiv -\left(\frac{s}{a}\right)^2. \quad (38)$$

Если бы мы рассматривали случай $\kappa = 0$, то имели бы в буквальном смысле одномерную задачу о колебаниях кристалла с силовой матрицей следующего вида:

$$\Lambda_{nm} \equiv \Lambda_0(n - m),$$

где

$$\Lambda_0(n - m) = \left\| \begin{array}{cccccc} \dots & 0 & -\varepsilon_0 & 2\varepsilon_0 & -\varepsilon_0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & -\varepsilon_0 & 2\varepsilon_0 & -\varepsilon_0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_0 & 2\varepsilon_0 & -\varepsilon_0 & 0 \dots \end{array} \right\|. \quad (39)$$

Для построения матрицы возмущения, порожденной свободной поверхностью, воспользуемся следующим соображением. Кристалл со свободной поверхностью можно получить из безграничного идеального кристалла разрезом по плоскости $z = 0$ (между слоями с $n = 0$ и $n = 1$) и заменой матрицы $\Lambda_0(n)$ другой силовой матрицей $\Lambda_0^*(n, n') = \Lambda_0(n - n') + U_0(n, n')$, обеспечивающей исчезновение взаимодействия между атомными

плоскостями по обе стороны разреза:

$$\Lambda_0^*(n, m) = \begin{array}{c} \left\| \begin{array}{cccc} \dots & -\varepsilon_0 & 2\varepsilon_0 & -\varepsilon_0 \\ & 0 & -\varepsilon_0 & \varepsilon_0 \end{array} \right\| \begin{array}{c} 0 \\ 0 \end{array} \left\| \begin{array}{c} n=0 \\ n=1 \end{array} \right. \\ \left. \begin{array}{c} 0 \\ \dots \end{array} \right\| \begin{array}{c} \varepsilon_0 & -\varepsilon_0 & 0 \\ -\varepsilon_0 & 2\varepsilon_0 & -\varepsilon_0 & \dots \end{array} \right\| \begin{array}{c} m=0 \\ m=1 \end{array} \end{array} \quad (40)$$

Структуру матрицы $\Lambda_0^*(n, n')$ легко понять, если вспомнить, что силовой матрице идеального кристалла $\Lambda_0(n)$ отвечает потенциальная энергия, интересующие нас (содержащие смещения $u(0)$ и $u(1)$) слагаемые которой равны

$$\begin{aligned} \sum_{n, n'} \Lambda_0(n - n') u(n) u'(n') = \\ = \dots \varepsilon_0 [u(0) - u(-1)]^2 + \varepsilon_0 [u(0) - u(1)]^2 + \\ + \varepsilon_0 [u(1) - u(2)]^2 + \dots = \dots 2\varepsilon_0 [u^2(0) + u^2(1)] - \\ - \varepsilon_0 [u(0)u(1) + u(1)u(0)] + \dots \end{aligned} \quad (41)$$

После разреза и исчезновения некоторых связей соответствующая часть потенциальной энергии изменяется:

$$\begin{aligned} \sum_{n, n'} \Lambda_0^*(n, n') u(n) u(n') = \\ = \dots \varepsilon_0 [u(0) - u(-1)]^2 + \varepsilon_0 [u(1) - u(2)]^2 + \dots = \\ = \dots \varepsilon_0 [u^2(0) + u^2(1)] + \dots \end{aligned} \quad (42)$$

Сравнивая коэффициенты при одинаковых произведениях смещений в (42) и (41), мы приходим к матрице (40), заменяющей силовую матрицу идеального кристалла (39).

Произведем очевидное вычитание $U_0 = \Lambda_0^* - \Lambda_0$ и построим матрицу возмущения:

$$U_0(n, m) = \begin{array}{c} \left\| \begin{array}{ccc} \dots & 0 & 0 \\ & 0 & -\varepsilon_0 \end{array} \right\| \begin{array}{c} 0 \\ 0 \end{array} \left\| \begin{array}{c} n=0 \\ n=1 \end{array} \right. \\ \left. \begin{array}{c} 0 \\ 0 \end{array} \right\| \begin{array}{ccc} \varepsilon_0 & -\varepsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \dots \right\| \begin{array}{c} m=0 \\ m=1 \end{array} \end{array} \quad (43)$$

Следовательно, матрица возмущения, эквивалентного наличию свободной поверхности в соответствующей одномерной задаче, имеет вид

$$U_0(n, m) = -\varepsilon_0 (\delta_{n0}\delta_{m0} + \delta_{n1}\delta_{m1}) + \varepsilon_0 (\delta_{n0}\delta_{m1} + \delta_{n1}\delta_{m0}). \quad (44)$$

При $\kappa \neq 0$ даже в приближении ближайших соседей разрез изменяет не только взаимодействие между атомными слоями $n = 0$ и $n = 1$, но и взаимодействие вдоль каждого из них, поэтому матрицу возмущений при $\kappa \neq 0$ естественно взять несколько отличной от (44):

$$U(n, m) = \left[-\frac{1}{2} \Lambda(0) + \Phi(\kappa) \right] (\delta_{n0}\delta_{m0} + \delta_{n1}\delta_{m1}) - \Lambda(1) (\delta_{n0}\delta_{m1} + \delta_{n1}\delta_{m0}), \quad (45)$$

где функция $\Phi(\kappa)$ учитывает отличие физических условий в атомной плоскости $n = 0$ или $n = 1$ от таковых в остальных кристаллографических плоскостях $z = an = \text{const}$. Так как изучаемые нами уравнения колебаний при $a\kappa \ll 1$ описывают звуковые волны, то функция $\Phi(\kappa)$ должна обращаться в нуль вместе со своим аргументом:

$$\Phi(0) = 0. \quad (46)$$

Учтем соотношение (38) и перепишем (45):

$$U(n, m) = [-\varepsilon_0 + \Psi(\kappa)] (\delta_{n0}\delta_{m0} + \delta_{n1}\delta_{m1}) + \varepsilon_0 (\delta_{n0}\delta_{m1} + \delta_{n1}\delta_{m0}), \quad (47)$$

введя удобное для дальнейшего обозначение

$$\Psi(\kappa) = \Phi(\kappa) - \frac{1}{2} s_0^2 \kappa^2. \quad (48)$$

Подставляя выражение (47) для матрицы возмущения в уравнение (23), мы убеждаемся, что последнее действительно свелось к уравнению для идеального кристалла, содержащего локализованные в двух плоскостях ($n = 0$ и $n = 1$) дефекты. То обстоятельство, что этих плоскостей только две, связано с предположением о взаимодействии только ближайших соседей вдоль направления оси z . Очевидно, что число подобных «дефектных» плоскостей всегда равно числу атомных слоев, взаимо-

действие с которыми учитывается в используемой модели.

Для описания предельно длинноволновых поверхностных колебаний можно воспользоваться переходом от дискретной переменной n к непрерывной координате z и, пользуясь условием $ak_z \ll 1$, произвести замену

$$\delta_{n1} \rightarrow \delta_{n0} \rightarrow a\delta(z).$$

В результате вместо формулы (47) для матрицы $U(n, n')$ получится простое выражение:

$$U(n, n') = 2a^2\psi(\kappa) \delta(z) \delta(z'), \quad (49)$$

совпадающее по форме записи с (25).

Из анализа колебаний решетки вблизи плоского дефекта следует, что локализация колебаний у свободной поверхности кристалла возможна лишь при $\psi(\kappa) < 0$, т. е. лишь при условии $\varphi(\kappa) < s_0^2\kappa^2/2$. Если это условие выполнено, то существуют локализованные у поверхности колебания, амплитуды которых экспоненциально убывают с глубиной, а частоты которых определяются формулой (32). В данном случае эта формула записывается следующим образом:

$$\omega_{\text{л}}^2 = s_0^2\kappa^2 - \frac{1}{\epsilon_0} (a\psi(\kappa))^2. \quad (50)$$

Зависимость частоты (50) от величины κ в значительной мере определяется поведением функции $\varphi(\kappa)$ при малых κ ($a\kappa \ll 1$). Но вопрос об этой зависимости, т. е. фактически вопрос о первом исчезающем члене разложения функции $\varphi(\kappa)$ по степеням κ , требует специального обсуждения. Если буквально следовать принятой нами модели, в которой смещение u является скалярной величиной, то для функции $\varphi(\kappa)$ следовало бы взять квадратичное разложение типа (26). Тогда зависимость $\omega = \omega_{\text{л}}(\kappa)$ для поверхностных колебаний в принципе не будет отличаться от (33).

Однако известно, что поверхностные колебания в упругом полупространстве (волны Рэлея) обладают двумя свойствами, отличающими их от полученных нами колебаний. Во-первых, для существования поверхностных волн в упругой среде не требуется выполнения

специальных условий, т. е. соответствующее возмущение всегда имеет нужный знак. Во-вторых, закон дисперсии поверхностных волн отличается от (33), а именно $\omega = s_{\text{п}}\kappa$, где $s_{\text{п}} < s_0$.

Следовательно, используемая нами модель со скалярным смещением, достаточно удобная для качественного описания объемных колебаний, оказывается в ряде пунктов неудовлетворительной при анализе поверхностных колебаний *). Поэтому на столь упрощенной модели можно проиллюстрировать метод, позволяющий рассматривать свободную поверхность кристалла как плоский дефект, но эту модель нельзя использовать для получения количественных характеристик поверхностных колебаний.

Поверхностные волны в упругом полупространстве (волны Рэлея), рассматриваемые как локализованные у плоского дефекта колебания, описываются по следующей схеме. Уравнения теории упругости для объемных колебаний, происходящих с частотой ω , имеют вид

$$\rho\omega^2 u^k + \lambda_{klmn} \nabla_l \nabla_m u^n = 0,$$

причем в изотропном приближении тензор модулей упругости кристалла сводится к двум коэффициентам Ламе λ и μ :

$$\lambda_{klmn} = \lambda \delta_{ik} \delta_{lm} + \mu (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}).$$

При наличии в теле дефекта, совпадающего с плоскостью $z = 0$, «возмущенные» коэффициенты Ламе можно представить в виде

$$\lambda' = \lambda + Lh\delta(z), \quad \mu' = \mu + Mh\delta(z), \quad (51)$$

где h — «толщина» плоского дефекта, а L и M — характеристики его упругих свойств. Ясно, что такое описание плоского дефекта имеет буквальный смысл лишь

*) Для согласования нашей модели с известными свойствами волн Рэлея необходимо сделать искусственное предположение о том, что функция $\varphi(\kappa)$ всегда имеет такое разложение вблизи $\kappa = 0$:

$$\varphi(\kappa) = -\frac{s_1 s}{a^2} \kappa \equiv -\frac{s_1 s}{a^2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2},$$

где $0 < s_1 < s_0$, а остальные обозначения прежние.

при $hk \ll 1$. Поэтому следует с осторожностью относиться к сингулярным функциям, описывающим пространственную локализацию возмущения в (51). Анализируя в п. 1 колебания у линейного дефекта, мы имели случай убедиться, что использование δ -образного возмущения в длинноволновом приближении приводит к необходимости вводить конечный верхний предел интегрирования по волновым векторам (иначе появляются нефизические расходимости интегралов). Точно так же и в случае возмущения типа (51), вызванного плоским дефектом, в методе преобразований Фурье по оси z необходимо ограничить возможные значения $|k_z|$ некоторой предельной величиной $k_0 \sim 1/h$. В интересующем нас случае значение k_0 должно определяться условием

$$hk_0 = \pi. \quad (52)$$

Если плоским дефектом является свободная поверхность кристалла (именно этот случай нас сейчас интересует), то возмущения упругих модулей должны обеспечить исчезновение связи между упругими полупространствами $z < 0$ и $z > 0$. Последнего, очевидно, можно добиться, положив

$$L = -\lambda, \quad M = -\mu. \quad (53)$$

Подставляя (53) в (51) и используя изложенный выше метод (с учетом условия (52)) нахождения возможных частот поверхностных колебаний, можно убедиться, что эти волны действительно имеют закон дисперсии $\omega = s_{\text{д}}k$, где $s_{\text{д}}$ совпадает с известной скоростью волн Рэлея. Соответствующие вычисления, хотя и являются элементарным развитием уже выполненных нами расчетов, весьма громоздки, и мы не будем их воспроизводить.

§ 10. МЕХАНИКА ОДНОМЕРНОГО КРИСТАЛЛА

1. Изгибные колебания линейной цепочки

Приступая к изучению механических колебаний одномерного кристалла, мы прежде всего обратим внимание на существование двух различных физических объектов, каждый из которых может называться одномерным

кристаллом. Во-первых, представляет интерес рассмотрение периодических линейных структур в трехмерном пространстве. Наиболее известным примером таковых является длинная молекула какого-либо гомополимера. Эти «кристаллы» мы будем называть линейными цепями или линейными кристаллами. Во-вторых, можно формально ограничить число измерений периодической структуры одним измерением и изучать механическое движение в одномерном пространстве.

Мы будем называть одномерным кристаллом только последнюю структуру, используя ее как простейшую модель обычной кристаллической решетки. Ясно, что такое уменьшение размерности пространства значительно упрощает уравнения движения кристалла и позволяет получить многие результаты механики кристаллической решетки в виде замкнутых формул, чего обычно не удастся достичь для трехмерного кристалла.

Начнем с уравнений механики линейной цепи, выделяя в первую очередь те их особенности и свойства, которые присущи только линейным кристаллам. Рассмотрим аналог простой кристаллической решетки, обозначая через a постоянную решетки, а через n — номер атома, отсчитанный от какой-либо точки на цепи (и принимающий значения ряда целых чисел). Тогда уравнение гармонических колебаний периодической линейной системы имеет обычный вид:

$$m\ddot{u}^i(n) = - \sum_{n'} \alpha^{ik}(n - n') u^k(n') \quad (i, k = 1, 2, 3), \quad (1)$$

и в его записи содержится лишь одна специфическая особенность: нумерация атомов производится с помощью целочисленного индекса n , а не трехмерного вектора $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$, как было раньше. Поэтому мы можем воспользоваться всеми прежними результатами анализа уравнения гармонических колебаний, считая, что вектор \mathbf{n} обладает только одной компонентой. Если направить ось z вдоль цепи, то следует положить $\mathbf{n} = (0, 0, n)$.

Элементы силовой матрицы $\alpha^{ik}(n)$ для простой решетки симметричны по индексам i, k , являются четными

функциями n и связаны соотношением

$$\sum_n \alpha^{ik}(n) = 0. \quad (2)$$

Кроме того, в трехмерном пространстве существует обсужденное в § 6 свойство симметрии:

$$\sum_n \alpha^{ik}(n) x_l(n) x_m(n) = \sum_n \alpha^{lm}(n) x_i(n) x_k(n),$$

из которого в линейной системе вытекает требование

$$\sum_n \alpha^{ik}(n) n^2 = 0 \quad (i, k = 1, 2). \quad (3)$$

Легко сообразить, что в нашем случае

$$\alpha^{ik}(n) = \alpha_1(n) \delta_{ik}, \quad \alpha^{iz}(n) = 0 \quad (i, k = 1, 2), \quad (4)$$

и уравнения для различных компонент вектора u разделяются:

$$m\ddot{u}^k(n) = - \sum_{n'} \alpha_1(n - n') u^k(n') \quad (k = 1, 2), \quad (5)$$

$$m\ddot{u}^z(n) = - \sum_{n'} \alpha_0(n - n') u^z(n'), \quad \alpha_0(n) = \alpha^{zz}(n). \quad (6)$$

Обозначим через v одну из компонент, u^x или u^y , вектора u , оставив обозначение u для компоненты u^z . Тогда

$$m\ddot{v}(n) = - \sum_{n'} \alpha_1(n - n') v(n'), \quad (7)$$

$$m\ddot{u}(n) = - \sum_{n'} \alpha_0(n - n') u(n'). \quad (8)$$

Ясно, что уравнение (7) описывает поперечные колебания, а (8) — продольные колебания линейной цепочки. Первые по очевидной причине часто называют изгибными колебаниями.

Закон дисперсии продольных колебаний

$$\omega^2 = \frac{1}{m} \sum_n \alpha_0(n) e^{-iakn} \equiv -\frac{1}{m} \sum_n \alpha_0(n) (1 - e^{-iakn}) \quad (9)$$

ничем не примечателен, и в длинноволновом пределе ($ak \ll 1$) он сводится к стандартной линейной зависимости:

$$\omega = s_0 k, \quad s_0^2 = -\frac{a^2}{2m} \sum_n \alpha_0(n) n^2, \quad (10)$$

где s_0 — скорость звуковых (продольных) колебаний в рассматриваемой системе.

Закон дисперсии поперечных колебаний дается выражением

$$\omega^2 = \frac{1}{m} \sum_n \alpha_1(n) e^{-iakn}. \quad (11)$$

Для изучения закона дисперсии длинноволновых изгибных колебаний (11) можно воспользоваться неоднократно примененным разложением по степеням ak , при реализации которого важно учесть условие (3). Тогда окажется, что при $ak \ll 1$

$$\omega = aAk^2, \quad A^2 = \frac{1}{4!} \frac{a^2}{m} \sum_n \alpha_1(n) n^4. \quad (12)$$

В том приближении, в котором записаны законы дисперсии (10) и (12), уравнения (7) и (8) можно заменить дифференциальными уравнениями, считая u и v непрерывными функциями z :

$$\ddot{u} - s_0^2 u'' = 0, \quad (13)$$

$$\ddot{v} + a^2 A^2 v'''' = 0. \quad (14)$$

В записи (13) и (14) использованы следующие обозначения пространственных производных:

$$u' = \frac{\partial u}{\partial z}, \quad u'' = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad u''' = \frac{\partial^3 u}{\partial z^3}, \quad u'''' = \frac{\partial^4 u}{\partial z^4}.$$

Различие в законах дисперсии (10) и (12), а также в уравнениях (13) и (14) имеет простую физическую причину, о которой говорилось в § 6. Напомним, о чем шла речь. Поскольку в рассматриваемом приближении продольные и поперечные колебания независимы, проанализируем каждый вид движения в отдельности. Если атомы смещаются вдоль оси z , то энергия кристалла определяется их относительными смещениями. Относительное смещение соседних атомов есть $\xi_n = u_n - u_{n-1}$, и в приближении взаимодействия ближайших соседей потенциальная энергия кристалла равна

$$U = \sum_n \varphi(\xi_n) = \sum_n \varphi(u_n - u_{n-1}), \quad (15)$$

причем в гармоническом приближении

$$\varphi(\xi) = \frac{1}{2} \alpha \xi^2, \quad \alpha > 0. \quad (16)$$

Порождающие потенциальную энергию (15) и (16) силы обеспечивают между соседними атомами некоторое подобие пружинной связи с коэффициентом упругости α . Такие силы принято называть центральными силами.

При переходе к длинноволновым колебаниям, когда можно произвести замену $u_n \rightarrow u(z)$, основной член разложения разности ξ_n по степеням a/λ , где λ — характерная длина волны, пропорционален первой производной от $u(z)$ по z :

$$\xi_n = u_n - u_{n-1} = au'(z).$$

Тогда потенциальная энергия кристалла (15) принимает вид функционала

$$U = \int \varphi[au'(z)] \frac{dz}{a}, \quad (17)$$

и в силу (16) плотность энергии φ равна

$$\varphi = \frac{1}{2} \alpha a^2 (u')^2. \quad (18)$$

Из (17) и (18) стандартным путем получается уравнение (13) с $s_0^2 = \alpha a^2/m$.

Если атомы в линейной цепи смещаются перпендикулярно оси z , то в гармоническом приближении центральные силы взаимодействия не возникают, и энергия кристалла

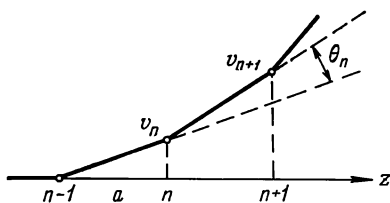


Рис. 35.

зависит не от относительных смещений соседних атомов, а от относительных поворотов отрезков, соединяющих атомы в соседних парах. Предположим, что поперечные смещения всех атомов лежат в одной плоскости, и обозначим угол подобного поворота

через θ (рис. 35). Тогда, как видно из рисунка, при малых θ для ближайших соседей можно записать

$$\theta_n = \frac{1}{a}(v_{n+1} - v_n) - \frac{1}{a}(v_n - v_{n-1}) = \frac{1}{a}(v_{n+1} + v_{n-1} - 2v_n).$$

Следовательно, энергия кристалла при учете нецентральных сил взаимодействия ближайших пар атомов получит дополнительное слагаемое

$$V = \sum_n \psi(a\theta_n) = \sum_n \psi(v_{n+1} + v_{n-1} - 2v_n), \quad (19)$$

и, опять же, в гармоническом приближении

$$\psi(\eta) = \frac{1}{2} \beta \eta^2, \quad \beta > 0. \quad (20)$$

В длинноволновом пределе, когда v_n заменяется непрерывной функцией координаты $v(z)$, главный член разложения угла θ_n по степеням a/λ пропорционален второй производной от $v(z)$ по z :

$$a\theta_n = v_{n+1} + v_{n-1} - 2v_n = a^2 v''(z). \quad (21)$$

Энергия кристалла V принимает вид интеграла по всей длине линейной цепи:

$$V = \int \psi[a^2 v''(z)] \frac{dz}{a},$$

в котором плотность энергии ψ равна

$$\psi = \frac{1}{2}\beta a^1 (v'')^2. \quad (22)$$

Плотность потенциальной энергии (22) приводит к уравнению (14) с $A^2 = \beta a^2/m$.

Сравнение уравнений (14) и (13) показывает, что слабое с производной четвертого порядка в (14) содержит дополнительный малый параметр порядка $(a/\lambda)^2$, отсутствующий у члена с производной второго порядка в уравнении (13). При такой ситуации возникает вопрос о том, можно ли считать достаточным линейное по смещениям приближение, в котором выведены уравнения (13) и (14). Если бы мы учли при выводе этих уравнений квадратичные по смещениям члены типа $v'v''$ или $u'v''$, то отношение последних к члену с v'''' имело бы порядок величины $(\lambda/a)^2 v'$. Но вполне возможны условия, при которых $v' \sim (a/\lambda)^2$, и линейное приближение действительно становится недостаточным. Реальным примером условий, требующих учета указанной нелинейности, служит наличие растягивающих статических усилий, приложенных к концам цепи. Под действием таких сил возникает однородная продольная деформация $u' = \varepsilon_0 = \text{const}$, величина которой зависит от растягивающей нагрузки, а потому может быть не малой.

При построении элементарной нелинейной теории колебаний рассматриваемой цепи ангармонизм следует учитывать только в членах, связанных с центральными силами, а потенциальную энергию малых нецентральных сил V можно вычислять в обычном гармоническом приближении. Если нелинейность действительно вызвана наличием значительной статической деформации $u' = \varepsilon_0$, то энергию кристалла, порожденную центральными силами, по-прежнему можно описывать формулами (15) и (16), вычислив более точно относительное удаление соседних атомов ξ_n . Величина ξ_n должна вычисляться с учетом смещений в направлении, перпендикулярном оси z (рис. 36):

$$\xi_n = \{(a + u_n^z - u_{n-1}^z)^2 + (u_n^x - u_{n-1}^x)^2 + (u_n^y - u_{n-1}^y)^2\}^{1/2} - a. \quad (23)$$

При переходе от дискретного номера n к непрерывной координате z мы ограничимся в разложении величины ξ_n первыми не исчезающими степенями производных от

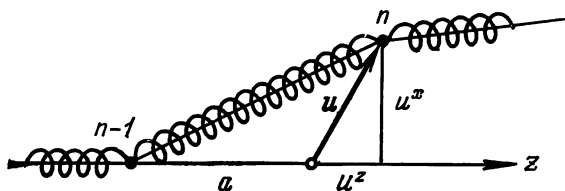


Рис. 36.

каждой из функций $u^x(z)$, $u^y(z)$ и $u^z(z)$:

$$v_n - v_{n-1} = av'(z), \quad (24)$$

$$(a + u_n - u_{n-1})^2 = a^2 [1 + u'(z)]^2 = a^2 (1 + 2u'(z)).$$

Подставив (24) в (23) и продолжив разложение по степеням производных, получим

$$\xi_n = a \left\{ \frac{\partial u^z}{\partial z} + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u^x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u^y}{\partial z} \right)^2 \right] \right\}. \quad (25)$$

Еще раз подчеркнем, что достаточно оставить первые не исчезающие степени производных от различных функций, и под знаком суммы в (15), которая заменится интегралом типа (17), можно положить

$$\xi^2 = a^2 \left\{ \left(\frac{\partial u^z}{\partial z} \right)^2 + \frac{\partial u^z}{\partial z} \left[\left(\frac{\partial u^x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u^y}{\partial z} \right)^2 \right] \right\}. \quad (26)$$

Таким образом, потенциальная энергия центральных сил будет иметь вид функционала:

$$U = \frac{1}{2} \alpha \int \xi^2 \frac{dz}{a}, \quad (27)$$

в котором функция ξ^2 определяется формулой (26).

Полная потенциальная энергия линейной цепи в длинноволновом приближении равна

$$U + V = \frac{1}{2} a^2 \int \left\{ \alpha \left(\frac{\partial u^z}{\partial z} \right)^2 + \alpha \frac{\partial u^z}{\partial z} \left[\left(\frac{\partial u^x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u^y}{\partial z} \right)^2 \right] + a^2 \beta \left[\left(\frac{\partial^2 u^x}{\partial z^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 u^y}{\partial z^2} \right)^2 \right] \right\} \frac{dz}{a}. \quad (28)$$

С помощью обычной процедуры функционального дифференцирования из выражения (28) получим силы, действующие на колеблющиеся атомы, и запишем уравнения движения, обобщающие (13) и (14). Легко проверить, что при этом в уравнении для функции $u(z, t)$ появятся слагаемые, всегда заведомо меньшие основного члена со второй пространственной производной $s^2 u''$. Поэтому их можно не учитывать, оставляя уравнение (13) без изменений. Что же касается уравнений для функций $v(z, t)$, то из (28) следует, что они принимают вид

$$\frac{\partial^2 v}{\partial t^2} = s_0^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) - a^2 A^2 \frac{\partial^4 v}{\partial z^4}. \quad (29)$$

Если линейная цепочка свободна (статическое натяжение отсутствует), то оба нелинейных члена в (29) имеют одинаковый порядок величины и оба малы. Если же под действием внешних усилий создается значительная статическая однородная деформация $u'_0 = \varepsilon_0$, то в уравнении (29) можно положить $\partial u / \partial z = \varepsilon_0 = \text{const}$, и тогда оно сведется к следующему:

$$\ddot{v} = \varepsilon_0 s_0^2 v'' - a^2 A^2 v'''' . \quad (30)$$

Уравнению (30) отвечает закон дисперсии

$$\omega^2 = \varepsilon_0 s_0^2 k^2 + a^2 A^2 k^4. \quad (31)$$

Мы видим, что при $ak \ll \sqrt{\varepsilon_0 s_0} / A$ имеет место характерная для акустической ветви зависимость

$$\omega = \sqrt{\varepsilon_0 s_0} k = sk \quad (32)$$

с малой скоростью звука $s = \sqrt{\varepsilon_0 s_0}$. Таким образом, предельно длинноволновый закон дисперсии изгибных колебаний линейной цепи, подвергнутой статическому продольному натяжению, качественно не отличается от закона дисперсии продольных колебаний этой цепи.

В области длин волн, для которых $\sqrt{\varepsilon_0 s_0} / A \ll ak \ll 1$ мы возвращаемся к типичному закону дисперсии волн изгиба (12).

Любопытно заметить, что закон дисперсии, аналогичный (31), мы уже встречали при анализе волн изгиба в кристалле с сильно анизотропной структурой (§ 6). В частно-

сти, закон дисперсии (31) эквивалентен закону дисперсии поперечных изгибных колебаний кристалла с игольчатой структурой. Эту эквивалентность законов дисперсии можно трактовать как указание на то, что параллельное соединение линейных цепей некоторыми слабыми связями в трехмерный кристалл создает в каждой из отдельных цепочек эффективное продольное натяжение. Появление этого натяжения делает закон дисперсии волн изгиба более «жестким» в длинноволновом пределе.

