ПМТФ, № 1, 1969

К ТЕОРИИ ДИНАМИЧЕСКИХ ДЕФОРМАЦИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

А. Н. Лузин, А. В. Попов

(Томск)

В работе в гармоническом приближении динамики кристаллической решетки решены уравнения движения атомов кристалла, имеющего сложную решетку при начальных условиях: все атомы кристалла находятся в узлах решетки; две полуограниченные части кристалла, получающиеся делением последнего произвольной кристаллической плоскостью, имеют равные по величине, но противоположно направленные, перпендикулярные этой плоскости скорости. Из полученного решения выделены макроскопические компоненты — ступенчатые волны однородных деформаций подрешеток и ступенчатые волны сдвигов подрешеток друг относительно друга; установлена связь между их амплитудами. Показано, что микроскопическое решение отличается от макроскопического конечными размерами фронта ударной волны. Размер области, занимаемой фронтом волны, с течением времени увеличивается пропорционально $t^{1/3}$; но отношение этой величины к пути, пройденному волной, с течением времени стремится к нулю. Установлено, что кинетическая энергия соударяющихся кристаллов полностью превращается в «упругую» энергию [1], а тепловые колебания атомов не возбуждаются.

1. Простые начальные условия. В этом пункте будут получены решения уравнений движения сложной решетки при некоторых простых начальных условиях. Это необходимо для обеспечения возможности обобщения задачи о соударении двух полуограниченных кристаллов [2] на случай сложной решетки. Итак, пусть сложная решетка состоит из $p+1$ простых подрешеток ($\nu = 0, 1, 2, \ldots, p$). Одна из них ($\nu = 0$) пусть называется основной подрешеткой. Так же, как это было сделано в [2], ее можно разбить на систему эквидистантных кристаллических плоскостей, ввести систему основных векторов и систему отсчета координат. Радиус-вектор произвольного узла решетки будет равен

$$\mathbf{r}_{\mathbf{n}\nu} = \mathbf{r}_{\mathbf{n}} + \mathbf{r}_{\nu} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 + \mathbf{r}_{\nu} \tag{1.1}$$

Значок n_3 нумерует теперь не только кристаллические плоскости основной подрешетки, но и параллельные им плоскости остальных подрешеток. Без ограничения общности можно считать, что номера плоскостей возрастают в положительном направлении оси x_3, а между двумя плоскостями $n_3 = N$ и $n_3 = N + 1$ основной подрешетки расположены p плоскостей остальных подрешеток, каждая с номером $n_3 = N$.

Пусть заданы начальные условия

$$u_{n\nu i}(0) = 0, \quad \dot{u}_{n\nu i}(0) = v\delta_{nm}\delta_{\nu\mu}\delta_{ij} \tag{1.2}$$

где $u_{n\nu i}(t)$ — смещение из положения равновесия плоскости с номером n подрешетки ν в направлении оси x_i. Так как эта задача является задачей о движении цепочки плоскостей, решение ее следует искать в виде суперпозиции гармонических плоских волн, волновые векторы которых перпендикулярны плоскостям

$$u_{n\nu i}(\mathbf{k}, t) = e_{\nu i}(\mathbf{k}) \exp i\,[\mathbf{k}\mathbf{r}_{\mathbf{n}} \pm \omega(\mathbf{k})\, t]$$

$$u_{n\nu i}(q) = e_{\nu i}(q) \exp i\,[nq \pm \omega(q)\, t], \quad \mathbf{k} = q\mathbf{b}_3 \tag{1.3}$$

где амплитуды $e_{\nu i}(\mathbf{k})$ являются решениями динамических уравнений

$$\sum_{\mu, j} \{B_{\nu i \mu j}(\mathbf{k}) - M_\mu \delta_{\mu\nu} \delta_{ij} \omega^2(\mathbf{k})\} e_{\mu j}(\mathbf{k}) = 0 \qquad (1.4)$$

$$B_{\nu i \mu j}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{m}} \Phi_{\mathbf{n}\nu i \mathbf{m} \mu j} \exp i\mathbf{k}(\mathbf{r}_\mathbf{m} - \mathbf{r}_\mathbf{n}), \qquad \Phi_{\mathbf{n}\nu i \mathbf{m}\mu j}$$

