Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 2 — 1965

УДИ 548. 0:58

И. П. БАЗАРОВ

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛЛЕКТИВНЫХ КОЛЕБАНИЙ В КРИСТАЛЛЕ МЕТОДОМ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Развивается метод кинетического уравнения с самосогласованным полем для определения коллективных колебаний в кристалле.

В работах [1, 2, 3] рассматривалась модель кристалла, допускающая асимптотически точное решение, и было показано, что в отличие от реальной системы многих частиц для исследуемой модели соответствующее уравнение с самосогласованным полем является точным. Особенность модельного кристалла состоит, кроме того, в том, что в нем возможны лишь одночастичные возбуждения, соответствующие изменению состояния отдельных частиц кристалла [4], и невозможны коллективные возбуждения, соответствующие одновременному изменению состояния движения многих частиц в кристалле*. Вследствие этого рассматриваемую модель нельзя использовать для нахождения коллективных возбуждений в кристалле.

В работе [6] спектр коллективных колебаний в кристалле определялся при $T=0°$ К с помощью кинетического уравнения А. А. Власова [7]. В настоящей статье этот метод определения коллективных колебаний развивается для «горячего» кристалла (при $T \neq 0°$ К).

Вариации $\varphi(\vec{r}, \vec{p}, t)$ функции распределения частиц статистической системы в приближении самосогласованного поля определяются кинетическим уравнением А. А. Власова

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{m}(\vec{p}, \nabla_r \varphi) - (\nabla_r U_0, \nabla_p \varphi) = (\nabla_r U, \nabla_p f_0), \tag{1}$$

где $f_0(\vec{r}, \vec{p})$ — равновесная функция распределения,

$$U_0(r) = \int \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|) f_0(\vec{r}', \vec{p}') d\vec{r}' d\vec{p}', \tag{2}$$

$$U(r, t) = \int \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|) \varphi(\vec{r}', \vec{p}', t) d\vec{r}' d\vec{p}', \tag{3}$$

$\Phi(r)$ — потенциальная энергия взаимодействия между частицами.

---

* В этом отношении рассматриваемый модельный кристалл аналогичен модельному сверхпроводнику Бардина в теории сверхпроводимости [5].

Для кристалла

$$f_0(\vec{r}, \vec{p}) = c\rho_0(r) \cdot e^{-\frac{p^2}{2m\theta}}, \tag{4}$$

где $\rho_0(r)$ — равновесная плотность, периодическая функция с периодом кристалла, θ — абсолютная температура (в эргах) и c определяется из условия $\int c e^{-\frac{p^2}{2m\theta}} d\vec{p} = 1$.

Для определения спектра частот колебаний кристалла $\omega = \omega(\vec{k})$, где $\vec{k}$ — волновой вектор возможной волны, положим

$$\varphi(\vec{r}, \vec{p}, t) = \varphi_\omega(\vec{r}, \vec{p}) \cdot e^{-i\omega t}. \tag{5}$$

Подставляя (5) в (1), получим

$$-i\omega\varphi_\omega + \frac{1}{m}\sum_\alpha p_\alpha \cdot \frac{\partial\varphi_\omega}{\partial r_\alpha} - \sum_\alpha \frac{\partial U_0}{\partial r_\alpha} \cdot \frac{\partial\varphi_\omega}{\partial p_\alpha} =$$

$$= \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial r_\alpha}\left(\int \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|)\rho_\omega(\vec{r}')d\vec{r}'\right)\frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha} \tag{6}$$

$$\left(\rho_\omega(\vec{r}) = \int \varphi_\omega(\vec{r}, \vec{p})\,d\vec{p}, \quad \alpha = 1, 2, 3\right).$$

Интегрируя (6) по $\vec{p}$, будем иметь

$$-i\omega\rho_\omega(\vec{r}) + \frac{1}{m}\sum_\alpha \frac{\partial j_\omega^{(\alpha)}(\vec{r})}{\partial r_\alpha} = 0, \tag{7}$$

где

$$j_\omega^{(\alpha)}(\vec{r}) = \int p_\alpha \varphi_\omega(\vec{r}, \vec{p})\,d\vec{p} \tag{8}$$

$$\left(\int \frac{\partial\varphi_\omega}{\partial p_\alpha}d\vec{p} = \int \frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha}d\vec{p} = 0\right).$$

