

0.1 Континуальная теория.

0.1.1 Идеальные кристаллы.

Рассмотрим простейший случай, когда среда считается однородной а характерная длина упругой волны много больше постоянной решетки - длинноволновое приближение. Схема смещений атомов одномерного кристалла при таких колебаниях показана на рис. 1

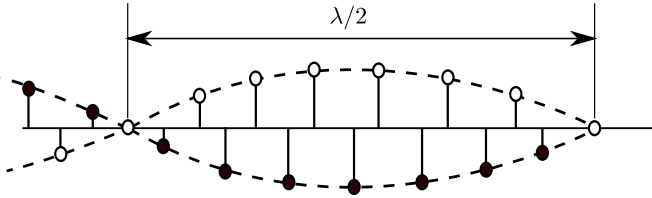


Рис. 1: Длинноволновые колебания одномерного кристалла со сложной решеткой.

В этом естественный шаг в решетке также мал в силу условия $a \ll \lambda$, то для анализа слабо изменяющихся в пространстве смещений можно использовать ряд упрощений. Будем считать, что во первых, "координата" атома $r = X_s(n)$ принимает непрерывный ряд значений, а, во -вторых, смещение $u_s(n)$ является непрерывной функцией r . В координатном представлении эта функция в каждой точке задает гладкое, однозначное, зависящее от времени векторное поле смещений.

Так как среда однородна то отклик на внешнее механическое воздействие будет линеен, и движение среды опишется линейным дифференциальным уравнением второго порядка - волновым уравнением решением которого являются плоские волны.

Если среда находится под действием внешних сил или, в более общем случае, если любая часть среды действует с некоторой силой на соседние части, то говорят, что эт тело неходтися в напряженном состоянии. Силы действующие на поверхность элемента объема со стороны окружающих его частей среды пропорциональны площади поверхности элемента. Сила, отнесенная к единице площади, называется напряжением.

Рассмотрим случай когда напряжение во всей среде однородно. Для этого рассмотрим четырехгранник $OABC$, рис. 2. Грани OBC , OAC , OAB перпендикулярны декартовым осям X_1 , X_2 , X_3 , а OP есть нормаль к плоскости ABC . Предположим, что сила k приложенная к грани ABC , причем не обязательно перпендикулярно ей, уравнивается нормальными и тангенциальными силами, приложенными к каждой из трех других граней. Эти последние силы обозначим через t_{ik} . Индекс k отвечает нормали к грани, а индекс i - оси, которой параллеллен

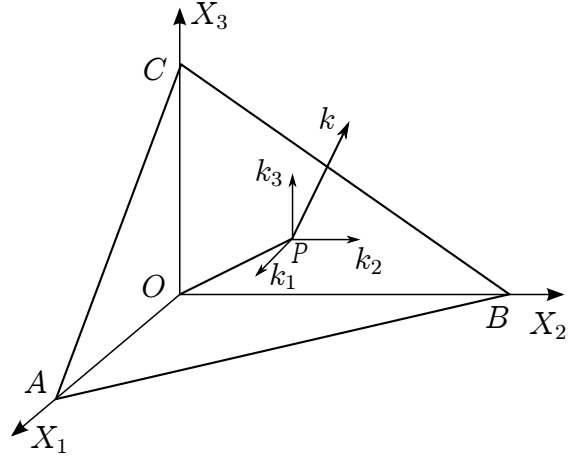


Рис. 2: Разложение приложенной к грани ABC силы k (отнесенной к единице площади) на компоненты.

сила. Таким образом, t_{11} представляет собой силу, которая действует на единицу поверхности и приложена к грани OBC вдоль X_1 , а t_{21} - силу, которая действует на единицу поверхности и приложена к той же грани вдоль X_2 . В состоянии равновесия сумма сил, действующих вдоль направления OX , должна быть равна сумме сил, действующих в противоположном направлении. Тогда можно записать $k_1 S_{ABC} = t_{11} S_{BOC} + t_{12} S_{COA} + t_{31} S_{AOB}$.

Направляющие косинусы l_i нормали к грани ABC таковы:

$$l_1 = \frac{S_{OBC}}{S_{ABC}}; \quad l_2 = \frac{S_{OAC}}{S_{ABC}}; \quad l_3 = \frac{S_{OAB}}{S_{ABC}}.$$

Тогда $k_1 = t_{11}l_1 + t_{12}l_2 + t_{13}l_3$. Обобщая получим $k_m = t_{mn}l_n$. Величина t_{mn} называется тензором напряжения. Итак, тензор напряжения осуществляет связь вектора силы с вектором нормали к площадке, к которой приложена эта сила.

Рассматривая случай неоднородного (изменяющегося в пространстве) напряжения естественно приходим к волновому уравнению. Для этого выделим две плоскости AB и CD , рис 3. Вспомним, что напряжение это сила отнесенная к единице площади. Пусть сила проходит через точку P в направлении оси X_2 . Эта сила действует на грани EF и GH в соответствии с выражениями

$$\begin{aligned} & - \left(t_{22} - \frac{1}{2} \frac{\partial t_{22}}{\partial X_2} \delta X_2 \right) \delta X_1 \delta X_3 \\ & \left(t_{22} + \frac{1}{2} \frac{\partial t_{22}}{\partial X_2} \delta X_2 \right) \delta X_1 \delta X_3 \end{aligned}$$

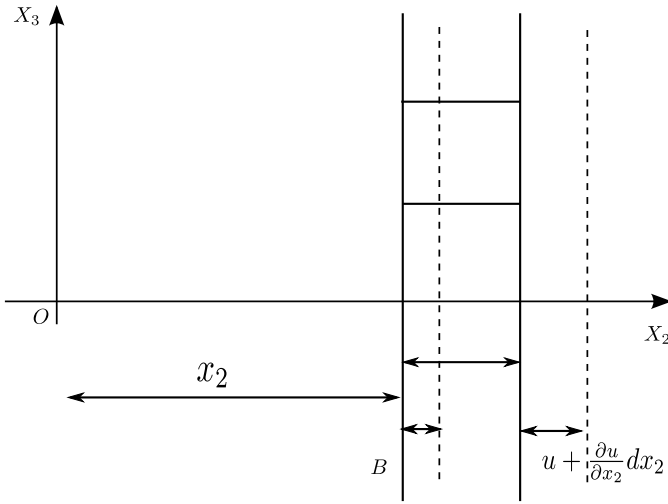


Рис. 3: Смещения, связанные с прохождением плоской волны в направлении OX_2

Результирующая сила есть

$$\left(\frac{\partial t_{22}}{\partial X_2} \delta X_2 \right) \delta X_1 \delta X_3$$

Эта сила, действующая на единицу объема элемента $EFHG$, должна быть равна произведению массы ρ единичного объема элемента на ускорение $\frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}$. Отсюда получаем следующее уравнение движения

$$\frac{\partial t_{22}}{\partial X_2} = \rho \ddot{u}$$

Напряжение связано с деформацией через упругие константы(жесткости)

$$t_{22} = c r_{22} = c \frac{\partial u}{\partial X_2}$$

Величина r_{22} называется тензором деформации. А $\frac{\partial u}{\partial X_2}$ компонента деформации, т.е. относительное изменение длины в направлении X_2 . Это значит, что если плоскость AB сместилась на расстояние u , тогда плоскость CD сместится на расстояние $u + (\partial u / \partial x_2) dx_2$. Тогда уравнение движения запишется в виде.

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}$$

Деформация так же бывает однородной и не однородной. В данном случае деформация однородна. К этому вопросу мы вернемся в параграфе...

Обобщим на 3-х мерный случай. Смещение u можно записать в виде

$$u_m = r_{ml} x_l; \quad \frac{\partial u_m}{\partial x_l} = r_{ml}$$

где x_l - координаты точки, испытывающие смещения u_m . Компоненты напряжения определяются уравнениями $t_{pq} = c_{pqml} r_{ml}$, где c_{pqml} упругие жесткости

(заметим что $r_{ik} = s_{ikmn} t_{mn}$, где r_{ik} компоненты тензора деформации, а s_{ikmn} упругие модули среды). После подстановки сюда r_{ml} получаем

$$t_{pq} = c_{pqml} \frac{\partial u_m}{\partial x_l}$$

$$\frac{\partial t_{pq}}{\partial x_q} = c_{pqml} \frac{\partial^2 u_m}{\partial x_q \partial x_l} = \frac{\rho \partial^2 u_p}{\partial t^2}.$$

Это и есть дифференциальное уравнение, с помощью которого описывается распространение упругих волн в кристаллах. Его решение позволяет представить соотношения между смещением \vec{u} и \vec{k}^* , ν и ξ в следующем виде

$$u_p = \xi_{(i)p} \exp\{2\pi i(\vec{k}_i^* \vec{r} - \nu t)\}$$

Это уравнение простой гармонической волны. По общему правилу для всех систем, способных совершать свободные гармонические колебания, частота этих колебаний пропорциональна волновому числу.

Из опытов известно, что при увеличении волнового числа - при выходе за рамки длинноволнового приближения, частота зависит от волнового числа уже нелинейно. Это явление называется дисперсией и описывается на основе рассмотрения среды с учетом ее микроструктуры.

0.1.2 Реальные кристаллы.