силовые постоянные решетки. Откуда (подробнее см. [3], стр. 29)

$$B_{\nu i \mu j}(\mathbf{k}) = B_{\nu i \mu j}(-\mathbf{k}), \quad e_{\nu i}(\mathbf{k}) = e_{\nu i}(-\mathbf{k}) \qquad (1.5)$$

т. е. вещественные части этих величин являются четными функциями от $\mathbf{k}$, мнимые части — нечетными и поэтому стремятся к нулю при $|\mathbf{K}| \to \mathbf{0}$. Теперь можно получить решение задачи с начальными условиями (1.2)

$$u_{n\nu i}(t) = \sum_{s=1}^{3(p+1)} \frac{v}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{M_\mu e_{(s)\mu j}(q) e_{(s)\nu i}(q)}{M\omega_{(s)}(q)} e^{i(n-m)q} \sin[\omega_{(s)}(q)t]\, dq \qquad (1.6)$$

Здесь s — номера ветвей спектра, $M = \sum\limits_\nu M_\nu$ — масса ячейки.

Здесь в отличие от формулы (2.8) в работе [2] для упрощения результата были использованы нормирующие соотношения

$$\sum_s e_{(s)\mu j}(\mathbf{k}) e_{(s)\nu i}(\mathbf{k}) \frac{M_\mu}{M} = \delta_{\nu\mu}\delta_{ij}, \quad \sum_{\nu, i} e_{(s)\nu i}(\mathbf{k}) e_{(r)\nu i}(\mathbf{k}) \frac{M_\nu}{M} = \delta_{sr} \qquad (1.7)$$

2. Соударение двух полуограниченных кристаллов, деформации подрешеток. Для получения решения задачи о соударении двух полуограниченных кристаллов [2], решается предварительно задача с начальными условиями

$$u_{n\nu i}(0) = 0, \quad \dot{u}_{n\nu i}(0) = -v\delta_{i3}, \quad (0 \leqslant n \leqslant N-1)$$

$$\dot{u}_{n\nu i}(0) = v\delta_{i3}, \quad (-N \leqslant n \leqslant -1), \qquad \dot{u}_{n\nu i}(0) = 0 \quad (n < -N,\ n > N-1)$$

а затем $N \to \infty$, откуда

$$u_{n\nu i}(t) = -\sum_{s, \mu} \frac{M_\mu v}{M\pi} \int_0^\pi \Big\{ \operatorname{Im}[e_{(s)\mu 3}(q) e_{(s)\nu i}(q)] \frac{\cos(n + 1/2)q}{\sin 1/2 q} +$$

$$+ \operatorname{Re}[e_{(s)\mu 3}(q) e_{(s)\nu i}(q)] \frac{\sin(n + 1/2)q}{\sin 1/2 q} \Big\} \frac{\sin[\omega_{(s)}(q)t]}{\omega_{(s)}(q)}\, dq \qquad (2.1)$$

Здесь было использовано решение (1.6), второе из соотношений (1.5), а также то, что

$$\int_0^\pi f(q) \cos Nq\, dq \to 0 \quad \text{при } N \to \infty$$

если $f(q)$ — непрерывная на интервале $[0, \pi]$ функция. Из (2.1) можно получить величины

$$\sigma_{n\nu i}(t) = \frac{1}{a}\left[u_{n\nu i}(t) - u_{n+1\nu i}(t)\right], \quad a = \frac{1}{|\mathbf{b}_3|}$$

$$\varkappa_{n\nu\mu i}(t) = [u_{n\nu i}(t) - u_{n\mu i}(t)] \qquad (2.2)$$

Здесь a — расстояние между ближайшими плоскостями одной подрешетки

$$\sigma_{n\nu i}(t)=\sum_{s,\,\mu}\frac{2vM_{\mu}}{a\pi M}\left\{\int_0^{\pi}\operatorname{Im}\left[e_{(s)\mu 3}(q)\,e_{(s)\nu i}(q)\right]\frac{\sin\left[\omega_{(s)}(q)\,t\right]}{\omega_{(s)}(q)}\sin nq\,dq\,-\right.$$

