

晶格动力学中的波矢表象

李景德 蒋志洁

(中山大学物理学系)

摘要 相应于键长、键角和二面角相互作用分别引进力系数 f , h 和 g , 写出了具有氯化钠结构晶格的振动方程。提出波矢表象的概念以说明循环和自由边界条件之间的相互关系。这两个条件导致振动频谱的重大差别, 特别是在其低频部份。但两个条件给出的最大频率不变。对于不同的力常数值, 给出了一些数字计算结果。

关键词 晶格动力学, 波矢量, 内坐标, 布里渊区, 声子频谱

1 简谐近似和内坐标

在晶格动力学中通常将恢复力系数表示为晶格总能量对振动位移的二次偏微商, 这种方法不能给出真正的简谐近似^[1]。真正的简谐近似要用独立内坐标来定义力系数。一个束缚原子体系的独立内坐标为近邻键长、键角和二面角^[2]。引入键长力系数 f , 键角力系数 h 和二面角力系数 g , 可以写出简单立方结构单原子体系的振动方程^[3]。下面将方程推广到氯化钠结构 AB 型双原子体系。常见的 AB 型晶体有130多种, 其中具有氯化钠结构的超过半数。这种推广具有重要的现实意义。此外, 由真正的简谐近似方程出发, 可以清楚地说明用传统的循环边界条件和用自由边界条件^[4]所得到的结果的差别以及两者之间的关系。

在氯化钠结构晶体中, 最近邻键长力系数只有一个独立的 f 。图1的 P_1, P_2, P_3 和 P_4 是晶体中近邻4个原子的共面的平衡位置; 若 P_1 和 P_4 位置为 A 原子, 则 P_2 和 P_3 位置为 B 原子。 $P_1P_2P_3P_4$ 为一正方形, 其边长等于晶体中的最近邻距 a 。只有原子沿垂直于正方形平面的位移运动才能引起二面角的变化。例如当4个原子位移至 P'_1, P'_2, P'_3 和 P'_4 点时, 二面角的变化可用有向线段 $\overrightarrow{O'O''}$ 衡量; 其中, $P'_1P'_2P'_4P'_3$ 共面, $P'_1P'_2P'_4P''_3$ 也共面。图中 F_1, F_2, F_3, F_4 为由于二面角变化而产生的恢复力。二面角恢复力是一种四体相互作用力, 这4个力的合力和总力矩都应等于零。因此由结构对称性得到

$$F_1 = F_4 = -F_2 = -F_3 \quad (1)$$

本文1991年11月18日收到

上式表明无论对于A原子或B原子,二面角力系数 g 相等。类似地可以证明,由于氯化钠结构的对称性,键角力系数也只有一个参数 h ,而不论角点上出现的是A原子或B原子。因此,氯化钠结构晶体和简单立方结构单原子晶体类似,均只有3个独立的力系数(f, h, g)。从而可以直接由后者的振动方程写出氯化钠结构晶体中第 $(\alpha\beta\gamma)$ 个原子的振动位移 x 分量的牛顿方程为^[3]