В реальных кристаллах всегда присутствуют дефекты(вакансии, примеси, дислокации и др.). В этом месте наука становится чрезвычайно большой. Мы же ограничимся несколькими примерами связанными с деформациями и дислокациями.

Будем считать кристалл однородной упругой средой, не учитывая дискретности его строения(континуальное приближение). Это приближение оправдано при длинах упругих волн, превышающих 10^{-6} см, что много больше межатомных расстояний, и частотах менее $10^{11} - 10^{12}$ Гц. Ультразвуковые волны используют для измерения упругих постоянных, изучения дефектов строения и ангармонизма кристаллической решетки, электронной структуры металлов и сверхпроводников.

Рассмотрим подробнее понятие однородной и неоднородной деформации.

Зафиксируем в пространстве начало координат и затем растянем струну, рис. 4

Деформация отрезка PQ определится как отношение приращения его длины к первоначальной длине, т.е.

$$\frac{P'Q' - PQ}{PQ} = \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

(в переменных Лагранжа)

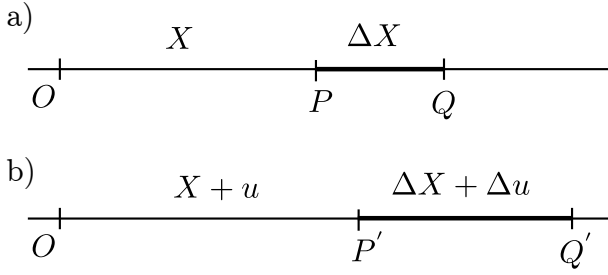


Рис. 4: Деформация растяжимой струны. а) до растяжения, б) после растяжения

Деформация в точке P определяется выражением

$$r = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} = \frac{du}{dx}$$

Таким образом, деформация в любой точке определяется просто угловым коэффициентом кривых, изображенных на рис. 5 Деформация есть производная

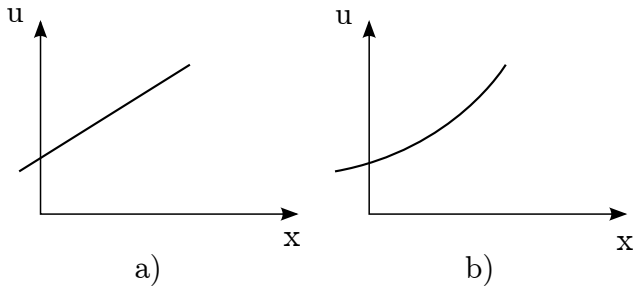


Рис. 5: Зависимость смещения u от координаты x в растяжимой струне. а) однородное растяжение, б) неоднородное растяжение.

смещения по координате и является безразмерной величиной. Очевидно в соответствии с данным определением, что положение начала координат не существенна.

Для однородной деформации r - константа, и интегрирование уравнения (...)дает

$$u = u_0 + ru$$

где u_0 - смещение точки, находящейся в начале координат.

Рассмотрим теперь, как определяется деформация растяжимой плоской пластинки. Рис 6

Найдем как смещения точек меняются с координатами. Ограничимся рассмотрением малых смещений. Пусть точка P с координатами (x_1, x_2) в неподвижной систем координат переходит после деформации в точку P' с координатами $(x_1 + u_1, x_2 + u_2)$. Следовательно, вектор u_i есть смещение точки P . Чтобы найти деформацию в этой точке пластинки, введем сначала четыре величины

$$r_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \quad r_{12} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2}, \quad r_{21} = \frac{\partial u_2}{\partial x_1}, \quad r_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2}$$

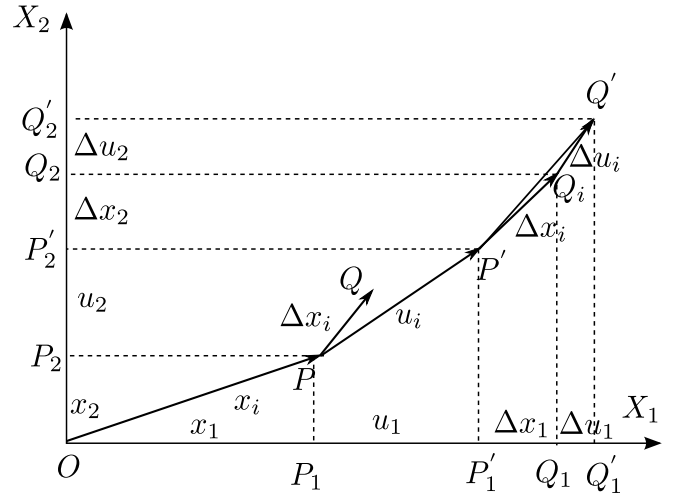


Рис. 6: Двумерная деформация

или в сокращенной записи

$$r_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1, 2).$$

Все e_{ij} являются безразмерными величинами, малы по сравнению с единицей. Чтобы определить их геометрический смысл, возьмем точку Q , лежащую вблизи P , так что

$$PQ = [\Delta x_i],$$

$$|PQ| = L^2 = \Delta x_i^2.$$

После деформации Q переходит в Q' ; и вектор $P'Q'$, очевидно, равен сумме двух векторов

$$[\Delta x_i] + [\Delta u_i],$$

$$|P'Q'| = L'^2 = \Delta x_i^2 + \Delta u_i^2,$$

Здесь $[\Delta u_i]$ есть разность смещений двух точек P и Q , первоначально отстоящих друг от друга на Δx_i . Тогда, как компоненты $[u_i]$ являются функциями координат, мы можем записать полное приращение вектора смещений.

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \Delta x_2 + \gamma_{11} \Delta x_1 + \gamma_{12} \Delta x_2$$

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Delta x_2 + \gamma_{21} \Delta x_1 + \gamma_{22} \Delta x_2$$

или кратко

$$\Delta u_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \Delta x_j + \gamma_{ij} \Delta x_j \Delta x_j = r_{ij} \Delta x_j + \gamma_{ij} \Delta x_j \Delta x_j.$$

Так как $[\Delta u_i]$ и Δx_i - векторы, отсюда следует, что r_{ij} является тензором. Переходя к dx :

$$du_i = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j = r_{ij} dx_j$$

Величину $\gamma_{ij}\Delta x_j\Delta x_i$ мы опустили как бесконечно малую высшего порядка.

Так как дифференциал это линейная часть приращения функции (вектора смещения в нашем случае) то r_{ij} характеризует линейную деформацию. Величины r_{ij} также называют градиентами деформации, а деформацию - градиентной деформацией.

Рассмотрим как будет изменяться элемент длины $|L|$ при деформации.

$$dL^2 = (dx_i)^2$$

$$(dL')^2 = (dx_i + du_i)^2 =$$

$$= dL^2 + 2\frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_l} dx_k dx_l$$

Поскольку во втором члене оба индекса i и k являются немymi, их можно переставить и соответственно записать этот член в явно симметричном виде

$$\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) dx_i dx_k$$

В третьем же члене поменяем местами индексы i и l . Тогда мы получим окончательно dL'^2 в виде

$$dL'^2 = dL^2 + 2u_{ik} dx_k dx_i,$$

где

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right)$$

Этим тензором деформации и определяется *изменение элемента длины* при деформировании тела. В случае малых деформаций последними величинами как малыми второго порядка можно пренебречь и u_{ik} определится выражением

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right)$$

Но величина r_{ik} содержит в себе больше информации чем u_{ik} . А именно r_{ik} содержит также информацию и о *кручении* при деформации. Рассмотрим теперь две ориентации вектора $[\Delta x_i]$: параллельно Ox_1 (вектор PQ_1) и параллельно Ox_2 (вектор PQ_2), рис 7, и тем же способом надем, как исказится прямоугольный элемент с вершиной в точке p . Для PQ_1 мы положим $\Delta x_2 = 0$; тогда уравнения (6.4) принимают вид

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 = r_{11} \Delta x_1 +$$

Смысл величин Δu_1 и Δu_2 ясен из рис. 7. r_{11} определяет растяжение на единицу длины отрезка PQ_1 , спроектированного на Ox_1 , ибо

$$\frac{\Delta u_1}{\Delta x_1} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = r_{11}.$$

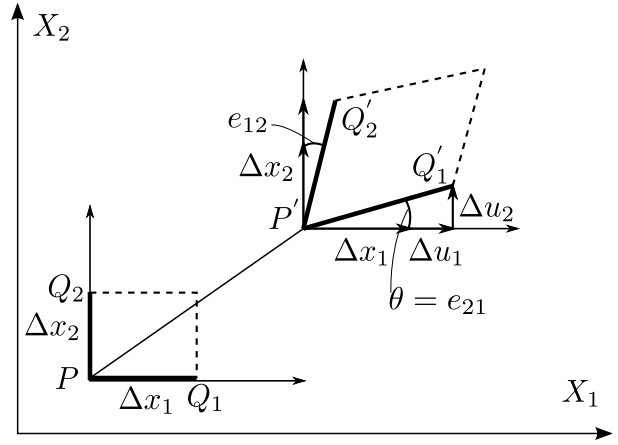


Рис. 7: Определение компонент деформации при двумерной деформации.