$$\left.-\int_0^{\pi}\operatorname{Re}\left[e_{(s)\mu 3}(q)\,e_{(s)\nu i}(q)\right]\frac{\sin\left[\omega_{(s)}(q)\,t\right]}{\omega_{(s)}(q)}\cos nq\,dq\right\} \tag{2.3}$$

Исходя из метода стационарной фазы [2,4,5], можно видеть, что незатухающие возмущения содержатся только в интегралах нижней строки (2.3) и только в тех, где $\omega_{(s)}(q)\to 0$ при $q\to 0$, т. е. только для трех акустических ветвей спектра $s=1,\,2,\,3$. Выделяя незатухающие возмущения и принимая во внимание соотношение, которое в дальнейшем будет здесь получено

$$e_{(s)\nu i}(0)=e_{(s)\mu i}(0)=e_{(s)\,i}(0) \qquad (s=1,\,2,\,3) \tag{2.4}$$

можно получить три ступенчатые волны однородных деформаций для каждой подрешетки

$$\sigma_{(s)\nu i}(t,\,n)\approx\sigma_{(s)i}(t,n)\equiv\begin{cases}-\,e_{(s)3}(0)\,e_{(s)i}(0)\,v/c_{(s)}, & c_{(s)}t>na\\ 0 & c_{(s)}t<na\end{cases}\quad\begin{pmatrix}c_{(s)}=a\omega_s'(0)\\ s=1,\,2,\,3\end{pmatrix} \tag{2.5}$$

Здесь $c_{(s)}$ — скорости звука.

Решение задачи о распространении возмущений, вызванных действием на одну из кристаллических плоскостей внешней силы, имеющей вид прямоугольного импульса, может быть получено из (1.6). Микроскопическая картина в обеих задачах также, как и в случае простой решетки, характеризуется затухающими возмущениями. В сложной решетке среди них будут возмущения, имеющие частоты оптических ветвей спектра, в том числе и возмущения, связанные с точками перегиба этих ветвей. Последние затухают со временем как $t^{-1/3}$.

3. Фронт ударной волны. Теперь можно видеть, что в случае сложной решетки, так же, как и в случае простой [2], ударные волны, возникающие при соударении двух полуограниченных кристаллов, описываются интегралами вида

$$J(\tau,\,n)=\int_0^{\pi}\frac{\psi(q)}{q}\sin\left[\tau\varphi(q)\right]\cos nq\,dq \qquad \left(\tau=\frac{ct}{a}\right) \tag{3.1}$$

Здесь τ — безразмерное время; c — скорость звука для исследуемой акустической ветви спектра; $\psi(q)$, $\varphi(q)$ — функции, имеющие достаточное количество непрерывных производных на интервале $[0,\,\pi]$, причем при $q\to 0$

$$\varphi(q)\approx q+\frac{\varphi'''(0)}{3!}q^3+\frac{\varphi^{\mathrm{v}}(0)}{5!}q^5, \qquad \psi(q)\approx\psi(0)+\frac{\psi''(0)}{2!}q^2 \tag{3.2}$$

Макроскопическим приближением интеграла (5.1) является ступенчатая волна

$$J(\tau,\,n)\approx\begin{cases}{}^1\!/_2\,\psi(0)\,\pi, & \tau>n\\ 0, & \tau<n\end{cases} \tag{3.3}$$

Чтобы более детально исследовать интеграл (3.1) при $\tau\approx n$, т. е. вблизи фронта ударной волны, достаточно положить в (3.1) $\tau=N$, где