Умножая (6) на p_β и интегрируя по $\vec{p}$, получим

$$-i\omega j_\omega^{(\beta)}(\vec{r}) + \frac{1}{m}\sum_\alpha \frac{\partial T_\omega^{(\alpha,\beta)}(\vec{r})}{\partial r_\alpha} + \frac{\partial U_0}{\partial r_\beta} \cdot \rho_\omega(\vec{r}) =$$

$$= -\rho_0(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r_\beta}\int \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|)\rho_\omega(\vec{r}')\,d\vec{r}', \tag{9}$$

где

$$T_\omega^{(\alpha,\beta)}(\vec{r}) = \int p_\alpha p_\beta \varphi_\omega(\vec{r}, \vec{p})\,d\vec{p} \tag{10}$$

$\left(\int p_\beta \frac{\partial\varphi_\omega}{\partial p_\alpha}d\vec{p} = -\delta_{\alpha\beta}\rho_\omega(r),\right.$ $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера$\left.\right)$.

Выражение (10) для $T_\omega^{(\alpha,\beta)}(\vec{r})$ можно представить в виде

$$T_\omega^{(\alpha,\beta)}(\vec{r}) = \int Q_\omega^{(\alpha,\beta)}(\vec{r}, \vec{r}')\rho_\omega(\vec{r}')\,d\vec{r}', \tag{11}$$

где

$$Q_{\omega}^{(\alpha,\beta)}(\vec{r},\vec{r}')=\frac{1}{\theta}\int\limits_0^{\infty}dte^{i\omega t}\frac{d}{dt}\int d\vec{p}p_\alpha p_\beta f_0(\vec{r},\vec{p})S_{-t}^{(r,p)}\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|) \qquad (12)$$

и $S_t^{(r,p)}$ — оператор сдвига на время t переменных $\vec{r}$ и $\vec{p}$ в функции, на которую он действует.

Действительно, уравнение (1) при адиабатическом включении бесконечно-малого возмущения (т. е. $\varphi=0$ при $t_0=-\infty$) приводится к виду [6]:

$$\varphi(\vec{r},\vec{p},t)=\int\limits_{-\infty}^{t}d\tau S_{-(t-\tau)}^{(r,p)}\sum_{\alpha}\frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha}\int d\vec{r}'\,\frac{\partial\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|)}{\partial r_\alpha}\int\varphi(\vec{r}',\vec{p}',\tau)\,d\vec{p}. \qquad (13)$$

Подставляя сюда (5), получим

$$\varphi_\omega(\vec{r},\vec{p})=\int K_\omega(\vec{r},\vec{r}',\vec{p})\,\rho_\omega(\vec{r}')\,d\vec{r}' \qquad (14)$$

и

$$\rho_\omega(\vec{r})=\int d\vec{p}\int K_\omega(\vec{r},\vec{r}',\vec{p})\,\rho_\omega(\vec{r}')\,d\vec{r}', \qquad (15)$$

где

$$K_\omega(\vec{r},\vec{r}',\vec{p})=\int\limits_{-\infty}^{t}d\tau e^{i\omega(t-\tau)}S_{-(t-\tau)}^{(r,p)}\sum_{\alpha}\frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha}\cdot\frac{\partial\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|)}{\partial r_\alpha}=$$

$$=\frac{1}{\theta}\int\limits_0^{\infty}dte^{i\omega t}f_0(\vec{r},\vec{p})\frac{d}{dt}S_{-t}^{(r,p)}\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|), \qquad (16)$$

так как

$$f_0(\vec{r},\vec{p})=ce^{-\frac{1}{\theta}\left(\frac{p^2}{2m}+U(r)\right)}=ce^{-\frac{H}{\theta}},$$

$$S_{-t}H=HS_{-t},\quad S_{-t}f_0=f_0S_{-t}$$

и

$$S_t^{(r,p)}\sum_{\alpha}\frac{p_\alpha}{m}\frac{\partial\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|)}{\partial r_\alpha}=\sum_{\alpha}\frac{p_\alpha(t)}{m}\cdot\frac{\partial\Phi(|\vec{r}(t)-\vec{r}'|)}{\partial r_\alpha}=$$

$$=\frac{d}{dt}\Phi(|\vec{r}(t)-\vec{r}'|)=\frac{d}{dt}S_t^{(r,p)}\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|).$$

Умножая (14) на $p_\alpha p^\beta$ и интегрируя по $\vec{p}$, получим (11).