Величина r_{21} определяет поворот отрезка PQ_1 против часовой стрелки. В самом деле, тангенс угла этого поворота определяется выражением

$$\tan \theta = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1 + \Delta u_1}$$

Так как мы рассматриваем только малые смещения, то u_1 и u_2 малы по сравнению с x_1 , а поэтому Δu_2 и Δu_1 малы по сравнению с Δx_1 . Следовательно,

$$\theta = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} = r_{21}$$

Аналогично, величина r_{22} равна растяжению PQ_2 на единицу длины в направлении Ox_2 , а r_{12} определяет (малый) поворот по часовой стрелке PQ_2 и $P'Q_2'$.

Однако в качестве меры деформации тензор r_{ij} не годится, потому что может быть случай, когда компоненты r_{ij} но деформации тела нет. Рассмотрим простой поворот пластинки как жесткого тела в его плоскости против часовой стрелки на малый угол φ , рис 8. При этом как PQ_1 , так и PQ_2 поворачивается против часовой стрелки на угол φ и поэтому в соответствии с геометрическим смыслом r_{ij} , установленным выше, можно написать

$$[r_{ij}] = \begin{bmatrix} 0 & -\varphi \\ \varphi & 0 \end{bmatrix}$$

Форма пластинки не искажается, но $[r_{ij}]$ не обращается в нуль, присутствуют компоненты вращения, чтобы отделить компоненты вращения от компонент r_{ij} представим этот тензор как сумму симметричного и антисимметричного тензоров

$$r_{ij} = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij}$$

где $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(r_{ij} + r_{ji})$ и $\omega_{ij} = \frac{1}{2}(r_{ij} - r_{ji})$. Легко видеть, что тензор заданный таким способом, является

симметричным, ибо

$$\varepsilon_{ij} \frac{1}{2}(r_{ij} + r_{ji}) = \varepsilon_{ij}$$

Другой введенный тензор антисимметричен, ибо

$$\omega_{ij} = -\frac{1}{2}(r_{ji} - r_{ij}) = -\omega_{ji}$$

Выше мы видели, что в случае чистого вращения тензор $[r_{ij}]$ оказывается антисимметричным. Отсюда заключаем, что симметричная часть $[r_{ij}]$, т.е. тензор $[\varepsilon_{ij}]$, описывает *деформацию*. Итак, в целом

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} & \frac{1}{2}(r_{12} + r_{21}) \\ \frac{1}{2}(r_{12} + r_{21}) & r_{22} \end{bmatrix}.$$

Такое разделение $[r_{ij}]$ на две части иллюстрируется фиг. 8.

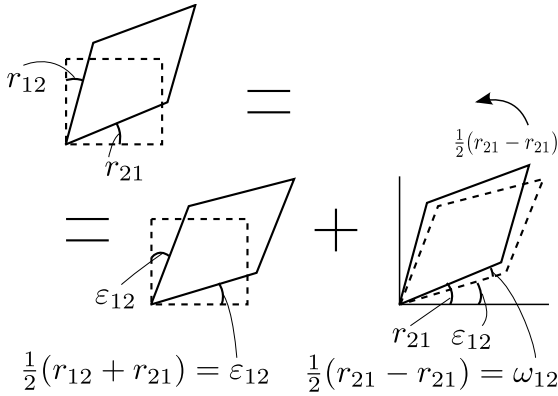


Рис. 8: Двумерный чертеж, иллюстрирующий то обстоятельство, что произвольная деформация (слева) равна собственно деформации (в середине) плюс поворот (справа).

Диагональные компоненты тензора $[\varepsilon_{ij}]$ представляют собой растяжения на единицу длины вдоль осей Ox_1 и Ox_2 . Компонента ε_{12} измеряет тензорную деформацию сдвига (тензорную сдвиговую деформацию). Если в недеформированном теле два линейных элемента расположены параллельно Ox_1 и Ox_2 , то после деформации угол между ними будет равен $\frac{1}{2}\pi - 2\varepsilon_{12}$ (см. средний чертеж на рис. 8). Заметим в частности, что тензорная деформация сдвига ε_{12} равна половине изменения угла между двумя указанными элементами. Теперь рассмотрим однородную двумерную деформацию.

Когда деформация однородна, все компоненты r_{ij} являются константами и интегрирование уравнения (6.3) дает

$$u_i = (u_0)_i + r_{ij}x_j \quad (i, j = 1, 2).$$

где $(u_0)_i$ - смещение точки, находящейся в начале координат.

Если на недеформированной пластинке проведен кривая $f(x_1, x_2) = 0$, то после деформации она переходит в $f(x'_1, x'_2) = 0$, где

$$x'_i = x_i + u_i = (u_0)_i + x_i + e_{ij}x_j$$

Эта замена переменных линейна, а отсюда следует, что при однородной деформации:

- 1) прямая остается прямой;
- 2) параллельные линии остаются параллельными
- 3) все прямые линии, параллельные между собой, удлиняются или сокращаются в одинаковой степени;
- 4) эллипс переходит в иной эллипс, в частности окружность становится эллипсом.

Под действием внешних нагрузок или источников внутренних напряжений в кристалле может возникнуть неоднородная статическая деформация, искажающая кристаллическую решетку, рис. 9

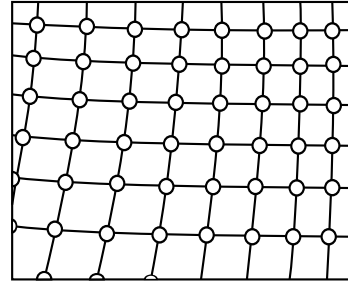


Рис. 9: Схема искаженной кристаллической решетки.

Если макроскопические характеристики кристалла существенно изменяются на расстояниях порядка δL и выполняется условие $\delta L \gg \bar{\lambda}$ то представление о распространении волн с определенным волновым числом можно сохранить вводя волновые пакеты, принадлежащие интервалу волновых векторов δk , где

$$\delta \gtrsim \frac{1}{\delta k} \gg \bar{\lambda}$$

Учитывая связь длины волны 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 - волна практически локализована в области размерами $1/\delta k \approx \delta x$ окружающей центр волнового пакета. Центр волнового пакета можно получить приравняв нулю производную фазы по волновому вектору

$$\varphi = k'x - \omega't$$

$$\frac{d\varphi}{dk} = x - t \frac{d\omega}{dk} = 0$$

т.е.

$$x = t \frac{d\omega}{dk}$$

Физически это соответствует измерению пространственных координат с точностью до δx , где $\bar{\lambda} \ll \delta x \ll \delta L$. Точка x движется со скоростью

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

которая называется групповой скоростью волнового пакета $\exp i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)$. Таким образом, описанному волновому пакету можно с достаточной степенью точности сопоставить колебание с квазиволновым вектором \vec{k} , такое колебание будем называть фононом. Неоднородность среды проявляется, помимо прочего в неоднородности преломления для фонона, т.е. зависимости частоты фонона от координаты \vec{r} : $\omega_\alpha = \omega_\alpha(\vec{r}, \vec{r})$. Тогда вектор \vec{k} соответствующего пакета зависит от времени:

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\nabla\omega(\vec{k}, \vec{r}) \equiv -\frac{\partial\omega}{\partial\vec{r}}$$

Приближение в котором имеет смысл соотношение (9.3), полностью соответствует приближению эйконала в геометрической оптике. Непосредственно из (9.3) и (9.4) можно записать уравнения движения для звукового луча:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{d\omega(\vec{k}, \vec{r})}{dk}; \quad \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{d\omega(\vec{k}, \vec{r})}{d\vec{r}}$$

Центр волнового пакета движется из начальной точки в конечную по пути минимизирующему времени движения (или что тоже самое минимизирующему длину пути) - принцип Ферма (в механике это соответствует принципу Гамильтона). Такой минимальный путь называется экстремалью. В главе 2 мы подробнее остановимся на этом понятии. Используя принцип Ферма и вариационные методы классической механики установим, что движение центра волнового пакета подчиняется уравнениям Гамильтона, где в роли энергии выступает частота как функция координат и квазиволнового вектора $\omega(\vec{r}, \vec{n})$.

Составим словарь, позволяющий переводить утверждения механики на язык звуковых лучей и наоборот:

Материальная точка - волновой пакет.

Траектория - Луч.

Скорость (V) - Групповая скорость (V).

Потенциальная энергия, функция координат

$U = U(x)$ - Показатель преломления.

Энергия E - Частота ν (В диспергирующей среде $\nu = \nu(\nu, x)$) Для фазовой скорости простой аналогии в механике нет.

Траектория материальной точки и траектория светового (в нашем случае - акустического) луча совпадают при определенном соответствии потенциальной энергии и переменного в пространстве показателя преломления. Этот факт был открыт выдающимся

ирландским математиком и физиком У.Р.Гамильтоном (1805-1865) в 1834 году (этот факт оказал влияние на установление связи между волновой оптикой и волновой (квантовой) механикой. Полная энергия материальной точки массы m , движущейся в потенциальном поле $U(x, y, z)$ складывается из кинетической и потенциальной, и сохраняется (в силу закона сохранения энергии) в процессе движения:

$$E = \frac{mV^2}{2} + U(x, y, z),$$

где V - абсолютная величина мгновенной скорости.

В результате деформаций могут возникнуть необратимые изменения в кристаллической решетке - дислокации. Дислокации могут также возникать при росте кристаллов в следствие флуктуций температуры, концентрации раствора и других факторов. Дислокация это линейный дефект. Примером дислокации может служить модель, в которой в кристаллическую решетку вставлена лишняя полуплоскость. Край лишней полуплоскости, рис.11, называется в этом случае краевой дислокацией.