$N \gg 1$, и $n = N + l$, где $l \ll N$. Откуда (3.4)

$$J(\tau,\ n) = J(N,l) \equiv J_{1(+)}(N,\ l) + J_{1(-)}(N,\ l) + J_{2(+)}(N,l) + J_{2(-)}(N,l)$$

$$J_{1(\pm)}(N,\ l) = \pm\int_0^\pi \frac{\psi(q)}{2q}\sin N\left[q \pm \varphi(q)\right]\cos lq\,dq \tag{3.5}$$

$$J_{2(\pm)}(N,\ l) = \pm\int_0^\pi \frac{\psi(q)}{2q}\cos N\left[q \pm \varphi(q)\right]\sin lq\,dq \tag{3.6}$$

Пользуясь тем, что $N \gg l$, к интегралам (3.5), (3.6) можно применить метод стационарной фазы [4,5]. Вследствие (3.2) интегралы $J_{1(-)}$ и $J_{2(-)}$ раскладываются в асимптотические ряды по целым степеням малой величины $N^{-1/3}$, причем $J_{1(-)}$ по четным степеням, начиная с нулевой степени, а интеграл $J_{2(-)}$ по нечетным степеням, начиная с первой. Интегралы же $J_{1(+)}$ и $J_{2(+)}$ раскладываются по целым степеням N^{-1}, первый — по четным, начиная с нуля, второй — по нечетным, начиная с единицы. Отбрасывая члены разложений, при $N \to \infty$, стремящиеся к нулю быстрее, чем $N^{-1/3}$, можно записать

$$J(N,\ l) \approx \psi(0)\left[{}^1/_6\,\pi - 0.703\,|\varphi'''(0)|^{-1/3}\,N^{-1/3}l\right],\quad \varphi'''(0) < 0$$

$$J(N,\ l) \approx \psi(0)\left[{}^1/_3\,\pi - 0.703\,|\varphi'''(0)|^{-1/3}\,N^{-1/3}l\right],\quad \varphi'''(0) > 0 \tag{3.7}$$

Здесь приходится различать два случая $\varphi'''(0) < 0$ и $\varphi'''(0) > 0$. В первом случае приближенное значение интеграла $J_{1(-)}$ является отрицательным, во втором случае — положительным. Хотя возможность существования положительной третьей производной у функции $\varphi(q)$ при $q = 0$ кажется сомнительной (в этом случае низкочастотные колебания имеют групповые скорости большие, чем скорости звука), авторами данной работы не было обнаружено никаких фактов, запрещающих такую возможность, поэтому здесь исследуются оба случая.

В новом приближении фронт ударной волны является наклонным, причем с течением времени тангенс угла наклона уменьшается пропорционально $N^{-1/3}$. Из (3.3) и (3.7) можно получить длину наклонной части фронта ударной волны

$$l_* \approx 2.2\,|\varphi'''(0)|^{1/3}N^{1/3}$$

В простой одномерной цепочке, если учитывать взаимодействие лишь ближайших соседей, $\varphi'''(0) = -{}^1/_4$, в этом случае $l_* \approx 1.4\,N^{1/3}$. Таким образом, в гармоническом приближении динамики кристаллической решетки длина наклонной части фронта ударной волны с течением времени растет, однако относительная ее длина l_*/N с течением времени уменьшается и стремится к нулю при $N \to \infty$. Следует отметить, что если $\varphi'''(0) = 0$, длина наклонной части фронта волны увеличивается со временем еще медленнее, а именно как $N^{1/5}$. Из (3.7) можно видеть, что расстояние, пройденное фронтом ударной волны $x_3 = ct$, определяется положением точки наклонной части фронта, где в случае $\varphi'''(0) < 0$ сжатие решетки достигает ${}^1/_3$, а в случае $\varphi'''(0) > 0$—${}^2/_3$ сжатия в области, находящейся за фронтом ударной волны.