2. Особенности плотности колебаний одномерного кристалла

Перейдем к собственно одномерному кристаллу, т. е. к периодической дискретной структуре в одномерном пространстве. Колебательное движение одномерного кристалла с простой структурой (с одним атомом на элементарную ячейку) характеризуется одним скалярным смещением $u(n)$ и описывается уравнением движения, являющимся частным случаем уравнения (1):

$$m\ddot{u}(n) = - \sum_{n'} \alpha(n - n') u(n'). \quad (33)$$

Силовая матрица $\alpha(n)$ удовлетворяет очевидным условиям

$$\alpha(n) = \alpha(-n), \quad \sum_n \alpha(n) = 0,$$

поэтому закон дисперсии колебаний одномерного кристалла дается выражением

$$\omega^2 = - \frac{1}{m} \sum_n \alpha(n) [1 - \cos(akn)]. \quad (34)$$

Длинноволновые колебания одномерного кристалла ($ak \ll 1$) имеют обычный акустический спектр типа (10), где вместо $\alpha_0(n)$ следует подставить $\alpha(n)$. Уравнение движения (33) в случае длинных волн заменяется волновым уравнением, эквивалентным (13):

$$\ddot{u} - s_0^2 u'' = 0. \quad (35)$$

Непрерывную координату, определяющую положение точки в одномерном кристалле, будем обозначать через x . Тогда $u'' = \partial^2 u / \partial x^2$. Напомним, что решением уравнения (35) является любая дважды дифференцируемая функция, зависящая от аргумента $x - s_0 t$ (если волна бежит в положительном направлении оси x) или $x + s_0 t$ (если волна бежит в обратном направлении).

При учете взаимодействия только ближайших соседей получим вместо (34)

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \omega_m^2 (1 - \cos ak) = \omega_m^2 \sin^2 \frac{ak}{2}, \quad (36)$$

где ω_m — верхняя граница полосы возможных частот колебаний ($2s_0 = a\omega_m$).

Очень важно, что зависимость частоты ω от k , задаваемая соотношением (36), определяет монотонную функцию в интервале значений квазиволнового числа $(0, \pi/a)$. Это означает, что во внутренних точках интервала $(0, \omega_m)$ функция распределения частот (или плотность колебаний) одномерного кристалла с таким законом дисперсии не имеет никаких особенностей. Действительно, из определения функции распределения частот $\nu(\omega)$ и формулы (36) следует

$$\nu(\omega) = \frac{L}{2\pi} \frac{2dk}{d\omega} = \frac{2N}{\pi \sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}, \quad (37)$$

где N — число атомов в кристалле ($L = aN$).

Плотность колебаний $g(\varepsilon)$ одномерного кристалла с взаимодействием ближайших соседей равна ($\varepsilon = \omega^2$)

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi \sqrt{\varepsilon(\omega_m^2 - \varepsilon)}}. \quad (38)$$

Таким образом, простейший пример показывает, что спектральные характеристики одномерного кристалла отличаются от таковых для трехмерного (и двухмерного) кристалла тем, что могут не обладать сингулярностями внутри полосы сплошного спектра. Что же касается особенностей на концах интервала непрерывного спектра, то они более сильные, чем у трехмерного кристалла. Из (38) следует, что при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_K$, где ε_K — край непрерывного

спектра,

$$g(\varepsilon) \propto \frac{1}{\sqrt{|\varepsilon - \varepsilon_K|}}, \quad (39)$$

в то время как для трехмерного кристалла

$$g(\varepsilon) \propto \sqrt{|\varepsilon - \varepsilon_K|}.$$

Если закон дисперсии (34) определяет немонотонную зависимость ω от k (типа изображенной на рис. 37), то в

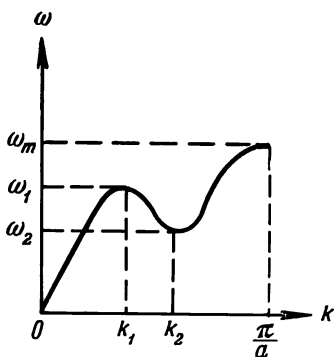


Рис. 37.

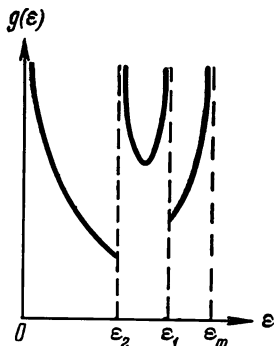


Рис. 38.

точках $\omega = \omega_1$ и $\omega = \omega_2$ спектральные характеристики колебаний одномерного кристалла будут иметь своеобразные особенности. Действительно, пусть вблизи точки $k = k_1$ и $\omega = \omega_1$ закон дисперсии имеет вид

$$\omega^2 = \omega_1^2 - \gamma_1^2 (k - k_1)^2.$$

Тогда вклад этого участка закона дисперсии в плотность колебаний легко определяется:

$$\delta g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{dk}{d\varepsilon} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi\gamma_1 \sqrt{\varepsilon_1 - \varepsilon}}, & \varepsilon < \varepsilon_1; \\ 0, & \varepsilon > \varepsilon_1 = \omega_1^2. \end{cases} \quad (40)$$

Аналогично, если записать закон дисперсии вблизи точки $k = k_2$ и $\omega = \omega_2$ в виде

$$\omega^2 = \omega_2^2 + \gamma_2^2 (k - k_2)^2,$$

то соответствующий вклад в плотность колебаний будет равен

$$\delta g(\varepsilon) = \begin{cases} 0 & , \quad \varepsilon < \varepsilon_2 = \omega_2^2; \\ \frac{1}{2\pi\gamma_2 \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_2}} & , \quad \varepsilon > \varepsilon_2. \end{cases} \quad (41)$$

Схематический график плотности колебаний для одномерного кристалла в том случае, когда интервал $(0, \omega_m)$ содержит две особые точки $\varepsilon = \varepsilon_1$ (максимум) и $\varepsilon = \varepsilon_2$ (минимум), приведен на рис. 38.

3. Возмущение типа ударной волны в одномерном кристалле

Гармоническое приближение, которым мы фактически ограничивались при изучении механики кристаллической решетки, хорошо описывает малые возмущения кристалла, когда амплитуда смещений в определенном смысле мала. Но в ряде случаев возникает необходимость описывать движение атомов кристалла, сопровождающееся заведомо не малыми их смещениями. В одномерном кристалле примером подобной задачи является следующая ситуация.

Допустим, что некоторая ударная нагрузка, приложенная к одному концу кристалла (условно, при $x = -\infty$, если x — координата в одномерном кристалле), создает у крайних атомов относительное смещение порядка величины постоянной решетки. Тогда естественно поставить вопрос: возможно ли такое движение атомов кристалла, при котором возникшее на одном его конце сильное возмущение будет перемещаться вдоль кристалла, практически не изменяя своей формы?

Если связанные с этим возмущением градиенты смещений достаточно малы, то в рамках гармонического приближения на поставленный вопрос существует положительный ответ. Действительно, в этом случае смещение атомов u описывается линейным дифференциальным уравнением (35), решением которого, как мы уже отмечали, служит любая функция аргумента $x - s_0 t$. Следовательно, смещение $u = u(x - s_0 t)$, где функция $u(x)$ имеет график, изображенный на рис. 39, является одной из возможных

реализаций интересующего нас движения. При этом на функцию $u(x)$ не накладывается никаких специальных ограничений, кроме требования большой длины переходной области: $\Delta x \gg a$. Но если гармоническое приближение оказывается недостаточным, то ответ на поставленный вопрос становится не очевидным. Ниже мы обсудим этот вопрос на примере ангармонического взаимодействия атомов весьма естественного, хотя и специального типа.

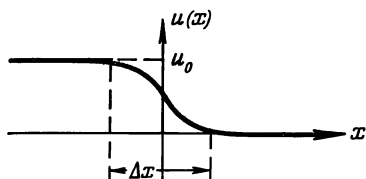


Рис. 39.

Для упрощения выкладок рассмотрим одномерный кристалл с взаимодействием только ближайших соседей, т. е. положим, что потенциальная энергия кристалла имеет вид суммы (15). Однако функцию $\varphi(\xi)$ будем считать отличной от (16) и сводящейся к параболической зависимости (16) лишь при $\xi \rightarrow 0$. Уравнение движения такого кристалла имеет вид

$$m\ddot{u}_n = \varphi'(u_{n+1} - u_n) - \varphi'(u_n - u_{n-1}). \quad (42)$$

В случае не очень больших относительных смещений можно принять

$$\varphi'(\xi) = \varphi''(0)\xi + \frac{1}{2}\varphi'''(0)\xi^2, \quad (43)$$

ограничившись так называемым кубическим ангармонизмом.

Будем интересоваться такими решениями уравнения (42), поведение которых соответствует графику на рис. 39, т. е. удовлетворяющими граничным условиям

$$u(-\infty) = u_0, \quad u(+\infty) = 0. \quad (44)$$

Кроме того, предположим, что переходная область у этих функций достаточно широкая: $\Delta x \gg a$. Последнее позволяет перейти к непрерывному рассмотрению, т. е. к замене функций дискретного аргумента n функциями непрерывной координаты x и к использованию разложений

$$\begin{aligned} \xi_{n+1} = u_{n+1} - u_n &= au' + \frac{1}{2}a^2u'' + \frac{1}{3!}a^3u''' + \frac{1}{4!}a^4u'''' \\ \xi_n = u_n - u_{n-1} &= au' - \frac{1}{2}a^2u'' + \frac{1}{3!}a^3u''' - \frac{1}{4!}a^4u'''' \end{aligned} \quad (45)$$

В разложениях (45) оставлены члены с производными четвертого порядка, поскольку анализ изгибных колебаний линейной цепочки показал нам, что соответствующие члены в уравнениях движения могут конкурировать с членами, обусловленными нелинейностью.

Нелинейные слагаемые в (42) будем вычислять в первом исчезающем приближении с наиболее низкими порядками производных. Поэтому примем в них на основании (45)

$$\xi_{n+1}^2 = a^2 (u')^2 + a^3 u' u'', \quad \xi_n^2 = a^2 (u')^2 - a^3 u' u''. \quad (46)$$

Подставим (45) и (46) в (43) и (42):

$$m\ddot{u} = a^2 \varphi''(0) \left[u'' + \frac{1}{12} a^2 u'''' \right] + a^3 \varphi'''(0) u' u''. \quad (47)$$

Введем обозначения

$$s_0^2 = \frac{a^2}{m} \varphi''(0), \quad B^2 = \frac{1}{12} s_0^2, \quad \Lambda^2 = -\frac{a^3}{m} \varphi'''(0) \quad (48)$$

и запишем уравнение движения (47) в виде хорошо известного в теории нелинейных волн уравнения:

$$\ddot{u} = s_0^2 u'' + a^2 B^2 u'''' - \Lambda^2 u' u''. \quad (49)$$

Поскольку по мере сближения атомов их взаимное отталкивание нарастает, а по мере удаления — их притяжение убывает, то можно считать $\varphi'''(0) < 0$, чем мы и воспользовались при введении обозначений (48). Кроме того, хотя полученная нами простая связь параметров B и s_0 является следствием предположения о взаимодействии только ближайших соседей, естественно всегда считать коэффициент при u'''' положительным. В самом деле, закон дисперсии гармонических колебаний одномерного кристалла обычно таков, что групповая скорость $\partial\omega/\partial k$ убывает с ростом k при малых k . Но для обеспечения такого убывания в нашем приближении обсуждаемый коэффициент должен быть положительным.

После формулировки условий вывода и записи уравнения (46) найдем его точное решение, подчиняющееся требованиям (44). Прежде всего заметим, что мы

безусловно сможем получить решение типа

$$u(x, t) = f(x - st), \quad s = \text{const}, \quad (50)$$

если функция $u(x, t)$ будет удовлетворять волновому уравнению. Поэтому достаточно найти нужное решение обыкновенного дифференциального уравнения

$$a^2 B^2 u'''' - \Lambda^2 u' u'' - \gamma s_0^2 u'' = 0, \quad (51)$$

содержащего некоторый произвольный параметр γ .

Введем новые обозначения *)

$$\alpha = \frac{\Lambda}{aB}, \quad \beta = \frac{\gamma s_0^2}{a^2 B^2}, \quad (52)$$

упростив запись уравнения (51):

$$u'''' - \alpha^2 u' u'' - \beta u'' = 0. \quad (53)$$

Проинтегрируем (53) по x :

$$u''' - \frac{1}{2} \alpha^2 (u')^2 - \beta u' = C_1 = \text{const}. \quad (54)$$

Умножим (54) на u'' и проинтегрируем еще раз:

$$\frac{1}{2} (u'')^2 - \frac{1}{6} \alpha^2 (u')^3 - \frac{1}{2} \beta (u')^2 - C_1 u' = C_2 = \text{const}. \quad (55)$$

Обозначим, как обычно делается,

$$p = u', \quad \frac{dp}{dx} = u''. \quad (56)$$

Тогда вместо (55) будем иметь нелинейное уравнение первого порядка:

$$\left(\frac{dp}{dx} \right)^2 = \frac{1}{3} \alpha^2 p^3 + \beta p^2 + 2C_1 p + 2C_2. \quad (57)$$

В силу граничных условий (44) и определений (56)

$$p = 0, \quad \frac{dp}{dx} = 0 \quad \text{при} \quad x = \pm \infty. \quad (58)$$

*) Параметры α и β в (52) не имеют отношения к параметрам, обозначенным этими же буквами в предыдущем разделе.

Поэтому мы должны искать решение уравнения (57), удовлетворяющее условию $dp/dx = 0$ при $p = 0$. Следовательно, $C_2 = 0$. Разрешив (57) относительно dp/dx , мы находим неявную зависимость $p = p(x)$:

$$\int_0^p \frac{dp}{\sqrt{\frac{1}{3} \alpha^2 p^3 + \beta p^2 + 2C_1 p}} = \pm x. \quad (59)$$

Эта зависимость, как следует из (58), должна давать $x = \pm \infty$ при $p = 0$. Последнее возможно, если интеграл в (59) расходится, когда $p \rightarrow 0$, т. е. только в случае $C_1 = 0$.

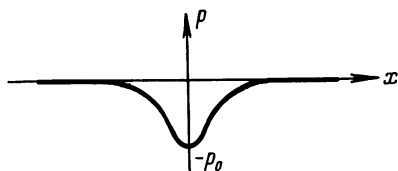


Рис. 40.

Итак, нужное нам решение $p = p(x)$ мы можем определить как четную функцию x (см. рис. 40), которая при $x > 0$ дается соотношением

$$\int_{-p_0}^p \frac{dp}{p \sqrt{p + p_0}} = \frac{\alpha}{\sqrt{3}} (x - x_0), \quad x_0 = \text{const}, \quad (60)$$

где $p_0 = 3\beta/\alpha^2$. Интеграл в (60) легко вычисляется, и мы получаем

$$\begin{aligned} \frac{du}{dx} \equiv p &= p_0 \left\{ \text{th}^2 \left[\frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{p_0}{3}} (x - x_0) \right] - 1 \right\} = \\ &= -p_0 \text{sch}^2 \left[\frac{1}{2} \sqrt{\beta} (x - x_0) \right]. \end{aligned} \quad (61)$$

Наконец, выполняя последнее интегрирование уравнения (61), запишем искомую функцию $u(x)$ в виде

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{2p_0}{\sqrt{\beta}} \left\{ 1 - \text{th} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\beta} (x - x_0) \right] \right\} = \\ &= \frac{6\sqrt{\beta}}{\alpha^2} \left\{ 1 - \text{th} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\beta} (x - x_0) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (62)$$

Если выбрать β на основании условия $u(-\infty) = u_0$, т. е. положить

$$\sqrt{\beta} = \frac{\alpha^2 u_0}{6}, \quad (63)$$

то после очевидных преобразований формула (62) для смещений примет вид

$$u(x) = \frac{u_0}{1 + \exp[(\alpha^2 u_0/6)(x - x_0)]}, \quad (64)$$

где параметр α определяется формулой (52).

Таким образом, нелинейное дифференциальное уравнение (51) имеет искомое решение (64) только в том случае, если параметр γ вполне определенным образом связан с амплитудой u_0 , а именно:

$$\gamma = \frac{a^2 B^2}{s_0^2} \beta = \left(\frac{\Lambda^2 u_0}{6 a s_0 B} \right)^2. \quad (65)$$

Потребуем, наконец, чтобы найденное решение уравнения (51) являлось также решением уравнения (49). Если мы положим в (64) $x_0 = st$, то окажется, что нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных (49) обладает решением

$$u(x) = \frac{u_0}{1 + \exp[(\alpha^2 u_0/6)(x - st)]}, \quad (66)$$

в котором скорость s определяется равенством

$$s^2 = s_0^2 (1 + \gamma) = s_0^2 \left[1 + \left(\frac{\Lambda^2 u_0}{6 a s_0 B} \right)^2 \right]. \quad (67)$$

Следовательно, вдоль одномерного кристалла может распространяться, не деформируясь, специфическое «ступенчатое» возмущение, скорость перемещения которого s больше скорости звука в кристалле ($s > s_0$). Основные характеристики такого возмущения, а именно, его скорость и крутизна «ступеньки», однозначно определяются амплитудой возмущения u_0 . Другими словами, при заданной амплитуде u_0 возможно единственное решение уравнения (49) типа (66). С увеличением u_0 скорость s возрастает в соответствии с зависимостью (67), а ширина

переходной области убывает по гиперболическому закону. В случае значительных амплитуд u_0 область размытия «ступеньки» Δx становится малой, и при макроскопическом описании состояния кристалла решение (66) естественно заменить разрывной функцией

$$u(x, t) = \begin{cases} u_0, & x - st < 0; \\ 0, & x - st > 0. \end{cases} \quad (68)$$

Движущийся вдоль оси x разрыв является типичной ударной волной в одномерной среде, поэтому решение нелинейного уравнения (66) можно рассматривать как длинноволновое описание «тонкой структуры» ударной волны.

Воспользуемся соотношениями (63), (65), (67) и выразим входящий в запись (62) параметр β через скорость движения «ступеньки»:

$$u(x, t) = \frac{6aB}{\Lambda^2} \sqrt{s^2 - s_0^2} \left\{ 1 - \text{th} \left[\frac{\sqrt{s^2 - s_0^2}}{2aB} (x - st) \right] \right\}. \quad (69)$$

Мы видим, что по мере уменьшения скорости волны s ее интенсивность ослабляется, возмущение делается все менее резким и в пределе $s \rightarrow s_0$ оно полностью размывается.

4. Одномерная модель дислокации (модель Френкеля — Конторовой)

Вернемся к одномерному кристаллу как дискретной периодической структуре и дадим другое физическое истолкование рассмотренного в предыдущем разделе возмущения. Положим в формуле (66) $u_0 = a$ (a — постоянная решетки) и будем помнить, что $x = na$. Тогда, как легко убедиться, решение

$$u(x) = \frac{a}{1 + \exp[(a\alpha^2/6)(x - st)]}, \quad (70)$$

где $s^2 = s_0^2 + (\Lambda^2/6B)^2$ описывает перемещение «лишнего атома» вдоль одномерного кристалла.

Действительно, при $x = -\infty$ имеем $u = a$, и потому все атомы этого конца переведены в соседние равновесные положения, из которых «вытеснены» занимавшие их прежде атомы. При $x = +\infty$ кристалл остается недеформированным.

рованным ($u = 0$), т. е. все атомы находятся на своих местах. Но поскольку количество атомов в кристалле фиксировано, то в окрестности точки $x = x_0 = st$ число атомов оказывается на единицу больше числа статических положений равновесия (рис. 41).

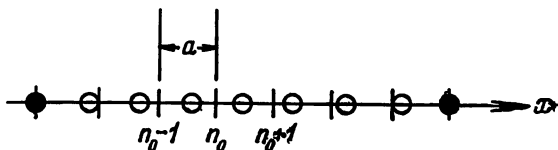


Рис. 41.

В соответствии с (70) изображенная на рис. 41 конфигурация атомов может существовать только как динамическое образование, движущееся с вполне определенной скоростью s , превышающей скорость звука ($s > s_0$). Но если иметь в виду использование одномерного кристалла как модели для анализа некоторых видов движения в трехмерной решетке, то полезно сделать такое обобщение модели, при котором рассмотренное в предыдущем разделе «ступенчатое» возмущение может перемещаться со скоростью, меньшей скорости звука s_0 , включая $s = 0$. Другими словами, модель должна допускать существование соответствующих неподвижных, т. е. статически равновесных, образований.

Предположим, что одномерный кристалл находится в заданном внешнем периодическом поле, период которого совпадает с постоянной одномерной решетки a . Тогда энергия кристалла будет определяться не только относительным смещением соседних атомов, но и абсолютным смещением отдельных атомов во внешнем потенциальном поле. Запишем эту дополнительную энергию кристалла в виде

$$W = \sum_n F(u_n), \quad F(u + a) = F(u). \quad (71)$$

Если смещения u малы, то

$$F(u) = \frac{1}{2} K^2 u^2, \quad K^2 = F''(0) > 0, \quad (72)$$

и потому учет энергии (71), (72) при изучении малых колебаний кристалла привел бы к появлению в законе дисперсии $\omega = \omega(k)$ отличной от нуля частоты предельно длинноволновых колебаний

$$\omega(0) = \sqrt{K/m}.$$

Теперь представим себе, что цепочка атомов, изображенных на рис. 41, является крайним атомным рядом одной половины плоского кристалла ($y > 0$ на рис. 42), сдвинутой определенным образом относительно второй половины кристалла ($y < 0$ на рис. 42). Тогда воз-

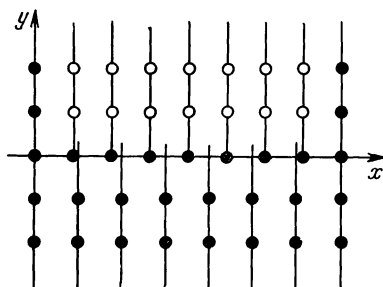


Рис. 42.

действие несдвинутой половины кристалла на расположенные вдоль оси x атомы качественно можно описать с помощью энергии (71).

Изображенная на рис. 42 конфигурация кристаллографических рядов, при которой над осью x имеется лишняя половина атомного ряда, носит название *дислокации в кристалле*. Следовательно, интересующая нас задача о возникновении «ступенчатого» возмущения в одномерном кристалле с дополнительной потенциальной энергией (71) является аналогом задачи о дислокации в двухмерном или трехмерном кристалле. В подобной формулировке задача о дислокации впервые была решена *Я. И. Френкелем и Т. А. Конторовой* (1938), потому соответствующая модель носит их имя. В модели Френкеля — Конторовой сделано еще дополнительное предположение о простом виде функции $F(u)$:

$$F(u) = \frac{1}{2} \tau^2 \sin^2 \frac{\pi u}{a}, \quad (73)$$

но последнее представляется не принципиальным.

Нелинейность, заключенная в функции $F(u)$ типа (73), является основной в модели Френкеля — Конторовой, поэтому межатомное взаимодействие ближайших соседей вдоль одномерного кристалла достаточно учесть в обычном

гармоническом приближении. Иными словами, уравнение движения кристалла следует взять в виде

$$m\ddot{u}(n) = \alpha_0 [u(n+1) + u(n-1) - 2u(n)] + mf(u_n), \quad (74)$$

где $mf(u) = -dF/du$.

Если заранее ограничиться случаем длинных волн ($\lambda \gg a$), то можно перейти к континуальному рассмотрению, заменив уравнение (74) уравнением в частных производных:

$$\ddot{u} = s_0^2 u'' + f(u), \quad s_0^2 = \frac{a^2 \alpha_0}{m}. \quad (75)$$

Имея в виду результаты предыдущего раздела, будем искать решение уравнения (75) в виде

$$u = u(x - st), \quad s = \text{const}, \quad (76)$$

где функция $u(x)$ удовлетворяет граничным условиям (44) и имеет график типа изображенного на рис. 39. Подставим (76) в (75):

$$(s_0^2 - s^2) u'' + f(u) = 0. \quad (77)$$

Умножая (77) на u' и выполняя интегрирование, получим

$$\frac{du}{dx} = \pm \frac{1}{s^*} \sqrt{\frac{2}{m} F(u)}, \quad (78)$$

где

$$s^* = \sqrt{s_0^2 - s^2}. \quad (79)$$

Искомое решение уравнения (78) $u = u(x)$ записывается в квадратурах:

$$\int_u^{a/2} \frac{du}{\sqrt{F(u)}} = \sqrt{\frac{2}{m}} \frac{x - x_0}{s^*}, \quad x_0 = \text{const}. \quad (80)$$

Помня выражение (72) для функции $F(u)$ при малых u , легко убедиться, что соотношение (80) действительно определяет непрерывную монотонно убывающую функцию $u(x)$, удовлетворяющую условиям (44), если только параметр s^* веществен, т. е. если скорость перемещения соответствующего возмущения меньше скорости звука ($s < s_0$).

Наличие «ступеньки», т. е. достаточно резкого перехода от $u = a$ к $u = 0$ на графике функции $u = u(x)$, демонстрируется асимптотическим поведением решения (80) при $x \rightarrow \pm \infty$. Рассмотрим асимптотику для $x \rightarrow +\infty$, когда $u \rightarrow 0$ и основную роль в интеграле формулы (80) играют малые u , для которых верно разложение (72):

$$\int^u \frac{du}{u} = -\frac{Kx}{s^* \sqrt{m}}, \quad x \rightarrow +\infty. \quad (81)$$

Из (81) следует асимптотическая формула

$$u = u^* \exp\left\{-\frac{Kx}{s^* \sqrt{m}}\right\}, \quad x \rightarrow +\infty, \quad (82)$$

где параметр u^* имеет порядок величины максимального смещения атома: $u^* \sim a$.

Точно так же можно получить асимптотику при $x \rightarrow -\infty$, когда в интеграле основную роль играют u , близкие к a :

$$a - u = u^* \exp\left(\frac{Kx}{s^* \sqrt{m}}\right), \quad x \rightarrow -\infty. \quad (83)$$

Анализ асимптотик (82) и (83) позволяет заключить, что ширина переходной области Δx на графике функции $u = u(x)$ по порядку величины равна

$$\Delta x \sim \frac{\sqrt{m}}{K} \sqrt{s_0^2 - s^2}. \quad (84)$$

Характерно, что с ростом скорости дислокации s крутизна спада функции $u(x)$ увеличивается, и в пределе $s \rightarrow s_0$ функция, определяемая соотношением (80), заменяется разрывной функцией (68).

Конкретное поведение анализируемого решения (80) в малой окрестности точки $x = x_0$, естественно, определяется точным видом потенциала $F(u)$. Если взять для функции $F(u)$ выражение (73), то интегрирование в (80) может быть выполнено явпо:

$$\operatorname{tg} \frac{\pi u}{2a} = \exp\left\{-\frac{\pi \tau (x - x_0)}{as^* \sqrt{m}}\right\}, \quad (85)$$

или же

$$u = \frac{2a}{\pi} \operatorname{arctg} \exp \left\{ -\frac{\pi\tau(x-x_0)}{as^* \sqrt{m}} \right\}. \quad (86)$$

Наконец, возвращаясь к полной зависимости от координат и времени (75) и подставляя выражение (79) для s^* , получим окончательную формулу для смещений:

$$u(x, t) = \frac{2a}{\pi} \operatorname{arctg} \exp \left\{ -\frac{\pi\tau}{a \sqrt{m}} \frac{x-st}{\sqrt{s_0^2 - s^2}} \right\}. \quad (87)$$

Столь же легко вычисляются смещения атомов в одномерном кристалле с движущейся дислокацией, если потенциал $\bar{F}(u)$ взять в виде

$$\begin{aligned} F(u) &= \frac{1}{2} \sigma^2 u^2 (a-u)^2, \quad 0 < u < a, \\ F(-u) &= F(u), \quad F(u+a) = F(u). \end{aligned} \quad (88)$$

Элементарное интегрирование в (80) с функцией (88) и столь же элементарные преобразования приводят нас к следующему результату:

$$u(x, t) = \frac{a}{1 + \exp \left[\frac{a\sigma}{\sqrt{m}} \frac{x-st}{\sqrt{s_0^2 - s^2}} \right]}. \quad (89)$$

В отличие от (70), где скорость s фиксирована, скорость движения возмущения типа (87) или (89) может принимать любые значения в интервале $0 < s < s_0$, и ее величина определяется полной энергией дислокации.

ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

§ 11. МАКРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ИЗОЛИРОВАННЫХ ДЕФЕКТОВ

1. Основные понятия и теоремы механики сплошной среды

Мы приступаем к изучению физической природы тех механических свойств кристалла, в возникновении и проявлении которых определяющую роль играют дефекты кристаллической решетки. Наиболее изученными и хорошо известными примерами таких свойств являются различные виды пластичности реальных кристаллов, и именно на них мы сосредоточим свое внимание. Однако пластичность, как и упругость кристалла, есть макроскопическое свойство твердого тела, и ее описание удобно вести в макроскопических терминах, т. е. на языке механики сплошной упругой среды. Поэтому нам представляется полезным начать с записи основных соотношений теории упругости, на которые придется опираться в дальнейшем.

При макроскопическом (или, как иногда говорят, континуальном) описании деформации кристалла исходным обычно служит понятие вектора смещений u как функции координат $r(x, y, z)$ и времени t : $u = u(r, t)$. Из пространственных производных вектора смещений строится тензор деформаций ($i, k = 1, 2, 3$)

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \equiv \frac{1}{2} (\nabla_i u_k + \nabla_k u_i), \quad (1)$$

который является основной геометрической характеристикой деформированного состояния среды.

Напомним, что сумма диагональных элементов тензора ε_{ik} , т. е. величина ε_{kk} , равна относительному увеличению объема элемента среды при деформации. Следовательно,

полное изменение объема тела ΔV при деформации может быть записано в виде

$$\Delta V = \int \epsilon_{kk} dV. \quad (2)$$

Производная по времени от вектора u определяет скорость смещений: $v = \dot{u}$. Если деформация кристалла происходит при сохранении сплошности среды (в кристалле не происходит, например, образования разрывов, трещин, каверн и т. п.), то скорость смещений удовлетворяет уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho v = 0, \quad (3)$$

в котором ρ — плотность кристалла (масса его единицы объема).

Силы внутренних напряжений, возникающих при деформации кристалла, характеризуются симметричным тензором напряжений σ_{ik} . В случае гидростатического сжатия кристалла давлением p тензор σ_{ik} имеет очень простой вид:

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik}. \quad (4)$$

На основании (4) величину

$$p_0 = -\frac{1}{3}\sigma_{kk} \quad (5)$$

называют *средним гидростатическим давлением* даже в том случае, когда тензор напряжений не совпадает с (4) и описывает более сложное напряженное состояние кристалла. Отличие тензора σ_{ik} от выражения (4) свидетельствует о наличии в кристалле сдвиговых напряжений, которые обычно характеризуются *тензором-девиатором* σ'_{ik} , равным

$$\sigma'_{ik} = \sigma_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\sigma_{ll} = \sigma_{ik} + \delta_{ik}p_0. \quad (6)$$

Если деформация кристалла чисто упругая, то напряжения σ_{ik} связаны с деформациями ϵ_{ik} линейными соотношениями закона Гука:

$$\sigma_{ik} = \lambda_{iklm}\epsilon_{lm}, \quad (7)$$

где λ_{iklm} — тензор модулей упругости кристалла. В кристалле кубической сингонии имеются три независимых упругих модуля:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \lambda_{1111} = \lambda_{2222} = \lambda_{3333}, \\ \lambda_2 &= \lambda_{1122} = \lambda_{1133} = \lambda_{2233}, \\ G &= \lambda_{1212} = \lambda_{1313} = \lambda_{2323}.\end{aligned}\quad (8)$$

В изотропном приближении эти три модуля связаны одним соотношением

$$\lambda_1 - \lambda_2 - 2G = 0,$$

поэтому тензор λ_{iklm} для изотропной среды сводится к двум независимым модулям, в качестве которых можно взять, например, коэффициенты Ламе $\lambda = \lambda_2$ и G :

$$\lambda_{iklm} = \lambda \delta_{ik} \delta_{lm} + G (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}). \quad (9)$$

Коэффициент G в (8) и (9), который часто обозначается буквой μ , носит название модуля сдвига и связывает недиагональные («косые») элементы тензоров σ_{ik} и ε_{ik} в изотропной среде и в кубическом кристалле:

$$\sigma_{ik} = 2G\varepsilon_{ik}, \quad i \neq k. \quad (10)$$

Полезно указать также на очевидную связь между средним гидростатическим давлением p_0 и относительным всесторонним сжатием изотропной среды или кубического кристалла. Из (7), (8) и (9) следует, что

$$\sigma_{ii} = 3K\varepsilon_{ii}, \quad (11)$$

где K — модуль всестороннего сжатия, который в кубическом кристалле определяется соотношением

$$3K = \lambda_1 + 2\lambda_2, \quad (12)$$

а в изотропной среде —

$$K = \lambda + \frac{2}{3}G. \quad (13)$$

Нахождение деформированного и напряженного состояния кристалла требует решения уравнения движения упругой среды

$$\rho \ddot{u}_i = \nabla_k \sigma_{ki} + f_i, \quad (14)$$

где вектор f описывает плотность действующих на кристалл объемных сил (среднюю силу, приложенную к единице объема кристалла), а тензор σ_{ik} связан с деформациями законом Гука (7).

В статических условиях проблема определения состояния кристалла сводится к решению следующего уравнения равновесия упругой среды:

$$\nabla_k \sigma_{ki} + f_i = 0. \quad (15)$$

Рассмотрим кубический кристалл (или изотропную среду) и выведем формулу, дающую возможность определить полное статическое изменение объема деформированного тела, не решая задачи о его деформированном состоянии.

Умножим (15) на x_i и проинтегрируем по всему объему кристалла:

$$\int x_i \nabla_k \sigma_{ki} dV = - \int r f dV. \quad (16)$$

Предположим для простоты, что внешняя поверхность тела свободна. Тогда левая часть в (16) может быть элементарным путем преобразована:

$$\begin{aligned} \int x_i \nabla_k \sigma_{ki} dV &= \int \nabla_k (x_i \sigma_{ki}) dV - \int \sigma_{ik} \nabla_k x_i dV = \\ &= \oint_S x_i \sigma_{ki} dS_k - \int \sigma_{ik} \delta_{ik} dV = - \int \sigma_{kk} dV. \end{aligned} \quad (17)$$

Интеграл по внешней поверхности тела S исчез в силу предположения о том, что поверхность тела свободна.

Подставим (17) в (16) и воспользуемся соотношением (11), а также формулой (2):

$$\Delta V = \frac{1}{3K} \int r f dV. \quad (18)$$

Нетрудно сообразить, что выражение (18) инвариантно относительно выбора начала координат, поскольку

$$\int f dV = 0, \quad (19)$$

в силу условия равновесия при свободной внешней поверхности.

2. Определение и свойства точечного дефекта в теории упругости

Под точечным дефектом обычно понимается любое искажение или нарушение кристаллической решетки, сконцентрированное в объеме порядка величины атомного объема. Однако мы ограничим себя анализом наиболее простых типов точечных дефектов в кристалле без примесей. Таковыми являются собственные междоузельные атомы (атомы, внедренные в кристалл, т. е. занимающие позиции между положениями равновесия атомов идеальной решетки) и вакансии (узлы кристаллической решетки, в которых отсутствуют атомы). Схемы расположения атомов вблизи таких дефектов изображены на рис. 26, *a* и *в*.

Особенности колебаний кристалла с точечным дефектом изучались в § 8. Однако при анализе гармонических колебаний мы рассматривали лишь малые отклонения атомов от своих новых положений равновесия в кристалле с дефектом, не интересуясь статическими смещениями самих центров равновесия. Такой подход основан на предположении, что в перестройку спектра колебаний вносит вклад лишь малая область «испорченного» кристалла, где расположен сам точечный дефект. Другими словами, в изложенной выше теории гармонических колебаний кристалла точечный дефект играл роль локальной неоднородности. Но для большинства проблем, связанных с макроскопическими механическими свойствами твердых тел, решающим оказывается учет вызванных точечным дефектом статических искажений кристаллической решетки вдали от него. Поле смещения атомов вокруг дефекта, естественно, определяется характером воздействия дефекта на окружающую его решетку (матрицу), но, как мы увидим ниже, может быть описано некоторым стандартным образом. Важно, что в расчете таких смещений точечный дефект играет роль источника упругого поля. При макроскопическом описании точечного дефекта оказывается возможным независимое его рассмотрение как локальной неоднородности и как источника упругого поля. Мы начнем с анализа более существенного для дальнейшего вопроса о воздействии дефекта на окружающую его матрицу.

Будем говорить для определенности о простой кубической решетке. Междоузельный атом в такой решетке приводит к локальному нарушению ее идеальности, заключающемуся в том, что ближайшие к рассматриваемому атому узлы оказываются смещенными в сторону от междоузельного атома (рис. 43). В простой кубической решетке эта деформация обладает кубической симметрией (в результате того, что атомы ближайшего окружения внедренного атома испытывают действие расталкивающих сил, очень симметрично распределенных в каждой координационной сфере). Система этих сил, естественно, имеет равную нулю результирующую и равный нулю полный момент. С макроскопической точки зрения их действие эквивалентно действию трех пар сил равной величины, приложенных к точке расположения

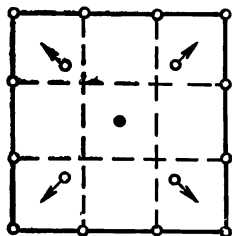


Рис. 43.

междоузельного атома и направленных по координатным осям. В теории упругости такая система будет описываться объемной плотностью сил следующего вида (дефект помещен в начало координат):

$$f(r) = -K\Omega_0 \text{grad } \delta(r), \quad (20)$$

где K — модуль всестороннего сжатия, а Ω_0 — постоянный множитель размерности объема, физический смысл которого мы сейчас выясним.

Воспользуемся формулой (18) и вычислим порождаемое плотностью сил (20) изменение объема кристалла, не подверженного внешним воздействиям:

$$\begin{aligned} \Delta V &= -\frac{1}{3} \Omega_0 \int r \text{grad } \delta(r) dV = \\ &= \frac{1}{3} \Omega_0 \int \text{div } r \delta(r) dV = \Omega_0. \end{aligned} \quad (21)$$

Следовательно, величина Ω_0 равна увеличению объема кристалла, вызванному наличием в нем одного междоузельного атома. Лишний атом может только увеличить объем кристалла и потому $\Omega_0 > 0$. Обычно увеличение объема, связанное с междоузельным атомом, порядка величины атомного объема, поэтому $\Omega_0 \sim V_0 = a^3$.

По классификации особенностей упругих полей в изотропной среде дефект, описываемый плотностью сил (20), называется *центром дилатации*. Таким образом, можно считать, что мы воспользовались дилатационной моделью междоузельного атома.

Вакансия отличается от междоузельного атома тем, что созданная ею деформация связана со смещением ближайших атомов в сторону дефекта. Это смещение вызвано силами, симметрию которых в простой кубической решетке можно ожидать такой же, как и в случае атома внедрения. Иными словами, вакансию можно описывать с помощью формулы (20), но интенсивность [дилатации следует считать отрицательной ($\Omega_0 < 0$).

Однако выбор модели междоузельного атома, основанный на использовании формулы (20), вполне естествен лишь для кубических кристаллов с примитивной решеткой Браве. Определение соответствующего точечного дефекта должно быть несколько обобщено даже в случае объемно- или гранецентрированной простой кубической решетки. Оказывается, что в таких решетках смещение атомов вокруг внедрения может не обладать той высокой симметрией, которую мы предположили в записи (20). В частности, в окрестности «лишнего» атома вполне допустима конфигурация решетки, схематически изображенная на рис. 44, где имеется не один, а два выделенных атома, поровну разделяющих между собой одно «междоузлие» (на плоском рисунке, где нельзя изобразить центрированные кубические решетки, эта схема может казаться неестественной, однако в пространстве она становится вполне реалистичной). Подобную деформацию порождает система сил, макроскопическим эквивалентом которой являются приложенные в точке нахождения дефекта три пары сил с равным нулю моментом в каждой паре, но с разными величинами сил. В теории упругости такую систему можно описать плотностью сил

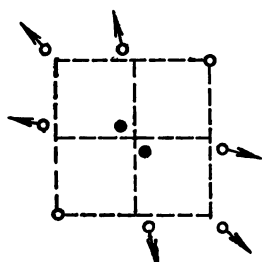


Рис. 44.

$$f_i(r) = -K\Omega_{ik}\nabla_k\delta(r), \quad (22)$$

причем отсутствие полного момента этих сил выражается в симметрии тензора Ω_{ik} ($\Omega_{ik} = \Omega_{ki}$).

Производя вычисления, аналогичные (21), легко проверить, что плотность сил (22) порождает изменение объема $\Delta V = \Omega_{ll}/3$. Поэтому для междоузельного атома естественно принять $\Omega_{ll} > 0$, считая $\Omega_{ll} \sim a^3$, а для вакансии — принять $\Omega_{ll} < 0$.

Найдем создаваемое точечным дефектом упругое поле и убедимся, что оно действительно простирается на макроскопические расстояния (иначе подобное рассмотрение не имело бы смысла). Обозначим через $G_{ik}(r)$ статический тензор Грина теории упругости, т. е. исчезающее на бесконечности решение уравнения

$$\lambda_{iklm} \nabla_k \nabla_l G_{mj}(r) + \delta_{ij} \delta(r) = 0.$$

Тогда вектор смещений, порождаемых в кристалле плотностью сил $f(r)$, можно будет записать в виде

$$u_i(r) = \int G_{ik}(r - r') f_k(r') dV'. \quad (23)$$

Подставим сюда (22) и произведем тривиальное интегрирование по частям:

$$u_i(r) = -K \Omega_{kl} \nabla_l G_{ik}(r). \quad (24)$$

В изотропном приближении для неограниченного пространства тензор Грина может быть записан в явном виде:

$$G_{ik}(r) = \frac{1}{8\pi G} \left(\delta_{ik} \Delta + \frac{1}{2(1-\nu)} \nabla_i \nabla_k \right) r, \quad (25)$$

де Δ — оператор Лапласа ($\Delta \equiv \nabla_k \nabla_k$), а ν — коэффициент Пуассона: $\nu = \lambda/2(G + \lambda)$. Подставим (25) в (24) и ограничимся случаем центра дилатации ($\Omega_{ik} = \delta_{ik} \Omega_0$):

$$u(r) = - \frac{\Omega_0}{12\pi} \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \text{grad} \frac{1}{r}. \quad (26)$$

Поскольку из (26) следует, что $\text{div} u \equiv \epsilon_{kk} = 0$ во всех точках вне области, занятой междоузельным атомом (вне точки $r = 0$), то центр дилатации в неограниченной изотропной среде вызывает чисто сдвиговую деформацию. Естественно, последний вывод справедлив только при

одновременном выполнении двух условий: во-первых, среда является упруго-изотропной и, во-вторых, точечный дефект эквивалентен центру дилатации. При нарушении хотя бы одного из этих условий упругое поле точечного дефекта, вообще говоря, не является чисто сдвиговым.

3. Дислокация в кристалле

Существует много микроскопических моделей дислокаций разного типа в кристаллах. Наиболее простой моделью является та, в которой линия дислокации представляет собой край вставленной в кристалл «лишней» полуплоскости. На рис. 45 изображена общепринятая атомная схема такой модели, где след вставленной полуплоскости совпадает с верхней полуосью y . Линия края «лишней» полуплоскости (ось z на рис. 45) называется в этом случае *краевой дислокацией*.

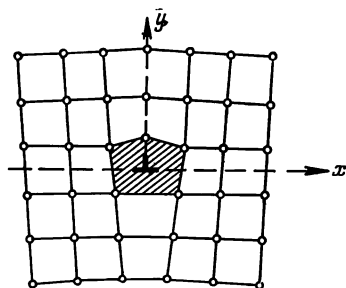


Рис. 45.

Нарушение правильной кристаллической структуры при наличии дислокации происходит лишь в малой окрестности выделенной линии — оси дислокации, и область нерегулярного расположения атомов, вытянутая вдоль оси дислокации, имеет поперечные размеры порядка величины постоянной решетки. Если окружить дислокацию трубкой с радиусом порядка нескольких межатомных расстояний, то вне этой трубки кристалл может считаться идеальным и подвергнутым только упругим деформациям (кристаллические плоскости смыкаются друг с другом почти правильным образом), а внутри нее атомы существенно смещены относительно своих положений равновесия в идеальном кристалле и образуют структуру, называемую ядром дислокации. На рис. 45 атомы ядра дислокации условно расположены по контуру заштрихованного пятиугольника.

Наличие деформации вдали от оси дислокации обнаруживается при обходе в плоскости xOy (рис. 45) по узлам

решетки вдоль замкнутого контура вокруг ядра дислокации. Если ввести вектор смещения каждого узла от его положения в идеальной решетке u , то полное приращение этого вектора при обходе будет отлично от нуля и равно одному периоду решетки вдоль оси x . Именно эта особенность дислокационной деформации может рассматриваться

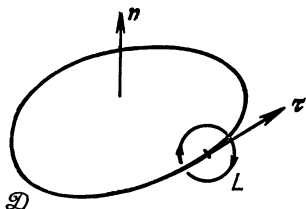


Рис. 46.

как исходная при макроскопическом определении дислокации в кристалле. Большинство существенных физических свойств дислокации не связано с их микроскопическими моделями и может быть описано феноменологически в рамках теории упругости на основе подобного определения.

Итак, дислокацией в кристалле называют особую линию \mathcal{D} , обладающую следующими свойствами: при обходе по любому замкнутому контуру L , охватывающему линию \mathcal{D} (рис. 46), вектор упругого смещения u получает определенное конечное приращение b , равное (по величине и направлению) одному из периодов решетки. Это свойство записывается в виде

$$\oint_L du_i = \oint_L \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k = -b_i, \quad (27)$$

причем принимается, что направление обхода контура связано правилом винта с выбранным направлением вектора касательной к линии дислокации τ . Сама линия дислокации является при этом линией особых точек поля деформаций и напряжений *).

Постоянный вектор b называется *вектором Бюргерса* данной дислокации. Ясно, что возможные значения векторов Бюргерса в рассматриваемом теле определяются его кристаллографической структурой и, как правило, соответствуют небольшому числу выделенных направлений в кристалле. Что же касается линии дислокации \mathcal{D} ,

*) Как и в случае точечных дефектов, мы пока оставляем вне рассмотрения вопрос о дислокационной линии как локальной неоднородности кристалла.

то при макроскопическом рассмотрении она может считаться гладкой кривой.

Краевой дислокации отвечает линия \mathcal{D} , вдоль которой $\tau \perp b$. Символом краевой дислокации обычно служит значок \perp . На схематической картинке рис. 45 краевые дислокации с противоположными направлениями b отличаются тем, что «лишняя» кристаллическая полуплоскость лежит сверху или снизу от плоскости xOz (о таких дислокациях говорят как о дислокациях разного знака).

Если $\tau \parallel b$, то соответствующая дислокация называется *винтовой*. Наличие прямолинейной винтовой дислокации в кристалле превращает кристаллические плоскости в решетке в геликоидальную поверхность, подобную винтовой лестнице. На рис. 47 изображена схема расположения атомных плоскостей при наличии винтовой дислокации, совпадающей с линией OO' .

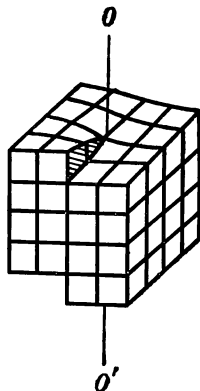


Рис. 47.

Очевидно, что вектор Бюргерса неизбежно постоянен вдоль всей линии дислокации. Очевидно также, что линия дислокации не может просто оканчиваться внутри кристалла. Она должна выходить обоими концами на поверхность кристалла либо (как это обычно бывает в реальных случаях) представлять собой замкнутую петлю.

Действительно, если бы линия \mathcal{D} оканчивалась в некоторой точке P (рис. 48), то можно было бы представить себе поверхность S_L , опирающуюся на контур L и нигде не пересекающую линию особенностей \mathcal{D} . Тогда контурный интеграл в левой части (27) можно было бы преобразовать в интеграл по поверхности S_L :

$$\oint_L dx_k \nabla_k u_i = \int_{S_L} dS_k e_{klm} \nabla_l \nabla_m u_i, \quad (28)$$

где e_{ikl} — единичный антисимметричный тензор третьего ранга, а dS — вектор элемента поверхности ($dS = n dS$, n — единичный вектор нормали к поверхности). Но в

силу антисимметрии тензора e_{ikl} поверхностный интеграл в (28) тождественно равен нулю. Так как этот результат противоречит условию (27), то линия дислокации не может обрываться внутри кристалла.

С математической точки зрения условие (27) означает, что при наличии дислокации вектор смещений является неоднозначной функцией координат, получающей заданное приращение при обходе вокруг линии дислокации. Никакой физической неоднозначности при этом, разумеется, нет: приращение b означает одновременное дополнительное смещение атомов кристалла на один из

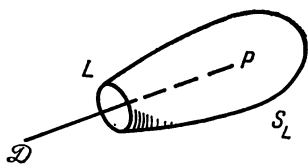


Рис. 48.

периодов решетки, которое в силу трансляционной инвариантности кристалла не меняет его состояния. В частности, тензор напряжений σ_{ih} , характеризующий упругое состояние кристалла, является однозначной и непрерывной функцией координат.

В кристалле с отдельной дислокацией вместо неоднозначного вектора упругого смещения всегда можно ввести однозначный вектор u , условившись, что функция $u(r)$ испытывает заданный скачок b на некоторой поверхности $S_{\mathcal{D}}$, опирающейся на дислокационную петлю \mathcal{D} :

$$\delta u \equiv u^+ - u^- = b, \quad (29)$$

где u^+ и u^- — значения $u(r)$ соответственно с верхней и нижней сторон поверхности $S_{\mathcal{D}}$. Направление «вверх» (положительное направление) определяется направлением нормали n к поверхности $S_{\mathcal{D}}$ (это направление опять же связывается правилом винта с направлением вектора τ ; оно указано на рис. 46).

Последнее обстоятельство позволяет дать формально иное определение дислокации, а именно, определить ее как такую линию \mathcal{D} , на которую опирается поверхность $S_{\mathcal{D}}$ с заданным скачком (29) вектора u . В ряде случаев это определение оказывается более удобным, чем первоначальное; например, с его помощью легко найти упругое поле вокруг дислокации. Если вычислить в соответствии с формулой (11) тензор деформаций для кристалла с ди-

словацией, т. е. при наличии скачка (29) на поверхности $S_{\mathcal{D}}$, то он будет иметь на этой поверхности δ -образную особенность:

$$\varepsilon_{ik}^{(S)} = \frac{1}{2} (n_i b_k + n_k b_i) \delta(\zeta), \quad (30)$$

где ζ — координата, отсчитываемая от поверхности $S_{\mathcal{D}}$ вдоль нормали n .

Поскольку никакой физической особенности в пространстве вокруг дислокации в действительности нет, то тензор напряжений σ_{ik} , как уже было отмечено, должен являться везде непрерывной функцией. Между тем с тензором деформаций (30) формально связан тензор напряжений $\sigma_{ik}^{(S)} = \lambda_{iklm} \varepsilon_{lm}^{(S)}$, имеющий особенность на поверхности $S_{\mathcal{D}}$. Для того чтобы исключить его, надо ввести фиктивные объемные силы, распределенные вдоль поверхности $S_{\mathcal{D}}$ со специально подобранной плотностью $f^{(S)}$. Уравнения равновесия при наличии объемных сил имеют вид (15), поэтому надо положить

$$f_i^{(S)} = -\nabla_k \sigma_{ki}^{(S)} = -\lambda_{iklm} \nabla_k \varepsilon_{lm}^{(S)}. \quad (31)$$

Таким образом, задача об отыскании неоднозначной функции $u(r)$ эквивалентна задаче об отыскании однозначной, но разрывной функции при наличии объемных сил, определяемых формулами (31) и (30). Воспользуемся теперь формулой (23), подставив в нее (31) и выполнив нужное интегрирование:

$$u_i(r) = -\lambda_{jklm} b_m \int_{S_{\mathcal{D}}} n_l \nabla_k G_{ij}(r - r') dS'. \quad (32)$$

В принципе выражение (32) позволяет найти упругие смещения в кристалле при произвольной форме дислокационной петли. Однако следует заметить, что общая формула (32) очень сложна, и вычисление поля смещений даже при простых формах линии дислокации весьма громоздко и затруднительно. В случае прямолинейной дислокации, когда имеем дело с плоской задачей теории упругости, более простым обычно оказывается непосредственное решение уравнения равновесия при условии (27).

Наиболее простой вид деформация (32) имеет вдали от замкнутой дислокационной петли. Если представить себе петлю, расположенную вблизи начала координат, то на больших по сравнению с ее линейными размерами расстояниях r имеем

$$u_i(r) = -\lambda_{jklm} d_{lm} \nabla_k G_{ij}(r), \quad (33)$$

где обозначено

$$d_{ik} = S_i b_k, \quad S_i = \int_{S_{\infty}} n_i dS = \frac{1}{2} e_{ijkl} \oint_{\infty} x_k dx_l. \quad (34)$$

Аксиальный вектор S имеет компоненты, равные площадям, ограниченным проекциями петли \mathcal{D} на плоскости, перпендикулярные соответствующим координатным осям. Тензор d_{ik} естественно назвать тензором *дислокационного момента*.

Компоненты тензора G_{ik} убывают обратно пропорционально расстоянию: $G_{ik} \propto 1/r$ (см., например, (25)), поэтому из (33) следует, что $u_i \propto 1/r^2$. Соответствующее поле напряжений убывает с расстоянием по закону $\sigma_{ik} \propto 1/r^3$.

4. Скольжение и переползание дислокации

Вернемся еще раз к определению дислокации (29) и обратим внимание на то, что оно является, в сущности, лишь некоторым формальным приемом, позволяющим решать ряд статических задач теории упругости в среде с дислокацией. Если же мы свяжем обладающий разрывом (29) вектор $u(r)$ с действительными смещениями атомов в кристалле и представим себе реальный процесс подобного создания дислокации (путем относительного смещения атомных слоев по двум сторонам поверхности S_{∞} на величину b), то встретимся с некоторыми трудностями физического характера.

В самом деле, при формулировке условия (29) подразумевается, что вдоль поверхности S_{∞} сохраняется сплошность кристалла и, в частности, остаются неизменными (с точностью до упругих деформаций) межатомные расстояния. Но легко сообразить, что понимаемый буквально разрыв (29) приводит к нарушению сплошности кристалла. Действительно, приведенная на рис. 49 схема расположения атомов (темные кружки) вдоль участка поверх-

ности $S_{\mathcal{D}}$ (при условии $nb > 0$) показывает, что после обсуждаемого взаимного смещения атомных слоев образуется макроскопическое число «вакантных» кристаллических узлов (светлые кружки). Для их заполнения, обеспечивающего непрерывность среды, необходим подвод «лишнего атомного материала» с объемом

$$\delta V = nb\delta S \quad (35)$$

на каждый элемент δS поверхности разрыва. Поэтому запись условия (29) предполагает, что мы «выбрасываем» материал там, где атомные слои при взаимном смещении накладываются друг на друга, и заполняем дополнительным материалом остающиеся «щели». Но в кристалле не существует механизмов автоматического удаления или подвода макроскопического количества материала внутри объема тела. Следовательно, невозможен чисто механический способ образования дислокации путем реального смещения атомных слоев вдоль произвольной поверхности $S_{\mathcal{D}}$ без возникновения на ней разрывов физических величин.