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.11 атомы ядра дислокации условно расположены по контуру заштрихованного пятиугольника.

Наличие деформации вдали от оси дислокации обнаруживается при обходе в плоскости xOy (рис 11) по узлам решетки вдоль замкнутого контура вокруг ядра дислокации. Рассмотрим вектор смещения каждого узла от его положения в идеальной решетке и проследим за полным приращением этого вектора при указанном обходе.

(Л.Л.) С макроскопической точки зрения дислокационная деформация кристалла как сплошной среды обладает в общем случае следующими свойствами: при обходе по любому замкнутому контуру L , охватывающему линию дислокации D , вектор упругого смещения u получает определенное конечное приращение b

Дислокация является также источником внутренних напряжений, т.е. порождает вокруг себя статиче-

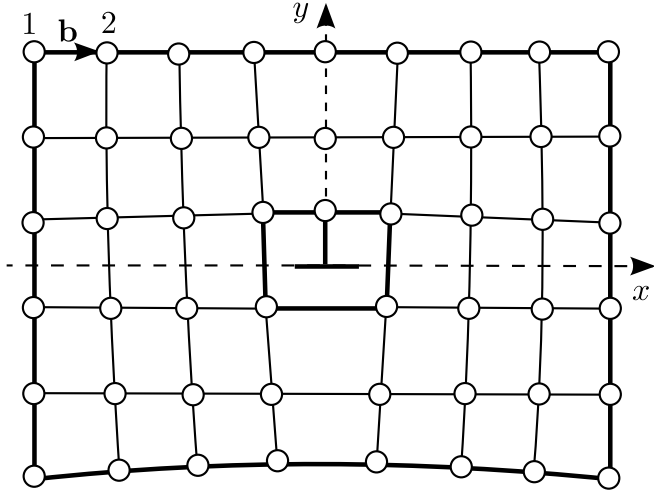


Рис. 10: Схема расположения атомов вблизи краевой дислокации.

ские упругие деформации. В ангармоническом приближении (в рамках нелинейной теории упругости) созданное дислокацией упругое также может служить причиной локализации малых гармонических колебаний на фоне искаженной решетки. Другими словами вдоль ядра дислокации распространяются волны с амплитудой быстро убывающей от ядра дислокации. Учитывая деформационное взаимодействие электронов с кристаллической решеткой, аналогичным путем можно изучить влияние дислокационных упругих полей на локализацию электронов или оптических фононов.

Проанализируем влияние дальнедействующего поля дислокации на возникновение локальных колебаний. Рассмотрим модель, дающую, однако, основные результаты.

Наиболее простой для анализа является так называемая скалярная модель кристалла, в которой предполагается, что атомы могут смещаться лишь в одном направлении. В качестве последнего естественно выбрать направление оси винтовой дислокации ось OX_3 , в этом направлении кристалл остается трансляционно инвариантным. Если обозначить u смещение атомов из положения равновесия в идеальном кристалле, то упругую энергию кристалла можно выразить через скалярные комбинации компонент тензора деформации

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial u}{\partial x_i} \delta_{j3} + \frac{\partial u}{\partial x_j} \delta_{i3} + \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} \right\}$$

:

$$\mathcal{E} = A_0 u_{ik}^2 + B_0 u_{li}^2 + C_0 u_{ik} u_{kl} u_{li} + D_0 u_{ik}^2 u_{li} + E_0 u_{ii}^3.$$

В выражении (1) мы ограничились кубическими по деформации ангармоническими членами. Из (1) вытекает следующее динамическое уравнение для сме-

щения u :

$$\begin{aligned} \rho_0 \ddot{u} = & 2A \Delta_2 u + 2B \frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2} + 2C \Delta_2 \frac{\partial u}{\partial x_3} + \\ & + 4C \frac{\partial}{\partial x_3} \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x_2} \right)^2 \right\} + \\ & 6D \frac{\partial u}{\partial x_3} \frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2}, \end{aligned}$$

где ρ_0 - плотность недеформированной среды;

$$\Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2};$$

$$A = \frac{1}{2} A_0; \quad B = A_0 + B_0;$$

$$C = A_0 + B_0 + \frac{3}{4} C_0 + \frac{1}{2} D;$$

$$D = A_0 + B_0 + C_0 + D_0 + E_0.$$

Решения уравнения (2) ищем в виде

$$u(x_1, x_2, x_3, t) = v(x_1, x_2) + \xi(x_1, x_2, x_3, t).$$

Здесь $v(x_1, x_2)$ - поле смещений вокруг винтовой дислокации; $\xi(x_1, x_2, x_3, t)$ - малые колебания. Линеаризуя (2) по малым смещениям ξ и учитывая, что $\partial v / \partial x_3 = 0$, приходим к следующей системе уравнений для v и ξ :

$$\begin{aligned} \rho_0 \ddot{\xi} = & 2A \Delta_2 \xi + 2B \frac{\partial^2 \xi}{\partial x_3^2} + \\ & + 4C \left\{ \frac{\partial v}{\partial x_1} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial v}{\partial x_2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x_2 \partial x_3} \right\}. \end{aligned}$$

Из уравнения (4а) следует известное выражение для поля винтовой дислокации

$$v = \frac{b}{2\pi} \arctan \frac{x_2}{x_1},$$

где b - модуль вектора Бюргерса. Учитывая (5) и отыскивая решение для ξ в виде монохроматической волны, распространяющейся вдоль дислокации:

$$\xi = \varphi(x_1, x_2) \exp[-i(\omega t - k_3 x_3)],$$

приходим к следующему уравнению для $\varphi(x_1, x_2)$ в полярных координатах:

$$\begin{aligned} s_1^2 \left\{ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \Theta^2} \right\} - \\ (s_2^2 k_3^2 - \omega^2) \varphi + i \frac{2bk_3 C}{\pi \rho_0} \frac{1}{r^2} \frac{\partial \varphi}{\partial \Theta} = 0. \end{aligned}$$

В этом уравнении r - расстояние от оси дислокации в плоскости $X_1 O X_2$, Θ - азимутальный угол;

$s_1^2 = 2A/\rho_0$; $s_2^2 = 2B/\rho_0$. Решение уравнения (6), экспоненциально убывающее при $r \rightarrow \infty$ (соответствующее локальным колебаниям), имеет вид

$$\varphi = e^{i\mu\theta} K_\nu \left(\frac{r}{s_1} (s_2^2 k_3^2 - \omega^2)^{1/2} \right),$$

$$\nu = \left(\mu^2 + \frac{2bk_3C}{\pi\rho_0 s_1^2} \mu \right)^{1/2}$$

где $\mu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; $K_\nu(t)$ -функция Макдональда. Уравнение(6) необходимо дополнить граничными условиями на поверхности ядра дислокации

$$\frac{1}{\varphi(r_0)} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)_{r=r_0} = F.$$

0.2 Кристаллы с учетом микроструктуры.

0.2.1 Идеальные кристаллы.

Выберем один из узлов кристаллической решетки за начало координат. Тогда в силу ее периодичности остальные узлы можно перенумеровать с помощью целочисленного вектора $n = (n_1, n_2, n_3)$

$$r_n \equiv r(n) = \sum_{\alpha=1}^3 n_\alpha a_\alpha$$

Для простой решетки нумерация узлов совпадает с нумерацией атомов. 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 \vec{a}_α). Поэтому сначала рассмотрим потенциальную энергию кристалла, атомы которого слегка смещены из равновесных положений, и выразим ее через смещения атомов $u(n)$. Учтем, что электроны столь подвижны, что в основном успевают приспособиваться к движению ядер - адиабатическое приближение. В этом случае считается что потенциальная энергия кристалла U функция только координат атомных ядер, фактически совпадающих с координатами центров тяжести атомов. Воспользовавшись стандартной теорией малых колебаний представим функцию U в виде

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{n, n'} \beta^{ik}(n, n') u^i(n) u^k(n')$$

Для сокращения записи опускать координатные индексы i, k, l, \dots у матричных и векторных величин: $\mathbf{B} = \beta^{ik}$, $i, k=1,2,3$. Тогда:

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum \mathbf{B}(\vec{n}, \vec{n}') u(\vec{n}) u(\vec{n}')$$

Коэффициенты в линейном члене разложения должны быть равны нулю (мы находимся вблизи равновесия). Для безграничной однородной решетки, в силу однородности коэффициенты матрицы \mathbf{B} должны зависеть только от разности $(n - n')$

$$\mathbf{B}(\vec{n}, \vec{n}') = \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}'),$$

Прямой подстановкой можно убедиться, что это функциональное уравнение имеет решение $\mathbf{A} = \alpha^{ik}$, $i, k=1,2,3$

Тогда:

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n}) u(\vec{n}')$$

Используя лагранжев формализм классической механики запишем уравнение движения в символической форме (подразумевается уравнение движения для каждого атом в кристалле):

$$m \ddot{u}(\vec{n}) = - \sum_{n'} \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n}')$$

Предположим, что кристалл сместился как целое: $u(n) = u_0 = const$. Тогда внутреннее состояние кристалла изменится не может (внешние силы отсутствуют); следовательно, на атомы не будут действовать никакие дополнительные силы:

$$\sum_{\vec{n}'} \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}') \equiv \sum_{\vec{n}'} \alpha^{ik}(\vec{n} - \vec{n}') = \sum \alpha^{ik}(\vec{n}) = 0$$

а значит добавление слагаемого

$$\sum_{n'} \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n})$$

в правую часть уравнения движения должно оставить его инвариантным

$$m \ddot{u}(\vec{n}) = - \sum_{n'} \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n}') =$$

$$= \sum_{n'} \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}') [u(\vec{n}) - u(\vec{n}')]]$$

что демонстрирует инвариантность состояния кристалла относительно его смещения как целого.

