

晶格振动声学支的边界耦合效应

李景德

(中山大学物理系)

1986年9月5日收到

提 要

在计入最近邻二体和三体作用的简谐近似下,解出了 $N \times N$ 正方简单格子的振动模,边界效应使通常将声子分支和用波矢量来标注的物理图象完全改变了,只能按空间型将声子分类。数字计算表明共价结构性质的加强可导致出现边界耦合软模。还给出了旋转模、内旋转模、公度非公度结构模,以及表面波声子模等一些新结果。边界耦合作用消除了声子的一些简并,使其频谱向高端和低端散开。理论被推广到三维一般情况,说明了边界耦合效应的主要结果。

一、引 言

Born 和黄昆对晶格动力学作了全面的详细论述^[1]。通常,晶体理论总是假设晶格为无限周期结构而略去边界效应;为了使波矢量量子化不得不又引进 Born-Karman 条件。在这种无限晶格动力学中,只有声学支解才能给出三个零频率,相应于波矢量为零的平移。按照软模(SM)理论的推断^[2,3],如果还出现其它的零频率,则相应的模将导致晶体结构不稳定。自从1940年 Kellermann 第一次作晶格动力学的具体频谱计算以来,对许多晶体的数字计算工作已做了很多,的确没有找到过其它的零频率。然而一个真实晶体还有三个旋转模,尽管几乎所有有关论著都明白指出旋转模的恢复力系数为零,应该具有零频率;但是这三个零频模在具体计算时总是被丢失了。虽然旋转模不是软模,但理论既已丢失三个确实存在的模,就有可能还丢失其它的模,甚至丢失实验中能够观察到的软模。另一方面,一个有限大晶体的独立模的个数必须等于系统的自由度。理论既丢失了至少三个真实的模,就必然多出同样数目的实际并不存在的“伪模”,甚至其中恰巧有一个被理论认为是软模。

在分子振动理论中既能解出平移模也同时能解出旋转模^[4]。只要不再理想化把晶体看成是无限周期结构,而看成是一个特大的大分子,应能将无限晶格动力学失去的东西找回来并排除混入的伪解。在一维有限晶格的讨论中,曾经得到了一些有趣的新结果^[5]。下面把一维有限晶格中连接矩阵和自由边界矩阵的概念推广到二维和三维,并对二维问题作详细的数字计算。通过二维边界耦合模的一些典型结果来说明边界耦合效应在晶格动力学中所引起的主要普遍变化。

二、 $N \times N$ 二维正方格子的振动

在研究束缚原子系统的振动时,对于小分子^[6]和晶体通常采取不同的方法。前者应

用点群和侧重于考虑短程作用, 而后者应用平移群和倾向于计入长程作用。过去晶格动力学只能处理两体相互作用, 不得不计入长程作用; 否则在极端情况下若只用最近邻近近似, 将完全失去切应变恢复力。在分子振动中, 近代量子化学可以用更接近于真正多体问题的方法来处理电子结构, 从而得到更符合于实验的键长和键角力系数。对于长程作用, 分子理论处理重迭积分时有足够理由作各种忽略。键角恢复力属于一种三体作用, 因为要有三个原子才能组成一个键角。一个小分子的电矩与共价结构的方向性密切联系。研究与电矩有关的问题时必须考虑与键角力相应的三体作用。例如对于 H_2O 分子, 如果不计入这种作用, 将会完全失去它的电偶极矩而成为线性分子。作者找到了在有限晶格动力学中引入这种三体作用的简单方法^[6]。