Однако из вида формулы (35) следует, что в кристалле всегда существует выделенная поверхность $S_{\mathcal{D}}$, в каждой точке которой $nb = 0$, и описанное смещение имеет характер сдвига, не нарушающего сплошность кристалла. Ясно, что это — цилиндрическая поверхность, образующие которой параллельны вектору \mathbf{b} , а направляющей для которой служит дислокационная петля \mathcal{D} . Она называется *поверхностью скольжения* рассматриваемой дислокации и является огибающей семейства плоскостей скольжения всех элементов дислокационной линии. Под *плоскостью скольжения* элемента дислокации понимается касательная плоскость к соответствующему элементу линии, заданная векторами $\boldsymbol{\tau}$ и \mathbf{b} . Возможные системы плоскостей скольжения в анизотропной среде определяются структурой соответствующей кристаллической решетки.

Физическая особенность и выделенность плоскости скольжения состоит не только в том, что вдоль нее можно

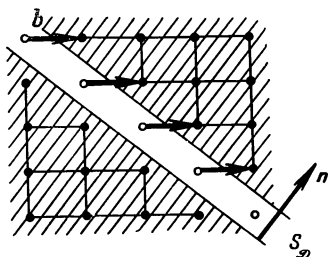


Рис. 49.

«безболезненно» произвести порождающий дислокацию сдвиг (после сдвига межатомные расстояния в окрестности плоскости скольжения остаются неизменными), но и в том, что в этой плоскости возможно сравнительно легкое перемещение дислокации. Последнее следует непосредственно из микроскопической картины дислокационного дефекта и проще всего демонстрируется с помощью схемы с лишней полуплоскостью, изображенной на рис. 45.

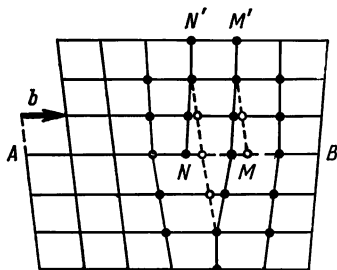


Рис. 50.

Пусть краевая дислокация создана сдвигом на величину b вдоль плоскости скольжения, след которой на рис. 50 совпадает с кристаллографическим направлением AB . Рассмотрим две конфигурации атомов вблизи ядра дислокации в случае, когда лишняя атомная полуплос-

кость находится в положении NN' (атомы отмечены черными кружками), и в случае, когда роль лишней кристаллической полуплоскости играет атомный слой, занимающий положение MM' (атомы показаны светлыми кружками).

Хотя переход от первой конфигурации атомов ко второй связан с перемещением дислокации на одно межатомное расстояние вправо в плоскости скольжения, смещения отдельных атомов, реализующие такой переход, оказываются малыми по сравнению с величиной b . Это означает, что подобная коллективная атомная перестройка, обеспечивающая движение дислокации, может происходить под действием сравнительно малых сил. Если сопоставить таким силам макроскопические нагрузки, то оказывается, что соответствующие сдвиговые напряжения σ_s , необходимые для начала движения дислокации, в $10^2 - 10^4$ раз меньше модуля сдвига монокристалла G . Малость параметра σ_s/G является решающим физическим обстоятельством, позволяющим использовать обычную линейную теорию упругости для описания механических процессов, сопровождающихся движением дислокаций.

Итак, дислокация сравнительно легко, чисто механическим путем, может перемещаться в своей плоскости скольжения. Подобное движение дислокации обычно называют *скольжением* или консервативным движением дислокации.

Совершенно иную физическую природу имеет реальное перемещение дислокации в направлении, перпендикулярном плоскости скольжения. Рассмотрим произвольное малое смещение δX элемента длины дислокационной петли dl и воспользуемся определением дислокации, основанным на условии (29). Независимо от выбора исходной поверхности S_{∞} , имеющего чисто формальный смысл, действительное перемещение элемента дислокации приводит к увеличению площади этой поверхности на величину, которую удобно характеризовать аксиальным вектором

$$\delta S = [\delta X \tau] dl.$$

Такое изменение площади поверхности S_{∞} сопровождается неупругим локальным увеличением объема кристалла, равным в соответствии с формулой (35) следующей величине:

$$\delta V = b \delta S = b [\delta X \tau] dl = -[b \tau] \delta X dl. \quad (36)$$

В том случае, когда смещение δX имеет нормальную к плоскости скольжения составляющую, величина (36) отлична от нуля. Но мы уже отмечали, что связанные с δV нехватка (при $\delta V > 0$) или избыток (при $\delta V < 0$) материала не могут быть сбалансированы в объеме идеального кристалла механическим путем, если сохраняется непрерывность среды. Однако в реальном кристалле существует своеобразный медленно действующий механизм уплотнения или разрежения вещества, не требующий макроскопических нарушений его сплошности. Имеются в виду процессы образования и диффузионного перемещения точечных дефектов типа атомов в междоузлиях (уплотняющих материал) и вакантных узлов (разрежающих вещество).

Следовательно, движение дислокации в нормальном к плоскости скольжения направлении может происходить без нарушения непрерывности среды только при усло-

вии, что в кристалле возможен диффузионный обмен веществом между дислокационной линией и остальным объемом кристалла. Именно этот диффузионный процесс компенсирует неупругое увеличение объема на оси дислокации за счет равного ему уменьшения объема кристалла путем образования соответствующего числа точечных дефектов в окрестности ядра дислокации. Поскольку на каждый кристаллический узел приходится объем элементарной ячейки V_0 , то величине (36) следует сопоставить число $|\delta V|/V_0$ рождающихся вакансий или исчезающих междоузельных атомов. Но так как могут образовываться или исчезать точечные дефекты обоих типов, то изменение их количества связано с перемещением элемента дислокационной линии формулой

$$\delta N = \frac{[b\tau]}{V_0} \delta X dl, \quad (37)$$

где δN — это разность чисел возникших междоузельных атомов и вакансий.

Точечные дефекты, для которых написана формула (37), появляются или исчезают непосредственно у ядра дислокации. Поэтому при макроскопическом описании движения дислокации все изменение объема кристалла можно сосредоточить на линии дислокации, высказав следующее утверждение. Перемещение дислокации в направлении, перпендикулярном плоскости скольжения, должно сопровождаться локальным увеличением объема кристалла с относительной величиной

$$\delta \epsilon_{kk}^0 = \delta X [b\tau] \delta(\xi), \quad (38)$$

где $\delta(\xi)$ — двухмерная δ -функция, а ξ — двухмерный радиус-вектор, отсчитываемый от оси дислокации в плоскости, перпендикулярной вектору τ в данной точке дислокационной петли.

Описанное перемещение дислокации, скорость которого лимитируется диффузионными процессами, обеспечивающими изменение объема (38), называют *переползанием* или неконсервативным движением дислокации.

§ 12. УПРУГОЕ ПОЛЕ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛЕ

1. Уравнения равновесия упругой среды с дислокациями

Исходное определение дислокации

$$\oint_L dx_i \nabla_i u_k = -b_k \quad (1)$$

удобно переписать в несколько ином виде, введя обозначение

$$u_{ik} = \nabla_i u_k \equiv \frac{\partial u_k}{\partial x_i}, \quad (2)$$

с помощью которого (1) преобразуется в формулу

$$\oint_L u_{ik} dx_i = -b_k. \quad (3)$$

Тензор u_{ik} принято называть *тензором дисторсии*. Его симметричная часть дает тензор упругой деформации

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2}(u_{ik} + u_{ki}), \quad (4)$$

связанный законом Гука с тензором напряжений σ_{ik} . В теории дислокаций тензор упругой дисторсии удобно считать самостоятельной величиной, описывающей деформацию кристалла. Как и тензоры ε_{ik} и σ_{ik} , он является однозначной функцией координат даже при наличии дислокации.

Запишем условие (3) в дифференциальной форме. Для этого преобразуем интеграл по контуру L в интеграл по какой-либо поверхности S_L , опирающейся на этот контур:

$$\oint_L dx_i u_{ik} = \int_{S_L} dS_l e_{ilm} \nabla_l u_{mk}.$$

Постоянный же вектор b представим в виде интеграла по той же поверхности с помощью введенной в § 11 двухмерной δ -функции:

$$b_k = \int_{S_L} \tau_i b_k \delta(\xi) dS_i. \quad (5)$$

Ввиду произвольности контура L равенство этих интегралов означает равенство подинтегральных выражений:

$$e_{ilm} \nabla_l u_{mk} = -\tau_i b_k \delta(\xi). \quad (6)$$

Это и есть искомая дифференциальная запись. Ясно, что на самой линии дислокации ($\xi = 0$), как на линии особых точек, представление u_{ik} в виде производных (2) теряет смысл.

Если в кристалле имеется одновременно много дислокаций, находящихся на относительно малых (хотя, конечно, и больших по сравнению с постоянной решетки) расстояниях, то становится целесообразным их усредненное рассмотрение. К такому рассмотрению обращаются в тех задачах, в которых не представляет интереса точное распределение поля между отдельными дислокациями и в которых теория оперирует с физическими величинами, усредненными по малым элементам объема. Ясно, что через такие «физически бесконечно малые» элементы объема должно проходить достаточно много дислокационных линий.

Формулировка уравнения, выражающего основное свойство дислокационных деформаций, достигается естественным обобщением уравнения (6). Введем тензор плотности дислокаций ρ_{ik} , потребовав, чтобы его интеграл по поверхности, опирающейся на любой контур L , был равен сумме векторов Бюргера b всех дислокационных линий, охватываемых этим контуром:

$$\int_{S_L} dS_i \rho_{ik} = b_k. \quad (7)$$

Тензор ρ_{ik} заменяет собой выражение в правой части уравнения (6):

$$e_{ilm} \nabla_l u_{mk} = -\rho_{ik}, \quad (8)$$

и описывает непрерывное распределение дислокаций в кристалле. Как видно из уравнения (8), тензор ρ_{ik} должен удовлетворять условию

$$\nabla_i \rho_{ik} = 0, \quad (9)$$

которое в случае одиночной дислокации выражает собой просто постоянство вектора Бюргера вдоль линии дислокации.

При таком рассмотрении дислокаций тензор u_{ik} становится первичной величиной, описывающей деформацию и определяющей тензор упругой деформации согласно (4). Вектор же смещений u , который был бы связан с u_{ik} соотношением (2), при этом вообще не может быть введен. Действительно, при таком определении тензора u_{ik} левая часть уравнения (8) тождественно обратилась бы в нуль во всем объеме кристалла.

Иногда вместо уравнения (8), определяющего тензор упругой дисторсии, используют уравнение, связывающее производные компонент тензора упругой деформации ϵ_{ik} . Это уравнение можно получить, применяя оператор $e_{jpk}\nabla_p$ к обеим частям (8) и симметризуя результат по индексам i и j . Тогда

$$e_{ilm}e_{jpk}\nabla_l\nabla_p\epsilon_{mk} = -\eta_{ij}, \quad (10)$$

где

$$\eta_{ik} = \frac{1}{2}(e_{ipl}\nabla_p\rho_{kl} + e_{kpl}\nabla_p\rho_{il}).$$

η_{ik} — это так называемый *тензор несовместности Кренера*. Название тензора связано с тем, что если $\eta_{ik} \equiv \equiv 0$, то уравнение (10) совпадает с условием совместности Сен-Ванана для компонент тензора деформаций.

Однако следует иметь в виду, что при переходе от тензора плотности дислокаций ρ_{ik} к тензору несовместности η_{ik} мы теряем часть информации о распределении дислокаций. Поэтому в дальнейшем мы будем исходить из уравнения (8), характеризуя распределение дислокаций тензором ρ_{ik} .

Уравнение (8) или (6) вместе с уравнением

$$\nabla_i\sigma_{ik} + f_k = 0 \quad (11)$$

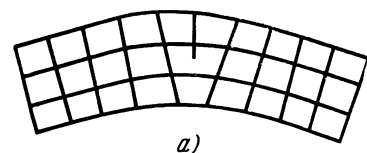
и законом Гука составляют систему уравнений равновесия упругой среды с дислокациями.

Наиболее простой, но часто встречающийся случай распределения дислокаций — это случай такого их распределения, когда суммарный вектор Бюргерса всех дислокаций (обозначим его B) равен нулю. Наличие дислокации в кристалле связано с некоторым его изгибом, как это схематически изображено на рис. 51, *a*. Ясно, что для создания макроскопического изгиба кристалла в нем

должно находиться макроскопическое число однотипных дислокаций. Легко сообразить, что если в кристалле имеется большое число равномерно распределенных параллельных краевых дислокаций одного знака, то такой кристалл изогнут с кривизной

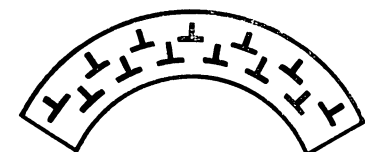
$$\frac{1}{R} = \frac{B}{S} \equiv \rho_0,$$

где B — величина суммарного вектора Бюргерса дислокаций, R — радиус кривизны и S — площадь поперечного сечения изогнутого кристалла (рис. 51, б), а ρ_0 — средняя плотность дислокаций.



а)

Поэтому равенство $B = 0$ означает отсутствие макроскопического изгиба кристалла в целом.



б)

Условие $B = 0$ является, например, свойством системы замкнутых дислокационных петель. Это условие означает, что при интегрировании по любому поперечному сечению тела

$$\int \rho_{ik} dS_i = 0. \quad (12)$$

Рис. 51.

Отсюда следует, что плотность дислокаций может быть представлена в виде

$$\rho_{ik} = e_{ilm} \nabla_l P_{mk}, \quad (13)$$

где P_{ik} — некоторый тензор второго ранга, естественно, равный нулю вне тела. Тогда интеграл (12) преобразуется в интеграл по контуру, проходящему вне тела, и обращается в нуль. Отметим также, что выражение (13) автоматически удовлетворяет условию (9). На возможность представления типа (13) указал Ф. Кроуна (1962).

Легко видеть, что определенный таким образом тензор P_{ik} представляет собой плотность дислокационного момента в деформированном кристалле (поэтому его естественно назвать *дислокационной поляризацией*). Полный

дислокационный момент кристалла D_{ik} равен по определению

$$D_{ik} = \sum S_i b_k = \frac{1}{2} \sum e_{ilm} b_k \oint_{\mathcal{L}} x_l dx_m = \\ = \frac{1}{2} e_{ilm} \sum \oint_{\mathcal{L}} x_l \tau_m b_k dl = \frac{1}{2} \int e_{ilm} x_l \rho_{m; i} dV, \quad (14)$$

где суммирование производится по всем дислокационным петлям, а интегрирование — по всему объему кристалла. Используя в (14) для ρ_{ik} выражение (13), получим

$$D_{ik} = \frac{1}{2} \int e_{ilm} e_{m;pq} x_l \nabla_p P_{qk} dV = \frac{1}{2} \int x_m (\nabla_i P_{mk} - \nabla_m P_{ik}) dV$$

и после интегрирования по частям в каждом из двух членов —

$$D_{ik} = \int P_{ik} dV. \quad (15)$$

Из (15) следует, что тензор поляризации P_{ik} действительно равен дислокационному моменту единицы объема кристалла.

Подставим (13) в уравнение (8) и перепишем последнее в виде

$$e_{ikl} \nabla_k w_{lm} = 0, \quad (16)$$

где

$$w_{ik} = u_{ik} + P_{ik}. \quad (17)$$

В отличие от u_{ik} тензор w_{ik} называют тензором полной дисторсии в кристалле с дислокациями. Дислокационная поляризация P_{ik} определяет ту часть полной дисторсии, однородное распределение которой вовсе не вызывает упругих напряжений. Но даже в случае неоднородного распределения дислокаций отсутствует непосредственная локальная связь между $P_{ik}(\mathbf{r})$ и тензором напряжений $\sigma_{ik}(\mathbf{r})$.

Из (1) следует, что тензор полной дисторсии w_{ik} всегда может быть представлен в виде производных от некоторого вектора:

$$w_{ik} = \nabla_i u_k. \quad (18)$$

Будем отсчитывать деформацию кристалла от состояния с $P_{ik} = 0$; тогда при неизменном условии $B = 0$ вектор

u определит полные геометрические смещения в кристалле с дислокациями. Уравнение для вектора u получается путем использования закона Гука и подстановки (17) и (18) в (11). Если внешние объемные силы отсутствуют ($f = 0$), то это уравнение сводится к следующему:

$$\lambda_{iklm} \nabla_k \nabla_l u_m - \lambda_{iklm} \frac{\partial P_{lm}}{\partial x_k} = 0. \quad (19)$$

Таким образом, при известном распределении дислокаций (при заданном тензоре P_{ik} как функции координат) вектор u является решением статического уравнения теории упругости с объемными силами, обладающими плотностью $f_i^{(\infty)} = -\lambda_{iklm} \nabla_k P_{lm}$.

2. Поля прямолинейных дислокаций

Если дислокация прямолинейна, то зависимость упругих напряжений вокруг нее от расстояния легко может быть выяснена в общем случае. В цилиндрических координатах r, φ, z (с осью z вдоль линии дислокации) деформация будет зависеть только от r и φ . Интеграл (3) не должен меняться, в частности, при произвольном подобном изменении размеров контура интегрирования в плоскости xOy . Очевидно, что это возможно, лишь если все элементы тензора u_{ik} обратно пропорциональны расстоянию: $u_{ik} \propto 1/r$. Той же степени $1/r$ будет пропорционален и тензор деформаций ε_{ik} , а с ним и тензор напряжений: $\sigma_{ik} \propto 1/r$.

В качестве примеров расчета упругой деформации, созданной дислокациями, рассмотрим деформацию вокруг прямолинейных винтовой и краевой дислокаций в изотропной среде. Физический смысл этих и других задач, относящихся к изотропной среде, условен, поскольку реальные дислокации по своему существу свойственны только кристаллам, т. е. анизотропной среде. Эти задачи представляют, однако, определенный интерес в качестве иллюстраций.

Начнем с винтовой дислокации, вдоль которой $\tau \parallel b$ (ясно, что чисто винтовой может быть только прямолинейная дислокация). Выберем ось z вдоль линии дислокации;

тогда вектор Бюргера будет иметь компоненты $b_x = b_y = 0$, $b_z = b$. Из соображений симметрии очевидно, что смещение u параллельно оси z и не зависит от координаты z .

Поскольку в изотропной среде $\sigma_{ik} = 2G\varepsilon_{ik}$ для $i \neq k$, то уравнение равновесия (11) при отсутствии объемных сил ($f = 0$) сводится к двумерному гармоническому уравнению для u_z :

$$\Delta u_z = 0, \quad \Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (20)$$

Решение (20), удовлетворяющее (1), имеет вид *)

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \varphi \equiv \frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y}{x}. \quad (21)$$

У тензора ε_{ik} и σ_{ik} отличны от нуля лишь следующие компоненты в цилиндрических координатах:

$$\varepsilon_{z\varphi} = \frac{b}{4\pi r}, \quad \sigma_{z\varphi} = \frac{Gb}{2\pi r}, \quad (22)$$

где G — модуль сдвига. Таким образом, деформация вокруг винтовой дислокации в изотропной среде представляет собой чистый сдвиг.

Значительно сложнее расчет упругих полей вокруг прямолинейной краевой дислокации (в отличие от винтовой, чисто краевая дислокация может быть криволинейной, если линия дислокации лежит в плоскости, перпендикулярной вектору b). Пусть ось z по-прежнему направлена по оси дислокации, а ось x — вдоль вектора Бюргера: $b_x = b$, $b_y = b_z = 0$. Из симметрии задачи при условии $\varepsilon_{zz} = 0$ следует, что вектор деформации лежит в плоскости xOy и не зависит от z , так что мы имеем дело с плоской задачей.

Ввиду громоздкости решения этой не очень сложной задачи теории упругости мы предоставим желающим самостоятельно проделать все выкладки и выпишем

*) Во всех задачах с прямолинейными дислокациями принимаем вектор τ в отрицательном направлении оси z ($\tau_z = -1$).

окончательные результаты для поля смещений *):

$$u_x = \frac{b}{2\pi} \left\{ \operatorname{arctg} \frac{y}{x} + \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{xy}{x^2 + y^2} \right\},$$

$$u_y = - \frac{b}{4\pi(1-\nu)} \left\{ (1-2\nu) \ln \sqrt{x^2 + y^2} + \frac{x^2}{x^2 + y^2} \right\}, \quad (23)$$

где ν — коэффициент Пуассона. Первое слагаемое в выражении для u_x имеет такой же вид, как и (21), поэтому оно обеспечивает выполнение условия (1).

Вычисленный на основании (23) тензор напряжений имеет декартовы компоненты

$$\sigma_{xx} = -bM \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad \sigma_{yy} = bM \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2},$$

$$\sigma_{xy} = bM \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (24)$$

или полярные (соответствующие координатам r, φ в плоскости xOy)

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\varphi\varphi} = -bM \frac{\sin \varphi}{r}, \quad \sigma_{r\varphi} = bM \frac{\cos \varphi}{r}, \quad (25)$$

где обозначено $M = G/2\pi(1-\nu)$.

Из условия $\varepsilon_{zz} = 0$ следует, что $\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = \nu(\sigma_{rr} + \sigma_{\varphi\varphi})$, поэтому среднее гидростатическое давление, создаваемое краевой дислокацией в изотропной среде, равно

$$p_0 = -\frac{1}{3} \sigma_{kk} = -\frac{1}{3} (1+\nu)(\sigma_{rr} + \sigma_{\varphi\varphi}) =$$

$$= -\frac{2(1+\nu)}{3} bM \frac{\sin \varphi}{r}. \quad (26)$$

Полезно вычислить энергию упругого поля, созданного прямолинейной дислокацией в кристалле. Свободная энергия единицы длины дислокации дается интегралом

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \int \varepsilon_{ik} \sigma_{ik} dx dy. \quad (27)$$

*) Решение этой задачи можно найти, например, в кн.: Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теория упругости, «Наука», 1965, стр. 164.

Для винтовой дислокации интеграл (27) равен

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \int 2\varepsilon_{z\varphi}\sigma_{z\varphi}2\pi r dr = \frac{Gb^2}{4\pi} \int \frac{dr}{r}, \quad (28)$$

где интегрирование по r должно производиться, вообще говоря, в пределах $(0, \infty)$. Однако интеграл (28) логарифмически расходится на обоих пределах. Расходимость при $r = 0$ связана с неприменимостью формул теории упругости на атомных расстояниях. Поэтому в качестве нижнего предела интегрирования следует взять величину r_0 порядка атомных расстояний ($r_0 \sim b$). При этом мы опустим энергию ядра дислокации \mathcal{F}_0 , максимальное значение которой нетрудно оценить. Действительно, в ядре дислокации с площадью сечения $\sim b^2$ относительные смещения атомов порядка единицы, поэтому

$$\mathcal{F}_0 \sim Gb^2. \quad (29)$$

Верхний же предел интегрирования в (28) определяется величиной L порядка длины дислокации или порядка размера кристалла. Тогда

$$\mathcal{F} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{L}{r_0}. \quad (30)$$

Сравнивая (30) и (29), мы видим, что выражение (30) определяет основную часть энергии дислокации при условии $\ln(L/r_0) \gg 1$. Иначе говоря, формула (30) определяет энергию дислокации с логарифмической точностью.

Для краевой дислокации интеграл (27) равен

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \frac{1}{2} \int (\varepsilon_{rr}\sigma_{rr} + \varepsilon_{\varphi\varphi}\sigma_{\varphi\varphi} + 2\varepsilon_{r\varphi}\sigma_{r\varphi}) r dr d\varphi = \\ &= \frac{1}{2} b^2 M^2 \frac{1-\nu}{G} \int_{r_0}^L \frac{dr}{r} \int_0^{2\pi} \sin^2 \varphi d\varphi = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{L}{r_0}. \end{aligned}$$

Естественно, энергия единицы длины краевой дислокации имеет тот же порядок величины, что и для винтовой дислокации. Более того, можно показать, хотя это и очевидно, что для любой слабо искривленной дислокационной линии (с радиусом кривизны $R \gg b$) энергия единицы ее длины будет иметь порядок величины

$$\mathcal{F} \sim \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}. \quad (31)$$

Однако следует иметь в виду, что теоретический «большой параметр» $\ln(L/r_0)$ или $\ln(R/r_0)$ в действительности не очень велик. В самом деле, беря отношение $L/r_0 \sim \sim 10^5 - 10^6$ (а оно часто бывает меньшим), приходим к выводу, что $\ln(L/r_0)$ не сильно отличается от 4π . Поэтому для грубых оценок энергию единицы длины изолированной дислокации можно принять примерно равной

$$\mathcal{F} \approx Gb^2.$$

Такого же типа оценка остается справедливой и в анизотропной среде.

Большой интерес с точки зрения приложений представляет упругая деформация, создаваемая в неограниченной среде так называемой *дислокационной стенкой*. Под «стенкой» обычно понимают бесконечное число одинаковых параллельных прямолинейных краевых дислокаций, расположенных в одной плоскости, перпендикулярной их векторам Бюргерса, на одинаковом расстоянии h друг от друга

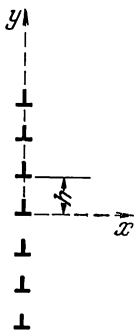


Рис. 52.

(рис. 52). Рассмотрим напряжение сдвига, создаваемое такой стенкой в изотропной среде.

Пусть дислокации параллельны оси z и расположены в плоскости yOz .

Суммарное напряжение сдвига, создаваемое всеми дислокациями в точке (x, y) , как следует из (24), дается суммой

$$\sigma_{xy}(x, y) = bMx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{x^2 - (y - nh)^2}{[x^2 + (y - nh)^2]^2}.$$

Перепишем эту сумму в виде

$$\sigma_{xy} = -bM \frac{\alpha}{n} \left[J(\alpha, \beta) + \alpha \frac{\partial J(\alpha, \beta)}{\partial \alpha} \right],$$

где

$$J(\alpha, \beta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\alpha^2 + (\beta - n)^2}, \quad \alpha = \frac{x}{h}, \quad \beta = \frac{y}{h}.$$

С помощью формулы суммирования Пуассона

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{2\pi i k x} dx \quad (32)$$

найдем

$$\begin{aligned} J(\alpha, \beta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\alpha^2 + \xi^2} + 2\operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} e^{2\pi i k \beta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{2\pi i k \xi} d\xi}{\alpha^2 + \xi^2} = \\ &= \frac{\pi}{\alpha} + \frac{2\pi}{\alpha} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-2\pi k \alpha} \cos 2\pi k \beta. \end{aligned} \quad (33)$$

Используя явное выражение (33), запишем окончательное выражение для сдвиговых напряжений:

$$\sigma_{xy}(x, y) = 4\pi^2 M \frac{bx}{h^2} \sum_{k=1}^{\infty} k e^{-2\pi k \frac{x}{h}} \cos\left(2\pi k \frac{y}{h}\right).$$

При $x \gg h$ в сумме по k можно оставить лишь первый член, и в результате получим

$$\sigma_{xy}(x, y) = 4\pi^2 M \frac{bx}{h^2} e^{-2\pi \frac{x}{h}} \cos\left(2\pi \frac{y}{h}\right). \quad (34)$$

Таким образом, напряжения периодически меняют знак вдоль направления y (с естественным периодом h) и убывают при удалении от стенки по экспоненциальному закону. Следовательно, в отличие от поля отдельной дислокации сдвиговое поле стенки дислокаций сосредоточено в объеме слоя с толщиной порядка расстояния между дислокациями в стенке.

3. Модель Пайерлса

Для количественного исследования роли дискретности кристаллической решетки в дислокационной деформации *P. Пайерлс* (1940) предложил полумикроскопическую модель, позволяющую, с одной стороны, учесть трансляционную симметрию кристалла, а с другой, — получить непосредственный предельный переход к результатам теории упругости.

Но прежде чем приступить к описанию модели Пейерлса, мы рассмотрим несколько соотношений континуальной теории дислокаций, используемых при формулировке этой модели.