Таким образом, равенство (9) при учете (7) и (11) приводится к следующему виду для $j_\omega^{(\alpha)}(\vec{r})$:

$$\omega^2 j_\omega^{(\alpha)}(\vec{r})+\frac{1}{m}\sum_{\beta}\frac{\partial}{\partial r_\beta}\left\{-\frac{1}{m}\sum_{\gamma}\int\frac{\partial Q_\omega^{(\alpha,\beta)}(\vec{r},\vec{r}')}{\partial r'_\gamma}\cdot j_\omega^{(\gamma)}(\vec{r}')d\vec{r}'+\right.$$

$$\left.+\frac{\partial U_0}{\partial r_\alpha}\cdot j_\omega^{(\beta)}(\vec{r})\right\}=$$

$$=\frac{1}{m}\sum_{\beta}\left\{\frac{\partial^2 U_0(\vec{r})}{\partial r_\alpha\partial r_\beta}j_\omega^{(\beta)}(\vec{r})-\rho_0(r)\frac{\partial^2}{\partial r_\alpha\partial r_\beta}\int\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|)\,j_\omega^{(\beta)}(\vec{r}')\,d\vec{r}'\right\}. \qquad (17)$$

Это уравнение определяет полный спектр $\omega=\omega(\vec{k})$ коллективных колебаний в твердых телах при любых температурах.

Рассмотрим для простоты одноатомное твердое тело. При $\theta=0$ мы получаем известный борновский спектр колебаний кристалла [6]. Действительно, в этом случае

$$\rho_0(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r}-\vec{r}_i), \qquad U_0(\vec{r}) = \sum_i \Phi(|\vec{r}-\vec{r}_i|),$$

$$Q_\omega^{(\alpha,\beta)}(\vec{r},\vec{r}\,') = 0, \qquad j_\omega^{(\alpha)}(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r}-\vec{r}_i)\cdot P_{i\omega}^{\prime(\alpha)},$$

где $P_i^{(\alpha)}$ — составляющая импульса i-го атома (см. [6]), поэтому уравнение (17) принимает вид

$$\omega^2 \sum_i \delta(\vec{r}-\vec{r}_i) P_{i\omega}^{(\alpha)} + \frac{1}{m}\sum_{i,\beta}\frac{\partial U_0}{\partial r_\alpha}\cdot\frac{\partial\delta(\vec{r}-\vec{r}_i)}{\partial r_\beta}\cdot P_{i\omega}^{(\beta)} =$$

$$= -\frac{1}{m}\sum_{i,j,\beta}\frac{\partial^2\Phi(|\vec{r}-\vec{r}_j|)}{\partial r_\alpha\cdot\partial r_\beta}\,\delta(\vec{r}-\vec{r}_i)\cdot P_{j\omega}^{(\beta)}. \tag{18}$$

Проинтегрировав это уравнение по объему i-той ячейки, получим

$$\omega^2 P_{i\omega}^{(\alpha)} - \frac{1}{m}\sum_\beta \frac{\partial^2 U_0(\vec{r}_i)}{\partial r_{i\alpha}\,\partial r_{i\beta}}\cdot P_{i\omega}^{(\beta)} = -\frac{1}{m}\sum_{j,\beta}\frac{\partial^2\Phi(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)}{\partial r_{i\alpha}\,\partial r_{i\beta}}\cdot P_{j\omega}^{(\beta)}$$

или

$$\omega^2 P_{i\omega}^{(\alpha)} - \frac{1}{m}\sum_{j,\beta}\frac{\partial^2\Phi(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)}{\partial r_{i\alpha}\cdot\partial r_{i\beta}}\left(P_{i\omega}^{(\beta)} - P_{j\omega}^{(\beta)}\right) = 0. \tag{19}$$

Полагая $P_{i\omega}^{(\alpha)} = A_\omega^{(\alpha)} e^{i(\vec{k},\vec{r}_i)}$ и обозначая $\vec{r}_f = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, будем иметь

$$\omega^2 A_\omega^{(\alpha)} - \frac{1}{m}\sum_{f,\beta}\frac{\partial^2\Phi(r_f)}{\partial r_\alpha\,\partial r_\beta}\left(1 - e^{-i(\vec{k},\vec{r}_f)}\right) = 0,$$

откуда, учитывая нечетность функции $\sin(\vec{k},\vec{r}_f)$, получаем

$$\omega^2 A_\omega^{(\alpha)} - \frac{1}{m}\sum_{f,\beta}\Phi''_{r_\alpha r_\beta}(\vec{r}_f)\left(1-\cos(\vec{k},\vec{r}_f)\right)A_\omega^{(\beta)} = 0. \tag{20}$$

Детерминант этой системы уравнений определяет полный спектр трех ветвей возможных коллективных колебаний в одноатомном кристалле.