为了简化问题以便得到具体的解, 观察具有简单晶包的正交对称单原子晶体。计入次近邻相互作用时第 (α, β, γ) 个粒子沿 x 方向振动方程可写为

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_{\alpha\beta\gamma} = & \sum_{\alpha'} a_1^2 f_1(x_{\alpha'\beta\gamma} - x_{\alpha\beta\gamma}) + \sum_{\alpha'\beta'} a_2^2 [g_3(x_{\alpha'\beta'\gamma} - x_{\alpha\beta\gamma}) + h_3(x_{\alpha\beta'\gamma} - x_{\alpha'\beta\gamma})] \\ & + \sum_{\alpha'\gamma'} a_2^2 [g_3(x_{\alpha'\beta\gamma'} - x_{\alpha\beta\gamma}) + h_2(x_{\alpha\beta\gamma'} - x_{\alpha'\beta\gamma})] \\ & + \sum_{\alpha'\beta'} a_1 a_2 [g_3(y_{\alpha'\beta'\gamma} - y_{\alpha\beta\gamma}) + h_3(y_{\alpha'\beta\gamma} - y_{\alpha\beta'\gamma})](\alpha' - \alpha)(\beta' - \beta) \\ & + \sum_{\alpha'\gamma'} a_1 a_2 [g_2(z_{\alpha'\beta\gamma'} - z_{\alpha\beta\gamma}) + h_2(z_{\alpha\beta\gamma} - z_{\alpha\beta'\gamma})](\alpha' - \alpha)(\gamma' - \gamma). \quad (1) \end{aligned}$$

沿 y 和 z 方向有类似方程。其中 a_1, a_2, a_3 为晶格常数; f_1, f_2, f_3 为最近邻键长力系数; h_1, h_2, h_3 为键角力系数; g_1, g_2, g_3 为次近邻相互作用力系数; m 为粒子质量。在方程 (1) 中求和的限制条件为

$$\alpha' = \alpha \pm 1, \beta' = \beta \pm 1, \gamma' = \gamma \pm 1. \quad (2)$$

九个力系数可以由晶体的九个非零独立弹性刚度常数按下式唯一确定:

$$\begin{aligned} c_{11} &= a_1^3 [f_1 + 2(g_2 + g_3 - h_2 - h_3)] / a_2 a_3, \\ c_{22} &= a_2^3 [f_2 + 2(g_3 + g_1 - h_3 - h_1)] / a_3 a_1, \\ c_{33} &= a_3^3 [f_3 + 2(g_1 + g_2 - h_1 - h_2)] / a_1 a_2, \\ c_{12} &= c_{21} = 2a_1 a_2 (g_3 - h_3) / a_3, \quad c_{66} = 2a_1 a_2 (g_3 + h_3) / a_3, \\ c_{23} &= c_{32} = 2a_2 a_3 (g_1 - h_1) / a_1, \quad c_{44} = 2a_2 a_3 (g_1 + h_1) / a_1, \\ c_{31} &= c_{13} = 2a_3 a_1 (g_2 - h_2) / a_2, \quad c_{55} = 2a_3 a_1 (g_2 + h_2) / a_2. \quad (3) \end{aligned}$$

对于 $N \times N$ 二维正方格子, 如果只用最近邻近近似, 则振动方程可简化为

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_{\alpha\beta} &= \sum_{\alpha'} a^2 f(x_{\alpha'\beta} - x_{\alpha\beta}) + \sum_{\alpha'\beta'} a^2 h [(x_{\alpha\beta'} - x_{\alpha'\beta}) + (y_{\alpha'\beta} - y_{\alpha\beta'})](\alpha' - \alpha)(\beta' - \beta), \\ m\ddot{y}_{\alpha\beta} &= \sum_{\beta'} a^2 f(y_{\alpha\beta'} - y_{\alpha\beta}) + \sum_{\alpha'\beta'} a^2 h [(y_{\alpha'\beta} - y_{\alpha\beta'}) + (x_{\alpha\beta'} - x_{\alpha'\beta})](\alpha' - \alpha)(\beta' - \beta). \quad (4) \end{aligned}$$

其中 $\alpha' = \alpha \pm 1, \beta' = \beta \pm 1; \alpha, \beta, \alpha', \beta' \leq N$. (5)

令 $x_{\alpha\beta} = \pm y_{\beta\alpha} = A_{\alpha\beta} \exp(-i\omega t) \quad \alpha, \beta = 1, 2, \dots, N$, (6)