Интересуясь гармоническими колебаниями представим зависимость смещения всех атомов от времени в виде:

$$u(\vec{n}, t) = \exp[-i\omega t] u(\vec{n})$$

Подставим это в ур-е движения, после сокращения на $\exp[-i\omega t]$ получим:

$$m\omega^2 u(\vec{n}) = \sum_{n'} \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n}')$$

Введем обозначение $\varepsilon = \omega^2$ и перепишем это уравнение

$$\frac{1}{m} \sum_{n'} A(\vec{n} - \vec{n}') u() - \varepsilon u(\vec{n}) = 0$$

Решение этого уравнения можно искать в виде

$$u(\vec{n}) = u \exp[i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})].$$

Вектор \vec{k} играет роль волнового вектора колебаний кристалла. Сейчас он является свободным параметром, характеризующим искомое решение. Подставляя его получаем для смещений u систему линейных однородных уравнений

$$m\omega^2 u = \sum_{n'} A(\vec{n} - \vec{n}') u e^{i\vec{k}[\vec{r}(\vec{n}') - \vec{r}(\vec{n})]}$$

Но из определения (1.1) в силу линейности следует

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

И воспользовавшись преобразованием Фурье

$$\mathbf{A}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}} \mathbf{A}(\vec{n}) e^{-i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})}$$

получим

$$m\omega^2 u - \mathbf{A}(\vec{k})u = 0$$

В данном случае $\mathbf{A}(\vec{n})$ силовая динамическая матрица в узельном представлении, а $\mathbf{A}(\vec{k})$ та же матрица в \vec{k} представлении. Сдесь следует отметить, что приведенный выше переход к \vec{k} -представлению в многом и обуславливает использование в физике твердого тела так называемого \vec{k} -пространства (обратного пространства). Этот переход также называют переходом к коллективным координатам, так как в случае \vec{k} -представления мы выделяем целое множество атомов колебания которых соответствуют данному волновому вектору \vec{k} .

Условие совместности данной системы имеет вид

$$\text{Det} \| m\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{A}(\vec{k}) \| = 0$$

где \mathbf{I} - единичная матрица. Вводя для упрощения обозначение

$$D(\varepsilon) = \text{Det} \left\| \varepsilon \mathbf{I} - \frac{1}{m} \mathbf{A}(\vec{k}) \right\| \quad (1)$$

перепишем условие совместности

$$D(\omega^2) = 0$$

Это соотношение в механике носит название характеристического уравнения для собственных частот [?],

и его решение связывает частоту возможных колебаний кристалла с квазиволновым вектором \vec{k} . Зависимость частоты от волнового вектора, как уже упоминалось, называется законом дисперсии, а само характеристическое уравнение - дисперсионным уравнением. Следовательно, решая дисперсионное уравнение, мы получаем закон дисперсии

$$\varepsilon = \omega^2(\vec{k})$$

для колебаний кристаллической решетки.

В простой решетке каждый атом является центром инверсии, поэтому

$$\mathbf{A}(\vec{n}) = \mathbf{A}(-\vec{n})$$

и очевидна вещественность матрицы $\mathbf{A}\vec{k}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\vec{k}) &= \sum \mathbf{A}(\vec{n}) \cos(\vec{k}\vec{r}(\vec{n})) = \\ &= \sum \mathbf{A}(\vec{n}) (\cos(\vec{k}\vec{r}(\vec{n})) - 1) \end{aligned}$$

Последняя часть равенства вытекает из свойства (1.8) силовой матрицы.

Если рассматривать цепочку атомов - скалярный случай вместо системы (1.19) имеется всего одно уравнение, и закон дисперсии может быть записан в явном виде:

$$\begin{aligned} \omega^2(\vec{k}) &= \frac{1}{m} \sum \alpha(\vec{n}) e^{i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})} = \\ &= \frac{1}{m} \sum \alpha(\vec{n}) (\cos \vec{k}\vec{r}(\vec{n}) - 1). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что прежде всего, закон дисперсии определяет частоту как периодическую функцию квазиволнового вектора с периодом обратной решетки:

$$\omega(\vec{k}) = \omega(\vec{k} + \vec{B})$$

Это - основное отличие закона дисперсии колебаний кристалла от закона дисперсии колебаний сплошной среды, так как для последнего характерна монотонная зависимость частоты от волнового вектора. Одновременно с этим проявляется отличие квазиволнового вектора \vec{k} от обычного волнового вектора - лишь значениям вектора \vec{k} внутри одной элементарной ячейки обратной решетки, отвечают физически неэквивалентные состояния кристалла. Элементарная ячейка обратной решетки называется зоной Бриллюэна.

Возвращаясь к закону дисперсии как решению дисперсионного уравнения (1.21), учтем, что последнее является алгебраическим уравнением третьей степени относительно ω^2 :

$$\text{Det} \| m\omega^2 \delta_{ij} - A_{ij}(\vec{k}) \| = 0,$$

$$i, j = 1, 2, 3.$$

Корни этого уравнения определяют три ветви закона дисперсии колебаний простой кристаллической решетки:

$$\varepsilon = \omega_\alpha^2, \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

где α номер ветви колебаний.

Итак, собственные колебания кристалла могут быть представлены в виде плоских волн (1.18), частоты которых связаны с квазиволновым вектором законом дисперсии (выше).

Чтобы отличать смещения разных ветвей колебаний, запишем решение (1.18) явно в векторном виде

$$u(\vec{n}, t) = e(\vec{k}, \alpha) e^{i[\vec{k}\vec{r}(\vec{n}) - \omega t]}$$

где $e(\vec{k}, \alpha)$ - единичный вектор. Этот вектор называется вектором поляризации.

Выделим временной множитель $e^{i\omega t}$ и определим нормированные решения типа (1.28) формулой

$$\varphi_{\vec{k}\alpha}(\vec{n}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e(\vec{k}, \alpha) e^{i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})}.$$

При условии, что рассматриваются только векторы \vec{k} находящиеся в одной элементарной ячейке обратной решетки (физически неэквивалентные) функциям (1.18) присущи естественные свойства независимости

$$\sum_{n'} \varphi_{\vec{k}\alpha}^*(\vec{n}') \varphi_{\vec{k}'\alpha'}(\vec{n}') = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\alpha\alpha'},$$

В связи с этим колебания отвечающие этим функциям называются независимыми - нормальными модами колебаний.

В скалярной модели понятие поляризации отсутствует, и координатная зависимость нормальных колебаний записывается в виде

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{n}) = \frac{1}{N} e^{i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})},$$

обеспечивающим условие нормировки

$$\sum_n \varphi_{\vec{k}}^*(\vec{n}) \varphi_{\vec{k}'}(\vec{n}) = \delta_{\vec{k}\vec{k}'},$$

Зависимость нормальных колебаний от узла кристаллической решетки \vec{n} была нами найдена в ходе непосредственного решения уравнений колебаний (1.17). Однако эта зависимость следует прямо из трансляционной симметрии кристалла. Если система материальных точек совершает гармонические колебания, то ее нормальные колебания преобразуются по неприводимым представлениям группы симметрии системы

Мы выяснили, что отдельные колебания (1.18), являющиеся независимыми состояниями движения всей

кристаллической решетки, характеризуются различными значениями квазиволнового вектора \vec{k} . При этом вопрос о возможных состояниях самого вектора \vec{k} остался открытым. Далеко не все точки внутри элементарной ячейки в k - пространстве могут соответствовать независимым состояниям кристалла. Это следует хотябы 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. Поэтому общее качественное исследование независимых состояний (колебаний) кристалла не может считаться полным, пока не установлен спектр возможных значений \vec{k} .

Во всем изложенном была существенна трансляционная симметрия, в связи с чем решетка считалась безграничной. Рассмотрение такой решетки затруднительно в математическом отношении, ввиду того, что приходится иметь дело с бесконечным числом атомов и собственных функций - состояний (1.18):

$$u(\vec{n}) = u \exp[i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})].$$

Мы можем изучать такие системы лишь полагая число атомов конечным и затем переходя к пределу, когда это число устремляется к бесконечности - переход к плотности состояний. При этом нужно было бы ввести границы как некоторые реальные поверхности, на которых, например, собственные функции обратились бы в нуль, однако в результате отражений от всех границ точные стационарные состояния такой системы изображались бы соячими волнами.

