

А. А. ВЛАСОВ, К. И. ВОЛЯНСКИЙ

## О ТЕОРИИ ЗВУКОВЫХ ВОЛН В ДИНАМИЧЕСКОЙ И СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛЯХ КРИСТАЛЛА

В статье рассматривается статистическая модель кристалла, в которой за основу берется понятие вероятности местонахождения частиц в узлах. Получено выражение для скорости и затухания звуковых волн.

В статистической модели кристалла [1] первичным понятием является вероятность местонахождения частиц в узлах, не требующая какого-либо процесса усреднения по времени или начальным условиям. Рассмотрена связь динамической теории решетки с теорией упругости. Выявлена трудность перехода динамической теории решетки в теорию упругости. Строится термодинамика (особая) для статистической модели кристалла, с помощью которой указанная трудность устраняется. Получено термодинамическое выражение для скорости звука. Рассмотрен механизм распространения звуковых волн в статистической модели кристалла на основе кинетического уравнения и получено выражение для скорости и затухания звуковых волн.

### § 1. Связь теории упругости с динамической теорией решетки

В динамической теории решетки [2] выводятся уравнения теории упругости и упругие постоянные сопоставлением решения механических уравнений для длинноволновых колебаний в решетке с решением феноменологического волнового уравнения теории упругости.

Исходные уравнения динамической теории в гармоническом приближении и волновое уравнение теории упругости есть

$$m_k \ddot{u}_\alpha(l) = \sum_{\beta l' k'} \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l & l' \\ k & k' \end{matrix} \right) u_\beta(l'),$$
$$\rho \ddot{u}_\alpha = \sum_{\beta \gamma \lambda} \tilde{c}_{\alpha\gamma\beta\lambda} \frac{\partial^2 u_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\lambda}.$$

Уравнения теории решетки получены из точных уравнений движения разложением около положения равновесия, при условии, что откло-

нения атомов от положения равновесия  $u_\alpha \left( \begin{smallmatrix} l \\ k \end{smallmatrix} \right)$  малы по сравнению с периодом решетки (гармоническое приближение). Для длинноволновых колебаний решение исходных уравнений ищется в виде

$$u_\alpha \left( \begin{smallmatrix} l \\ k \end{smallmatrix} \right) = \left( u_\alpha(j) + \tilde{u}_\alpha^{(1)} \left( k \left| \begin{smallmatrix} y \\ j \end{smallmatrix} \right. \right) + \tilde{u}_\alpha^{(2)} \left( k \left| \begin{smallmatrix} y \\ j \end{smallmatrix} \right. \right) + \dots \right) \exp \{2\pi i y \vec{x} - i\omega t\},$$

$$\tilde{u}_\alpha(\vec{x}) = \tilde{u}_\alpha \exp \{2\pi i y \vec{x} - i\omega t\},$$

что приводит к следующим соотношениям для амплитуд колебаний атомов решетки и для амплитуд смещений упругого континуума [2]

$$\frac{\sum_k m_k}{v_a} \left[ \omega^{(1)} \left( \begin{smallmatrix} y \\ j \end{smallmatrix} \right) \right]^2 u_\alpha(j) = 4\pi^2 \sum_\beta \left\{ \sum_{\gamma\lambda} ([\alpha\beta\gamma\lambda] + (\alpha\gamma\beta\lambda)) y_\gamma y_\lambda \right\} u_\beta(j),$$

$$\rho \omega^2 \tilde{u}_\alpha = 4\pi^2 \sum_\beta \left\{ \sum_{\gamma\lambda} \tilde{c}_{\alpha\gamma\beta\lambda} y_\gamma y_\lambda \right\} \tilde{u}_\beta.$$

Соотношение для амплитуд колебаний атомов нулевого (по модулю волнового числа) приближения получено как условие разрешимости уравнения для второго приближения. Квадратные и круглые скобки с индексами в этом уравнении выражаются через коэффициенты

$$\Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{smallmatrix} l & l' \\ k & k' \end{smallmatrix} \right) = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_\alpha \left( \begin{smallmatrix} l \\ k \end{smallmatrix} \right) \partial u_\beta \left( \begin{smallmatrix} l' \\ k' \end{smallmatrix} \right)} \Big|_0,$$

где индекс 0 означает, что производные берутся в несмещенном положении.