则 $2N^2$ 方程组 (4) 可化为两个关于 $A_{\alpha\beta}$ 的 N^2 方程组。因为晶格的边点和角点缺少了一

些键,其方程比内点少了一些相应的项。将所缺少的项的系数组成的矩阵记为 B_{\pm} ,称为自由边界矩阵。各方程其余的项的系数组成的矩阵记为 Q 。用 Dirac 记号 $|\rangle$ 表示由 $A_{\alpha\beta}$ 组成的 N^2 行一列的矩阵,则由(4)至(6)式可得矩阵本征方程

$$(Q + B_{\pm})|\rangle = \varepsilon|\rangle, \quad (7)$$

$$\text{其中} \quad \varepsilon = (2 - m\omega^2/a^2f)/(1 - 2h/f). \quad (8)$$

$$\text{若令} \quad D = [-2 + f/h]^{-1}, \quad (9)$$

则 B_{\pm} 为一个整数稀疏矩阵乘以 $D^{[7]}$, 而 Q 则类似于 Hückel 分子轨道 (HMO) 理论中的连接矩阵^[8]。将由

$$A_{\alpha\beta}(q_1, q_2) = C_{q_1q_2} \cos[(2\alpha - 1)q_1\pi/2N] \cos[(2\beta - 1)q_2\pi/2N] \quad (10)$$

组成的列矩阵记为 $|q_1, q_2\rangle$, 则 $|q_1, q_2\rangle$ 是 $N^2 \times N^2$ 矩阵 Q 的一组正交归一本征矢, 相应于本征值

$$\varepsilon(q_1, q_2) = 2 \cos(q_1\pi/N) + 4D \cos(q_2\pi/N), \quad (11)$$

$$\text{其中} \quad q_1, q_2 = 0, 1, 2, \dots, (N - 1); \quad (12)$$

$$C_{qq'} = 2/N, C_{q0} = C_{0q} = \sqrt{2}/N, C_{00} = 1/N, q, q' \neq 0. \quad (13)$$

于是可以在 Q 表象用久期微扰方法解出方程(7)的本征矢

$$|\rangle = \sum_{q_1q_2} D_{q_1q_2} |q_1q_2\rangle; \quad (14)$$

$$\text{久期方程} \quad \sum_{q'_1q'_2} \langle q_1q_2 | B_{\pm} |q'_1q'_2\rangle D_{q'_1q'_2} = [\varepsilon - \varepsilon(q_1, q_2)] D_{q_1q_2}. \quad (15)$$

同时确定了本征值 ε 和相应的耦合系数 $D_{q_1q_2}$ 。

q_1, q_2 是沿 x, y 方向由(10)式给出的波节数。条件(12)式规定了波节数空间(q_1, q_2)的一个有限点阵。它代替了具有无限周期结构的倒格子空间的布里渊区。在有限晶格动力学中,完全没有必要再引入 Born-Karman 条件;因为量子化已经是运动方程的很自然的结果。波节数点阵的一个点相应于方向相反的一对波矢量。(14)式表明,由于有限边界的存在,在简谐近似下不再能用一个波矢量来标注一个独立的模。

三、群论的考虑和数字计算

$N \times N$ 正方格子的点群为 C_{4v} 。 $2N^2$ 个声子模按点群的分类列于表1,表1中还给出了各个不可约表示的特征标。表1的右边给出了一些模的具体例子;括号中的数字为模的编号,数字后面的正负号标明该模是由 B_+ 或 B_- 得到。这些模的花样示于图1。 B_+ 使 q_1 为奇, q_2 为偶的零级近似模互相耦合给出 A_1 模,偶 q_1 , 奇 q_2 组合成 B_2 模。 B_- 使偶 q_1 , 奇 q_2 组合成 A_2 模,奇 q_1 , 偶 q_2 组合成 B_1 模。余下可能的数组 (q_1, q_2) 中,两个波节数为同奇偶;这时 B_+ 和 B_- 的微扰结果相同,给出二重简并的 E 模。(6)式用投影的方法使 E 模分裂成对于 σ_a 为对称 (B_+) 和反对称 (B_-) 的两个单解,从而须处理的自由度减少一半。