Существует математический прием, который позволяет удовлетворительно решить проблему подсчета состояний и при этом не вводит каких-либо физических эффектов, связанных с граничными условиями. Этот прием состоит в применении циклических граничных условий или условий Борна - Кармана в уравнении (1.17). Таким условием является требование цикличности, согласно которому

$$\begin{aligned} u(\vec{r}_n) &= u(\vec{r}_n + N_1 \vec{a}_1) = \\ &= u(\vec{r}_n + N_2 \vec{a}_2) = u(\vec{r}_n + N_3 \vec{a}_3) \end{aligned}$$

Накладывая это ограничение на (1.18) получаем

$$\begin{aligned} u(\vec{r}_n) &= u e^{ik[\vec{r}(n_\alpha + N_\alpha a_\alpha)]} = \\ &= u e^{i\vec{k}\vec{r}(n_\alpha)} e^{i\vec{k}\vec{r}(N_\alpha a_\alpha)} \end{aligned}$$

Учитывая (2.1 тут)

$$e^{i\vec{k}\vec{r}(N_\alpha a_\alpha)} = 1.$$

Отсюда

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{N_\alpha a_\alpha} p_\alpha$$

В кубической решетке формула (1.45) может быть значительно упрощена, если положить $L_\alpha = N_\alpha a$ и направить оси координат по осям симметрии четвертого порядка:

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

Наконец, совокупность целых чисел p_α обычно берут расположенной симметрично на числовой оси:

$$p_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N_{\alpha+1}}{2}, \alpha = 1, 2, 3.$$

Из (1.45) или (1.46) следует, что дискретные значения компонент вектора \vec{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 \vec{k} может считаться квазинепрерывным. Последнее свойство мы использовали при анализе закона дисперсии, рассматривая частоту как непрерывную функцию квазиволнового вектора.

В дальнейшем мы будем использовать квазинепрерывность спектра значений \vec{k} , заменяя суммирование по дискретным значениям квазиволнового вектора интегрированием. Учтя соотношения (1.45) и (1.46), легко получить правило указанного перехода к интегрированию:

$$\sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int f(\vec{k}) d^3 k$$

где интегрирование производится по объему одной элементарной ячейки в k -пространстве (или по одной зоне Бриллюэна). Заметим, что если в формуле (1.47) положить $f(\vec{k}) \equiv 1$, то мы приходим к очевидному соотношению

$$\sum_{\vec{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k = \frac{V}{V_0} = N,$$

сводящемуся к утверждению, что число независимых значений вектора \vec{k} в одной элементарной ячейке равно числу элементарных ячеек (числу атомов в простой решетке).

Для объяснения ряда свойств кристаллов, обусловленных колебаниями решетки иногда достаточно знать лишь распределение колебаний по частотам. Имея это в виду, вводят понятие плотности колебаний.

Возпользуемся обозначением $\varepsilon = \omega^2$. Тогда число колебаний квадраты частот которых лежат в интервале $\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon$, можно записать в виде

$$dn_\alpha = N g_\alpha(\varepsilon) d\varepsilon,$$

где N - число элементарных ячеек в кристалле. Функцию $g(\varepsilon)$ мы будем называть *плотностью колебаний*.

Очевидно, имеет место формула

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \delta(\varepsilon - \omega^2(\vec{k})),$$

где зависимость $\omega^2(\vec{k})$ определяется законом дисперсии кристалла, а суммирование проводится по всем физически неэквивалентным значениям этого вектора (находящимся в одной ячейке обратной решетки или в первой зоне Бриллюэна).

Преобразуем формулу (2.13) переходя к интегрированию по правилу (1.47) и производя замену переменных интегрирования:

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

где V_0 - объем элементарной ячейки кристалла.

Рассмотрим теперь как упрощаются сами уравнения движения кристалла в случае длинноволновых колебаний.

Рассмотрим колебания с малым k , т.е. колебания для которых $ak \ll 1$. Разложим косинус в правой части (1.26), по степеням его аргумента и используем то обстоятельство, что функция $\alpha(\vec{n})$ быстро убывает с ростом номер-вектора \vec{n} . Тогда в основном приближении

$$\omega^2(\vec{k}) = -\frac{1}{2m} \sum_{\alpha, \beta} (\vec{k} \vec{a}_\alpha) (\vec{k} \vec{a}_\beta) \sum_{\vec{n}} \alpha(\vec{n}) n_\alpha n_\beta$$

Обозначим $\vec{k} = \vec{k} \vec{\kappa}$, введя единичный вектор направления обратном пространстве $\vec{\kappa}$, и представим (1.34) в виде

$$\omega_2 = s_2(\vec{\kappa}) k_2$$

где

$$s^2(\vec{\kappa}) = -\frac{1}{2m} \sum_{\alpha, \beta} (\vec{k} \vec{a}_\alpha) (\vec{k} \vec{a}_\beta) \sum_{\vec{n}} \alpha(\vec{n}) n_\alpha n_\beta$$

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

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

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

Вернемся к уравнению движения однородной кристаллической решетки

$$m\ddot{u}(\vec{n}) = - \sum_{\vec{n}'} \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n}')$$

Запишем его в виде

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

где

$$\vec{r} = X_s(\vec{n}), \quad \vec{r}' = X_{s'}(\vec{n}').$$

Учитывая что смещения слабо изменяются в пространстве разложим функцию $u_{s'}(\vec{r}')$ в ряд около точки $\vec{r}'(x_1, x_2, x_3)$, ограничившись членами второго порядка по $X_s^k(\vec{n}) - X_{s'}^k(\vec{n}')$:

0.2.2 Реальные кристаллы.

Рассмотрим как будут распространяться колебания при наличии в решетке изолированного изотоп-дефекта. В параграфе ... при условии что все атомы одинаковой массы мы описывали стационарные колебания кристалла уравнением

$$m\ddot{u}(\vec{n}) - m \sum_{\vec{n}'} \alpha(\vec{n} - \vec{n}') [u(\vec{n}) - u(\vec{n}')] = 0$$

Затем используя временную зависимость $e^{-i\omega t}$ переходили к частотному представлению

$$m\omega^2 u(\vec{n}) = \sum_{\vec{n}'} \mathbf{A}(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n}')$$

Решение искали в виде

$$u(\vec{n}) = u e^{ik\vec{r}(\vec{n})}$$

И переходя импульсному представлению Фурье преобразованием матрицы \mathbf{A}

$$\mathbf{A}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}} \mathbf{A}(\vec{n}) e^{-i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})}$$

пришли к дисперсионному уравнению

$$\text{Det} \| m\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{A}(\vec{k}) \| = 0$$

с законом дисперсии

$$\omega^2 = \omega_0^2(\vec{k}) \equiv \frac{1}{m} \sum_{\vec{n}} \alpha(\vec{n}) \cos(\vec{k}\vec{r}(\vec{n}))$$

Затем в параграфе (переход к длин волн приближению) мы этим уравнением описывали акустические колебания для которых закон дисперсии

$$\omega_0^2(0) \equiv \frac{1}{m} \sum_{\vec{n}} \alpha(\vec{n})$$

и возможные частоты колебаний лежат в конечном интервале $(0, \omega_m)$.

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 параметров упругой связи атомов и сводится только к изменению массы в узле, занятом изотопом. Пусть изотоп занимает узел в начале координат $\vec{n} = 0$ обладая массой M , отличной от массы основного атома. При наличии такого дефекта вместо уравнения ... мы получим систему из двух уравнений

$$Mu(\vec{0}, t) - \sum_{\vec{n}'} \alpha(\vec{n}') u(\vec{n}') = 0, \quad \vec{n} = 0$$

$$m\ddot{u}(\vec{n}, t) - \sum_{\vec{n}'} \alpha(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n}') = 0, \quad \vec{n} \neq 0$$

Эти уравнения можно объединить в единой записи

$$m\ddot{u}(\vec{n}, t) -$$

$$\sum_{\vec{n}'} \alpha(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n}') =$$

$$-(M - m)\ddot{u}(\vec{0}, t)\delta_{n0} \equiv F(\vec{0}, t)\delta_{n0}$$

введя трехмерный символ Кронекера $\delta_{nn'}$. В этом можно убедиться прямой подстановкой. Таким образом мы пришли к уравнению движения для невозмущенной решетки при наличии внешней силы $F = -(M - m)\ddot{u}(\vec{0}, t)\delta_{n0}$ (неоднородное дифференциальное уравнение).

Перейдем в этом уравнении от временного к частотному представлению представив $u(\vec{n}, t)$ и $F(\vec{0}, t)$ в виде интегралов Фурье.

$$u(\vec{n}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} u_{\omega^2}(\vec{n}) e^{-i\omega t} d\omega$$

$$u_{\omega^2}(\vec{n}) = \int_{-\infty}^{\infty} u(\vec{n}, t) e^{i\omega t} dt$$

$$F(\vec{0}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{\omega^2}(\vec{0}) e^{-i\omega t} d\omega$$

$$F_{\omega^2}(\vec{0}) = \int_{-\infty}^{\infty} u(\vec{0}, t) e^{-i\omega t} dt$$

Дельта функция от времени не зависит, поэтому она остается неизменной.