Рассмотрим совокупность большого числа краевых прямолинейных дислокаций, расположенных параллельно друг другу в одной и той же плоскости скольжения. Пусть ось z параллельна дислокациям, а ось x — их векторам Бюргера (тогда плоскость xOz совпадает с плоскостью скольжения).

Деформации и напряжения, создаваемые одной дислокацией, убывают обратно пропорционально расстоянию от нее. Поэтому, например, элемент тензора дисторсии u_{yx} в точке x на оси x , создаваемый дислокацией, находящейся в точке x' , равен

$$u_{yx}(x) = \frac{bQ}{x - x'}, \quad Q = \text{const.} \quad (35)$$

В изотропной среде, как вытекает из записи (23), $Q = (3 - 2\nu)/4\pi(1 - \nu)$.

Сдвиговые напряжения σ_{yx} определяются аналогичной формулой:

$$\sigma_{xy}(x) = \frac{b\mu_1}{x - x'}; \quad (36)$$

здесь μ_1 — постоянный множитель порядка величины модуля сдвига кристалла. В изотропном приближении $\mu_1 = M = G/2\pi(1 - \nu)$ (см. формулу (24) для σ_{xy}).

Обозначим посредством $\rho(x)$ линейную плотность дислокаций, распределенных на оси x : $\rho(x) dx$ есть сумма векторов Бюргера дислокаций, проходящих через точки интервала dx . Тогда полное сдвиговое напряжение, создаваемое в каждой точке оси x всеми дислокациями, запишется в виде интеграла

$$\sigma_{xy}(x) = \mu_1 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\xi) d\xi}{x - \xi}. \quad (37)$$

Этот интеграл должен пониматься в смысле главного значения, для того чтобы исключить физически неопределенное собственное поле дислокации на ее оси.

Вернемся к геометрическому смыслу величины $\rho(x)$. Допустим, что создаваемый дислокациями сдвиг вдоль плоскости скольжения отсутствует при $x = \infty$. Тогда по определению краевой дислокации интеграл

$$u(x) = \int_x^{\infty} \rho(\xi) d\xi \quad (38)$$

равен смещению атомных слоев в точке x над плоскостью

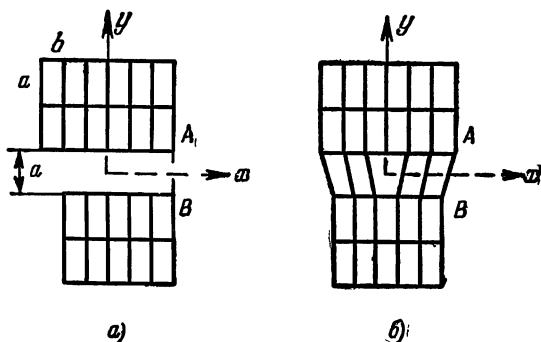


Рис. 53.

скольжения относительно таковых под этой плоскостью. Из (38) следует

$$\rho(x) = -\frac{du}{dx}. \quad (39)$$

Итак, зная относительные смещения кристалла по двум сторонам плоскости скольжения, мы можем с помощью соотношения (39) сопоставить ему определенную плотность дислокаций.

Переходим к формулировке полумикроскопической модели краевой дислокации. Пусть атомы неискаженного кристалла образуют простую тетрагональную решетку с постоянной b вдоль оси x и постоянной a вдоль оси y (рис. 53, а). Рассмотрим две части такого кристалла, одна из которых (А) содержит лишнюю атомную плоскость по сравнению со второй частью (В). Составим из этих двух частей единый кристалл, сблизив верхнюю и нижнюю части на межатомное расстояние a и совместив левые и

правые края этих частей. Для выполнения последнего при неподвижных правых краях частей A и B необходимо осуществить относительный сдвиг вдоль оси x на величину b их левых краев. После соединения двух частей кристалла атомы образуют единую решетку, содержащую краевую дислокацию (рис. 53, б).

Обозначим относительное смещение атомов по двум сторонам плоскости скольжения в направлении оси x через $u(x)$. На бесконечно большом от дислокации расстоянии кристаллическая решетка должна быть идеальной. Это возможно при выполнении условия

$$u(\infty) = 0, \quad u(-\infty) = b. \quad (40)$$

Функция $u(x)$ должна иметь вид, качественно совпадающий с графиком рис. 39. Положим $u(x_0) = b/2$, т. е. будем считать центр дислокации находящимся в точке $x = x_0 = X$. Для точного определения функции $u(x)$ предполагается, что верхняя и нижняя части кристалла могут рассматриваться как два упругих сплошных тела. Однако препятствующее деформации касательное напряжение в плоскости скольжения (в плоскости соединения упругих полупространств) считается периодической функцией локального относительного смещения $u(x)$ с периодом b . Другими словами, принимается, что в плоскости скольжения

$$\sigma_{xy}^P(x) = \mu_2 f[u(x)], \quad f(u) = f(u + b), \quad (41)$$

где для удобства дальнейшего анализа введен коэффициент μ_2 порядка величины упругих модулей кристалла, а безразмерная периодическая функция $f(u)$ считается по порядку величины не превышающей единицы. Обязательное свойство функции $f(u)$ сводится к наличию линейного участка на ее графике при $|u| \ll b$:

$$f(u) = f'(0)u, \quad |u| \ll b. \quad (42)$$

Напряжения локального характера (41) должны совпадать с макроскопическими напряжениями, обусловленными неоднородным распределением сдвига $u(x)$ вдоль всей плоскости скольжения. Мы уже видели, что неоднородное относительное смещение $u(x)$ эквивалентно совокупности краевых дислокаций с плотностью (39), а значит,

оно вызывает сдвиговые напряжения (37). Подставляя (39) в (37) и приравнивая результат величине $\sigma_{xy}^P(x)$, мы получим сингулярное интегральное уравнение для $u(x)$:

$$\mu_1 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{du}{d\xi} \right) \frac{d\xi}{x-\xi} = -\mu_2 f[u(x)]. \quad (43)$$

Интересующее нас решение уравнения (43) должно обладать свойством (40).

Найдем прежде всего связь коэффициента μ_2 и величины $f'(0)$ с упругими модулями кристалла. Ясно, что вдали от ядра дислокации ($x \gg b$), где смещения $u(x)$ малы, решение уравнения (43) должно совпадать с известным решением теории упругости (35), если принять $u_{yx} = u/a$. Из (43) следует, что при $x \rightarrow \infty$, когда $u \ll b$ и верно (42),

$$\mu_2 f'(0) u(x) = -\frac{\mu_1}{x} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{du}{d\xi} \right) d\xi = \frac{\mu_1 b}{x}. \quad (44)$$

Сравнивая (44) с (35) при $x \gg x'$, мы находим $\mu_1/\mu_2 = aQf'(0)$.

Таким образом, уравнение Пайерлса принимает вид

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{du}{d\xi} \right) \frac{d\xi}{x-\xi} + \frac{f[u(x)]}{aQf'(0)} = 0. \quad (45)$$

Очень важным свойством уравнения (45), существенно отличающим его от уравнения Френкеля — Конторовой для дислокации в одномерном кристалле, является очень медленное изменение величины $u(x)$ с расстоянием x . В то время как в одномерном кристалле убывание $u(x)$ при $x \rightarrow \infty$ является экспоненциальным, решение уравнения (45) убывает по гиперболическому закону (44).

Уравнение (45) может быть решено явно при простейшей периодической зависимости $f(u)$, а именно, в случае

$$f(u) = \sin\left(2\pi \frac{u}{b}\right), \quad f'(0) = \frac{2\pi}{b}. \quad (46)$$

Тогда, как можно проверить, уравнение (45) обладает

таким решением, удовлетворяющим (40),

$$u(x) = \frac{b}{2} \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{x-X}{\lambda} \right\}, \quad (47)$$

в котором

$$\lambda = \pi a Q. \quad (48)$$

Величину λ условно можно назвать *полушириной* дислокации. Условность этого понятия связана с медленным пространственным изменением смещения $u(x)$, что делает оценку ширины дислокации весьма сильно зависящей от конкретного вида периодической функции $f(u)$ в уравнении (45). В изотропном приближении формула (48) дает $\lambda = a(3-2\nu)/4(1-\nu)$, и полуширина дислокации в зависимости от величины коэффициента Пуассона может принимать значения в интервале от $\lambda = 3/4 a$ (при $\nu = 0$) до $\lambda = a$ (при $\nu = 1/2$).

В модели Пайерлса может быть произведена оценка того критического скалывающего напряжения, которое необходимо для смещения дислокации в плоскости скольжения. Эту оценку проделал Ф. Набарро (1947), используя следующие рассуждения. Напряжению $\sigma_{xy}^P(x)$ соответствует приходящаяся на один атомный ряд (на интервал b оси x) потенциальная энергия

$$U(x) = -b \int_0^{u(x)} \sigma_{xy}^P du = -b \mu_2 \int_0^{u(x)} f(u) du.$$

В случае синусоидальной зависимости (46) эта энергия равна

$$\begin{aligned} U(x) &= \frac{\mu_2 b^2}{2\pi} \left[1 - \cos \left(2\pi \frac{u(x)}{b} \right) \right] = \\ &= \frac{\mu_1 b^3}{2\pi^2 a Q} \sin^2 \left(\frac{\pi u(x)}{b} \right). \end{aligned} \quad (49)$$

Учтем теперь дискретность строения плоскости скольжения и сопоставим каждому атомному слою координату

$$x = x_n \equiv nb, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (50)$$

выбрав начало нумерации слоев в окрестности центра дислокации. Если теперь дискретную координату (50) подставить в формулу (49), то получится энергия n -го

атомного слоя в искаженной присутствием дислокации кристаллической решетке. Следовательно, та энергия дислокации, которая связана с локальными напряжениями вдоль плоскости сдвига, равна

$$E = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U(x_n) = \frac{\mu_1 b^2}{2\pi^2 a Q} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin^2 \frac{\pi u(x_n)}{b}. \quad (51)$$

Воспользовавшись явным видом (47) для функции $u(x)$, легко получить

$$\sin^2 \frac{\pi u(x)}{b} = \cos^2 \left(\operatorname{arctg} \frac{x-X}{\lambda} \right) = \frac{\lambda^2}{(x-X)^2 + \lambda^2}. \quad (52)$$

Напомним, что X — это координата центра дислокации, являющаяся независимой ее характеристикой и, вообще говоря, не совпадающая с координатой какого-либо атомного слоя.

Наконец, подставим (52) в (51) и воспользуемся формулой суммирования Пуассона (32):

$$\begin{aligned} E &= \frac{\mu_1 b^2 \lambda^2}{2\pi^2 a Q} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + \lambda^2} + 2\operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{2\pi i k \frac{x}{b}}}{(x-X)^2 + \lambda^2} dx \right\} = \\ &= \mu_1 b^2 + \frac{2}{\pi} \mu_1 b^2 \lambda \sum_{k=1}^{\infty} \cos \left(2\pi k \frac{X}{b} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos \left(2\pi k \frac{x}{b} \right)}{x^2 + \lambda^2} dx = \\ &= \mu_1 b^2 + 2\mu_1 b^2 \sum_{k=1}^{\infty} e^{-2\pi k \frac{\lambda}{b}} \cos 2\pi k \frac{X}{b}. \end{aligned}$$

Если $2\pi\lambda \gg b$, то в сумме по k можно ограничиться только первым слагаемым:

$$E = \mu_1 b^2 + 2\mu_1 b^2 e^{-2\pi \frac{\lambda}{b}} \cos 2\pi \frac{X}{b}. \quad (53)$$

Мы видим, что энергия дислокации является периодической функцией координаты ее центра. Дифференцируя (53) по координате X , мы получим силу, действующую на дислокацию в кристалле:

$$F = -\frac{\partial E}{\partial X} = 4\pi\mu_1 b e^{-2\pi \frac{\lambda}{b}} \sin 2\pi \frac{X}{b}. \quad (54)$$

Формула (54) определяет так называемую *силу Пайерлса*. Максимальное значение этой силы F_m определяет те сдвиговые напряжения $\sigma_s = F_m/b$, которые необходимо приложить к кристаллу, чтобы дислокация начала перемещаться в своей плоскости скольжения. Для оценки σ_s примем $\lambda = a$ и $a = b$. Тогда окажется, что $\sigma_s \sim 2\pi\mu_1 10^{-2} \sim \sim 10^{-2}G$. Если же $a = \frac{3}{2}b$, то $\sigma_s \sim 10^{-4}G$. Именно эти предельные оценки приводились выше при анализе скольжения дислокации.

§ 13. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДЕФЕКТОВ

1. Упругое взаимодействие точечных дефектов

При обсуждении макроскопических моделей точечного дефекта мы убедились, что в теории упругости точечный дефект может рассматриваться как источник внутренних напряжений, поскольку он эквивалентен некоторому специальному распределению дипольных сил без момента. Если дефект расположен в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$, то соответствующая плотность объемных сил равна

$$f_i(\mathbf{r}) = -K\Omega_{ik}\nabla_k\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad \Omega_{ik} = \Omega_{ki}. \quad (1)$$

Оказывается, что свойство дефекта играть роль источника упругого поля является основным при описании взаимодействия дефектов. Но следует помнить, что это свойство отражает только одну сторону вызванных дефектом нарушений кристаллической решетки. Фактически в формуле (1) сконцентрирована лишь информация о статических смещениях центров равновесия атомов кристалла после возникновения точечного дефекта (вдали от него).

Помимо этого, наличие дефекта обычно приводит к изменению массы одной или нескольких элементарных ячеек (что необходимо учитывать при анализе колебаний кристалла) и к локальному изменению силовых связей между соседними атомами в кристалле. Последнее обстоятельство существенно как в динамике, так и в статике кристаллической решетки, поэтому мы вынуждены обсудить возможность его учета в макроскопической теории.

Силловые связи (элементы силовой матрицы кристалла) определяют в конечном итоге модули упругости соответствующей анизотропной среды. Поэтому при макроскопическом описании точечного дефекта изменение силовых связей в малой его окрестности можно смоделировать локальным изменением упругих модулей кристалла. Будем считать, что после включения дипольных сил (1) динамическое поведение кристаллической решетки (например, при длинноволновых собственных колебаниях) или реакция кристалла на внешние воздействия описывается с помощью упругих модулей

$$\lambda'_{iklm} = \lambda_{iklm} + \Omega^* \Lambda_{iklm} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (2)$$

где λ_{iklm} — модули идеального кристалла, $\Omega^* \sim V_0$ (V_0 — атомный объем), а Λ_{iklm} — тензорные характеристики локальной неоднородности. Между коэффициентами Λ_{iklm} и Ω_{ik} существует некоторая связь, обсуждать которую мы не будем.

Рассмотрим точечный дефект в упругом поле, созданном внешними нагрузками, и вычислим работу при бесконечно малом смещении дефекта. Если это смещение приводит к малому изменению вектора деформации $\delta \mathbf{u}$, то оно сопровождается работой внешних сил

$$\delta R = \oint_{S_\infty} \sigma_{ik} \delta u_k dS_i = \int \nabla_i (\sigma_{ik} \delta u_k) dV = \int \delta u_k \nabla_i \sigma_{ik} dV + \\ + \int \sigma_{ik} \delta u_{ik} dV = - \int f \delta u dV + \int \sigma_{ik} \delta \varepsilon_{ik} dV, \quad (3)$$

где S_∞ — внешняя поверхность тела, а трехмерные интегралы берутся по всему объему кристалла.

Подставим (1) в первое слагаемое правой части (3) и используем (2) в законе Гука $\sigma_{ik} = \lambda'_{iklm} \varepsilon_{lm}$ для преобразования последнего слагаемого:

$$\delta R = K \Omega_{ik} \int \delta u_i \nabla_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) dV + \\ + \Omega^* \Lambda_{iklm} \int \varepsilon_{ik} \delta \varepsilon_{lm} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) dV + \int \lambda_{iklm} \varepsilon_{ik} \delta \varepsilon_{lm} dV.$$

Выполним интегрирование по частям, учитывая симмет-

рию Ω_{ik} , в первом слагаемом и тривиальное интегрирование во втором:

$$\delta R = - [K\Omega_{ik} - \Omega^* \Lambda_{iklm} \varepsilon_{lm}] \delta \varepsilon_{ik} + \frac{1}{2} \int \lambda_{iklm} \delta (\varepsilon_{ik} \varepsilon_{lm}) dV. \quad (4)$$

Если деформация происходит при постоянной температуре, то работа (4) равна изменению свободной энергии кристалла. Поэтому полная свободная энергия деформированного кристалла должна иметь вид

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0(T) + \frac{1}{2} \int \lambda_{iklm} \varepsilon_{ik} \varepsilon_{lm} dV - K\Omega_{ik} \varepsilon_{ik}(\mathbf{r}_0) + \frac{1}{2} \Omega^* \Lambda_{iklm} \varepsilon_{ik}(\mathbf{r}_0) \varepsilon_{lm}(\mathbf{r}_0), \quad (5)$$

где $\mathcal{F}_0(T)$ — свободная энергия кристалла с одним точечным дефектом в отсутствие упругого поля. Второе слагаемое (объемный интеграл) в (5) равно энергии упругого поля в кристалле без дефекта, а последние два слагаемых определяют энергию взаимодействия дефекта с упругим полем:

$$E_{\text{вз}} = -K\Omega_{ik} \varepsilon_{ik}(\mathbf{r}_0) + \frac{1}{2} \Omega^* \Lambda_{iklm} \varepsilon_{ik}(\mathbf{r}_0) \varepsilon_{lm}(\mathbf{r}_0). \quad (6)$$

Заметим, что определяющие энергию $E_{\text{вз}}$ деформации берутся в точке нахождения дефекта. Пусть дефект смещается на величину $\delta \mathbf{r}_0 \equiv \delta \mathbf{r}$ в заданном упругом поле. Тогда входящие в (6) деформации изменятся на величину $\delta \varepsilon_{ik} = (\nabla_j \varepsilon_{ik}) \delta x_j$, и изменение свободной энергии можно будет представить в виде $\delta E_{\text{вз}} = -\mathbf{F} \delta \mathbf{r}$, где сила \mathbf{F} равна

$$F_j = (K\Omega_{ik} - \Omega^* \Lambda_{iklm} \varepsilon_{lm}) \nabla_j \varepsilon_{ik}. \quad (7)$$

Это — сила, с которой упруго деформированный кристалл действует на дефект.

Мы видим, что взаимодействие точечного дефекта с упругим полем состоит из двух независимых частей, в первой из которых (линейной по деформации) дефект выступает как источник напряжений, а во второй (квадратичной по деформациям) — как локальная неоднородность.

Прежде всего обращает на себя внимание то, что связанная с точечным дефектом локальная неоднородность вносит в энергию (6) или силу (7), вообще говоря, малый

вклад, поскольку соответствующие слагаемые квадратичны по упругим деформациям. В большинстве задач этим вкладом пренебрегают, ограничиваясь линейным по упругим деформациям приближением для энергии

$$E_{\text{вз}} = -K\Omega_{ik}\varepsilon_{ik} \quad (8)$$

и силы

$$F_j = K\Omega_{ik}\nabla_j\varepsilon_{ik}. \quad (9)$$

В изотропном приближении, когда $\Omega_{ik} = \Omega_0\delta_{ik}$, энергию и действующую на центр дилатации силу удобно выразить через среднее гидростатическое давление:

$$E_{\text{вз}} = -\frac{1}{3}\Omega_0\sigma_{kk} \equiv \Omega_0 p_0, \quad (10)$$

$$F = \frac{1}{3}\Omega_0 \text{grad } \sigma_{kk} = -\Omega_0 \text{grad } p_0. \quad (11)$$

Таким образом, в линейном приближении на центр дилатации в изотропной среде (и в кубическом кристалле) действует сила, пропорциональная градиенту среднего гидростатического давления.

Полученные выше формулы позволяют описать упругое взаимодействие отдельных точечных дефектов. Но прежде чем приступить к записи общих соотношений, обратим внимание на обособленное положение изотропной среды, где точечный дефект с «шаровой симметрией» создает чисто сдвиговое поле напряжений. Оказывается, что в линейном приближении взаимодействие центров дилатации в изотропной среде отсутствует. Действительно, если считать, что (10) или (11) характеризует действие на один центр дилатации упругого поля другого центра дилатации, то в (10) или (11) следует положить $\sigma_{kk} = 0$. Однако отсутствие взаимодействия двух точечных дефектов в линейном приближении есть следствие предельно простой модели и изотропии среды, а не общее правило. В анизотропной среде или даже в изотропной среде с несимметричной моделью дефекта всегда имеется упругое взаимодействие точечных дефектов. Это взаимодействие удобно характеризовать энергией (8), считая, что Ω_{ik} относится к одному дефекту, а деформация ε_{ik} создана вторым дефектом.

Энергия взаимодействия двух точечных дефектов естественным образом может быть выражена через тензор Грина соответствующей среды. Пусть один дефект находится в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1$ (его характеристика $\Omega_{ik}^{(1)}$), а второй — в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2$ (его характеристика $\Omega_{ik}^{(2)}$). Тогда применение формулы (24) из § 11 приводит нас к такому выражению для упругой дилатации:

$$u_{ik}^{(2)}(\mathbf{r}_1) = -K\Omega_{lm}\nabla_i\nabla_l G_{km}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (12)$$

Подставим (12) в (8):

$$E_{вз}(\mathbf{R}) = K^2\Omega_{ik}^{(1)}\Omega_{lm}^{(2)}\nabla_i\nabla_l G_{km}(\mathbf{R}), \quad (13)$$

где \mathbf{R} — радиус-вектор, соединяющий два дефекта ($\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$). Поскольку $G_{ik}(\mathbf{r}) \propto 1/r$, то энергия упругого взаимодействия двух точечных дефектов, вообще говоря, обратно пропорциональна кубу расстояния между ними: $E_{вз}(\mathbf{R}) \propto 1/R^3$. Исключение составляют центры дилатации в изотропной среде, взаимодействие которых в линейном приближении отсутствует.

Чтобы вычислить энергию взаимодействия двух центров дилатации в изотропной среде, следует рассмотреть второе слагаемое в энергии (6). Локальную неоднородность, создаваемую симметричным дефектом в изотропной среде, характеризуют всего два независимых коэффициента, которые удобно ввести на основании следующего соотношения:

$$\Omega^*\Lambda_{iklm}\varepsilon_{ik}\varepsilon_{lm} = V_0\Lambda_0\left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\varepsilon_{ll}\right)^2 + V_0\Lambda_1\varepsilon_{ll}^2.$$

Тогда энергия центра дилатации в чисто сдвиговом поле деформаций ($\varepsilon_{ll} = 0$) примет вид

$$E_{вз} = \frac{1}{2}V_0\Lambda_0\varepsilon_{ik}^2. \quad (14)$$

Деформация в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1$, созданная центром дилатации, расположенным в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2$, определяется на основании формулы (26) из § 11:

$$\varepsilon_{ik}(\mathbf{r}_1) = \frac{\Omega_0}{12\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{1}{R^5} (R^2\delta_{ik} - 3X_iX_k), \quad (15)$$

где $R(X_1, X_2, X_3) = r_1 - r_2$. Подставим (15) в (14) и получим для двух точечных дефектов

$$E_{\text{вз}}(R) = \frac{1}{3} V_0 \left(\frac{\Omega_0}{4\pi} \right)^2 \Lambda_0 \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{1}{R^6}. \quad (16)$$

Естественно, энергия взаимодействия двух центров дилатации обращается в нуль как при $\Lambda_0 = 0$, так и при $\Omega_0 = 0$.

Итак, энергия взаимодействия двух симметричных точечных дефектов в изотропной среде обратно пропорциональна шестой степени расстояния между ними. Однако эта энергия имеет лишь некоторый условный характер и недостаточна для полного описания упругого взаимодействия в системе подобных точечных дефектов. Действительно, в связи с нелинейным (по деформациям) видом энергии (14) взаимодействие в системе центров дилатации не разбивается на парные взаимодействия, хотя всегда может быть разложено на тройные взаимодействия.

Рассмотрим взаимодействие одного центра дилатации (находящегося в начале координат) с большим числом таких же центров, распределенных в неограниченном кристалле (и имеющих координаты r_α). Используя (14) и (15), вычислим энергию такого взаимодействия:

$$\begin{aligned} E_{\text{вз}}^0 &= \frac{1}{2} V_0 \Lambda_0 \sum_{\alpha, \beta} \varepsilon_{ik}(r_\alpha) \varepsilon_{ik}(r_\beta) = \frac{1}{2} V_0 \left(\frac{\Omega_0}{12\pi} \right)^2 \Lambda_0 \frac{1+\nu}{1-\nu} \times \\ &\times \sum_{\alpha, \beta} \frac{[r_\alpha^2 \delta_{ik} - 3x_i^{(\alpha)} x_k^{(\alpha)}] [r_\beta^2 \delta_{ik} - 3x_i^{(\beta)} x_k^{(\beta)}]}{r_\alpha^5 r_\beta^5} = \\ &= \frac{1}{3} V_0 \left(\frac{\Omega_0}{4\pi} \right)^2 \Lambda_0 \frac{1+\nu}{1-\nu} \left\{ \sum_{\alpha} \frac{1}{r_\alpha^6} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha \neq \beta}} \frac{3 \cos^2 \theta_{\alpha\beta} - 1}{r_\alpha^3 r_\beta^3} \right\}, \quad (17) \end{aligned}$$

где $\theta_{\alpha\beta}$ — угол между лучами, соединяющими начало координат с точками $r = r_\alpha$ и $r = r_\beta$: $(r_\alpha r_\beta) = r_\alpha r_\beta \cos \theta_{\alpha\beta}$.

Если предположить, что в каждом малом элементе объема кристалла имеется много дефектов и распределены они хаотически с некоторой однородной объемной плотностью n_0 , то можно ввести среднюю энергию парного взаимодействия, определив ее следующим способом. Выполним во втором слагаемом формулы (17) суммирование

по координатам r_β , заменив его интегрированием по непрерывному распределению дефектов:

$$\sum_{\beta \neq \alpha} \frac{3 \cos^2 \theta_{\alpha\beta} - 1}{r_\beta^3} = n_0 \int (3 \cos^2 \theta - 1) 2\pi \sin \theta d\theta \frac{dr}{r}.$$

При интегрировании по углам это выражение обращается в нуль, и средняя энергия парного взаимодействия принимает вид

$$\bar{E}_{\text{вз}}^0 = \frac{1}{3} V_0 \left(\frac{\Omega_0}{4\pi} \right)^2 \Lambda_0 \frac{1+\nu}{1-\nu} \sum_{\alpha} \frac{1}{r_\alpha^6}.$$

Итак, энергия парного взаимодействия точечных дефектов (16) должна относиться к любым двум центрам дилатации из бесконечного числа однородно распределенных в неограниченном кристалле точечных дефектов.

2. Непрерывное распределение точечных дефектов в упругом поле

В реальных условиях число точечных дефектов даже в малых объемах кристалла очень велико, и потому при решении многих задач становится физически оправданным их усредненное описание. Обозначим через $n(\mathbf{r})$ плотность однотипных дефектов в кристалле ($n(\mathbf{r}) dV$ есть число дефектов в элементе объема dV), а через $c(\mathbf{r})$ — их концентрацию (отношение числа дефектов к числу узлов кристаллической решетки). Непрерывные функции координат $n(\mathbf{r})$ или $c(\mathbf{r})$ задают распределение точечных дефектов в кристаллическом образце.

Если $c(\mathbf{r}) \ll 1$, то кристалл с дефектами можно рассматривать как твердый раствор, в котором точечные дефекты являются «атомами» растворенного вещества. Тогда систему дефектов в равновесном или слабо неравновесном состоянии удобно характеризовать химическим потенциалом μ , который в отсутствие упругих напряжений является функцией концентрации дефектов $\mu = \mu_0(c)$. Будем считать, что точечные дефекты образуют слабый раствор:

$$\mu_0(c) = kT \ln c + \psi(T), \quad (18)$$

где $\psi(T)$ — некоторая функция температуры.