只有一对 E 模保持为零级近似解而不与其它波节数耦合。这就是 $q_1 = q_2 = 0$ 的平移模。(8)式使求解 ω 的问题等效地化为求解本征值 ε 。 ω 越小则 ε 越大。求软模 (SM)。

表 1 二维正方格子声学模的分类

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	B_{\pm}	q_1, q_2	模的例子
A_1	1	1	1	1	1	B_+	奇 偶	$(9+), (57+)$
B_2	1	-1	1	-1	1	B_+	偶 奇	$(2+), (50+)$
A_2	1	1	1	-1	-1	B_-	偶 奇	$(2-), (36-)$
B_1	1	-1	1	1	-1	B_-	奇 偶	$(9-), (11-)$
E	2	0	-2	0	0	B_{\pm}	同奇偶	$(1+)$

相当于求最大本征值。与零频率相应的本征值等于 $(2 + 4D)$ 。

理论中只出现一个参数 D 。可以编成计算程序由 N 和 D 值得到 $2N^2$ 个模。因为电子计算机的计算速度很快,例如用 IBM 型计算机处理 $N = 6$ 的问题只需一小时左右;故当 N 不太大时甚至不必先用群论化简。由计算机作出的任一张模矢量图都很容易利用点群的特征标直觉地看出其所属空间型。但是对于较大的 N 值,按群论结果来编程可以节省大量的内存空间和机时,使得 IBM/PC 机可以解决 $N \leq 24$ 的问题。

当 $N = 7$ 时,边角点的数目与内点相近。因边界点数目随 N 线性地增加而内点数目按平方律增加,故当 $N \geq 8$ 时已可清楚地看出结果给出的物理图象。为了使图形有适宜于看得清楚的大小,图 1 只给出 $N = 8$ 的一些例子。图中小圆圈表示格点的平衡位置,始于小圆圆心的短线表示该粒子振动位移方向和相对振幅。一般地,特别对于更大的 N 值,模矢量图都很复杂。这里只给出比较简单的下面要作进一步讨论的少数例子。在给定 N 和 D 值后,所编程序能作出全部 $2N^2$ 个模矢量图、相应频谱分布图,以及打印出各种需要的数据。