При малых k эти колебания определяются законом дисперсии

$$\omega^2 = \sum_f c_f^2 (\vec{k}, \vec{r}_f)^2, \tag{21}$$

т. е. ω^2 квадратично зависит от составляющих волнового вектора $\vec{k}$.

В одномерном случае при учете лишь ближайших соседей ($f=\pm 1$, $r_f=a$, $\alpha=\beta$) из (19) непосредственно получаем известный результат

$$\omega^2 = \frac{4}{m}\Phi''(a)\sin^2\frac{ka}{2},$$

что при малых k приводит к закону дисперсии

$$\omega^2 = c^2 k^2.$$

Определить полный спектр коллективных колебаний в кристалле при температурах, отличных от абсолютного нуля, значительно сложнее.

Установим спектр этих колебаний при $\theta > 0$ для малых волновых чисел.

Общее решение уравнения (17) имеет вид

$$j_\omega^{(\alpha)}(\vec{r}) = U_\omega^{(\alpha)}(\vec{r})\, e^{i(\vec{k},\vec{r})}, \tag{22}$$

где $U_\omega^{(\alpha)}(\vec{r})$ — некоторая периодическая функция с периодом кристалла. Это следует из того, что ядро уравнения (14), с помощью которого при использовании (7) легко получить уравнение для $j_\omega^{(\alpha)}(\vec{r})$, инвариантно относительно смещения аргументов $\vec{r}$ и $\vec{r}'$ на период решетки.

Если $U_\omega^{(\alpha)}(\vec{r}) = A_\omega^{(\alpha)} \rho_0(\vec{r})$, то

$$j_\omega^{(\alpha)}(\vec{r}) = A_\omega^{(\alpha)} \rho_0(\vec{r})\, e^{i(\vec{k},\vec{r})} \tag{23}$$

точно удовлетворяет уравнению (17) при $\omega = 0$ и $\vec{k} = \mathbf{0}$. Действительно, при $\omega = 0$ и $j_0^{(\alpha)}(\vec{r}) = A_0^{(\alpha)} \rho_0(\vec{r})$ уравнение (17) принимает вид

$$\sum_\beta \frac{\partial}{\partial r_\beta}\left\{-\frac{1}{m}\sum_\gamma A_\omega^{(\gamma)} \int \frac{\partial Q_0^{(\alpha,\beta)}(\vec{r},\vec{r}')}{\partial r'_\gamma}\cdot\rho_0(r')\,d\vec{r}' + A_0^{(\beta)}\frac{\partial U_0}{\partial r_\alpha}\cdot\rho_0(\vec{r})\right\} = 0. \tag{24}$$

Выражение 12 для $Q_\omega^{(\alpha,\beta)}(\vec{r},\vec{r}')$ при $\theta = 0\,°$К с учетом адиабатичности включения возмущения равно

$$Q_\omega^{(\alpha,\beta)}(r,r') = -m\delta_{\alpha\beta}\cdot\rho_0(\vec{r})\,\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|) -$$

$$-\frac{i\omega}{\theta}\int_0^\infty dt\, e^{i\omega t}\int d\vec{p}\,p_\alpha p_\beta\, f_0(\vec{r},\vec{p})\, S_{-t}^{(\vec{r},\vec{p})}\,\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|), \tag{25}$$

поэтому при $\omega = 0$ имеем

$$\int \frac{\partial Q_0^{(\alpha,\beta)}(\vec{r},\vec{r}')}{\partial r'_\gamma}\rho_0(\vec{r}')\,d\vec{r}' = m\delta_{\alpha\beta}\,\rho_0(\vec{r})\frac{\partial U_0}{\partial r_\gamma},$$

$$\frac{1}{m}\sum_\beta\frac{\partial}{\partial r_\beta}\sum_\gamma A_0^{(\gamma)}\int\frac{\partial Q_0^{(\alpha,\beta)}(\vec{r},\vec{r}')}{\partial r'_\gamma}\rho_0(r')\,d\vec{r}' = \sum_\beta A_0^{(\beta)}\frac{\partial}{\partial r_\alpha}\left(\rho_0(\vec{r})\frac{\partial U_0}{\partial r_\beta}\right).$$

Подставляя это выражение в (24) и учитывая, что равновесная плотность $\rho_0(\vec{r})$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial\rho_0(\vec{r})}{\partial r_\alpha} + \frac{1}{\theta}\frac{\partial U_0}{\partial r_\alpha}\rho_0(\vec{r}) = 0, \tag{26}$$

убеждаемся, что равенство (24) удовлетворяется тождественно. Таким образом, выражение (23) является точным решением уравнения (17) при $\omega=0$ и $\vec{k}=0$. Поэтому это выражение будет тем лучше удовлетворять уравнению (17) при $\omega\neq0$ и $\vec{k}\neq0$, чем меньше ω и $\vec{k}$.