Существенными поправками к макроскопическому приближению (3.3) интеграла (3.1) являются и низкочастотные колебания, распространяющиеся в случае $\varphi'''(0) < 0$ со скоростями несколько меньшими скорости звука, в случае $\varphi'''(0) > 0$ — со скоростями несколько большими скорости звука. Из асимптотических разложений, приведенных в [2], можно видеть, что амплитуды этих поправок возрастают по мере приближения к наклонной части фронта ударной волны. Метод стационарной фазы позволяет оценить, на каком расстоянии l_{**} от фронта волны амплитуды этих поправок в Q раз меньше амплитуды ступенчатой волны (3.3)

$$l_{**} \approx 0.9 \ (Q^4 N \,|\, \varphi'''(0)\,|)^{1/3}$$

если $Q = 10$, а $\varphi'''(0) = -1/4$, то $l_{**} \approx 13\, N^{1/3}$. Если при этом $N = 1000$, $l_{**} \approx 130$, если $N = 10^8$, $l_{**} \approx 6000$. Величина l_{**} возрастает с течением времени пропорционально $N^{1/3}$. Однако отношение этой величины к пути, пройденному фронтом волны, (l_{**}/N) уменьшается и стремится к нулю при $N \to \infty$.

В число поправок к макроскопической картине входят также колебательные возмущения, распространяющиеся со всевозможными скоростями от места возникновения ударной волны. Среди них слабее всего (как $\tau^{-1/3}$) затухают возмущения, связанные с точками перегиба дисперсионных кривых. С течением времени вклад этих поправок становится весьма незначительным.

С физической точки зрения интересно остановиться на тех случаях, когда направление соударения является осью симметрии кристалла. Здесь можно провести проверку соотношений Гюгонио [1]. Результаты, полученные выше, позволяют утверждать, что при соударении гармонических решеток (в отличие от ангармонических [6]) соотношения Гюгонио выполняются. При этом обнаруживается особенность, присущая только гармоническому приближению динамики решетки,— кинетическая энергия движущегося кристалла полностью превращается в «упругую» энергию сжатия, а тепловые колебания атомов не возбуждаются.

4. Сдвиги подрешеток кристалла. При изучении различных физических явлений (например, пьезоэффект) важно знать, как в результате деформации кристалла смещаются решетки Бравэ, составляющие сложную решетку. Итак, имея в виду (2.2), из (2.1) можно получить

$$\begin{aligned} \varkappa_{n\nu\lambda i}(t) = -\sum_{s,\,\mu} \frac{M_\mu v}{M\pi} \Bigg\{ \int_0^\pi \mathrm{Re}\,[e_{(s)\mu 3}(q)\,(e_{(s)\nu i}(q) - e_{(s)\lambda i}(q))] \times \\ \times \frac{\sin[\omega_{(s)}(q)\,t]}{\omega_{(s)}(q)\sin{}^1/_2\, q} \sin(n + {}^1/_2)\, q\,dq + \\ + \int_0^\pi \mathrm{Im}\,[e_{(s)\mu 3}(q)\,(e_{(s)\nu i}(q) - e_{(s)\lambda i}(q))] \frac{\sin[\omega_{(s)}(q)\,t]}{\omega_{(s)}(q)\sin{}^1/_2\, q} \cos(n + {}^1/_2)\, q\,dq \Bigg\} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Принимая во внимание (1.5), (2.4) и равенство

$$\sum_\mu M_\mu e_{(s)\mu j} = 0, \qquad s = 4, 5, \ldots, 3\,(p+1)$$

(см., например, [7], стр. 75), можно видеть, что незатухающие возмущения содержатся только в интегралах нижней строки (4.1) и только если $s = 1, 2, 3$. Из (4.1) выделяются три ступенчатые волны сдвигов подрешеток

$$\varkappa_{(s)\nu\lambda i}(t, n) = \begin{cases} -ave_{(s)3}(0)\,(e^\circ_{(s)\nu i} - e^\circ_{(s)\lambda i})\,/\,c_{(s)}, & c_{(s)}t > na \\ 0, & c_{(s)}t < na \end{cases} \quad (4.2)$$

$$e^\circ_{(s)\nu i} = \lim_{q\to 0} \frac{1}{q}\, \mathrm{Im}\, e_{(s)\nu i}(q)$$