Сопоставление полученных уравнений для амплитуд дает

$$\rho = \frac{\sum_k m_k}{v_a}, \quad \omega^2 = \left[ \omega^{(1)} \left( \begin{smallmatrix} y \\ j \end{smallmatrix} \right) \right]^2,$$

$$\tilde{c}_{\alpha\gamma\beta\lambda} = C_{\alpha\gamma\beta\lambda} = [\alpha\beta\gamma\lambda] + [\alpha\gamma\beta\lambda] - [\beta\lambda\alpha\gamma] + (\alpha\gamma\beta\lambda),$$

и кроме того:

$$u_\alpha(j) = A^2 \tilde{u}_\alpha; \quad A^2 = \text{const.}$$

Таким образом, нулевое приближение смещения атомов и величина смещения упругого континуума отличаются постоянным коэффициентом пропорциональности. Для получения численного значения безразмерного коэффициента воспользуемся выражениями для плотности энергии в обеих теориях:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\gamma\beta\lambda} C_{\alpha\gamma\beta\lambda} \overset{(1)}{U}_{\alpha\gamma} \overset{(1)}{U}_{\beta\lambda}, \quad \tilde{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\gamma\beta\lambda} \tilde{c}_{\alpha\gamma\beta\lambda} \tilde{U}_{\alpha\gamma} \tilde{U}_{\beta\lambda}.$$

При этом учитываем, что выражение для плотности энергии в случае длинноволновых колебаний тождественно совпадает с выражением для случая однородных деформаций. Параметры деформации есть:

$$\overset{(1)}{U}_{\alpha\beta} = 2\pi i y_\beta u_\alpha(j); \quad \tilde{U}_{\alpha\beta} = 2\pi i y_\beta \tilde{u}_\alpha.$$

Используя выражения для плотности энергии, выражения для параметров деформации и соотношение для амплитуд смещений, находим

$$V = \frac{1}{2} A^2 \sum_{\alpha\gamma\beta\lambda} \tilde{C}_{\alpha\gamma\beta\lambda} \tilde{U}_{\alpha\gamma} \tilde{U}_{\beta\lambda} = A^2 \tilde{V},$$

но поскольку выражение для плотности энергии не должно зависеть от способа рассмотрения, получаем, что  $A^2 = 1$  или  $A = \pm 1$ , т. е.

$$|U_{\alpha}(j)| = |\tilde{U}_{\alpha}|.$$

Приходим к результату: динамическая модель кристалла приводит к равенству амплитуд смещений атомов решетки и амплитуд смещений в упругом континууме. Однако этот результат приводит к трудности, поскольку смещения атомов ограничены условием  $U_{\alpha}(j) < 10^{-8}$  см, а упругие смещения, описывающие опытные данные, лежат в широком интервале значений  $\tilde{U}_{\alpha} \sim 10^{-13} - 10^{-6}$  см [3].

В экспериментальных работах определяются смещения среды через пересчет подводимой мощности к пьезокварцу на изменение объема при колебаниях, пользуясь соотношениями теории упругости. В излагаемой теории величина объема системы всецело определяется функцией распределения, включая его изменение под влиянием акустических колебаний:

$$(L + \Delta L)^3 = \prod_{\alpha=1}^3 \left( \int_{(\infty)} x_{\alpha}(f_0 + \varphi) d\vec{r} d\vec{v} \right) / \left( \int_{(\infty)} (f_0 + \varphi) d\vec{r} d\vec{v} \right).$$

В тех случаях, когда экспериментальные методы гарантируют непосредственный сдвиг вещества твердого тела [4], теория подобных сдвигов также должна быть непосредственно (без перехода к теории упругости) связана с изменением функции распределения.