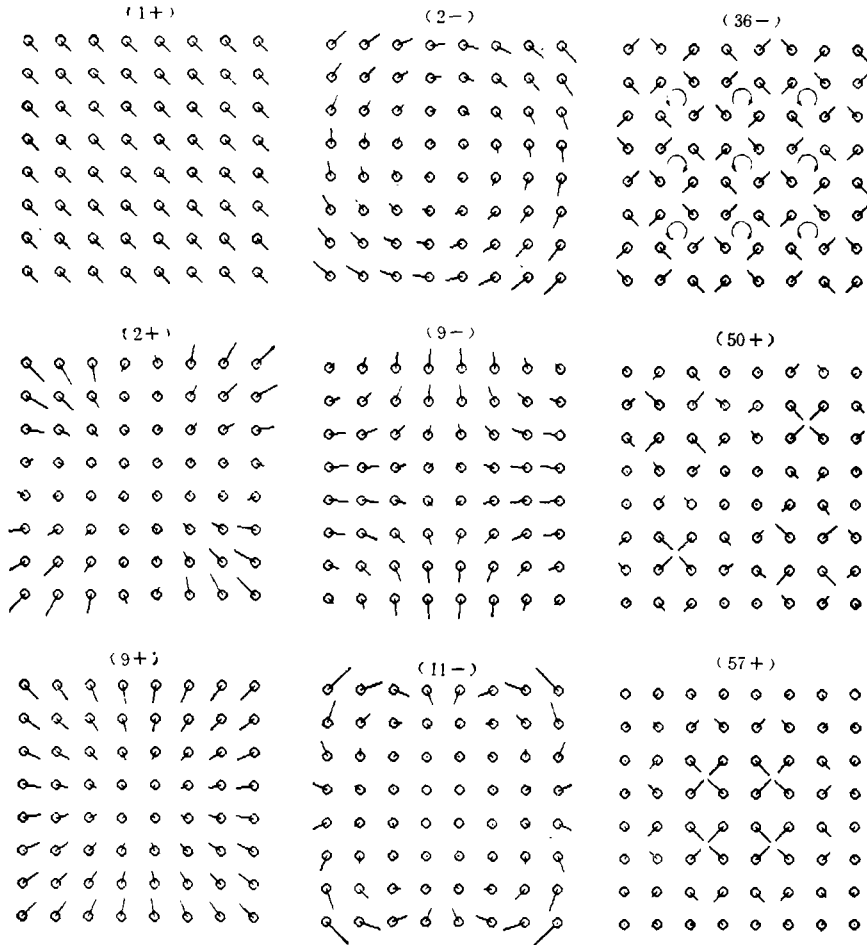
四、一些边界耦合模

$N = 8$ 的正方格子有 128 个不同的模,图 1 是其中的九个。 E 模有三十二对,由于是二重简并,模的花样不能完全确定。图中的平移模 $(1+)$ 是用了(6)式的对称投影由 B_+ 从任意方向的平移中分解出来的结果。根据计算机作图的方式,图中 x 轴方向自左向右, y 轴自上向下。 $(1+)$ 模对于 $x = y$ 平面是对称的。模 $(2-)$ 为旋转模,与平移模一样都具有零频率。模 $(2+)$ 类似于切应变,模 $(9-)$ 类似于正应变;但是它们和通常用压电振子激发的宏观的面切应变或面正应变谐振方式有原则性差别。模 $(2+)$ 和 $(9-)$ 都各有非零耦合系数 $N^2/4$ 个;若用同样方法描述面切应变和面正应变机械谐振,则各只有一个等于 1 的非零耦合系数。

在空间型 A_1 中发现一个边界耦合软模 $(9+)$,由图 1 可以看出它对于点群 C_{4v} 是全对称的 A_1 模。计算表明,当 D 值由零增大到某个值 D_{sm} 时,其本征值单调上升到 $\epsilon = (2 + 4D)$, 相应于频率单调下降到 $\omega = 0$ 。 $N = 3$ 时,容易直接解出 $D_{sm} = 1/(\sqrt{8} - 2)$ 。计算机给出的 D_{sm} 与 N 的关系曲线示于图 2。曲线可用经验方程拟合为

$$D_{sm} = 0.70916 \times (N - 2)^{-0.924} + 0.49749 \quad N = 3, 4, \dots \quad (16)$$

当 $N = 2$ 时正方格子没有内点,此模消失。不同 N 值给出的边界耦合软模的花样彼此完

图1 $N=8$ 的一些声子模矢量图

全相似,都表现出面积收缩的特征。这里只考虑了 $f \geq 2h$ 的情况。由(9)式看出,当键

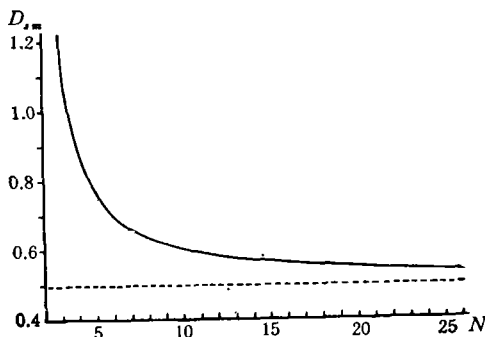


图2 边界耦合软模出现条件

角力系数与键长力系数的比值 h/f 增大时 D 单调增大。从化学键理论知键角力系数的增大是结构的共价性质加强所引起的。

在铁电软模(SM)理论中只注意到横光支模的软化,这就很难解释像 BaTiO_3 型晶体沿 z 方向自发极化时为什么同时发生晶体的纵向伸长和横向收缩。如果把这种铁电转变的根源解释为垂直于 z 方向结构的共价性质的加强^[9],则边界耦合软模恰好说明了这一现象。软模不是相变的原因,它只是可能伴随