Тогда () запишется в виде

$$m\epsilon u(\vec{n}) - \sum_{\vec{n}'} \alpha(\vec{n} - \vec{n}') u_{\omega^2}(\vec{n}') =$$

$$= F_{\omega^2}(0)\delta_{n0} = -(M - m)\varepsilon u_{\omega^2}(0)\delta_{n0}$$

Теперь перейдем к импульсному представлению произведя преобразование фурье над этим уравнением

$$u_{\varepsilon}(\vec{n}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} u(\varepsilon, \vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})}$$

$$u(\varepsilon, \vec{k}) = \sum_{\vec{n}} u(\vec{n}) u_{\varepsilon}(\vec{n}) e^{-i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})}$$

$$F_{\omega^2}(\vec{n}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} F(\varepsilon, \vec{k})$$

$$F(\varepsilon, \vec{k}) = \sum_{\vec{n}} F_{\varepsilon}(\vec{n}) e^{-i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})}$$

$$\mathbf{A}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}} \mathbf{A}(\vec{n}) e^{-i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})}$$

$$1 = \sum_{\vec{n}} \delta_{n0} e^{-i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})} = e^{-i\vec{k}\vec{0}}$$

Тогда уравнение (1) запишется в виде:

$$\varepsilon u(\varepsilon, \vec{k}) - \frac{\mathbf{A}(\vec{k})}{m} u(\varepsilon, \vec{k}) = \frac{F(\varepsilon, \vec{k})}{m}$$

$$(\varepsilon - \frac{1}{m} \mathbf{A}(\vec{k})) u(\varepsilon, \vec{k}) = \frac{F(\varepsilon, \vec{k})}{m}$$

отсюда

$$u(\varepsilon, \vec{k}) = \frac{F(\varepsilon, \vec{k})}{m} \frac{1}{\varepsilon - \omega^2(\vec{k})}$$

Введем функцию

$$G_{\varepsilon}(\vec{k}) = \frac{1}{\varepsilon - \omega^2(\vec{k})}$$

тогда

$$u(\varepsilon, \vec{k}) = \frac{F(\varepsilon, \vec{k})}{m} G_{\varepsilon}$$

Функция G_{ε} называется функцией Грина для идеальной решетки. Для удобства внесем константу $1/m$ в правую часть (2) и введем обозначения

$$M - m = \Delta m, \quad U_0 = -\frac{\Delta m}{m} \varepsilon$$

Тогда учитывая (5) легко видеть, что если в правой части оставить только δ_{n0} то

$$u(\varepsilon, \vec{k}) = G_{\varepsilon}(\vec{k})$$

И из (3) следует, что

$$u(\vec{n}) = G_{\varepsilon}(\vec{n}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})}}{\varepsilon - \omega^2(\vec{k})}.$$

Введем формальное решение (2):

$$u(\vec{n}) = U_0 G_{\varepsilon}(\vec{n}) u(0)$$

Если отказаться от скалярной модели, то при наличии изотоп-дефекта в узле $n = 0$ аналогичное выражение для вектора смещения любого атома кристалла будет:

$$u^i(\vec{n}) = U_0 G_{\varepsilon}^{ik}(\vec{n}) u^i(0)$$

Вернемся к скалярной модели. Полагая в (12.9) $\vec{n} = 0$, мы обнаруживаем, что формула (12.9) непротиворечива лишь при условии

$$1 - U_0 G_{\varepsilon}^0(0) = 0$$

Подставляя сюда ()

$$1 - \frac{U_0}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\varepsilon - \omega^2(\vec{k})} = 0$$

Перейдя от суммирования к интегрированию по квазиволновым векторам заменив суммирование интегрированием по частотам:

$$1 - U_0 \int \frac{g_0(z) dz}{\varepsilon - z} = 0$$

здесь $g_0(\varepsilon)$ - плотность колебаний идеальной решетки. Учитывая что частоты акустических колебаний невозмущенного кристалла лежат в интервале $(0, \omega_m)$, ясно, что уравнение (12.13) имеет смысл лишь для $\varepsilon > \varepsilon_m = \omega_m^2$. Но тогда знаменатель в интеграле (12.13) всегда положителен, и уравнение (12.13) может обладать решением только при $U_0 < 0$, т.е. для легкого изотопа ($M < m$). Однако в трехмерном кристалле наличие нужного знака возмущения еще не гарантирует существования решения уравнения (12.13). В последнем легко убедиться, произведя графический анализ уравнения (12.13).

Введем обозначение

$$F(\varepsilon) = \varepsilon \int \frac{g_0(z) dz}{\varepsilon - z}$$

и, учитывая определение (12.7), перепишем (12.3):

$$F(\varepsilon) = -\frac{m}{\Delta m}.$$

Поскольку $g_0(z) \sim \sqrt{\varepsilon_m - z}$ 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:

$$F'(\varepsilon) \simeq -\varepsilon_m \int \frac{g_0(z) dz}{(\varepsilon - z)^2} < 0.$$

При $\varepsilon \gg \varepsilon_m$, в силу выбранной нами нормировки плотности колебаний $F(\varepsilon) \approx 1$, поэтому график

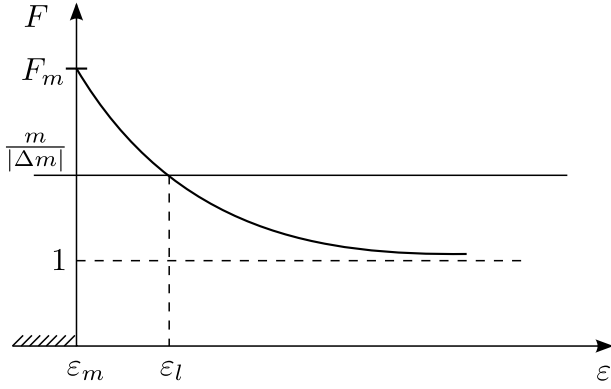


Рис. 11: Нахождение положения локальных частот при разных знаках Δm .

функции $F(\varepsilon)$ обычно имеет вид кривой, представленной на рис. 12.

Изобразив на том же рисунке горизонтальную прямую, соответствующую правой части (12.15), мы приходим к выводу, что решение $\varepsilon = \varepsilon_l$ существует лишь при условии $|\frac{\Delta m}{m}| F_m > 1$. Если это условие выполнено, то решение уравнения (12.13) дает дискретную частоту ε_l , лежащую вне полосы непрерывного спектра (рис. 12, $\varepsilon_l = \omega_l^2$).

Таким образом, для возникновения колебания с дискретной частотой, расположенной вблизи акустической полосы, изотоп должен обладать массой M удовлетворяющей условию

$$M < m \left(1 - \frac{1}{F_m} \right) < m$$

Покажем, что амплитуда соответствующего колебания действительно отлична от нуля лишь в некоторой области вблизи точечного дефекта.

Амплитуда локальных колебаний дается формулой (12.9), из которой следует, что ее координатная зависимость полностью определяется поведением функции Грина идеального кристалла. Перепишем функцию Грина в виде следующего интеграла:

$$\begin{aligned} G_\varepsilon^0(\vec{n}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\exp(i\vec{k}\vec{r}(\vec{n}))}{\varepsilon - \omega_0^2(\vec{k})} = \\ &= \frac{V_0}{(2\pi)} \int \frac{\exp(i\vec{k}\vec{r}(\vec{n})) d^3k}{\varepsilon_0^2(\vec{k})}. \end{aligned}$$

Как всегда в подобных интегралах, их поведение на больших расстояниях ($r \ll a$) в основном определяется видом подынтегральной функции при малых значениях k ($ak \ll 1$). Другими словами, основной вклад в интеграл (12.17) при больших r дает интегрирование по области малых волновых векторов, где закон дисперсии идеального кристалла квадратичен по k .

$$\omega_0^2(\vec{k}) = \omega_1^2 + \gamma^2 k^2, \quad \gamma^2 \sim (\omega_2^2 - \omega_1^2) a^2.$$

Учтем этот закон дисперсии, заменив $\varepsilon_1 = \omega_1^2$, и выполним требуемое в (12.17) интегрирование:

$$\begin{aligned} &\int \frac{\exp(i\vec{k}\vec{r} d_3k)}{\varepsilon_1 - \varepsilon + \gamma^2 k^2} = \\ &= 2\pi \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{\varepsilon_1 - \varepsilon + \gamma^2 k^2} \int_0^\pi e^{(ikr \cos(\theta))} \sin(\theta) d\theta = \\ &= \frac{2\pi^2}{\gamma^2 r} \exp\left(-\frac{r}{\gamma} \sqrt{\omega_1^2 - \omega^2} \frac{r}{\gamma}\right). \end{aligned}$$

Подставим полученный результат в формулу (12.17) и обозначим $\vec{r} = \vec{r}(\vec{n})$:

$$G_\varepsilon^0(\vec{n}) \sim \frac{1}{r} \left(-\sqrt{\omega_1^2 - \omega^2} \frac{1}{\gamma} \right)$$

Подставим (12.18) в формулу (12.9):

$$u(\vec{n}) \sim \frac{u(0)}{r} \exp\left(-\frac{r}{l}\right),$$

где введена характерная длина l , определяющая область локализации колебаний с дискретной частотой:

$$l = \frac{\gamma}{\sqrt{\varepsilon_1 - \varepsilon_l}} = \frac{\gamma}{\sqrt{\omega_1^2 - \omega_l^2}}.$$

Таким образом, амплитуда локального колебания действительно быстро убывает с ростом расстояния r и l — длина на которой происходит это убывание.