Сравнивая (4.2) и (2.5), можно записать

$$\sigma_{(s)i} / \varkappa_{(s)\nu\lambda i} = e_{(s)i}(0) / a\,(e^{\circ}_{(s)\nu i} - e^{\circ}_{(s)\lambda i}) \tag{4.3}$$

Таким образом, для того чтобы знать как связаны между собой деформации кристалла и сдвиги его подрешеток нужно выявить, как связаны между собой величины

$$e_{(s)i}(0) \text{ и } e^{\circ}_{(s)\nu i} - e^{\circ}_{(s)\lambda i}$$

В связи со сказанным выше исследуем поведение акустических ветвей спектра при $q \to 0$. Тогда

$$\lim_{q\to 0} \frac{\omega_{(s)}(q)}{q} = \frac{c_{(s)}}{a}; \quad \lim_{|\mathbf{k}|\to 0} \frac{\omega_{(s)}(\mathbf{k})}{|\mathbf{k}|} = c_{(s)}(\mathbf{k}_0), \quad \mathbf{k}_0 = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \tag{4.4}$$

При исследовании уравнения (1.4) при $q \to 0$ (в общем случае при $|\mathbf{k}| \to 0$) удобнее перейти от переменных $\mathbf{e}_\mu$ к переменным

$$\mathbf{f}_0 = \mathbf{e}_0, \quad \mathbf{f}_\mu = \mathbf{e}_\mu - \mathbf{e}_0 \quad (\mu = 1, 2, \ldots, p) \tag{4.5}$$

$$\left\{\sum_{\lambda=0}^{p} \mathbf{B}^*_{\nu\lambda}(\mathbf{k}) - M_\nu \omega^2(\mathbf{k}) \mathbf{E}^*\right\} \mathbf{f}_0(\mathbf{k}) + \sum_{\mu=1}^{p} \{\mathbf{B}^*_{\nu\mu}(\mathbf{k}) - M_\mu \omega^2(\mathbf{k})\, \delta_{\nu\mu} \mathbf{E}^*\} \mathbf{f}_\mu(\mathbf{k}) = 0$$

где ε^* — единичная матрица третьего порядка, $\mathbf{e}_\mu(\mathbf{k}) \equiv \{e_{\mu j}(\mathbf{k})\}$ — трехмерные векторы, $\mathbf{B}_{\nu\mu}{}^*(\mathbf{k}) \equiv \{B_{\nu i \mu j}(\mathbf{k}\}$ — матрицы третьего порядка, удовлетворяющие соотношениям

$$\sum_{\mu=0}^{p} B_{\nu i \mu j}(0) \equiv \sum_{m,\,\mu} \Phi_{n\nu i m \mu j} = 0, \qquad \lim_{|\mathbf{k}|\to 0} \frac{1}{|\mathbf{k}|} \sum_{\nu,\,\mu=0}^{p} \operatorname{Im} B_{\nu i \mu j}(\mathbf{k}) = 0 \tag{4.6}$$

Первое из тождеств (4.6) является общеизвестным, второе соответствует тождествам (23.11) [8], (59.5б) [9] и может быть из них получено. Принимая во внимание (4.4), первое из тождеств (4.6) и устремляя в (4.5) $|\mathbf{k}| \to 0$, можно получить

$$\sum_{\mu=1}^{p} \mathbf{B}^*_{\nu\mu}(0)\, \mathbf{f}_\mu(0) = 0 \tag{4.7}$$

Матрица $B_{\nu i \mu j}$, $(\nu,\ \mu = 1, 2, \ldots, p)$, имеющая порядок $3p$, является неособенной, ибо в противном случае решетка была бы неустойчивой, а именно были бы возможны сдвиги подрешеток друг относительно друга без воздействия внешних сил.

Таким образом, $3p$ величин $f_{\mu i}(0)$, $(\mu = 1, 2, \ldots, p)$ равны нулю, так как они являются решениями системы однородных линейных уравнений, ранг матрицы которой равен $3p$.