## § 2. Термодинамика для статистической модели кристалла. Определение скорости звука. Связь между «микро»- и «макро»-смещениями

Поставим задачу приспособления метода Гиббса к статистической модели кристалла. Выразим свободную энергию, рассчитанную для одной частицы, через посредство нелокального выражения энергии взаимодействия частиц в кристалле, как исходного понятия теории:

$$e^{-\frac{\psi}{\theta}} = \iint_{V_{\infty}} e^{-\frac{H}{\theta}} \frac{d\vec{r} d\vec{v}}{g}, \quad H = \frac{mv^2}{2} + \frac{\varepsilon}{N},$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \int V(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r}, \quad V(\vec{r}) = c \int K(|\vec{r} - \vec{r}'|) e^{-\frac{V(\vec{r}')}{\theta}} d\vec{r}', \quad (1)$$

$$\rho(\vec{r}) = c e^{-\frac{V(\vec{r})}{\theta}}, \quad N = \int_V \rho(\vec{r}) d\vec{r}, \quad \frac{\varepsilon}{N} = \hat{\varepsilon}.$$

Формулы (1) являются исходными для построения термодинамики. К особенностям метода относятся: 1) аналог функции Гамильтона ( $H$ ) является нелинейным функционалом от плотности вероятности  $\rho(\vec{r})$ ; 2) этот функционал зависит от температуры; 3) полное число частиц

в системе ( $N$ ) определяется плотностью вероятности, а потому не обязательно должно быть целым.

В нелокально-статистической модели кристалла полная вероятность местоположения атома в узле решетки  $\left(\int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r}\right)$  остается в теории произвольной [1]. Целочисленность относится только к числу элементарных ячеек, но не к общему числу частиц  $N = N_{\text{яч}} \int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r}$ . Поэтому в термодинамике величину  $\left(\int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r}\right)$  можно принять за непрерывный внешний параметр, по которому в дальнейшем будет производиться дифференцирование.

Следствие. Даже в случае, когда  $(abc) = \text{const}$ ,  $N = \text{const}$ , имеет место изменение объема всего кристалла

$$V + \Delta V = N(abc) \left/ \left( \int_{(abc)} (\rho + \Delta\rho) d\vec{r} \right) \right.$$

вследствие изменения заполняемости ячеек.

Для внутренней энергии, приходящейся на одну частицу  $u$ , и обобщенной силы  $A_k$ , соответствующей внешнему термодинамическому параметру  $a_k$  из (1), имеем

$$u = \int_{V_\infty} H e^{\frac{\psi-H}{\theta}} \frac{d\vec{r} d\vec{v}}{g} = \psi - \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \theta \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \theta},$$

$$A_k = \int_{V_\infty} \left( -\frac{\partial H}{\partial a_k} \right) e^{\frac{\psi-H}{\theta}} \frac{d\vec{r} d\vec{v}}{g} = -\frac{\partial \psi}{\partial a_k}.$$
(2)

Член  $\theta \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \theta} \neq 0$  отличает выражение внутренней энергии от классического. С помощью (2) находим следующую форму второго начала термодинамики:

$$du + \sum_k A_k da_k = \theta \left( -\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + dq, \quad q = \theta \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \theta}.$$
(3)

Таким образом, выражение энтропии  $S = -\partial \psi / \partial \theta$  не изменяется. Перенормированные значения других термодинамических функций, аналогичных внутренней энергии, находятся из (2) и (3). Для термодинамического потенциала  $\Phi(p, \theta)$  имеем

$$\Phi(p, \theta) = u - \theta s + \sum_k A_k a_k - \theta \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \theta},$$

$$d\Phi = -s d\theta + \sum_k a_k dA_k.$$

Развитая на этом пути термодинамика может быть применимой и для статистических структур, отличных от кристаллических.