着相变一起发生的另一现象;其共同原因为不同宏观条件下微观电子结构的变化。

有限晶格动力学不但找回来了曾经丢失的整体旋转零频率,而且还找到了一个内旋

转模(36-);图 1 中的箭头标明相邻每四个格点集团的内旋转方向。直接由方程 (4) 和 (6) 可以证明,对于任何的偶数 N 有一个通解

$$\begin{aligned} A_{11} &= -A_{21} = -A_{31} = A_{41} = A_{51} = \dots \\ &= A_{12} = -A_{22} = -A_{32} = A_{42} = A_{52} = \dots \\ &= -A_{13} = A_{23} = A_{33} = -A_{43} = -A_{53} \\ &= \dots = 1/N. \end{aligned} \quad (17)$$

相应的本征值 $\varepsilon = 0$ 。这个通解对应于可被 4 整除的 N 为 A_2 型内旋转,其它的偶数的 N 为 B_1 型内旋转模。容易由图中看出,这种内旋转满足角动量守恒。当 N 为奇数时,计算机没有找到这种内旋转。

观察模(36-)所引起的最近邻格点距离的变化,可以看出它导致晶格常数出现公度-非公度 (C-I) 变化。图 1 的模(50+)和(57+)给出的是另两种类型的 C-I 结构。C-I 超结构近年来在实验研究中引起了很大兴趣^[50]。

当 N 很大但保持为有限值时,用类似于标度变换的办法可以证明有限晶格动力学方程(1)和(4)过渡到连续介质弹性振动方程^[6]。但是对于一个有限晶格,标度变换前后的系统是不等价的。放大标度相当于只考虑格点集团的运动,这就必然失去一些细致结构。因此方程(1)和(4)虽然可适用于任何 $2 \leq N < \infty$ 的情况,即将分子振动与晶格振动问题统一了起来,并且和连续弹性介质力学相一致;但是恰好同时又反映了微观与宏观运动的原则性差别。有限晶格动力学给出的是微观的解,由连续介质弹性力学得到的只能是宏观的解。这在前面关于模(2+)和(9-)的讨论中已提到。当自由边界条件用于连续介质弹性振动方程时,得出的所有的驻波解都是简单的,即都可以用一对波节数 (q_1, q_2) 来表征;同时,系统的自由边界必然都是所有的解的波腹。图 1 模(11-)的运动集中于边界点附近,内点的振幅很快衰减下去,类似于近代压电技术上得到重要应用的声表面波。但它是微观的运动,故称之为表面波声子。还可以找到其它的表面波声子模。然而另一方面也可找到一些模,没有宏观的类似。例如模(57+)表明,边界上出现的是波节而不是波腹;这在自由边界的宏观振动中是完全不可能的。在已描出的大量模矢量图中,还可找到其它的边界点为波节的许多微观振动模。

五、三维有限晶格振动的一般情况

由三维振动方程(1)出发,令

$$x_{\alpha\beta\gamma} = A_{\alpha\beta\gamma} \exp(-i\omega t), \quad y_{\alpha\beta\gamma} = B_{\alpha\beta\gamma} \exp(-i\omega t), \quad z_{\alpha\beta\gamma} = C_{\alpha\beta\gamma} \exp(-i\omega t). \quad (18)$$

将得到的关于 $A_{\alpha\beta\gamma}, B_{\alpha\beta\gamma}, C_{\alpha\beta\gamma}$ 的 $3N^3$ 个线方程组中边界点所缺少的项的系数分出来组成边界矩阵 B 。其余系数组成矩阵 Q 。也可得到本征方程

$$(Q + B)|\rangle = \varepsilon|\rangle, \quad (19)$$

其中 ε 为 ω^2 的线性函数。在一维^[9]、二维和三维情况下本征方程(19)有相同形式;其特点在于分出了边界矩阵 B ,从而使 Q 有简单驻波本征矢。其实从任何力系数模型出发,均可类似地分出边界矩阵 B 而得到本征方程(19)。