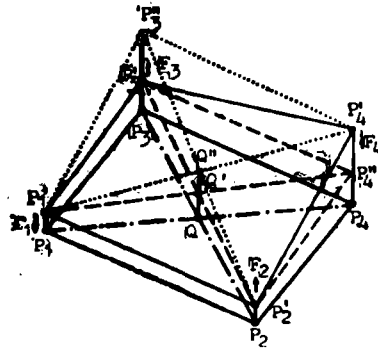


图1 二面角力系数
Fig.1 The force constant of dihedral angle

$$\begin{aligned}
 m_{\alpha\beta\gamma} \ddot{x}_{\alpha\beta\gamma} = & \sum_{\alpha'} f a^2 (x_{\alpha'\beta\gamma} - x_{\alpha\beta\gamma}) \\
 & + \sum_{\alpha'\beta'} h a^2 [(x_{\alpha\beta'\gamma} - x_{\alpha'\beta\gamma}) + (y_{\alpha'\beta\gamma} - y_{\alpha\beta'\gamma})(\alpha' - \alpha)(\beta' - \beta)] \\
 & + \sum_{\alpha'\gamma'} h a^2 [(x_{\alpha\beta\gamma'} - x_{\alpha'\beta\gamma}) + (z_{\alpha'\beta\gamma} - z_{\alpha\beta\gamma'})(\alpha' - \alpha)(\gamma' - \gamma)] \\
 & + \sum_{\beta'\gamma'} g a^2 [(x_{\alpha\beta'\gamma} + x_{\alpha\beta\gamma'}) - (x_{\alpha\beta\gamma} + z_{\alpha\beta'\gamma'})] \quad (2)
 \end{aligned}$$

其中, $(\alpha + \beta + \gamma) =$ 奇数的原子称为奇位原子,其质量 $m_{\alpha\beta\gamma} = m_-$; $(\alpha + \beta + \gamma) =$ 偶数的偶位原子的质量为 $m_{\alpha\beta\gamma} = m_+$ 。

类似于(2)式,用轮换方法可以得到第 $(\alpha\beta\gamma)$ 个原子的 y 和 z 位移分量的振动方程。由于采用了最近邻距 a 为长度单位,故原子的平衡位置矢量 $\vec{r} = (\alpha, \beta, \gamma)$ 。

2 氯化钠结构的稳定性

晶体结构稳定的必要条件为所有简谐振动频率均为正值,频率等于零的3个平移模和3个旋转模例外。下面首先按传统方法附加循环边界条件进行讨论。这时利用平移群理论可以引入波矢量 $\vec{q} = (\xi, \zeta, \eta)$ 。定义记号

$$\begin{aligned}
 \text{令} \quad & \begin{cases} H = h/f, & G = g/f, & E = \sqrt{m_+ + m_-} \omega^2 / f a^2, \\ M = \sqrt{m_- / m_+}, & M_{\alpha\beta\gamma} = 1/M (\text{奇位}), \text{ 或 } M (\text{偶位}) \end{cases} \\
 & \begin{cases} x_{\alpha\beta\gamma} = (A_{\alpha\beta\gamma} / \sqrt{m_{\alpha\beta\gamma}}) \exp i(-\omega t - 2\pi \vec{q} \cdot \vec{r}), \\ y_{\alpha\beta\gamma} = B_{\alpha\beta\gamma} / \sqrt{m_{\alpha\beta\gamma}} \dots, & z_{\alpha\beta\gamma} = C_{\alpha\beta\gamma} / \sqrt{m_{\alpha\beta\gamma}} \dots \end{cases}
 \end{aligned}$$

则(2)式可写为

$$\begin{aligned}
 E A_{\alpha\beta\gamma} = & \sum_{\alpha'} [M_{\alpha\beta\gamma} A_{\alpha\beta\gamma} - A_{\alpha'\beta\gamma} \exp 2\pi \xi i (\alpha - \alpha')] \\
 & + \sum_{\alpha'\beta'} H \{ A_{\alpha'\beta\gamma} \exp 2\pi \xi i (\alpha - \alpha') - A_{\alpha\beta'\gamma} \exp 2\pi \zeta i (\beta - \beta') \\
 & + [B_{\alpha\beta'\gamma} \exp 2\pi \zeta i (\beta - \beta') - B_{\alpha'\beta\gamma} \exp 2\pi \xi i (\alpha - \alpha')] (\alpha' - \alpha) (\beta' - \beta) \}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\alpha'\gamma'} H \{ A_{\alpha'\beta\gamma} \exp 2\pi\xi i(\alpha - \alpha') - A_{\alpha\beta\gamma'} \exp 2\pi\eta i(\gamma - \gamma') \\
& + [C_{\alpha\beta\gamma'} \exp 2\pi\eta i(\gamma - \gamma') - C_{\alpha'\beta\gamma} \exp 2\pi\xi i(\alpha - \alpha')] (\alpha' - \alpha) (\gamma' - \gamma) \} \\
& + \sum_{\beta',\gamma'} G \{ M_{\alpha\beta\gamma} A_{\alpha\beta\gamma'} + M_{\alpha\beta\gamma'} A_{\alpha\beta\gamma} \exp 2\pi i [(\beta - \beta')\zeta + (\gamma - \gamma')\eta] \\
& - A_{\alpha\beta'\gamma} \exp 2\pi\zeta i(\beta - \beta') - A_{\alpha\beta\gamma'} \exp 2\pi\eta i(\gamma - \gamma') \} \quad (3)
\end{aligned}$$