Для статистической модели кристалла конкретизируем внешние термодинамические параметры ( $a_h$ ) и выражение энергии взаимодействия частиц ( $\epsilon$ ) с помощью решений для невозмущенного состояния кристалла [1]. При этом надо учитывать следующее.

Во-первых, все величины, характеризующие кристаллическое состояние, выражаются через нормировку вероятности на одну ячейку  $\int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r}$ , которая остается в стационарной теории произвольной. Ввиду этого именно эту величину необходимо принять за внешний термодинамический параметр.

Во-вторых, в стационарной теории параметры элементарной ячейки  $a$ ,  $b$ ,  $c$  определяются из условий минимума функции  $\sum_{hkl} K(|\vec{r} - (h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c})|)$  и ее производных в узлах решетки, ввиду чего эти параметры не могут зависеть от величины  $\int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r}$ .

Выбирая за удельный объем, т. е. объем, приходящийся на одну частицу:

$$v = (abc) / \left( \int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r} \right), \quad (4)$$

закключаем, что изменение удельного объема будет определяться изменением нормировки вероятности на узел решетки.

Потенциальную энергию взаимодействия ( $\epsilon$ ) разобьем на энергию взаимодействия элементарных ячеек между собой и энергию взаимодействия элементов облака вероятности внутри одной элементарной ячейки (энергию «самовоздействия»). Для подсчета первой части можно воспользоваться распределением вероятности  $\rho(\vec{r})$  без учета термодинамических возмущений, т. е. используя решение для стационарного случая. Энергия же «самовоздействия» чувствительна к малым изменениям плотности  $\rho(\vec{r})$  в узлах ввиду быстрого изменения парного потенциала на малых расстояниях. Таким образом имеем

$$\epsilon = \frac{1}{2} \iint_V K(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' = \epsilon_C + \epsilon_B,$$

$$\epsilon_C = \frac{N_{яч}}{2} \left( \int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r} \right)^2 \iint_{(abc)} K(|\vec{r} - \vec{r}'|) \hat{\rho}(\vec{r}) \hat{\rho}(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}', \quad (5)$$

$$\epsilon_B = \frac{N_{яч}}{2} \left( \int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r} \right) \left[ \left( \int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r} \right) \sum_{hkl} K(|h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}|) + 3\theta + O(\theta) \right],$$

$$\rho(\vec{r}) = \left( \int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r} \right) \hat{\rho}(\vec{r}).$$

Используя (1) для свободной энергии, получаем

$$\begin{aligned} \Psi = & -\theta_1 \ln \left( \frac{2\pi\theta}{m} \right)^{3/2} N v g^{-1} + \frac{1}{2} \iint K(|\vec{r} - \vec{r}'|) \hat{\rho}(\vec{r}) \hat{\rho}(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' + \\ & + \frac{abc}{v} \frac{1}{2} \sum_{hkl} K(|h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}|) + \frac{3}{2} \theta + \dots \end{aligned} \quad (6)$$

Откуда для давления и скорости звуковых волн имеем

$$p = -\frac{\partial \Psi}{\partial v} = \frac{abc}{v^2} \left( \frac{1}{2} \iint K(|\vec{r} - \vec{r}'|) \hat{\rho}(\vec{r}) \hat{\rho}(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum'_{hkl} K(|h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}|) \right) + \frac{\theta}{v}, \quad (7)$$

$$v_{\Phi}^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} = \frac{abc}{mv} \left( \iint K(|\vec{r} - \vec{r}'|) \hat{\rho}(\vec{r}) \rho(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' + \right. \\ \left. + \sum'_{hkl} K(|h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}|) \right) + \frac{\theta}{m}, \quad \rho = \frac{m}{v}.$$

Закключаем, что наличие звука в статистической модели ( $v_{\Phi}^2 > 0$ ) определяется не взаимодействием между ячейками, а «самовоздействием» внутри одной элементарной ячейки.