Сам факт существования дискретной частоты, отделенной конечным интервалом от частот полосы непрерывного спектра приводит к появлению особенностей в частотных зависимостях различных характеристик процессов рассеяния и поглощения. Соответствующие резонансные особенности появляются у амплитуд рассеяния различных частиц (например, нейтронов) на локальных дефектах.

Рассмотрим локальные колебания точечного дефекта, который создается примесью замещения, когда место атома основного элемента занято "чужим" атомом. Такого же типа дефект создает вакансия в узле. При наличии этого типа дефекта меняются как масса соответствующего узла, так и постоянные упругой связи этого узла с соседними. Поэтому уравнение (12.8) должно быть заменено более общим (дефект расположен в узле $\vec{n} = \vec{0}$):

$$\begin{aligned} \varepsilon u(\vec{n}) &= \frac{1}{m} \sum_{\vec{n}'} \alpha(\vec{n} - \vec{n}') u(\vec{n}') = \\ &= \sum_{\vec{n}'} U(\vec{n}, \vec{n}') u(\vec{n}') - \varepsilon \frac{\Delta m}{m} u(0) \delta_{n0} \end{aligned}$$

Где матрица $U(\vec{n}, \vec{n}')$ определяет созданное дефектом возмущение силовых коэффициентов идеальной решетки $\alpha(\vec{n} - \vec{n}')$

Если уравнение (12.21) описывает акустические колебания кристалла, то матрица возмущения должна обладать свойством, анлогичным (4.3):

$$\sum_{\vec{n}'} U(\vec{n}, \vec{n}') = \sum_{\vec{n}} U(\vec{n}, \vec{n}') = 0.$$

Отыскание локальных частот у любого точечного дефекта, в принципе, не отличается от нахождения таковых у дефекта-изотопа. Однако процедура становится очень громоздкой. Ввиду ее очевидности мы не будем ее демонстрировать.

Обратимся к анализу колебаний кристалла с одномерным (линейным) дефектом - дислокацией. Для анализа колебаний кристалла с дислокацией сделаем ряд предположений:

1) малые колебания (вблизи их новых положений равновесия в присутствии дислокации), поэтому в нулевом приближении ось дислокации можно считать фиксированной.

2) дислокация прямолинейна и ее ось перпендикулярна плоскости симметрии кристалла.

Направим ось z вдоль линии дислокации и обозначим через ξ двумерный радиус-вектор в плоскости xOy : $\vec{r} = (\xi, z)$, $\xi = (x, y)$

Если принять, что дислокация не влияет на величину 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 в скалярной модели смещение атомов кристалла как непрерывную функцию координат: $u = u(\xi, z)$, можно представить уравнение колебаний в виде

$$\omega^2 u(\xi, z) - \frac{1}{m} \sum_{\vec{n}'} \alpha(\vec{n} - \vec{n}') u(\xi', z') = a^2 \delta(\xi) \sum_{z'} U(z - z') u(0, z')$$

где $\delta(\xi)$ - двумерная δ -функция ($\delta(\xi) = \delta(x)\delta(y)$); суммирование по узлам кристаллической решетки может быть заменено интегрированием:

$$\sum_z \dots = \frac{1}{a} \int dz, \quad \sum_{\xi} \dots = \frac{1}{a^2} \int dxdy \dots, \quad \sum_{\vec{n}} \dots = \frac{1}{V_0} \int dV \dots$$

Функция $U(z)$ в ... описывающая возмущение силовой матрицы, не зависит от частоты, является четной функцией от z и удовлетворяет очевидному требованию

$$\sum_z U(z) = 0$$

Используем однородность кристалла вдоль направления Oz и применим одномерное преобразование Фурье относительно координаты z :

$$u(\xi, z) = \frac{a}{2\pi} \int \chi_k(\xi) e^{ikz} dk, \\ \chi^k(\xi) = \sum_z u(\xi, z) e^{-ikz}$$

Уравнение для $\chi_k(\xi)$ выводится стандартным путем из ...:

$$\omega^2 \chi_k(\xi) - \sum_{\xi'} \Lambda_k(\xi - \xi') \chi_k(\xi') = a^2 \delta(\xi) U_k \chi_k(0)$$

где

$$\Lambda_k(\xi) = \frac{1}{m} \sum_{n_z} \alpha(\vec{n}) e^{-ikanz}, \quad U_k = \sum U(z) e^{-ikz}$$

Уравнение ... является уравнением колебаний двумерного кристалла со специфическим "точечным" дефектом в начале координат. Компонента $k = k_z$ 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...

$$U_k = -k_2 W_0, \quad W_0 = \frac{1}{2} \sum U(z) z^2$$

Для нахождения функции $\chi_k(\xi)$ воспользуемся двумерным разложением Фурье

$$\chi_k(\xi) = \frac{a^2}{(2\pi)^2} \int \chi(\vec{\varkappa}, k) e^{i\vec{\varkappa}\xi} d^2 \varkappa, \\ \chi(\vec{\varkappa}, k) = \sum_{\xi} \chi_k(\xi) e^{-i\vec{\varkappa}\xi}$$

где $\vec{\varkappa}$ - двумерный волновой вектор, $\vec{\varkappa} = (k_x, k_y)$.

Компоненты Фурье $\chi(\varkappa, k)$ определяются из соотношения

$$[\omega^2 - \omega_0^2(\vec{\varkappa}, k)] \chi(\vec{\varkappa}, k) = -k^2 W_0 \chi_k(0),$$

в котором функция $\omega_0^2(\vec{\varkappa}, k)$ задает закон дисперсии идеального кристалла.

Предположим для дальнейшего упрощения выкладок, что ось Oz является осью симметрии четвертого, или шестого порядка. Тогда в длинноволновом пределе

$$\omega_0^2(\vec{\varkappa}, k) = s_0^2 \varkappa^2 + s^2 k^2.$$

Зависимость амплитуды колебаний от ξ следует непосредственно из ...

$$\chi_k(\xi) = -(ak^2) \frac{W_0}{(2\pi)^2} \chi_k(0) \int \frac{\cos(\vec{\varkappa}\xi) d^2 \varkappa}{\omega^2 - s^2 k^2 - s_0^2 \varkappa^2}.$$

Положив тут $\xi = 0$, получим уравнение для частот колебаний, амплитуда которых описывается этой формулой

$$1 + (ak)^2 \frac{W_0}{2\pi} \int_0^{\kappa_0} \frac{\tilde{z} d\kappa}{\omega^2 - s^2 k^2 - s_0^2 \kappa^2} = 0.$$

Верхний предел интегрирования тут имеет порядок величины $\kappa_0 \sim 1/a$. То обстоятельство, что предел интегрирования в этой формуле определяется лишь по порядку величины и имеет характер некоторого параметра "образования", связано с модельным предположением о точечном характере возмущения в уравнении (14.5). Предположение () о дельтаобразной локализации возмущения на оси дислокации точно так же, как и закон дисперсии (), справедливо только для длинноволновых колебаний ($a\kappa \ll 1$). В тоже время интегрирование в () и () должно распространяться на весь интервал непрерывного спектра частот. А поскольку подынтегральное выражение в () не обладает нужным для сходимости интеграла убыванием на бесконечности, мы вынуждены формально ввести естественный верхний предел интегрирования по квазиволновым векторам ($a\kappa_0 \sim \pi$).

Упростим уравнение ():

$$1 - (a)^2 \frac{W_0}{4\pi s_0^2} \ln \frac{s_0^2 \kappa_0^2}{s^2 k^2 - \omega^2} = 0,$$

опустив малые члены порядка величины

$$\frac{s^2 k^2 - \omega^2}{s_0^2 \kappa_0^2} \sim \frac{s^2 k^2}{s_0^2 k_0^2} \sim \frac{s^2 k^2}{\omega_D^2} \sim (ak)^2 \ll 1.$$

Как и в случае с изолированным изотоп-дефектом, уравнение () относительно квадратов собственных частот 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 () всегда имеет решение:

$$\omega^2 = s^2 k^2 = s^2 k_0^2 \exp\left\{-\frac{4\pi s_0^2}{(ak)^2 W_0}\right\}$$

Напомним, что здесь $W_0 > 0$ и $s_0 \kappa_0 \sim \omega_D$.

Частоты () обладают характерной для двумерных задач экспоненциальной зависимостью от интенсивности возмущения, т.е. от величины U_k . Существование локализованных вблизи дислокации колебаний требует определенного знака возмущения (W_0), и при нужном знаке соответствующая частота всегда отделена некоторой конечной щелью $\delta\omega$ от начала спектра собственных колебаний кристалла:

$$\delta\omega = sk - \omega_l \sim \frac{\omega_D^2}{sk} \exp\left\{-\frac{4\pi s_0^2}{(ak)^2 W_0}\right\}.$$

Мы рассмотрели бегущие вдоль дислокации упругие волны, существование которых обусловлено изменением упругих модулей в ядре дислокации.

Для идеального кристалла, в том числе подверженного однородной деформации, частоты нормальных колебаний атомов кристалла можно определить как собственные значения динамической матрицы [Моделирование на ЭВМ атомных конфигураций дефектов в металлах.]

0.3 Совместное рассмотрение.

Декартовы координаты смещений атомов линейно выражаются через нормальные координаты, и наоборот. Преобразование унитарно. (Элементарная теория колебательной структуры...). Нормальные колебания должны рассматриваться как квантовомеханические переменные (м бонн).