Подставим (23) в (17), умножим уравнение на $e^{-i(\vec{k},\vec{r})}$ и проинтегрируем по объему v ячейки; мы получим тогда

$$\omega^2 A_\omega^{(\alpha)} + \frac{1}{m}\sum_\beta \int_v d\vec{r}\, e^{-i(\vec{k},\vec{r})} \frac{\partial}{\partial r_\beta}\Big\{-\frac{1}{m}\sum_\beta A_\omega^{(\gamma)} \int \frac{\partial Q_\omega^{(\alpha,\beta)}(\vec{r},\vec{r}')}{\partial r'_\gamma} \times$$

$$\times\, \rho_0(\vec{r}')\, e^{i(\vec{k},\vec{r}')} d\vec{r}' + A_\omega^{(\beta)} \frac{\partial U_0}{\partial r_\alpha}\cdot \rho_0(\vec{r})\, e^{i(\vec{k},\vec{r})}\Big\} =$$

$$= \frac{1}{m}\sum_\beta A_\omega^{(\beta)} \int_v \rho_0(\vec{r})\, d\vec{r} \int \frac{\partial^2\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|)}{\partial r_\alpha \partial r_\beta}\, \rho_0(\vec{r}')\,(1 - e^{-i(\vec{k},\vec{r}-\vec{r}')}). \qquad (27)$$

Так как $\rho_0(\vec{r})$ периодическая функция с периодом решетки, то

$$\int_v \frac{\partial U_0}{\partial r_\alpha}\cdot \rho_0(\vec{r})\, d\vec{r} = -\theta \int \frac{\partial \rho_0(\vec{r})}{\partial r_\alpha} d\vec{r} = 0$$

и после интегрирования в левой части (27) по частям будем иметь

$$\omega^2 A_\omega^{(\alpha)} + \frac{2ik_\alpha}{m}\sum_\beta A_\omega^{(\beta)} \int_v d\vec{r}\, \rho_0(\vec{r}) \int d\vec{r}'\, \frac{\partial\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|)}{\partial r_\beta}\, \rho_0(\vec{r}') \times$$

$$\times \sin^2\frac{(\vec{k},\vec{r}-\vec{r}')}{2} - \frac{2\omega}{m^2\theta}\int_v d\vec{r} \sum_{\beta,\gamma} A_\omega^{(\gamma)}\cdot k_\beta \cdot \int d\vec{r}'\cdot \rho_0(\vec{r}') \sin^2\frac{(\vec{k},\vec{r}-\vec{r}')}{2} \times$$

$$\times \int_0^\infty dt\cdot e^{i\omega t} \int d\vec{p}\, p_\alpha p_\beta f_0(\vec{r},\vec{p})\, S_{-t}^{(r,p)} \frac{\partial\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|)}{\partial r_\gamma} =$$

$$= \frac{2}{m}\sum_\beta A_\omega^{(\beta)} \int_v \rho_0(\vec{r})\, d\vec{r} \int \frac{\partial^2\Phi(|\vec{r}-\vec{r}'|)}{\partial r_\alpha \partial r_\beta}\, \rho_0(\vec{r}') \sin^2\frac{(\vec{k},\vec{r}-\vec{r}')}{2}\, d\vec{r}'. \qquad (28)$$

Оставляя здесь при малых ω и $\vec{k}$ главные члены, получаем, что для таких коллективных колебаний в твердом теле при любых температурах квадрат частоты пропорционален квадрату волнового вектора, подобно (21).

Выражаю глубокую благодарность акад. Н. Н. Боголюбову за обсуждение настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Базаров И. П. ДАН СССР, 140, 85, 1961.
2. Базаров И. П. «Вести. Моск. ун-та», сер. физики, астрономии, № 5, 42, 1962.
3. Bazarov I. P. Physica, 28, 479, 1962.
4. Базаров И. П. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физики, астрономии, № 6, 85, 1963.
5. Боголюбов Н. Н., Толмачев В. В., Ширков Д. В. Новый метод в теории сверхпроводимости. Изд-во АН СССР, 1958.
6. Базаров И. П. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физики, астрономии, № 1, 56, 1964.
7. Власов А. А. Теория многих частиц. ГИТТЛ, 1950.

Поступила в редакцию
30. 12 1963 г.

Кафедра
теоретической физики