Перейдем к вопросу о соотношении между «микро»- и «макро»-смещениями при распространении звука в статистическом континууме, описывающем кристалл. Рассматривая звук как термодинамический процесс, мы должны за смещения принять соответствующие изменения удельного объема, приходящегося на одну частицу:

$$v = (abc) / \left( \int_{(abc)} \rho(\vec{r}) d\vec{r} \right) = a^* b^* c^*, \quad (8)$$

т. е. величины  $a^* b^* c^*$ . В случае распространения продольной волны вдоль  $\vec{a}^*$ :

$$a^* = a_0^* + u_x^* \exp\{ikx - i\omega t\}. \quad (9)$$

С точки зрения упругого континуума тот же процесс описывается уравнениями

$$\rho \ddot{u}_x = -\frac{\partial p}{\partial x}, \quad \tilde{u}_\alpha = \tilde{u}_\alpha \exp\{ikx - i\omega t\}, \quad (10)$$

где  $\rho$  в нашей модели должно быть отождествлено с (7). В формуле (10)  $\tilde{u}_x$  — «макро»-смещения, в формуле (9)  $u_x^*$  — «микро»-смещения. Учитывая, что

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial v} \frac{1}{a^*} \frac{\partial a^*}{\partial x} a^* b^* c^*,$$

а также формулы (8), (9), (10) и термодинамическое определение скорости звука, имеем

$$\rho \omega^2 \tilde{u}_x = \frac{mv_{\Phi}^2}{v} (-ik) \frac{u_x^*}{a^*}. \quad (11)$$

в результате приходим к уравнению

$$|\tilde{u}_x| = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{\lambda}{a^*} \right| |u_x^*|, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad (12)$$

отвечающему на поставленный вопрос о связи «микро»- и «макро»-смещений. Амплитуды смещений упругого континуума превышают амплитуды смещений в статистической модели кристалла в  $(1/2\pi)(\lambda/a^*)$  раз. Полученный результат устраняет трудность динамической теории, рассмотренной в § 1.

### § 3. Механизм, скорость и затухание звука на основе кинетического уравнения

Запишем исходное уравнение для функции распределения, описывающее поведение атомов в кристалле:

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla}_{\vec{r}} f - \frac{1}{m} \vec{\nabla}_{\vec{v}} f \vec{\nabla}_{\vec{r}} V \{f\} = 0, \quad (13)$$

$$V \{f\} = \int K(|\vec{r} - \vec{r}'|) f(\vec{r}', \vec{v}, t) d\vec{r}' d\vec{v}.$$

В случае звуковых волн малой амплитуды (линейное приближение) будем искать решение в виде

$$f = f_0(\vec{r}, \vec{v}) + \varphi(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad |\varphi| \ll f_0,$$

где  $f_0 = \rho_0(\vec{r}) f_M(v^2)$  — функция распределения в отсутствие звуковых волн, воспроизводящая периодическую структуру кристалла,  $f_M(v^2)$  — максвелловская функция распределения скоростей. Для возмущения  $\varphi$  имеем уравнение

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \varphi - \frac{1}{m} \vec{\nabla}_{\vec{v}} f_0 \vec{\nabla}_{\vec{r}} U \{\varphi\} - \frac{1}{m} \vec{\nabla}_{\vec{v}} \varphi \vec{\nabla}_{\vec{r}} U \{f_0\} = 0, \quad (14)$$

$$V \{\varphi\} = \int K(|\vec{r} - \vec{r}'|) \varphi(\vec{r}', \vec{v}, t) d\vec{r}' d\vec{v},$$

$$V \{f_0\} = \int K(|\vec{r} - \vec{r}'|) f_0(\vec{r}', \vec{v}) d\vec{r}' d\vec{v}.$$