Однако мы убедились, что в деформированном кристалле появляется дополнительная энергия дефекта в упругом поле, играющая роль потенциальной энергии частицы во внешнем поле. Поскольку в свободной энергии (5) последние два слагаемых определяют соответствующую добавку к энергии, приходящуюся на один точечный дефект, то $E_{вз}$ совпадает с изменением химического потенциала точечных дефектов в упругом поле:

$$\mu = \mu_0(c) + E_{вз}.$$

Следует только учесть, что химический потенциал является функцией напряжений, а не деформацией, поэтому в формуле (6) необходимо выразить ε_{ik} через σ_{ik} с помощью закона Гука.

Избегая ненужных усложнений, ограничимся, во-первых, случаем центров дилатации в изотропной среде, а во-вторых, только линейным по деформациям (или напряжениям) приближением. Тогда, объединяя (10) и (18), мы получим

$$\mu = kT \ln c - \frac{1}{3} \Omega_0 \sigma_{kk} + \psi(T). \quad (19)$$

Равновесие точечных дефектов по отношению к их диффузионному перемещению определяется условием $\mu = \text{const}$. Если неоднородные упругие напряжения заданы, то равновесная концентрация дефектов будет иметь вид

$$c = c_0(T) \exp\left(\frac{\Omega_0 \sigma_{kk}}{3kT}\right), \quad (20)$$

где $c_0(T)$ — равновесная концентрация в ненапряженном кристалле.

Теперь представим себе, что в кристалле имеется дислокация, длина которой намного превышает среднее расстояние между точечными дефектами. Тогда можно поставить вопрос о равновесном распределении центров дилатации в поле напряжений дислокации. В соответствии с (20) распределение точечных дефектов должно быть резко неоднородным и существенно зависящим как от ориентации, так и от вида дислокации. Для иллюстрации подобной зависимости рассмотрим равновесное распределение дефектов вблизи краевой дислокации. Из формулы (26)

в § 12 следует, что

$$c = c_0(T) \exp \left[- \frac{(1 + \nu) b \Omega_0 M \sin \varphi}{3kT r} \right], \quad M > 0, \quad (21)$$

где r — расстояние от оси дислокации ($r \gg b$), а полярный угол φ отсчитывается от направления вектора Бюргера дислокации.

Помня, что для междоузельных атомов $\Omega_0 > 0$, а для вакансий $\Omega_0 < 0$, мы можем заключить, что вблизи дислокации всегда существуют области повышенной концентрации дефектов того или иного типа.

Таким образом, упругое взаимодействие точечных дефектов с дислокацией приводит к образованию «облаков» точечных дефектов (*атмосферы Коттрелла*) вблизи последних.

Легко проверить, что над плоскостью скольжения краевой дислокации (со стороны «лишней полуплоскости») возникает избыточная концентрация вакансий, а под плоскостью скольжения — избыточная концентрация междоузельных атомов.

В том случае, когда равновесие точечных дефектов в напряженном кристалле отсутствует, возникают диффузионные потоки, плотности которых j определяются градиентом химического потенциала:

$$j = - \frac{nD}{kT} \text{grad } \mu, \quad (22)$$

где n — плотность, а D — коэффициент диффузии соответствующих дефектов.

Запишем развернутое выражение для плотности диффузионного потока, подставляя в (22) химический потенциал (19) и принимая температуру неизменной вдоль кристалла ($T = \text{const}$):

$$j = - D \text{grad } n(r) + \frac{\Omega_0 n D}{3kT} \text{grad } \sigma_{kk}(r). \quad (23)$$

Мы видим, что неоднородное распределение упругих напряжений в кристалле вызывает дополнительный диффузионный поток, обуславливающий так называемую *восходящую диффузию* точечных дефектов в напряженном кристаллическом образце.

3. Действие поля напряжений на дислокацию

Перейдем к обсуждению воздействия упругого поля на дислокацию. Рассмотрим дислокационную петлю \mathcal{D} в поле внешних (по отношению к дислокации) упругих напряжений σ_{ik} и, частично повторяя изложенный в начале параграфа прием, найдем действующую на дислокацию силу.

Вычислим работу внешних сил δR , затрачиваемую на бесконечно малое перемещение петли \mathcal{D} . Если эта работа будет представлена в виде

$$\delta R = \oint_{\mathcal{D}} F \delta r \, dl, \tag{24}$$

где δr — смещение элемента линии дислокации, то F определит силу, с которой упругие напряжения действуют на единицу длины дислокации.

Пусть смещение дислокации порождает некоторое изменение вектора деформации δu ; тогда работа внешних сил находится так же, как и в формуле (3). Но чтобы воспользоваться преобразованием типа (3), основанным на формуле Гаусса, следует рассматривать смещение u вокруг дислокации как однозначную функцию координат. В таком случае этот вектор будет иметь разрыв на поверхности $S_{\mathcal{D}}$, опирающейся на дислокационную петлю. Чтобы исключить точки разрыва вектора u , окружим петлю \mathcal{D} некоторой замкнутой поверхностью S_0 , вне которой (в объеме V') функция $u = u(r)$ является непрерывной.

Тогда

$$\begin{aligned} \delta R &= \oint_{S_{\infty}} \sigma_{ik} \delta u_k \, dS_i = \int_{V'} \nabla_i (\sigma_{ik} \delta u_k) \, dV - \oint_{S_0} \sigma_{ik} \delta u_k \, dS_i = \\ &= \int_{V'} (\nabla_i \sigma_{ik}) \delta u_k \, dV + \int_{V'} \sigma_{ik} \delta \varepsilon_{ik} \, dV + \int_{S_0} \sigma_{ik} \delta u_k n_i \, dS, \end{aligned} \tag{25}$$

где вектор нормали n направлен наружу по отношению к поверхности S_0 .

Так как дислокация не связана с появлением дополнительных объемных сил в кристалле, то $\nabla_i \sigma_{ik} = 0$ и первый интеграл в правой части (25) исчезает. Для вычисления последних двух интегралов в качестве поверхности S_0

выберем поверхность, проходящую по верхнему и нижнему берегам разреза $S_{\mathcal{D}}$ (с «просветом» h) и соединенную бесконечно тонкой трубкой S_T радиуса ρ , охватывающей линию \mathcal{D} (схема этой поверхности в разрезе показана на рис. 54).

Если отвлечься от вносимой дислокацией локальной неоднородности материала, которая не играет значительной роли при оценке взаимодействия дислокации с упругим полем, то остающийся в правой части (25) объемный интеграл упрощается. Действительно, при сближении берегов разреза ($h \rightarrow 0$) и уменьшении радиуса трубки ($\rho \rightarrow 0$) в силу непрерывности σ_{ik} и ϵ_{ik} интеграл по объему V' превращается в интеграл по полному объему кристалла:

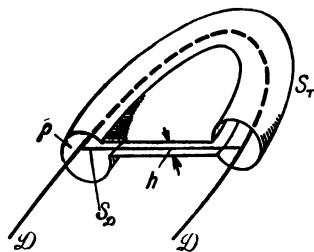


Рис. 54

при сближении берегов разреза ($h \rightarrow 0$) и уменьшении радиуса трубки ($\rho \rightarrow 0$) в силу непрерывности σ_{ik} и ϵ_{ik} интеграл по объему V' превращается в интеграл по полному объему кристалла:

$$\int_{V'} \sigma_{ik} \delta \epsilon_{ik} dV \rightarrow \int \sigma_{ik} \delta \epsilon_{ik} dV. \quad (26)$$

Поверхностный интеграл в (25) также можно упростить путем соответствующего предельного перехода. Прежде всего заметим, что интеграл по поверхности трубки S_T при $\rho \rightarrow 0$ обращается в нуль, так как поле смещений дислокации обладает следующим очевидным свойством:

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \rho u(r) = 0.$$

На остающихся в интеграле берегах разреза значения непрерывных функций σ_{ik} в пределе одинаковы, а предельные значения u отличаются на постоянную величину b . Поэтому вместо (25) получим

$$\delta R = \int \sigma'_{ik} \delta \epsilon'_{ik} dV + \frac{1}{3} \int \sigma_{ll} \delta \epsilon_{kk} dV + b_i \delta \int_{S_{\mathcal{D}}} \sigma_{ik} dS_k, \quad (27)$$

где σ'_{ik} — девиатор напряжений, ϵ'_{ik} — девиатор деформаций ($\epsilon'_{ik} = \epsilon_{ik} - 1/3 \delta_{ik} \epsilon_{ll}$), и первые два слагаемых заменяют интеграл (26) на основании очевидного

тождества

$$\sigma_{ik}\epsilon_{ik} = \left(\sigma_{ik} - \frac{1}{3} \delta_{ik}\sigma_{ll} \right) \epsilon_{ik} + \frac{1}{3} \sigma_{ll}\epsilon_{kk} = \sigma'_{ik}\epsilon'_{ik} + \frac{1}{3} \sigma_{ll}\epsilon_{kk}.$$

В последнем слагаемом правой части (27) символ бесконечно малой вариации δ вынесен за знак интеграла, поскольку распределение напряжений σ_{ik} предполагается заданным.

Если элемент линии дислокации dl смещается на $\delta r = \delta X$, то происходит изменение площади элемента поверхности $S_{\mathcal{L}}$ на величину

$$\delta S_i = e_{imn} \delta X_m \tau_n dl. \tag{28}$$

Соотношение (28) должно быть использовано при преобразовании последнего интеграла в (27).

В том случае, когда смещение δX лежит в плоскости скольжения дислокации, выражение (28) полностью характеризует происходящие в кристалле изменения. Но иначе обстоит дело при наличии смещения, перпендикулярного плоскости скольжения. В этом случае весьма существенны дополнительные условия, вытекающие из сплошности кристалла. Обычно интересуются возможностью движения дислокации без нарушения непрерывности среды. Тогда, как было показано в § 11, перемещение дислокации сопровождается локальным относительным изменением объема, величина которого дается формулой (38) из § 11. На основании этой формулы для преобразования второго интеграла в (27) может быть произведена формальная замена

$$\delta \epsilon_{kk} dV \rightarrow e_{ilm} b_l \tau_m \delta X_i dl. \tag{29}$$

Учитывая (28) и (29), представим работу в виде линейного интеграла по дислокационной петле:

$$\delta R = \oint_D e_{ilm} \tau_l \left(\sigma_{mk} - \frac{1}{3} \delta_{mk} \sigma_{ll} \right) b_k \delta X_i dl. \tag{30}$$

Сравнивая (30) с (24), мы видим, что сила F равна

$$F_i = e_{ilm} \tau_l \sigma'_{mk} b_k. \tag{31}$$

Формула типа (31), в которой девиатор напряжений σ'_{ik}

заменен тензором напряжений σ_{ik} , впервые была получена М. Пичем и Дж. Келером (1950) *).

В качестве простейшего конкретного примера формулы (31) рассмотрим силу, действующую на краевую дислокацию. Пусть ось z параллельна линии дислокации ($\tau_z = -1$), а ось x направлена вдоль ее вектора Бюргерса ($b_x = b$). Тогда

$$F_x = b\sigma_{xy}, \quad F_y = -b\sigma'_{xx} = -\frac{1}{3}b(2\sigma_{xx} - \sigma_{yy} - \sigma_{zz}). \quad (32)$$

Интересно определить составляющую силы (31) на плоскость скольжения соответствующего элемента дислокации. Пусть κ — вектор нормали к линии дислокации в плоскости скольжения. Тогда искомая составляющая силы (обозначим ее F_{\perp}) равна $F_{\perp} = \kappa F = e_{ikl}\kappa_i\tau_k\sigma_{lm}b_m$ или

$$F_{\perp} = \nu_l\sigma_{lm}b_m, \quad (33)$$

где $\nu = [\kappa\tau]$ — вектор нормали к плоскости скольжения. Поскольку векторы ν и b взаимно перпендикулярны, то, выбрав вдоль них две из координатных осей, мы видим, что сила F_{\perp} определяется всего одной из компонент σ_{ik} . Если дислокация является плоской кривой, лежащей в своей плоскости скольжения, и находится в однородном поле упругих напряжений, то сила F_{\perp} одинакова для всех элементов дислокационной линии, независимо от их положения на плоскости скольжения.

Формулы (31) и (33) позволяют очевидным образом описать взаимодействие дислокаций. Однако учет взаимодействия достаточно близких дислокаций в общем случае сопряжен с громоздкими вычислениями, которые очень редко приводят к элементарным или специальным функциям. Лишь взаимодействие параллельных дислокаций может быть легко проанализировано. Мы проиллюстрируем эту возможность на примере взаимодействия краевых прямолинейных дислокаций в изотропной среде.

*) Необходимость учета неупругого изменения объема среды при переползании дислокации, т. е. необходимость использования дивергента тензора напряжений в (31), была указана Дж. Виртманом (1965).

Сила взаимодействия двух краевых дислокаций, вообще говоря, не является радиальной и обладает существенной угловой зависимостью даже в изотропной среде. Допустим, что плоскости скольжения дислокаций параллельны.

Выберем плоскость xOz параллельно плоскостям скольжения и направим ось z параллельно линиям

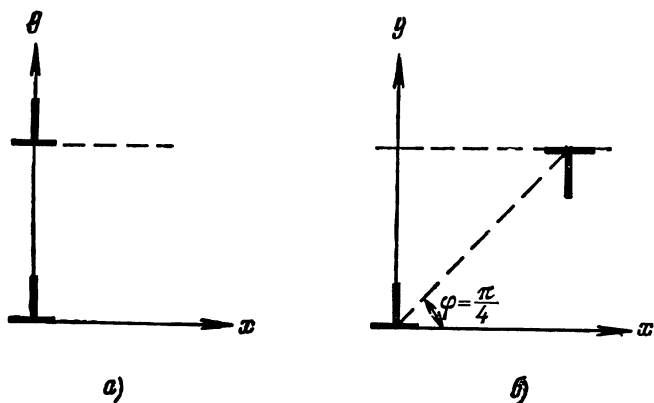


Рис. 55.

дислокаций. Тогда мы сможем производить расчет непосредственно по формулам (32). Если одна дислокация совпадает с осью z , то она действует на вторую дислокацию, проходящую через точку (x, y) на плоскости xOy , с силой, проекция которой на плоскость скольжения равна

$$F_x = M b_1 b_2 \frac{\cos \varphi \cos 2\varphi}{r}, \quad M = \frac{G}{2\pi(1-\nu)}. \quad (34)$$

Именно эта проекция представляет наибольший интерес, так как только в плоскости скольжения перемещение дислокации может иметь характер механического движения. Обращение в нуль этой проекции силы соответствует равновесной по отношению к скольжению конфигурации двух дислокаций.

Из формулы (34) вытекает, что F_x обращается в нуль при $\varphi = 0$ и при $\varphi = \pi/4$. Легко проверить, что первое из этих положений (рис. 55, а) отвечает условию устойчивого равновесия двух дислокаций одного знака ($b_1 b_2 > 0$),

а второе (рис. 55, б) — двух дислокаций разных знаков ($b_1 b_2 < 0$). Очевидно, что первая конфигурация (рис. 55, а) остается устойчиво равновесной и в случае числа дислокаций больше двух. Данное обстоятельство является причиной того, что дислокационная стенка, упомянутая в § 12 и изображенная на рис. 52, а, является равновесной и устойчивой структурой.

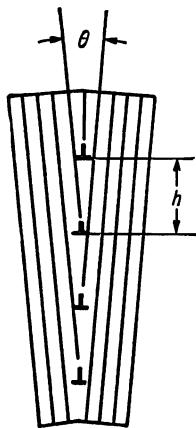


Рис. 56.

Легко понять геометрический смысл деформации кристалла, порожденной такой системой дислокаций. Наличие «стенки» приводит к разориентации двух частей кристалла, разделенных плоскостью, проходящей через рассматриваемую систему дислокаций (рис. 56). Если h — расстояние между дислокациями (в макроскопической теории обязательно $h \gg b$), то угол разориентации двух частей кристалла равен $\theta = b/h$.

Таким образом, дислокационная стенка служит моделью границы двух блоков с малой разориентацией. Мы видели, что упругие напряжения убывают экспоненциально по мере удаления от дислокационной стенки. Это значит, что монокристалл по обеим сторонам от границы блоков остается ненапряженным и решетка является правильной. Вся упругая энергия, связанная с сопряжением двух слегка разориентированных участков монокристалла, сосредоточена в узком слое вблизи границы блоков.

§ 14. ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИЙ И ПЛАСТИЧНОСТЬ КРИСТАЛЛА

1. Динамические уравнения теории упругости для кристалла с дислокациями

До сих пор мы предполагали дислокации неподвижными либо анализировали их квазистатическое перемещение. Выясним теперь, какой вид имеет полная система уравнений теории упругости, определяющая деформации

и напряжения в кристалле, когда дислокации совершают заданное движение.

Содержащее описание дислокационной особенности уравнение

$$e_{ikl} \nabla_k u_{lm} = -\rho_{im} \quad (1)$$

не зависит от того, покоятся или движутся дислокации. При этом тензор u_{ik} по-прежнему остается величиной,

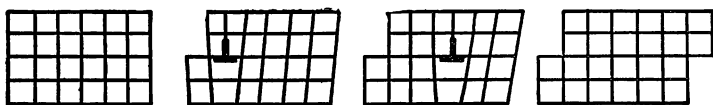


Рис. 57.

определяющей упругую дисторсию, и его симметричная часть есть тензор упругой деформации, связанный обычным законом Гука с тензором напряжений. Этого уравнения, однако, теперь недостаточно для полного формулирования задачи. Полная система уравнений должна определять также и скорость v перемещения точек среды.

Если при смещении элементов среды дислокации остаются неподвижными, то имеет место очевидное равенство

$$\frac{\partial u_{ik}}{\partial t} = \nabla_i v_k, \quad (2)$$

где $v = v(r, t)$ — скорость смещения элементов среды с координатами r в момент времени t .

Если же дислокации движутся и плотность дислокаций меняется со временем, то равенство (2) несовместимо с уравнением (1). Физическая причина последнего заключается в том, что движение дислокаций сопровождается, помимо изменения упругой деформации, изменением формы кристалла, не связанным с возникновением напряжений — с *пластической деформацией*.

Связь движения дислокаций с пластической деформацией ясно демонстрируется на рис. 57: в результате прохождения краевой дислокации слева направо верхняя (над плоскостью скольжения) часть кристалла оказывается сдвинутой на один период решетки; поскольку решетка в результате остается правильной, то кристалл остается

ненапряженным. В противоположность упругой деформации, однозначно связанной с термодинамическим состоянием тела, пластическая деформация является функцией процесса. (При рассмотрении неподвижных дислокаций вопрос о разделении упругой и пластической деформаций не возникает: нас интересуют при этом лишь напряжения, не зависящие от предыдущей истории кристалла.)

Чтобы учесть связь движения дислокации с пластической деформацией, заменим уравнение (2) на более общее:

$$\frac{\partial u_{ik}}{\partial t} = \nabla_i v_k + j_{ik}, \quad (3)$$

в котором тензор j_{ik} должен быть выбран так, чтобы уравнения (1) и (3) были совместными. Условия совместности уравнений (1) и (3) имеют вид

$$\frac{\partial \rho_{ik}}{\partial t} + e_{ilm} \nabla_l j_{mk} = 0. \quad (4)$$

Для выяснения физического смысла тензора j_{ik} рассмотрим вектор полного геометрического смещения точек среды u , отсчитываемый, скажем, от их положения перед началом процесса деформации. Производная вектора u по времени определяет скорость смещения элемента среды $\dot{u} = v$, поэтому

$$\frac{\partial w_{ik}}{\partial t} = \nabla_i v_k, \quad (5)$$

где w_{ik} — тензор полной дисторсии: $w_{ik} = \nabla_i u_k$.

С помощью выражения (5) перепишем (3) в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_{ik} - u_{ik}) = -j_{ik}.$$

Разность $w_{ik} - u_{ik}$ определяет ту часть тензора полной дисторсии, которая не связана с упругими напряжениями и обычно называется пластической дисторсией тела. Обозначим эту величину $u_{ik}^{пл}$ и получим

$$\frac{\partial u_{ik}^{пл}}{\partial t} = -j_{ik}. \quad (6)$$

Таким образом, изменение тензора пластической дисторсии в некоторой точке среды за малое время δt равно

$$\delta u_{ik}^{пл} = -j_{ik} \delta t. \quad (7)$$

Если написать соотношение типа (7) для тензора пластической деформации $\epsilon_{ik}^{пл}$, то оно будет иметь вид

$$\delta \epsilon_{ik}^{пл} = -\frac{1}{2} (j_{ik} + j_{ki}) \delta t.$$

Чтобы связать тензор j_{ik} с движением дислокаций, заметим, что условие (4) можно рассматривать как дифференциальное выражение «закона сохранения вектора Бюргерса» в среде. Действительно, проинтегрируем обе стороны уравнения (4) по поверхности, опирающейся на некоторую замкнутую линию L , и, введя полный вектор Бюргерса b охваченных линией L дислокаций, а также воспользовавшись теоремой Стокса, получим

$$\frac{db_k}{dt} = -\oint_L dx_i j_{ik}.$$

Из смысла этого равенства следует, что интеграл в его правой части определяет величину вектора Бюргерса, «протекающего» в единицу времени через контур L , т. е. уносимого дислокациями, пересекающими линию L . Поэтому естественно назвать j_{ik} тензором *плотности потока дислокаций*.

Ясно, в частности, что в случае отдельной дислокационной петли тензор j_{ik} имеет вид

$$j_{ik} = e_{ilm} \tau_l V_m b_k \delta \quad (8),$$

где V — скорость линии дислокации в данной ее точке. При этом вектор потока $j_{ik} dl_i$ через элемент dl контура пропорционален dl $[\tau V] = V [dl \tau]$, т. е. проекции скорости V на направление, перпендикулярное как dl , так и τ . Из геометрических соображений очевидно, что так и должно быть — только эта проекция скорости приводит к пересечению дислокацией элемента dl .

Если же распределение дислокаций описывается непрерывными функциями ρ_{ik} , то естественным обобщением

(8) служит формула

$$j_{ik} = e_{ilm} \sum_s \rho_{ik}^s V_m^s,$$

где индекс s отличает плотности дислокаций разного типа (например, дислокаций разного знака в случае системы параллельных краевых дислокаций), а вектор V^s равен средней скорости дислокаций типа s в рассматриваемой точке кристалла.

Тензор j_{ik} имеет самостоятельный смысл и является основной характеристикой движения дислокаций. Связь плотности потока дислокаций со скоростью пластической деформации, т. е. соотношения, равноценные (6) или (7), были указаны *Е. Кренером* и *Г. Ридером* (1956).

Соберем, наконец, полную систему дифференциальных уравнений, описывающих упругие поля в кристалле при наличии движущихся дислокаций. Эта система состоит из уравнений (1), (3) и уравнения движения сплошной среды

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \nabla_k \sigma_{ki}, \quad \sigma_{ik} = \lambda_{iklm} u_{lm}. \quad (9)$$

Фигурирующие в этих уравнениях тензоры ρ_{ik} и j_{ik} являются заданными функциями координат (и времени), характеризующими распределение и движение дислокаций.

2. Пластическая деформация и движение дислокаций

Мы видели, что движение отдельной дислокации порождает локальную пластическую деформацию кристалла и изменение полной пластической деформации тела однозначно связано с распределением в нем движущихся дислокаций. Следовательно, движущиеся дислокации являются элементарными носителями пластичности кристалла. Поэтому задача о расчете пластической деформации кристалла в принципе сводится к задаче о нахождении плотности потока дислокаций j_{ik} .

Специальный интерес представляет связь следа тензора j_{ik} ($j_0 \equiv j_{kk} = \partial u_{kk}^{pl} / \partial t$) с уравнением непрерывности сплошной среды. Величина j_0 входит в уравнение,

получающееся из (3):

$$\operatorname{div} \mathbf{v} - \frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t} = -j_0. \quad (10)$$

Свертка ε_{kk} есть относительное упругое изменение объема элемента среды, связанное очевидным образом с соответствующим относительным изменением ее плотности:

$$\varepsilon_{kk} = -\frac{\delta \rho}{\rho} \quad (11)$$

(ρ — плотность среды). Подставляя (11) в (10) и используя линейность теории, приходим к соотношению

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = -\rho j_0. \quad (12)$$

Если при движении дислокации перемещение элементов среды происходит без нарушения сплошности, то в силу уравнения непрерывности левая часть (12) исчезает и

$$j_0 \equiv j_{kk} = \frac{\partial \varepsilon_{kk}^{\text{пл}}}{\partial t} = 0. \quad (13)$$

Таким образом, уравнение (3) включает в себя известное в теории пластичности утверждение, что чисто пластическая деформация, происходящая без нарушения сплошности среды, не приводит к всестороннему сжатию или растяжению (которые должны быть связаны с возникновением внутренних напряжений).

Для линейных дислокаций условие (13) имеет простой смысл. Действительно, как следует из (8), в случае отдельной линейной дислокации свертка j_0 пропорциональна $[\mathbf{b}\boldsymbol{\tau}] V$, т. е. проекции скорости дислокации на направление, перпендикулярное векторам $\boldsymbol{\tau}$ и \mathbf{b} , другими словами, на нормаль к плоскости скольжения дислокации. Таким образом, условие (13) означает, что если пластическая деформация кристалла создается только движением дислокаций, то при сохранении непрерывности среды вектор скорости дислокации V всегда лежит в ее плоскости скольжения. Этот вывод соответствует результату анализа разных типов перемещения дислокации (§ 11) и означает следующее. Если под воздействием внешних нагрузок дислокации совершают неконсервативное движение, то

для сохранения сплошности среды в процесс пластической деформации должен быть включен механизм неупругого увеличения удельного объема среды. Действие такого механизма, как уже отмечалось, сводится к макроскопическому скоплению вакансий или междоузельных атомов вдоль линии дислокации.

Обозначим через $q(r)$ относительное увеличение удельного объема среды в точке r в единицу времени. Тогда в соответствии с формулой (38) из § 11 или формулами (8) и (12) настоящего параграфа переполнение отдельной дислокации должно порождать такую величину q :

$$q(r) = V [b\tau] \delta(\xi), \quad (14)$$

где ξ — двухмерный радиус-вектор, отсчитываемый от оси дислокации.

Если система дислокаций в кристалле обладает нулевым суммарным вектором Бюргера ($B = 0$) и движение дислокаций не изменяет этого условия, то плотность потока дислокаций может быть выражена через тензор дислокационной поляризации (см. § 12)

$$j_{ik} = - \frac{\partial P_{ik}}{\partial t}. \quad (15)$$

В этом легко убедиться, вычислив, например, интеграл $\int j_{ik} dV$ по произвольной части объема тела с помощью выражения (8) как сумму по всем заключенным в этом объеме дислокационным петлям и учтя, что изменение вектора площади дислокационной петли равно

$$\frac{dS_i}{dt} = \oint_{\mathcal{D}} e_{ilm} V_l dx_m.$$

Сравнивая выражения (15) и (6), видим, что

$$\delta u_{ik}^{пл} = \delta P_{ik}.$$

Следовательно, при $B = 0$ изменение тензора пластической дисторсии в каждой точке среды равно изменению тензора дислокационной поляризации в той же точке. Однако следует помнить, что между тензорами P_{ik} и $u_{ik}^{пл}$ существует принципиальное различие. В то время как

тензор P_{ik} является функцией состояния кристалла, тензор пластической дисторсии $u_{ik}^{пл}$ не является функцией состояния тела; он зависит от процесса, приведшего тело в данное состояние. Если условиться считать пластическую деформацию отсутствующей в состоянии с $P_{ik} = 0$, то будет $u_{ik}^{пл} = P_{ik}$. Тогда

$$u_{ik} = w_{ik} - u_{ik}^{пл} = \nabla_i u_k - P_{ik},$$

где снова u — вектор полного геометрического смещения от положения в недеформированном состоянии. Уравнение (3) при этом удовлетворяется тождественно, а уравнение движения сплошной среды (9) принимает вид

$$\rho \ddot{u}_i - \lambda_{iklm} \nabla_k \nabla_l u_m = -\lambda_{iklm} \nabla_k P_{lm}. \quad (16)$$

Таким образом, определение упругой деформации, созданной движущимися дислокациями с $B = 0$, сводится к задаче обычной теории упругости с объемными силами, распределенными по кристаллу с плотностью $f_i^{(s)} = -\lambda_{iklm} \nabla_k P_{lm}$.