对于任何一种力系数模型,也可按照无限晶格动力学方法引入 Born-Karman 条件得

到一组行波解 $|j, \mathbf{q}\rangle$ 而写振动方程为

$$\mathcal{Q}'|j, \mathbf{q}\rangle = \varepsilon(j, \mathbf{q})|j, \mathbf{q}\rangle, \quad (20)$$

其中 j 为分支的标号. 对于同一个晶体的相同力系数模型, 由于处理边界方法的不同, 矩阵 \mathcal{Q}' 和 \mathcal{Q} 略有区别但阶数相同. 定义矩阵 B' 使

$$(\mathcal{Q} + B) = (\mathcal{Q}' + B'). \quad (21)$$

以之代入方程(19), 就可以在 \mathcal{Q}' 表象用行波解为基来解有限晶格振动本征方程. 要找到 \mathcal{Q} 的驻波本征矢是个新问题, 但求行波解(20)的方法已经熟知. 类似地, 微扰 B' 导致各种行波在简谐近似下的强烈耦合.

无限晶格动力学给出的声子图象按光学支、声学支、纵波和横波来分支; 每支又用布里渊区的波矢量来区分简谐近似下的各个独立模. 因此, 声学支的长波极限^[1]自然就和宏观的连续介质弹性波等同起来. 过去认为, 声子与声子之间通过非简谐项引起的散射来交换能量, 使得一个经受了某种宏观作用后的系统重新趋向于热平衡. 然而 Fermi 查明这种非简谐耦合导致的是孤波 (soliton), 所能产生的能量交换是很少的^[11]. Fermi 引起的惊奇在声子统计问题中尚未得到满意解决. 有限晶格动力学表明用波矢量标注的模不是简谐独立模, 因此不是微观运动的声子. 由声子的微观运动要通过类似于标度变换的方法改变为研究粒子集团的运动, 才能得到可用波矢量来描述的宏观运动. 作用于 $N \times N$ 正方格子的宏观扰动如果属于空间型 E , 将同时激发 $(N^2 - 2)$ 种声子, 此处把平移除外; 如果扰动属空间型 A 或 B , 将同时激发 $N^2/4$ 种声子. 这只有利于趋向热平衡而不利于出现孤波. 通常实际发生的情况正是这样.

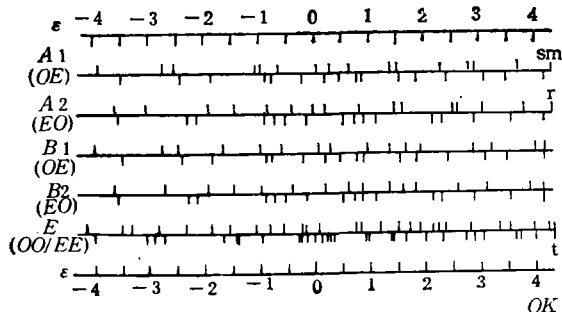


图3 $N \times N$ 正方格子的声子频谱 ($N = 8, D = 0.58$)

简并度. 当晶体外形保持与点群对称相同时, $(\mathcal{Q}' + B')$ 保持点群对称而失去平移对称; 声子按点群不可约表示分类, 最高简并度不超过 3.

图3给出 $N = 8$ 的正方格子的声子频谱. 参数 $D = 0.58$ 相应的最大本征值 $\varepsilon = 4.32$. 图中用 SM, R, T 分别标出了边界耦合软模(9+), 旋转模(2-), 和平移模(1±)的本征值. 每个空间型的频谱下面, 还标出了零级近似频谱. 括号内的字母标明了 (q_1, q_2) 的奇 (O) 或偶 (E). 可以看出略去边界效应使 A_1 支和 B_1 支简并, 而 A_2 支和 B_2 支简并; 从而不能将解再按点群的不可约表示分类. 简并消除的同时, 声子频谱向高端和低端散开但保持平均中心不变. 这是因为

$$\text{Tr}(\mathcal{Q} + B_{\pm}) = \text{Tr}\mathcal{Q} = (2 + 4D)/N \quad (22)$$