Молекулярный потенциал возмущения  $V \{\varphi\}$  представим в виде суммы «самовоздействия» и «взаимодействия»

$$V \{\varphi\} = \int_{(abc)} K(|\vec{r} - \vec{r}'|) \varphi(\vec{r}', \vec{v}, t) d\vec{r}' d\vec{v} +$$

$$+ \sum'_{hkl} \int_{(abc)} K(|\vec{r} - (h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}) - \vec{r}'|) \times$$

$$\times \varphi(\vec{r}' + h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}, \vec{v}, t) d\vec{r}' d\vec{v}, \quad (15)$$

$$V \{\varphi\} = V^{(1)} \{\varphi\} + V^{(2)} \{\varphi\}.$$

Микронеоднородности кристалла выступают в (14) посредством функций  $\sum'_{hkl} K(|\vec{r} - (h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c})|)$ ,  $K(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ ,  $\rho_0(\vec{r})$ . Ограничимся малыми пространственными изменениями в звуковом поле по сравнению с микронеоднородностями кристалла

$$\frac{\partial \varphi}{\varphi \partial x_\alpha} \ll \frac{\partial k}{K \partial x_\alpha}, \quad \frac{\partial \rho_0}{\rho_0 \partial x_\alpha}, \quad \frac{\partial \Sigma'}{\Sigma' \partial x_\alpha}$$

$$(x_\alpha \in \Delta \langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2} < \Delta < (abc))$$

и усредненной информацией о поведении решения по области  $\Delta$ . При усреднении последний член в уравнении (14) дает практически исчезающий результат

$$\frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \vec{\nabla}_{\vec{r}+\vec{s}} V \{f_0|\vec{r} + \vec{s}\} \vec{\nabla}_{\vec{v}} \varphi(\vec{r} + \vec{s}, \vec{v}, t) d\vec{s} = 0, \quad (17)$$

ввиду условий (16) и наличия симметрии функции  $U(\vec{r})$  вблизи узла. Операция усреднения практически не изменяет величины производных возмущения

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \frac{\partial \varphi}{\partial t}(\vec{r} + \vec{s}, \vec{v}, t) d\vec{s} &= \frac{\partial \varphi}{\partial t}(\vec{r}, \vec{v}, t), \\ \frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \frac{\partial \varphi}{\partial x_{\alpha}}(\vec{r} + \vec{s}, \vec{v}, t) d\vec{s} &= \frac{\partial \varphi}{\partial x_{\alpha}}(\vec{r}, \vec{v}, t). \end{aligned} \quad (18)$$

Остальные члены, фигурирующие в уравнении (14), после усреднения дадут

$$\frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \vec{\nabla}_{\vec{r}+\vec{s}} V^{(1),(2)} \{ \varphi | \vec{r} + \vec{s}, t \} \rho_0(\vec{r} + \vec{s}) d\vec{s} = \vec{\nabla}_{\vec{r}} V^{(1),(2)} \{ \varphi | \vec{r}, t \} \tilde{\rho}_0, \quad (19)$$

$$\rho_0 = \frac{1}{\Delta} \int_{\Delta} \rho_0(\vec{r} + \vec{s}) d\vec{s} = \frac{1}{\Delta} \int_{(abc)} \rho_0(\vec{r}) d\vec{r} = \text{const.}$$

При тех же ограничениях (16) молекулярный потенциал возмущения  $V(\varphi) = V^{(1)} + V^{(2)}$  приобретает вид

$$\begin{aligned} V \{ \varphi | \vec{r}, t \} &= \sigma(k) \int_{(\infty)} \varphi(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} + \sum'_{hkl} \int_{(\infty)} \varphi(\vec{r} + h\vec{a} + \\ &+ k\vec{b} + l\vec{c}, \vec{v}, t) d\vec{v} K(|\vec{r} - (h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c})|) \tilde{abc}, \end{aligned} \quad (20)$$

где  $\tilde{abc}$  — область сосредоточения функции  $\varphi$  в узлах, а

$$\sigma(k) = 4\pi \int_0^{\infty} K(R) \frac{\sin kR}{kR} R^2 dR.$$

Используя (17) — (20) и представляя возмущение в виде разложения типа Фурье по координатам

$$\varphi(\vec{r}, \vec{v}, t) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{V}, t) e^{i\vec{k}\vec{r}},$$