3. Эффективная масса и уравнение движения дислокации

Сформулированная в начале параграфа система уравнений определяет тензор упругой дисторсии u_{ik} и вектор скорости смещения среды v по известному распределению дислокаций и их потоков. Тензоры ρ_{ik} и j_{ik} , а значит, и движение дислокаций считаются заданными. Для того чтобы система уравнений была полностью замкнутой и определяла самосогласованную эволюцию дислокаций и упругого поля, необходимо показать, как изменяются плотности дислокаций и их потоков под действием упругих полей. Иными словами, должно быть указано уравнение движения дислокации.

Так как отдельные дислокационные петли являются линиями своеобразных особенностей упругого поля, то уравнение движения дислокации есть уравнение движения особенности упругого поля. Физическая идея получения уравнения движения особенности поля (в данном случае дислокации) общеизвестна. Поскольку дислокация

создает в кристалле поле деформаций и напряжений, то с ней связана определенная упругая энергия кристалла. Естественно считать эту энергию энергией дислокации. При движении дислокации должно перемещаться связанное с ней упругое поле. Но поле всегда обладает некоторой инерцией, обусловленной тем, что энергия динамического упругого поля отличается от энергии статического поля. Инерционность упругого поля дислокации можно трактовать как инерционность самой дислокации, описывая это обстоятельство некоторой эффективной массой дислокации. Известные энергия и масса дислокации определяют ее уравнение движения. При таком подходе энергия и масса дислокации, а следовательно, и уравнение движения дислокации будут иметь чисто полевое происхождение.

Принципиальная схема осуществления идеи о полевой природе движения дислокации может быть представлена в следующем виде. Необходимо упругую энергию поля, созданного движущейся дислокацией и внешними силами, выразить через мгновенные координаты и скорости элементов дислокационной петли и через внешние напряжения. Таким образом, формальная запись упругой энергии в некоторый момент времени будет включать в себя как напряженности внешних полей, так и координаты и скорости дислокации в тот же момент времени. Ту часть энергии, которая зависит только от координат и скоростей дислокации, следует считать ее собственной энергией (энергией покоя и кинетической энергией).

Программа вычисления собственной энергии дислокации совершенно ясна, однако ее реализация в общем случае дислокационной петли, произвольно перемещающейся в кристалле, связана с громоздкими выкладками даже в изотропном приближении. Поэтому мы вынуждены отказаться от рассмотрения последовательного и полного вывода уравнения движения дислокации и постараемся в ходе анализа простейшего примера и его почти очевидных обобщений лишь пояснить формулировку этого уравнения.

Рассмотрим равномерное движение прямолинейной винтовой дислокации в изотропной среде. Выберем, как и прежде, ось z вдоль линии дислокации, а ось x — параллельно направлению скорости дислокации V . Как и в

статическом случае (см. § 12), упругое поле винтовой дислокации полностью описывается единственной отличной от нуля компонентой вектора смещений $u_z = u(x, y, t)$, и уравнение движения среды (9) сводится к двумерному волновому уравнению

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = s^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad s^2 = \frac{G}{\rho}. \quad (17)$$

Решение уравнения (17) должно обладать стандартной дислокационной особенностью на линии $x = Vt, y = 0$ и потому удобно, сделав замену переменных

$$x' = \frac{x - Vt}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta^2 = \frac{V^2}{s^2} = \frac{\rho V^2}{G},$$

привести уравнение (17) к виду

$$\Delta u^0 = 0, \quad \Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad (18)$$

где $u^0(x', y) = u(x, y, t)$.

Уравнение (18) совпадает с уравнением (20) из § 12, и его решение имеет дислокационную особенность в точке $x' = y = 0$. Следовательно, функция $u^0(x', y)$ тождественна соответствующему статическому решению (формула (21) из § 12), если в последнем произвести очевидную замену $x \rightarrow x'$.

Полная энергия поля вокруг дислокации, отнесенная к единице ее длины, равна

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \int [\rho \dot{u}_z^2 + G(u_{xz}^2 + u_{yz}^2)] dx dy = \\ &= \frac{1}{2} G \int \left[\frac{1 + \beta^2}{1 - \beta^2} \left(\frac{\partial u^0}{\partial x'} \right)^2 + \left(\frac{\partial u^0}{\partial y} \right)^2 \right] dx dy = \\ &= \frac{1}{2} G \sqrt{1 - \beta^2} \int \left[\frac{1 + \beta^2}{1 - \beta^2} \left(\frac{\partial u^0}{\partial x'} \right)^2 + \left(\frac{\partial u^0}{\partial y} \right)^2 \right] dx' dy. \quad (19) \end{aligned}$$

Перейдем в интеграле (19) к полярным координатам на плоскости $x'Oy$:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} G \sqrt{1 - \beta^2} \int \left(\frac{1 + \beta^2}{1 - \beta^2} \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi \right) (u_{\varphi z}^0)^2 r dr d\varphi = \\ &= \frac{\pi G}{\sqrt{1 - \beta^2}} \int (u_{\varphi z}^0)^2 r dr. \end{aligned}$$

Наконец, подставим выражение для $u_{\varphi z}^0$, вытекающее из формулы (21) или (22) в § 12:

$$E = \left(\frac{b}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi G}{\sqrt{1-\beta^2}} \int \frac{dr}{r} = \frac{Gb^2}{4\pi} \frac{\ln(L/r_0)}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (20)$$

где параметры L и r_0 выбираются из тех же соображений, что и в статическом случае.

Выражая в (20) модуль сдвига G через скорость поперечных звуковых волн ($G = \rho s^2$), мы приходим к такой любопытной формуле для энергии единицы длины винтовой дислокации:

$$E = \frac{m^* s^2}{\sqrt{1-V^2/s^2}}, \quad m^* = \frac{\rho b^2}{4\pi} \ln \frac{L}{r_0}. \quad (21)$$

Несмотря на содержащийся в (21) «релятивистский» радикал, придающий этой формуле вид некоторой универсальной зависимости, мы должны ограничиться ее разложением по малой скорости дислокации, полагая $V \ll s$. Такое кажущееся «обеднение» формулы (21) происходит по той причине, что рассматриваемая энергия дислокации имеет полевое происхождение и, в частности, включает в себя энергию взаимодействия различных элементов одной и той же дислокационной линии. Но для учета взаимодействия удаленных элементов дислокационной петли в случае нестационарного движения нужно иметь возможность выразить упругое поле дислокации в некоторый момент времени через ее координаты и скорости в тот же момент времени. В общем случае из-за запаздывания упругих волн такого выражения не существует. Однако если скорость дислокации V мала по сравнению со скоростью звука в соответствующем кристалле s , это всегда можно сделать в линейном по V/s приближении. Иными словами, так же как в электродинамике, упругую энергию взаимодействия всегда можно написать лишь в квадратичном по V/s приближении.

Поэтому, желая получить выражение для E , справедливое при любой зависимости скорости винтовой дислокации V от времени, мы должны, используя условие $V \ll s$, заменить (21) на

$$E = m^* s^2 + \frac{1}{2} m^* V^2. \quad (22)$$

Первое слагаемое в (22) совпадает с собственной энергией единицы длины покоящейся дислокации (см. формулу (30) из § 12), а второе естественно считать ее кинетической энергией. Тогда величину m^* следует назвать *эффективной массой* единицы длины винтовой дислокации. Как и в случае с энергией покоя, нетрудно оправдать наше предположение о чисто полевой массе дислокации. Дело в том, что при движении реальной дислокации в кристалле часть атомов в окрестности оси дислокации на расстояниях порядка r_0 от нее также приходит в движение. Это создает дополнительную инерцию дислокации, связанную с обычной массой этих атомов. Порядок величины массы атомов внутри трубки радиуса $r_0 \sim b$ на единице длины дислокации может быть оценен как $\rho r_0^3 \sim \rho b^3$. Сравнивая эту оценку с формулой (21) для m^* , мы видим, что с логарифмической точностью массу дислокации действительно можно считать полевой.

Если имеется произвольная слабо искривленная дислокационная петля, то ее инерционные свойства также можно характеризовать некоторой тензорной линейной плотностью эффективной массы m_{ik}^* , зависящей, вообще говоря, от точки на линии дислокации. Можно понять, что в точке, где характерный радиус кривизны дислокационной петли равен R ($R \gg b$), оценка порядка величины эффективной массы имеет такой же вид, как и оценка энергии покоя дислокации *):

$$m^* \sim \frac{\rho b^3}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}. \quad (23)$$

Зная энергию движущейся дислокации, а также выражение для силы, с которой действует на дислокацию внешнее поле, нетрудно получить уравнение движения дислокации в заданном поле. Уравнение движения элемента дислокационной петли, расположенного в точке l на линии дислокации, может быть записано аналогично второму закону Ньютона:

$$m_{ik}^*(l) W_k(l) = F_i^{(0)}(l) + e_{ijm} \tau_j \sigma_{mk}(l) b_k + S_i(l, V), \quad (24)$$

*) Если дислокация совершает изгибные гармонические колебания, характеризующиеся некоторой длиной волны λ , то в (23) следует считать $R \sim \lambda$.

где $W = \dot{V}$ — ускорение элемента дислокации, а σ_{ik} — тензор напряжений, созданных внешними (по отношению к дислокации) источниками. Первое слагаемое в правой части (24) определяет силу собственного квазистатического самодействия F_0 искривленной дислокации, обусловленную ее энергией покоя. В так называемом приближении линейного натяжения, справедливом при $R \gg b$, порядок величины этой силы оценивается очевидным образом:

$$F_0 \sim \frac{m^* s^2}{R} \approx \frac{Gb^2}{R}. \quad (25)$$

Последнее слагаемое в правой части (24) — это сила торможения, испытываемая дислокацией в реальном кристалле. В этой силе можно выделить две физически разные части. Первую часть составляют силы, возникновение которых обусловлено дискретностью структуры кристалла и атомным характером строения ядра дислокации. Среди таких сил имеется статическая составляющая, аналогичная в некотором смысле силе «сухого трения» (сила Пайерлса), и составляющая, зависящая от скорости дислокации. Последняя сила связана с перемещающимися вместе с дислокацией специфическими искажениями кристаллической решетки на ее оси и вынужденной перестройкой ядра дислокации при ее движении *). Сюда же можно отнести силу торможения, порождаемую динамическим взаимодействием ядра дислокации с разными дефектами кристаллической решетки.

Вторая часть силы торможения обусловлена различными макроскопическими механизмами диссипации энергии движущейся дислокации. Это, во-первых, «радиационное трение» пестационарно движущейся дислокации и, во-вторых, потеря энергии динамического упругого поля (даже при $V = \text{const}$), связанная с поглощением упругих волн вследствие дисперсии упругих модулей реального кристалла.

*) Упомянутая перестройка дислокационного ядра включает в себя, в частности, образование и перемещение вдоль дислокации так называемых перегибов (ступенек), с помощью которых соединяются участки одной и той же дислокации, расположенные в соседних «долинах» пайерлсовского потенциального рельефа. В ряде случаев кинетика перегибов оказывается основным механизмом медленного движения дислокации.

В заключение заметим, что инерционный член в уравнении движения, т. е. левая часть соотношения (24), играет существенную роль только при резко нестационарном движении дислокации, когда ее ускорение очень велико. Если же ускорение дислокации невелико, то определяющим является действие сил торможения, включающих в себя диссипативные силы. Величина и зависимость от скорости дислокации именно этих сил определяет в основном характер почти стационарного движения дислокации.

§ 15. ДИФФУЗИОННАЯ КИНЕТИКА МЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

1. Направленные потоки точечных дефектов и течение кристалла

Пластическое деформирование, связанное с механическим движением (скольжением) дислокаций, обладает двумя весьма важными характерными чертами. Во-первых, оно происходит со сравнительно большими скоростями, и обеспечивающая его система дислокаций за короткое время приходит в равновесие, отвечающее заданным напряжениям. Поэтому каждому квазистатическому изменению внешней нагрузки можно сопоставить вполне определенную величину изменения пластической деформации. Последнее означает, что существует некоторая отличная от закона Гука зависимость деформаций от напряжений, определяющая нелинейный (и, как правило, гистерезисный) закон пластичности. Во-вторых, это деформирование имеет пороговый характер, поскольку скольжение дислокаций начинается только под действием нагрузки, превышающей некоторую «стартовую» величину типа напряжения Пайерлса. При напряжениях, меньших «стартовых», подобная пластическая деформация не происходит (при достаточно низких температурах).

Однако в реальном кристалле может развиваться процесс пластического деформирования совсем иной природы и с иными характерными проявлениями. Это — так называемое *течение кристалла*, заключающееся в медленном (при не очень высоких температурах) изменении формы образца под действием фиксированных внешних нагрузок. Для начала течения не требуется, чтобы напряжение

превышало какую-либо критическую величину, и в принципе течение кристалла совершается при сколь угодно малых нагрузках. Если в кристалле устанавливается некоторый стационарный режим с постоянной скоростью деформации, то говорят об установившемся течении, и скорость такого течения однозначно определяется величиной действующего на кристалл напряжения.

Наиболее простым случаем течения кристалла, представляющим определенный самостоятельный интерес, является диффузионное течение монокристалла. Структура кристаллической решетки при таком течении не нарушается, и неупругое формоизменение твердого тела всецело обуславливается направленными потоками точечных дефектов типа вакансий или междоузельных атомов. В том случае, когда напряжения в кристалле однородны, единственной причиной направленных диффузионных потоков является неоднородность граничных условий для точечных дефектов на внешней поверхности образца. Поэтому мы начнем свой анализ с формулировки этих условий.

Выходящая из кристалла через его внешнюю поверхность вакансия уменьшает на единицу число узлов решетки и «уносит» из кристалла атомный объем Ω^*). «Выпадение» макроскопического числа вакансий через некоторый элемент поверхности кристалла приводит к перемещению последней на величину, прямо пропорциональную числу ушедших вакансий. Легко сообразить, что нормальная составляющая скорости перемещения поверхности V_n связана с соответствующим потоком вакансий следующим соотношением:

$$V_n = - \Omega j_n^0, \quad (1)$$

где j_n^0 — нормальная компонента плотности потока вакансий на поверхности тела.

Аналогичные рассуждения можно повторить относительно потока междоузельных атомов. Вышедший из кристалла и осевший на его поверхности междоузельный атом становится «нормальным» атомом, благодаря чему число регулярных узлов решетки увеличивается на еди-

*) Во избежание путаницы в настоящем параграфе мы будем обозначать атомный объем через Ω ($\Omega \equiv V_0$; в кубическом кристалле $\Omega = a^3$).

ницу, а объем кристалла получает приращение Ω . Следовательно, вклад потока междоузельных атомов в перемещение поверхности образца отличается лишь знаком от такового для вакансий. Поэтому формула (1) становится универсальной, если положить в ней $j^0 = j_v - j_m$, где j_v и j_m — это соответственно плотности потоков вакансий и междоузельных атомов через поверхность тела.

Если к поверхности кристалла приложено нормальное напряжение $\sigma_n = \sigma_{ik}n_i n_k$, где \mathbf{n} — единичный вектор нормали, то перемещение этой поверхности сопровождается работой внешних сил. Эта работа, рассчитанная на единицу площади поверхности и совершаемая за время δt , равна

$$\delta R = \sigma_n V_n \delta t = -\Omega \sigma_n j_n^0 \delta t = -\Omega \sigma_n \delta N,$$

где δN — число вакансий, уходящих из кристалла через единичную площадку за время δt . Следовательно, при уходе одной вакансии совершается работа

$$\frac{\delta R}{\delta N} = -\Omega \sigma_n. \quad (2)$$

Записывая соотношение типа (2) для междоузельных атомов, следует в правой части поменять знак на обратный.

Обычно диффузионные потоки малы и приводят, вообще говоря, к медленному перемещению поверхности кристалла. Тогда можно считать, что на поверхности успевает устанавливаться локальное равновесие точечных дефектов, и их химический потенциал совпадает с таковым для равновесного состояния, отвечающего давлению $p = -\sigma_n$. Поскольку работа внешних сил (2) отнесена к одной вакансии, то она определяет изменение химического потенциала вакансий на нагруженной поверхности по сравнению с его значением у свободной поверхности:

$$\mu^{(v)}|_S = \mu_0^{(v)} + \Omega \sigma_n. \quad (3)$$

Для междоузельных атомов вместо (3) следует писать

$$\mu^{(m)}|_S = \mu_0^{(m)} - \Omega \sigma_n.$$

Но в дальнейшем для определенности мы будем говорить только о вакансиях ($\mu = \mu^{(v)}$) и их потоках ($j = j_v$).

Плотность диффузионного потока определяется через градиент химического потенциала *)

$$j = -\frac{c_0 D}{\Omega k T} \text{grad } \mu, \quad (4)$$

где в случае малых отклонений от равновесия c_0 обозначает равновесную концентрацию вакансий в отсутствие внешних нагрузок. Если диффузионные потоки стационарны ($\text{div } j = 0$), что мы будем предполагать, то в изотропном приближении (или в кубическом кристалле) химический потенциал является гармонической функцией координат:

$$\Delta \mu = 0. \quad (5)$$

Рассмотрим теперь пример диффузионного течения кристаллического образца прямоугольного сечения, подвергнутого чисто сдвиговой нагрузке следующего вида (рис. 58): $\sigma_n = -p$ на его боковых поверхностях $x = \pm L_1$ ($p > 0$) и $\sigma_n = p$ на поверхностях $y = \pm L_2$. В силу условия (3) граничные значения хими-

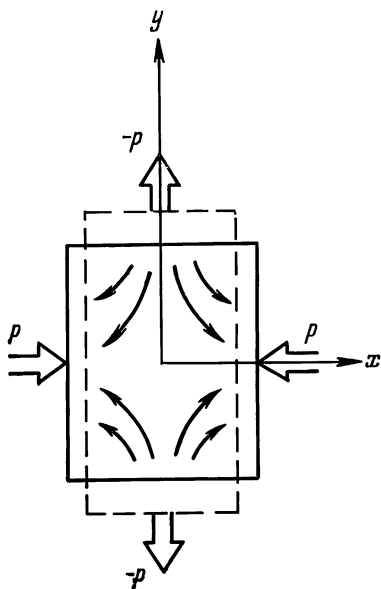


Рис. 58.

ческого потенциала в таком кристалле равны

$$\begin{aligned} \delta\mu &= -\Omega p \quad \text{при } x = \pm L_1; \\ \delta\mu &= \Omega p \quad \text{при } y = \pm L_2, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\delta\mu$ определяется как отклонение μ от его равновесного значения в отсутствие внешней нагрузки: $\delta\mu = \mu - \mu_0$.

*) Ясно, что формула (4) со скалярным коэффициентом диффузии D справедлива только в кубическом кристалле и в изотропной среде.

При наличии неоднородных по внешней поверхности кристалла граничных условий (6) в объеме кристалла возникнут стационарные потоки вакансий, направление которых указано стрелками на рис. 58. Эти потоки будут переносить материал с боковых поверхностей $x = \pm L_1$ на поверхности $y = \pm L_2$, в результате чего произойдет удлинение образца вдоль оси y и укорочение в поперечном направлении.

Задача о распределении потоков вакансий без особого труда может быть решена точно, но требует написания громоздких формул. Поэтому мы ограничимся оценкой порядков величин этих потоков и порождаемой ими скорости деформации. На основании (1), (4) и (6) можно заключить, что по порядку величины нормальная скорость смещения какой-либо поверхности кристалла равна

$$V_n \sim \Omega j \sim \frac{c_0 D}{kT} \frac{\delta \mu}{L} \sim \frac{c_0 D}{L} \left(\frac{\Omega p}{kT} \right), \quad L \sim L_1 \sim L_2.$$

Разделив V_n на размер образца L , мы получим характеризующую установившееся течение кристалла скорость относительного изменения линейных размеров тела, которое по очевидным причинам должно соответствовать чисто сдвиговой деформации:

$$\dot{\epsilon}_{yy} = -\dot{\epsilon}_{xx} \sim \frac{c_0 D}{L^2} \left(\frac{\Omega p}{kT} \right). \quad (7)$$

Формула (7) содержит упоминавшуюся в начале раздела однозначную зависимость скорости установившегося течения от напряжений. В данном случае эта зависимость является линейной. Обращает на себя внимание характерная для диффузионного течения кристалла обратная зависимость скорости деформации от квадрата линейного размера кристаллического образца.

Проанализированный выше на простейшем примере механизм диффузионного течения был предложен и использован для вычисления скорости течения монокристалла Ф. Набарро (1948) и К. Херрингом (1950).

В качестве другого интересного и столь же простого примера физического явления, демонстрирующего механизм диффузионного течения кристалла, мы рассмотрим процесс роста одиночной поры в безграничном теле. Пусть в кристалле имеется замкнутая полость (пора), заполнен-

ная каким-либо нейтральным газом под давлением p . Поверхность поры является граничной поверхностью для кристалла, и на этой поверхности для химического потенциала вакансий должно выполняться условие (3). Ограничимся изотропным приближением, считая поверхность равновесной поры сферической. Тогда входящее в (3) нормальное напряжение можно записать как

$$\sigma_n = \frac{2\gamma}{R} - p,$$

где R — радиус поры, а γ — коэффициент поверхностного натяжения на свободной поверхности кристалла, и граничное условие на поверхности поры примем вид

$$\delta\mu|_s = \Omega \left(\frac{2\gamma}{R} - p \right). \quad (8)$$

Если внешняя поверхность тела свободна и в кристалле поддерживается некоторое малое пересыщение вакансий δc , то вдали от поры (формально — на бесконечности)

$$\delta\mu = \frac{\partial\mu_0(c)}{\partial c} \delta c = kT \frac{\delta c}{c_0}. \quad (9)$$

Таким образом, стационарное отклонение химического потенциала μ от равновесного значения описывается решением уравнения (5), удовлетворяющим граничным условиям (8) и (9).

Скорость изменения радиуса поры совпадает со скоростью нормального смещения ее поверхности, если соответствующая нормаль направлена от центра поры. Используя (1) и (4), легко получить

$$\frac{dR}{dt} = V_n = -\Omega j_n^\gamma = \frac{c_0 D}{k\Gamma} \frac{\partial\mu}{\partial n} \Big|_s. \quad (10)$$

В силу симметрии задачи химический потенциал μ не меняется вдоль поверхности поры. Но тогда задача о нахождении величины dR/dt имеет простой электростатический аналог, а именно, она эквивалентна задаче о нахождении плотности заряда на симметричном проводнике в изотропном диэлектрике по известному его потенциалу относительно бесконечности. Последняя задача имеет

очевидное решение: полный заряд Q на проводнике равен

$$Q = C (\varphi_0 - \varphi_\infty). \quad (11)$$

Здесь φ_0 — потенциал проводника, φ_∞ — потенциал на бесконечности, а C — электрическая емкость проводника. Для сферы $Q = 4\pi R^2 \eta$, где η — поверхностная плотность заряда, и $C = R$.

В нашем случае роль электрического потенциала играет μ , а «плотность заряда» η , как следует из (10), равна $\eta = -(kT/4\pi c_0 D) dR/dt$.

Используя формулу (11), граничные условия (8) и (9), а также отмеченное соответствие диффузионной и электрической задач в случае сферической поверхности, легко получить для η следующее выражение:

$$\eta = \frac{kT}{4\pi R} \left[\frac{R^*}{R} - \frac{p\Omega}{kT} - \frac{\delta c}{c_0} \right],$$

где $R^* = 2\gamma\Omega/kT$ — величина, характеризующая поверхностное натяжение кристалла.

Наконец, учитывая физический смысл величины η , запишем скорость изменения радиуса поры:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{c_0 D}{R} \left(\frac{p\Omega}{kT} + \frac{\delta c}{c_0} - \frac{R^*}{R} \right). \quad (12)$$

Мы видим, что при $p\Omega + kT (\delta c/c_0) < 0$ любая пора, независимо от ее радиуса, уменьшает свои размеры, «растворяясь» в кристалле. Если же

$$\frac{R^*}{R_K} \equiv \frac{p\Omega}{kT} + \frac{\delta c}{c_0} > 0, \quad (13)$$

то введенная формулой (13) положительная величина R_K приобретает смысл критического радиуса, с помощью которого соотношение (12) удобно переписать в виде

$$\frac{dR}{dt} = c_0 D \frac{R^*}{R} \left(\frac{1}{R_K} - \frac{1}{R} \right). \quad (14)$$

Из (14) следует, что диффузионная кинетика поры при условии (13) существенно зависит от ее радиуса. Поры больших радиусов ($R > R_K$) растут за счет «конденсации» на них вакансий, а поры маленьких радиусов ($R < R_K$)

уменьшаются, «испаряя» со своей поверхности вакансии. И лишь поря критического радиуса ($R = R_k$) не может изменить своих размеров путем диффузионного течения материала.

Если в кристалле распределено большое число пор разных размеров, то возникает их интенсивное диффузионное взаимодействие через среднее пересыщение вакансий. Эволюция системы таких пор в общих чертах сводится к росту больших пор за счет растворения маленьких. Однако подобная диффузионная «перекачка» вещества описывается весьма громоздкой системой уравнений, и мы не ставили своей целью давать их анализ.

2. Диффузионное взаимодействие дислокации с точечными дефектами

Наличие поля напряжений вокруг дислокации приводит к ее упругому взаимодействию с точечными дефектами. Но между ними может существовать взаимодействие другой природы, которое мы называем *диффузионным взаимодействием*. Приступая к рассмотрению последнего, заметим, что в ряде случаев оно оказывается более существенным, чем упругое взаимодействие.

При анализе движения дислокации в § 14 было показано, что перемещение дислокации в направлении, перпендикулярном плоскости скольжения, сопровождается неупругим изменением объема, описываемым формулой

$$q(r) = V [b\tau] \delta(\xi), \quad (15)$$

где $q(r)$ — увеличение относительного объема среды в единицу времени.

До сих пор мы говорили, что неконсервативное движение дислокации вызывает неупругое изменение объема q . Но на соотношение (15) можно смотреть иначе: если на линии дислокации происходит изменение объема q , то дислокация вынуждена переползать со скоростью, определяемой формулой (15). Локальное неупругое изменение объема имеет место, например, когда на дислокации оседает макроскопическое количество междоузельных атомов или вакансий (происходит «конденсация» точечных дефектов).

Если «конденсация» точечных дефектов на дислокации осуществляется путем их диффузионного подвода к дислокационному ядру, то неупругое увеличение объема кристалла вдоль линии дислокации можно определить формулой

$$q(r) = \Omega I \delta(\xi) = \Omega (I_B - I_M) \delta(\xi), \quad (16)$$

где I — разность потоков вакансий (I_B) и междоузельных атомов (I_M) на единицу длины дислокации. Осевшие на оси дислокации междоузельные атомы становятся «правильными» атомами решетки, поэтому в процессе «конденсации» каждый междоузельный атом приносит атомный объем Ω (вакансия уносит такой же объем). Это обстоятельство учтено в записи (16).

Расчет потока I на дислокацию обычно предполагает следующий механизм «конденсации» или «испарения» точечных дефектов. Дислокационное ядро окружается трубкой радиуса r_0 ($r_0 \sim b \sim a$), и считается, что точечный дефект, достигший поверхности этой трубки, поглощается (или испускается) дислокацией. Этот модельный механизм ставит дислокацию в ряд макроскопических дефектов типа поры в кристалле и позволяет использовать изложенный выше метод анализа диффузионной кинетики дислокации как макроскопического дефекта. В этом методе задача о неконсервативном движении дислокации сводится к расчету объемных потоков точечных дефектов. В дальнейшем, как и в предыдущем разделе, будем учитывать только потоки вакансий, полагая $I = I_B$.