等于常数. 对于偶数 N , 非简并的 A_1, A_2, B_1, B_2 模各有 $N^2/4$ 个; 当 N 为奇数时, 这些

在方程(20)中, 算符 \mathcal{Q}' 对晶体空间群操作为不变. 波矢量反映了作为空间群子群的平移群的不可约表示. 而点群对称则使波矢量空间出现等效点. 具体数字计算时常利用等效点数来减小工作量以得出频谱分布^[12]. 因此行波模的简并度很大, 晶体为立方对称时可达 48. 边界耦合作用在很大程度上降低了

模的个数各为 $(N^3 - 1)/4$; 其余为二重简并 E 模。无限晶格动力学给出的行波解不可能存在非简并模。

六、讨 论

通常用面网将倒格子单包分割的办法来选取波矢量以计算频谱分布。计算机技术的发展使得有可能直接用正格子计算频谱,同时还给出声子模的具体花样。令人鼓舞的是计算结果随粒子数增大的收敛性还不算坏,这从图 2 可以看出。因此事实上不必处理太大的 N 值。对前述正方格子的零级近似总频谱分布曲线,取 $N \leq 40$ 就可得到收敛得很好的结果。计算机给出的 $N = 40$ 和 200 的两种频谱分布之间差别很小。

表面物理向理论提出了半无限晶体问题。相变过程中的微区现象以及近代陶瓷工艺微晶粉料性质的研究向理论提出了一个粒子数不太多的有限大小的微晶体问题。关于晶体的动力学性质研究的各种散射实验手段正在逼近声子模的具体花样问题。这里只提出了一个解决问题的初步方案从而探索可能得到的一些新结果。对于非完全自由的一些简单的具体边界条件,可以类似于 I1MO 理论处理聚合物高分子端基的方法,由改变边界矩阵 B 的元素来解决。

本工作得到中山大学高等学术研究中心的部份资助。

参 考 文 献

- [1] M. Born and K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, (1954).
- [2] R. Blinc and B. Zeks, *Soft Modes in Ferroelectrics and Anti-Ferroelectrics*, North-Holland, (1974).
- [3] C. N. R. Rao and K. J. Rao, *Phase Transitions in Solids*, India, (1978).
- [4] E. B. Wilson and P. C. Cross, *Molecular Vibrations*, (1955).
- [5] Li Jingde, *Ferroelectrics Lett.*, 2(1984), 59.
- [6] Li Jingde, *Chinese Phys. Lett.* 2(1985), 465.
- [7] 李景德, 中山大学学报(自然科学版), (2)(1986), 58.
- [8] E. Hückel, *Z. Physik*, 70(1931), 204; *ibid.*, 72(1931), 310; *ibid.*, 76(1932), 628.
- [9] 李景德, 物理学报, 22(1966), 188.
- [10] Y. Yamada and T. Yamada, *J. Phys. Soc. Japan*, 21(1966), 2167.
- [11] E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam, *Collected Papers of Enrico Fermi*, Vol. II, University of Chicago Press, (1965), p. 978.
- [12] E. W. Kellermann, *Phil. Trans. Roy. Soc.*, 238(1940), 513; *Proc. Roy. Soc.*, A178(1941), 17.

BOUNDARY COUPLING EFFECTS OF LATTICE VIBRATION IN ACOUSTIC BRANCH

LI JING-DE

(Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou)

ABSTRACT

Taking account of two- and three-body interaction of the nearestneighbours, the acoustic modes of $N \times N$ square lattice is solved in harmonic approximation. The boundary coupling effect leads to physical pictures of phonons different from those in infinite lattice. The standing wave phonons can only be classified according to space species, and the wave vector losses it's sense. Numerical computation shows that the strengthening of the covalent property leads to appearance of a boundary coupling soft mode. The modes related to rotation, inner-rotation, C/I structure, and surface wave phonon are also given. The phonon spectrum of finite lattice extends to the lower and higher end. The effects in three dimensions are also considered.