Можно видеть, что слагаемые уравнений (4.5) являются нулями различного порядка по $|\mathbf{k}|$ при $|\mathbf{k}| \to 0$, причем наименьший порядок равен единице. Из (4.5) после деления на $|\mathbf{k}|$ и перехода к пределу при $|\mathbf{k}| \to 0$ следует:

$$\sum_{\mu=1}^{p} \mathbf{B}^*_{\nu\mu}(0)\, \mathbf{f}^{\circ}_\mu + \sum_{\lambda=0}^{p} \mathbf{B}^{\circ *}_{\nu\lambda}\, \mathbf{f}_0(0) = 0 \tag{4.8}$$

$$\mathbf{f}^{\circ}_\mu = \frac{1}{|\mathbf{k}|} \operatorname{Im} \mathbf{f}_\mu(\mathbf{k}), \qquad \mathbf{B}^{\circ *}_{\nu\lambda} = \lim_{|\mathbf{k}|\to 0} \frac{1}{|\mathbf{k}|} \operatorname{Im} \mathbf{B}^*_{\nu\lambda}(\mathbf{k})$$

Вследствие тождеств (4.6) из $3(p+1)$ уравнений (4.8) с $3(p+1)$ неизвестными только $3p$ будут линейно независимыми (пусть для симметрии $\nu = 1, 2, \ldots, p$). Недостающие для полноты системы три уравнения можно получить, просуммировав по ν уравнения (4.5), разделив их на $|\mathbf{k}|^2$ и устремив $|\mathbf{k}| \to 0$

$$\{\mathbf{B}^* - Mc^2\mathbf{e}^*\}\,\mathbf{f}_0(0) - \sum_{\lambda=1}^{p}\left(\sum_{\nu=0}^{p}\mathbf{B}_{\nu\lambda}^{\circ*}\right)\mathbf{f}_\lambda^\circ = 0 \tag{4.9}$$

где

$$\mathbf{B}^* = \lim_{|\mathbf{k}|\to 0}\frac{1}{|\mathbf{k}|^2}\operatorname{Re}\sum_{\nu,\lambda=0}^{p}\mathbf{B}_{\nu\lambda}^*(\mathbf{k}), \qquad M = \sum_{\mu=0}^{p} M_\mu$$

Пользуясь тем, что матрица левой части уравнений (4.8) неособенна, решая уравнения, можно получить

$$\mathbf{f}_\mu^\circ = \mathbf{D}_\mu^*\mathbf{f}_0(0) \tag{4.10}$$

Для выяснения полной картины смещений подрешеток достаточно рассмотреть лишь смещения всех подрешеток относительно основной подрешетки. А эти смещения, если воспользоваться (4.3) и (4.10), могут быть получены из деформаций кристалла

$$\varkappa_{(s)\nu 0} = \mathbf{D}_\nu^*\sigma_{(s)}$$

Можно показать, что в случае решетки, каждый атом которой является центром инверсии, подрешетки сдвигаются так, что сложная решетка в целом претерпевает лишь однородную деформацию.

Поступила 23 VII 1968

ЛИТЕРАТУРА

1. Альтшулер Л. В. Применение ударных волн в физике высоких давлений. Усп. физ. н, 1965, т. 85, № 2, стр. 197—258.
2. Лузин А. Н. Некоторые задачи динамики кристаллической решетки и теории упругости. ЖЭТФ, 1966, т. 50, № 4, стр. 926—935.
3. Марадудин А. А., Монтролл Э., Вейсс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. М., «Мир», 1965.
4. Эрдейи А. Асимптотические разложения. М., Физматгиз, 1962.
5. Лузин А. Н. Асимптотические разложения некоторых интегралов с синусоидальными ядрами. Ж. вычислит. матем. и матем. физ., 1966, т. 6, № 3, стр. 576—578.
6. Tsai D. H., Beckett C. W., Shock-wave propagation in cubic lattices, J. geophys. Res., 1966, vol. 71, No. 10, p. 2601—2611.
7. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М.— Л., Физматгиз, 1962.
8. Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. М., Изд-во иностр. лит., 1958.
9. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических тепловых свойств кристаллов. М.— Л., Физматгиз, 1963.