Если физические условия неоднородны по длине дислокации, то, помимо объемных потоков течечных дефектов через боковую поверхность дислокационной трубки, в величину I дают самостоятельный вклад линейные диффузионные потоки вдоль дислокационной петли. Дело в том, что ядро дислокации является особой линией в кристалле, вдоль которой может происходить одномерная диффузия, не сводящаяся к обычной объемной диффузии. Учет линейной стационарной диффузии по дислокации не представляет труда и может быть произведен независимо.

Сравнивая (15) и (16), мы можем заключить, что

$$V [b\tau] = I\Omega. \quad (17)$$

Преобразуем очевидным образом левую часть выражения (17):

$$V [b\tau] = [b\tau] V_n = b_{\perp} V_n, \quad (18)$$

где V_n — составляющая скорости дислокации, нормальная плоскости ее скольжения, а b_{\perp} — величина составляющей вектора Бюргерса, перпендикулярной линии дислокации в данной точке: $b_{\perp}^2 = [b\tau]^2$, т. е. величина его «краевой» составляющей. Из формул (17) и (18) непосредственно следует

$$V_n = \frac{\Omega I}{b_{\perp}^2} [b\tau]. \quad (19)$$

Таким образом, отличный от нуля поток точечных дефектов на ось дислокации вызывает переползание последней со скоростью (19).

Обратим внимание на особенность выражения (19) в случае чисто винтовой дислокации. Для винтовой дислокации $b_{\perp} = 0$, и при любом конечном потоке I даваемая формулой (19) скорость переползания винтовой дислокации обращается в бесконечность и становится неопределенной по направлению. Эта особенность имеет следующий физический смысл: винтовая дислокация является абсолютно неустойчивой по отношению к переползанию — в результате «конденсации» точечных дефектов. Сколь угодно малый поток точечных дефектов приводит к перемещению винтового участка дислокации, заканчивающемуся таким изгибом дислокационной линии, который приобретает краевую составляющую вектора Бюргерса и препятствует дальнейшему ее движению (за счет возникновения дополнительных сил линейного натяжения). Легко понять, что в изотропной среде вначале прямолинейная винтовая дислокация после потери устойчивости под действием однородного по ее длине не очень сильного потока приобретает форму геликоида (винтовой линии), ось которого совпадает с первоначальным направлением дислокации.

Причиной диффузионного потока на дислокацию, естественно, может служить пересыщение точечных дефектов в объеме кристалла. Однако такой поток порождается также наличием силы, действующей на дислокацию в направлении, нормальном ее плоскости скольжения. Пусть дислокация находится в поле напряжений,

создающих силу F , приложенную к единице длины дислокации. Тогда при переползании дислокации совершается работа, определяемая в единицу времени величиной FV_n . Эта работа, отнесенная к одной вакансии, осевшей на дислокации, проще всего записывается в случае чисто краевой прямолинейной дислокации, когда она равна

$$\delta R = \frac{\Omega}{b_{\perp}^2} [b\tau] F \equiv \frac{\Omega}{b^2} [b\tau] F = -\Omega\sigma'_{xx}, \quad (20)$$

где ось x направлена вдоль вектора Бюргерса дислокации.

Если дислокация не чисто краевая и не прямолинейная, то, как легко проверить, вместо (20) следует писать

$$\delta R = -\Omega\sigma^*, \quad \sigma^* = \frac{b_{\perp}^{\perp} \sigma'_{mk} b_k}{b_{\perp}^2} + \frac{1}{b_{\perp}^2} [\tau b] F_0, \quad (21)$$

где $b_{\perp} = b - (\tau b)\tau$ — краевая составляющая вектора Бюргерса, а F_0 — сила линейного натяжения искривленной дислокации.

Допустим, что переползание дислокации совершается достаточно медленно для того, чтобы в процессе движения у оси дислокации успевало устанавливаться равновесие точечных дефектов по отношению к их прохождению через поверхность дислокационной трубки. Тогда, как и в случае поры, мы сможем записать граничное условие для стационарного изменения химического потенциала вакансий на поверхности дислокационной трубки в виде

$$\delta\mu|_s = \Omega\sigma^*. \quad (22)$$

Наличие пересыщения вакансий вдали от дислокации учитывается условием (9) на бесконечности.

Поскольку при расчете скорости переползания дислокации (19) используется только полный поток вакансий через единицу длины дислокационной трубки, то интересующая нас проблема для дислокационных петель симметричных форм в однородном поле упругих напряжений ($\sigma^* = \text{const}$, $I = \text{const}$) эквивалентна задаче о нахождении линейной плотности электрического заряда вдоль некоторой проводящей линии. Для решения этой задачи мы

снова воспользуемся электродиффузионной аналогией и применим формулу (11), в которой под Q и C следует понимать заряд и электрическую емкость единицы длины соответствующего линейного проводника. Элементарный расчет дает для величины полного потока

$$I = - \frac{4\pi c_0 D}{\Omega k T} Q = \frac{4\pi c_0 D}{\Omega} C \left\{ \frac{\delta c}{c_0} - \frac{\Omega \sigma^*}{k T} \right\}. \quad (23)$$

Наиболее симметричной в указанном выше смысле является прямолинейная дислокация. Рассмотрим отдельно винтовую и краевую прямолинейные дислокации.

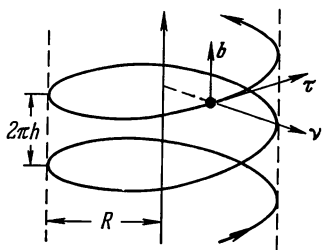


Рис. 59.

Ранее мы заметили, что винтовая дислокация является абсолютно неустойчивой по отношению к изменению своей формы вследствие диффузионного взаимодействия с точечными дефектами и что она становится устойчивой, превращаясь в геликоид, ось которого параллельна вектору Бюргерса (рис. 59).

Поверхностью скольжения геликоидальной дислокации является круговой цилиндр, на который «намота» дислокация. Поэтому скорость переползания любого элемента дислокации (параллельно нормали к поверхности скольжения \mathbf{v}) направлена перпендикулярно оси геликоида. Следовательно, в однородных условиях переползание такой дислокации не может изменить шага винта $2\pi h$ (рис. 59) и приводит лишь к увеличению радиуса геликоида R .

Шаг винта, или число витков геликоида с заданной длиной его оси L , определяется случайными начальными отклонениями дислокации от прямолинейной формы в момент потери устойчивости. Для закрепленного на концах очень длинного геликоида ($L \gg R$) можно не учитывать скольжения дислокации вдоль оси и принять величину h фиксированной. Тогда изменение формы геликоида при переползании сведется к изменению его радиуса R и скорость (19) будет определяться как $V_n = dR/dt$.

Обратим внимание на то, что для геликоидальной дислокации, ось которой совпадает с осью z (рис. 59), имеем

$$(b_{\perp})_m \sigma'_{mk} b_k = b^2 (\sigma'_{zz} - \tau_z \tau_m \sigma'_{mz}), \quad b_{\perp}^2 = \frac{R^2 b^2}{R^2 + h^2}; \quad (24)$$

$$\tau_x = -\frac{R}{\sqrt{R^2 + h^2}} \sin \varphi, \quad \tau_y = \frac{R}{\sqrt{R^2 + h^2}} \cos \varphi, \quad (25)$$

$$\tau_z = \frac{h}{\sqrt{R^2 + h^2}},$$

где φ — угол, отсчитываемый в плоскости xOy от оси x в направлении τ .

Так как τ_x и τ_y являются функциями точки на геликоиде, то предположенное нами постоянство σ^* вдоль линии дислокации возможно лишь во внешнем поле с $\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0$. В таком поле, как следует непосредственно из формулы (24),

$$\sigma^* = \sigma'_{zz} - \sigma_0(R), \quad \sigma_0(R) = -\frac{\sqrt{R^2 + h^2}}{bR} F_{\nu}(R), \quad (26)$$

где $F_{\nu} = (\nu F_0)$ — проекция силы статического самодействия геликоидальной дислокации на нормаль к поверхности скольжения. Эта величина, естественно, зависит некоторым сложным образом от радиуса геликоида: $F_{\nu} = F_{\nu}(R)$. Если вектор ν направлен от оси геликоида (как на рис. 59), то $F_{\nu} < 0$.

Подставим (26) и (23) в (19) и получим скорость изменения радиуса геликоида:

$$\frac{dR}{dt} = 4\pi c_0 D \frac{C(R)}{b_{\perp}(R)} \left\{ \frac{\Omega}{kT} [\sigma'_{zz} - \sigma_0(R)] - \frac{\delta c}{c_0} \right\}, \quad (27)$$

где $C(R)$ — емкость единицы длины геликоида, а зависимость $b_{\perp} = b_{\perp}(R)$ дается формулой из (24).

Знак выражения в фигурных скобках в правой части формулы (27) определяет, возрастает ($\dot{R} > 0$) или убывает ($\dot{R} < 0$) радиус геликоида. С изменением R знак \dot{R} может меняться. Однако существует такое значение R , при котором $dR/dt = 0$. Этот радиус, являющийся корнем уравнения

$$\sigma_0(R) = \sigma'_{zz} - \frac{kT}{\Omega} \left(\frac{\delta c}{c_0} \right),$$

соответствует той форме геликоидальной дислокации, которая находится в равновесии с заданным пересыщением точечных дефектов и фиксированной одноосной нагрузкой вдоль оси геликоида.

Допустим теперь, что тензор внешних напряжений обладает отличной от нуля компонентой σ_{yz} . Поскольку все анализируемые уравнения линейны, влияние компоненты σ_{yz} на переползание дислокации можно учесть отдельно. Пусть за счет δc или σ_{zz} поддерживается некоторый равновесный радиус геликоида R . Тогда под действием нагрузки δ_{yz} величина σ^* приобретает добавку

$$\delta c^* = -\tau_z \tau_y \frac{b^2}{b_{\perp}^2} \sigma_{yz} = -\sigma_{yz} \left(\frac{h}{R} \right) \cos \varphi, \quad (28)$$

в записи которой использованы соотношения (25).

Угловая зависимость (28) войдет в граничные условия (24) на дислокационной трубке, поэтому, не решая задачи о нахождении химического потенциала во всем кристалле, можно предсказать зависимость I от угла φ . Действительно, непрерывность μ как функции координат обеспечивает очевидную зависимость от φ в непосредственной окрестности дислокационной линии: $\mu \propto \cos \varphi$. Но это означает, что его нормальная производная на поверхности дислокационной трубки будет иметь ту же зависимость от φ . Поэтому имеет место формула *)

$$I = I_0 \cos \varphi, \quad (29)$$

где величина I_0 пропорциональна σ_{yz} и зависит как от R , так и от характеристик вакансий (c_0 , D). Подставим (29) в (19):

$$V_n = \frac{\Omega I_0}{b_{\perp}^2} \cos \varphi. \quad (30)$$

Так как вектор V_n всегда лежит в плоскости, параллельной плоскости xOy , то формула (30) соответствует

*) Если на линии дислокации $\mu \propto \cos \varphi$, то вдоль нее возникает стационарный поток вакансий, который обязательно нужно учитывать. Однако легко сообразить, что вклад этого потока в I также сопровождается множителем $\cos \varphi$.

перемещению геликоида как целого вдоль оси x со скоростью

$$V_x = \text{const} \left(\frac{\Omega \sigma_{uz}}{kT} \right). \quad (31)$$

Для нахождения зависимости множителя в выражении (31) от радиуса геликоида R и параметров c_0 , D требуется подробное рассмотрение задачи, на котором мы не будем останавливаться.

3. Диффузионно-дислокационное течение кристалла

Перейдем к расчету переползания краевых дислокаций. Рассмотрим отдельную прямолинейную дислокацию, параллельную оси z . Если ось x совпадает с направлением вектора Бюргерса, то, как следует из (20), $\sigma^* = \sigma'_{xx}$ и переползание дислокации происходит вдоль оси y со скоростью $V_y = (\Omega/b) I$. При очевидном условии $R \gg r_0$ для дислокационной трубки имеем $C = \{2 \ln(L/r_0)\}^{-1}$, где L — длина дислокации (размер кристалла), поэтому скорость перемещения дислокации за счет диффузии вакансий равна

$$V_y = - \frac{2\pi c_0 D}{b \ln(L/r_0)} \left\{ \frac{\Omega \sigma'_{xx}}{kT} - \frac{\delta c}{c_0} \right\}. \quad (32)$$

Допустим, что в момент установления стационарных диффузионных потоков концентрация вакансий в кристалле равновесна ($\delta c = 0$); тогда

$$V_y = - \frac{2\pi c_0 D}{b \ln(L/r_0)} \left(\frac{\Omega \sigma'_{xx}}{kT} \right).$$

Если имеется большое число параллельных краевых дислокаций, то вызванная их переползанием в поле напряжений средняя пластическая деформация образца имеет скорость

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{xx}^{\text{пл}} &= - \rho_0 b V_y = \frac{2\pi \rho_0 c_0 D}{\ln(L/r_0)} \left(\frac{\Omega \sigma'_{xx}}{kT} \right), \\ \dot{\epsilon}_{yy}^{\text{пл}} &= \dot{\epsilon}_{zz}^{\text{пл}} = 0, \end{aligned} \quad (33)$$

где ρ_0 — плотность дислокаций (число дислокаций, проходящих через единицу площади на плоскости xOy).

Таким образом, даже под действием весьма слабых напряжений, меньших тех, при которых начинается скольжение дислокаций (меньше «стартовых» напряжений), может иметь место дислокационно-диффузионное течение монокристалла. Физическая схема пластической деформации образца при таком течении ясна из анализа рис. 60, где стрелки у дислокаций указывают направление «прораствания» лишних атомных полуплоскостей. Становится также ясным, что при наличии в кристалле только краевых дислокаций с параллельными плоскостями скольжения (изображенных на рис. 60) механизм течения, описываемый формулой (33), быстро «выдохнется».

Действительно, рассмотренный процесс переползания дислокаций связан с изменением концентрации точечных дефектов в объеме кристалла. Легко понять, что скорость изменения пересыщения вакансий dc/dt имеет знак, совпадающий со знаком σ'_{xx} . Поэтому со временем обязательно наступит момент, начиная с которого

$$\frac{\delta c}{c_0} = \frac{\Omega \sigma'_{xx}}{kT}, \quad (34)$$

и в кристалле прекратится пластическое течение ($V_y = 0$) за счет создания принудительного пересыщения вакансий δc , определяемого формулой (34).

Здесь уместно заметить, что δc — это то эффективное среднее пересыщение, которое устанавливается внутри образца (далеко от его поверхности) в объемах, включающих большое число дислокаций. При этом обычно оказывается, что значение δc отлично от созданного внешним давлением равновесного эффективного пересыщения у поверхности образца. Последнее, как следует из (3), равно

$$\delta c^*|_s = c_0 \left(\frac{\Omega \sigma_n}{kT} \right),$$

где σ_n — нормальная нагрузка на поверхности тела. Однако в настоящем разделе мы не интересуемся явлениями, обусловленными диффузионным переносом вещества на внешнюю поверхность тела. Эти явления вкратце уже были рассмотрены в начале параграфа.

Положение меняется, если в кристалле имеются две системы параллельных дислокаций, плоскости скольжения которых перпендикулярны (рис. 61). При этом рассчитанное нами «прораствание» лишних полуплоскостей

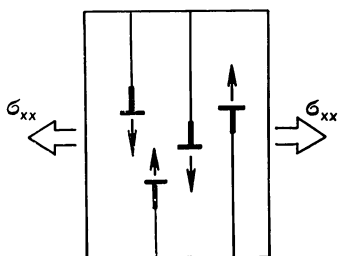


Рис. 60.

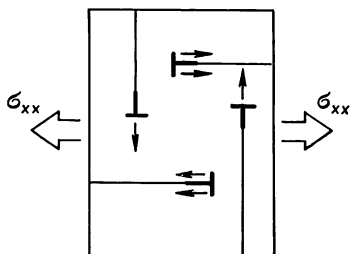


Рис. 61.

будет происходить за счет «растворения» перпендикулярных им лишних полуплоскостей другой системы дислокаций. Легко найти пересыщение δc , при котором будет происходить стационарный процесс «перекачки» материала от одной системы дислокаций к другой.

Будем называть соответственно первой или второй ту систему дислокаций, векторы Бюргера которых направлены по оси x или оси y . Для каждой дислокации второй системы $\sigma^* = \sigma'_{yy}$, и ее перемещение осуществляется вдоль оси x со скоростью $V_x = -(\Omega/b) I$. Следовательно, диффузия вакансий порождает такую скорость перемещения отдельной дислокации второй системы:

$$V_y = \frac{2\pi c_0 D}{b \ln(L/r_0)} \left\{ \frac{\Omega \sigma'_{yy}}{kT} - \frac{\delta c}{c_0} \right\}. \quad (35)$$

Очевидное условие баланса вещества, при котором $dc/dt = 0$ и процесс течения стационарен, сводится к условию $\rho_1 I_1 + \rho_2 I_2 = 0$, или

$$\rho_1 \left(\frac{\Omega \sigma'_{xx}}{kT} - \frac{\delta c}{c_0} \right) + \rho_2 \left(\frac{\Omega \sigma'_{yy}}{kT} - \frac{\delta c}{c_0} \right) = 0, \quad (36)$$

где ρ_1, ρ_2 и I_1, I_2 — плотности дислокаций и потоки вакансий на единицу длины дислокации соответственно для первой и второй систем.

Из (36) получаем стационарное пересыщение вакансий в кристалле:

$$\delta c = \frac{c_0}{\rho_1 + \rho_2} \left(\frac{\Omega}{kT} \right) (\rho_1 \sigma'_{xx} + \rho_2 \sigma'_{yy}). \quad (37)$$

Учтем выражение (37) в формулах (32) и (35) для скоростей дислокаций и вычислим среднюю скорость пластической деформации кристалла:

$$\dot{\epsilon}_{xx}^{\text{пл}} = -\rho_1 b V_y = \frac{2\pi c_0 D}{\ln(L/r_0)} \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho_1 + \rho_2} \frac{\Omega (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})}{kT}, \quad (38)$$

$$\dot{\epsilon}_{yy}^{\text{пл}} = -\dot{\epsilon}_{xx}^{\text{пл}}, \quad \dot{\epsilon}_{zz}^{\text{пл}} = 0.$$

Естественно, стационарная пластическая деформация (38) является чисто сдвиговой.

Важной особенностью рассчитанного нами простейшего примера диффузионно-дислокационного течения кристалла является то, что течение происходит при некотором пересыщении вакансий, величина которого определяется формулой (37). Лишь в специальных случаях (при $\rho_1 \sigma'_{xx} + \rho_2 \sigma'_{yy} = 0$) концентрация вакансий в процессе течения остается равновесной.

Если считать плотности дислокаций обеих систем одного порядка величины ($\rho_1 \sim \rho_2 \sim \rho_0$), то из (38) получается следующая оценка скорости диффузионно-дислокационного течения кристалла:

$$\dot{\epsilon}_{xx}^{\text{пл}} = -\dot{\epsilon}_{yy}^{\text{пл}} \sim c_0 D \rho_0 \left(\frac{\Omega \sigma}{kT} \right) \sim \frac{c_0 D}{l^2} \left(\frac{\Omega \sigma}{kT} \right), \quad (39)$$

где σ — характерная величина сдвиговой нагрузки, а l — среднее расстояние между дислокациями в плоскости xOy . Сравнивая (39) с (7), мы можем заключить, что для монокристалла с дислокациями, способными участвовать в обмене точечными дефектами, основную роль в диффузионной пластичности играет обмен вакансиями между дислокациями ($l \ll L$) и ничтожную — выход вакансий на внешнюю поверхность монокристалла.

Наконец, обратим внимание на одно важное физическое обстоятельство, относящееся к диффузионно-дислокационному течению. Сам по себе механизм, приводящий к

формуле (38), может иметь насыщение, наступающее после выхода всех дислокаций из кристалла. Поэтому, не указывая способа пополнения совокупности дислокаций новыми дислокациями, мы ограничиваем интервал применения формул (38) временами, малыми по сравнению со средним временем выхода дислокации из кристалла. Механизм стационарной пластической деформации в течение больших времен должен включать источники образования (зарождения) новых дислокаций. В нашем примере такими источниками могут, например, служить внешние поверхности кристалла. Легко представить себе, что возможны условия, при которых поверхности кристалла способны генерировать краевые дислокации, поступающие в объем кристалла и вступающие в обмен вакансиями с другими дислокациями. Тогда на больших временных интервалах величины ρ_1 и ρ_2 , а следовательно, и скорость течения кристалла, будут существенно определяться интенсивностью образования дислокаций.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Адиабатическое приближение 22
Акустические колебания 76, 82
Амплитуда нулевого колебания 53
Аналитические критические точки 45
Ангармонизм 56, 129
Атмосфера Коттрелла 240
- Больцмана уравнение 128
- Вакансия 141, 201
Вектор Бюргерса 206
— обратной решетки 18
— полного геометрического смещения 220, 248, 253
— поляризации 80
— смещений 197, 204, 208, 217
— трансляции 13
— упругого смещения 206
Ветви закона дисперсии 75—77, 80, 83, 106, 113
Взаимодействие ближайших соседей 29, 103, 168, 177, 183, 186, 193
— дефектов упругое 232, 240, 266
— диффузионное 266
— между ветвями колебаний 166
— оптических фононов с фотонами 97
— фононов 56, 128
Виртуальные переходы 59
Волны Рэлея 172
Время свободного пробега 128, 129, 139
— столкновений среднее 130
Вторичное квантование 50, 52
Второй звук 138
Вязкость фононного газа 137
- Гамильтониан 49
— взаимодействия 57
— газа фононов 55
— колебаний 50, 56, 84
— фонона 127
Гидростатическое давление среднее 198
Граница блоков 246
Групповая скорость 36, 40
— — пакета 126
- Дебаевская температура 120, 122
— частота 121
Дефект кристаллической решетки 141, 197
- Дефект линейный (одномерный) 141, 142, 157
— поверхностный (двухмерный) 142, 162
— точечный (нульмерный) 141, 201
— упаковки 162
Дислокационная деформация 206, 225
— линия 205, 207
— петля 207, 210, 257
— поляризация 218, 252
— стенка 224, 246
— трубка 205, 267
Дислокационный момент 210
— — единицы объема 219
Дислокация 157, 193, 205
— винтовая 207
— геликоидальная 270
— краевая 205
— прямолинейная 220
Диффузия восходящая 240
— точечных дефектов 213
Длина волны 24—26, 86, 126, 139
— свободного пробега 128, 129, 134, 135, 139
Длинноволновые колебания 82, 85, 157
- Закон Гука
— дисперсии 24, 25, 29, 33, 40, 80
— — волн изгиба 110
— — звуковых колебаний 26
— — изгибных колебаний линейной цепи 181
— — поперечных колебаний ионного кристалла 98, 99
— — продольных колебаний ионного кристалла 99
— — сложной решетки 87, 81
— — слоистого кристалла 106
Зона Бриллюэна 14
- Игольчатая структура 32, 111
Идеальный газ фононов 55
Изочастотная поверхность 33
— — замкнутая 33
— — открытая 35
Индексы Миллера 17
Интеграл столкновений 128
Ионный кристалл 94, 95

- Квазиволновой вектор 23, 24, 28, 54
 Квазиимпульс 54
 Квазилокальная частота 155, 167
 Квазилокальные колебания 151, 155
 Квазичастица 54
 Квантование колебаний 49, 84
 Кинетическое уравнение 125, 128, 130, 135, 139
 Колебания изгибные 104, 173
 Коническая точка 35, 42
 Концентрация вакансий равновесная 262
 — дефектов 152, 238
 Коэффициент Пуассона 204
 Коэффициенты Ламе 172, 199
 Кристалл типа NaCl 96
- Линейная цепочка 173, 174
 Локализация колебаний вблизи плоского дефекта 165, 166
 — — у линейного дефекта 157, 161
 — — у поверхности 171
 Локальная неоднородность 201, 233
 — равновесная функция распределения 139
 — частота 145
 Локальное колебание 141, 145, 151, 160, 162
 — равновесие 261
- Макроскопическая симметрия 13
 Масса дислокации эффективная 253, 257
 Междоузельный атом 201
 Модель Пайерлса 225
 — Френкеля — Конторовой 191, 193
 — Эйнштейна 119
 Модуль всестороннего сжатия 199
 — сдвига 26, 199
 Молекулярные кристаллы 77
- Нормальные координаты 46, 84
 — столкновения 58, 129, 138
 Нулевые колебания 53
- Обратная решетка 13, 14, 18
 Одномерная модель дислокации 191
 Одномерный кристалл 173, 174, 182, 185
 Оператор рождения фонона 54
 — уничтожения фонона 54
 Оптические колебания 72, 76, 83, 91, 97
 Основные векторы 7
 Осциллятор гармонический 52, 116
- Переход к механике сплошной среды 26, 85
 Пластическая деформация 247, 249, 250
 — дисторсия 248
 Плотность скольжения 211
 Плотность дислокаций 216
 — колебаний 37, 40, 64, 78
 — потока вакансий 260, 261
 — — дислокаций 249
 — — диффузионного 262
 — — междоузельных атомов 261
 — фононов 112, 113
 Поверхностные колебания 172
 Поверхность кристалла как плоский дефект 167
 — скольжения 211
 Поле дислокации 215
 — — прямолинейной 220
 Полная дисторсия 219
 Полуширина дислокации 230
 Постоянная решетки 20
 Поток вакансий 260, 267
 — междоузельных атомов 260, 267
 — точечных дефектов 259, 260
 Процессы переброса 58, 129, 134, 138
- Решетка Браве 10
 — гексагональная 12, 102
 — кубическая 12, 29
 — обратная 13, 14
 — плоская 7, 10
 — простая 8, 10, 20, 29
 — сложная 8, 10, 72, 81
 — тетрагональная 12, 30
 Решеточная часть энергии кристалла 113
 Рост поры 263
- Сила Пайерлса 232
 Силовая матрица 26, 30, 73, 88, 95, 103, 149
 Симметрия направлений 12
 Сингонии 11
 Скольжение дислокации 210, 213
 Скорость волны 191
 — — плотности фононного газа 141
 — дислокации 195, 254
 — звука 26, 30, 33, 123, 181, 190
 — — в анизотропной среде 82
 — — в базисной плоскости 31
 — — вдоль оси 32
 — предельных колебаний 176
 — течения кристалла 263, 274
 Смещение атома 20
 — относительно центра тяжести 89, 90
 — центра тяжести ячейки 88, 90
- Температура характеристическая 120
 Тензор Грина 204
 — деформации 242
 — дисторсии 215
- Переползание дислокаций 210, 213
 Пересыщение вакансий 264, 274, 276

- Тензор несовместности Кренера 217
 — упругих модулей 91, 199, 233
 Тензор-девиатор деформаций 242
 — напряжений 198, 242
 Теорема ван Хова 45
 Тепловое сопротивление 135
 Теплоемкость кристалла 117, 122, 136
 Теплопроводность при низких температурах 134
 Точечные группы 13
 Трансляционные периоды 7
- Ударная волна 185, 191
 Уравнение Лифшица 144
 Уравнения движения атома в кристалле 22
 — — дислокации 253, 257
 — — сложной решетки 73, 78
 — — среды 199, 250
 — — трехмерного кристалла 79
 — — фонона 127
- Фононы 53, 54, 56, 62, 76, 112, 117, 126, 127, 129
 Формула Дебая 120
 Функция Гамильтона 48, 49
- Функция Грина 60
 — — запаздывающая 67, 69
 — — опережающая 67, 69
 — распределения фононов 113, 127, 139
 — — частот
- Химический потенциал вакансий 261
 — — междоузельных атомов 261
 — — точечных дефектов 238
- Центр дилатации 203
 Центральные силы 177
- Частота дебаевская 121
 — столкновений 128, 129
 Числа заполнения 52
- Элементарная ячейка 7
 — — обратной решетки 14
- Ядро дислокации 205
 Ячейка Вигнера — Зейтца 9