получаем уравнение

$$\frac{\partial \varphi_{\vec{k}}}{\partial t} + i\vec{k} \cdot \vec{v} \varphi_{\vec{k}} - \frac{\tilde{\rho}_0}{m} i\vec{k} [\sigma(k) + \sigma(k_x, k_y, k_z)] \int_{(\infty)} \varphi_{\vec{k}} d\vec{v} \vec{\nabla}_{\vec{v}} f_M = 0, \quad (21)$$

$$\sigma(k_x, k_y, k_z) = \tilde{abc} \sum'_{hkl} K(h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}) 2 \cos k_x h a 2 \cos k_y k b 2 \cos k_z l c.$$

Применяя в свою очередь к уравнению (21) преобразования Лапласа по времени, получим решение для волн, распространяющихся вдоль оси  $x$ , в следующем виде:

$$\begin{aligned} \rho_k(t) &= \int_{(\infty)} \varphi_k(v, t) dv = \frac{1}{2\pi} \int_C \rho_k(z) e^{izt} dz, \\ \rho_k(z) &= \frac{1}{\varepsilon_+(k, z)} \frac{1}{i} \int \frac{q_k(v, 0)}{kv - z} dv, \end{aligned} \quad (22)$$



$$\varepsilon_+(k, z) = 1 - \frac{\tilde{\rho}_0}{m} [\sigma(k) + \sigma(k, 0, 0)] \int \frac{k \partial f_m}{kv - z} dv,$$

$$k \equiv k_x, v \equiv v_x,$$

здесь

$$q_k(v, 0) = \varphi_k(v, t)|_{t=0}, f_m = \left(\frac{2\pi\theta}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2\theta}}.$$

Скорость и затухание волн определяются дисперсионным уравнением  $\varepsilon_+(k, z) = 0$ . В приближении длинноволновых колебаний решение дисперсионного уравнения дает для скорости и декремента затухания волн:

$$v_\Phi^2 = \left(\frac{\omega}{k}\right)^2 = \frac{\tilde{\rho}_0}{m} [\sigma(k) + \sigma(k, 0, 0)] + \frac{3\theta}{m} + \dots$$

$$\gamma = -k \frac{\pi}{2} v_\Phi^2 \frac{\partial f_m(v_\Phi^2)}{\partial v_\Phi} > 0. \quad (23)$$

$$\sigma(k, 0, 0) = \tilde{abc} \sum'_{hkl} K(h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c} |) \delta \cos kha,$$

$$\sigma(k) = 4\pi \int K(R) \frac{\sin kR}{kR} R^2 dR, \tilde{\rho}_0 = \frac{1}{\Delta} \int_{(abc)} \rho_0(\vec{r}) d\vec{r}.$$

В заключение сделаем некоторые выводы.

Кинетическая скорость звука и термодинамическая (7) находятся в соответствии друг с другом, если отождествить выступающие объемы  $\Delta$  и  $\tilde{abc}$  и пренебречь дисперсией для длинных волн.

Декремент затухания мал вследствие  $v_\Phi > \frac{\theta}{m}$  и существенно зависит от волнового числа  $k$ .

Механизм распространения звука в статистической модели кристалла отличен от динамической теории, он связан с изменением нормировки вероятности местоположения на ячейку  $\partial_t \int_{(abc)} \int_{(\infty)} \varphi(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} d\vec{v} \neq 0$  и наличием энергии «самовоздействия» в окрестности узла, которая должна превышать энергию взаимодействия между ячейками кристалла.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Власов А. А. ТМФ, 5, 388, 1970.
2. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. М., 1958.
3. Зарембо Л. К., Красильников В. А. «Успехи физических наук», 102, вып. 4, 1970.
4. Карпушко Ф. В. «Приборы и техника эксперимента», № 3, 186, 1971.

Поступила в редакцию  
28.12 1971 г.

Кафедра  
теоретической физики