类似地用轮换方法可以写出关于 $B_{\alpha\beta\gamma}$ 和 $C_{\alpha\beta\gamma}$ 的方程。

氯化钠结构的单位晶胞中只有两个原子，故可取 $(A_{111}, B_{111}, C_{111}, A_{112}, B_{112}, C_{112})$ 为(3)式中的独立变量。由(3)式可解出本征值

$$\begin{aligned}
E = & [(1/M) + M][1 + 2G(1 + \cos 2\pi\zeta \cos 2\pi\eta)] \pm \{ [(1/M) + M]^2 \\
& [1 + 2G(1 + \cos 2\pi\zeta \cos 2\pi\eta)]^2 - 4[1 + 2G(1 + \cos 2\pi\zeta \cos 2\pi\eta)]^2 \\
& + [(8H - 2)\cos 2\pi\xi - 4(H + G)(\cos 2\pi\zeta + \cos 2\pi\eta)]^2 \}^{1/2} \quad (4)
\end{aligned}$$

注意到 $(1/M) + M \geq 2$ ，(4)式给出的 E 为正值的条件为

$$[1 + 2G(1 + \cos 2\pi\zeta \cos 2\pi\eta)]^2 > [(4H - 1)\cos 2\pi\xi - 2(H + G)(\cos 2\pi\zeta + \cos 2\pi\eta)]^2 \quad (5)$$

对于平移模， $\xi = \zeta = \eta = 0$ ，这时(5)式取等号。由于二面角恢复力通常都很小，故恒有 $G \ll H$ 。若略去 G ，则(5)式给出结构稳定的条件变为

$$[(4H - 1)\cos 2\pi\xi - 2H(\cos 2\pi\zeta + \cos 2\pi\eta)]^2 < 1 \quad (6)$$

上式左边可能的最大值出现于 $\cos 2\pi\xi = 1$ ， $\cos 2\pi\zeta = \cos 2\pi\eta = -1$ ；结构稳定条件要求

$$0 < H < 1/4 \quad (7)$$

上式中的 $H > 0$ 是恢复力系数按定义为正值所要求的。

注意公式(5)至(7)中不含有 M ，故当 $M = 1$ 时也可应用。若 $M = 1$ ，则方程(2)和简单立方结构单原子体系振动方程相同；而在自由边界条件下结构稳定的条件为^[3]

$$0 < H < 0.1360 \quad (8)$$

因此，循环边界条件的引入导致失去了 $0.1360 < H < 0.2500$ 范围以内的所有软模。

3 波矢表象

前面讨论的引用循环边界条件的氯化钠结构型的平移基矢为 $(0, 1, 1)$ ， $(1, 0, 1)$ ， $(1, 1, 0)$ ；倒易基矢为 $(-1/2, 1/2, 1/2)$ ， $(1/2, -1/2, 1/2)$ ， $(1/2, 1/2, -1/2)$ ；第一布里渊区的体积为 $1/2$ 。在特殊情况下若原子 A 等同于原子 B ，上述各种结果也应成立。但这时每个氯化钠型结构单胞中含有两个相同的原子；称将上述方法用于简单立方单原子体系时为采用 $\tilde{q}(2)$ 波矢表象。直接处理这种单原子体系时，通常采用的是 $\tilde{q}(1)$ 表象；相应的平移基矢为 $(1, 0, 0)$ ， $(0, 1, 0)$ ， $(0, 0, 1)$ ；倒易基矢为 $(1, 0, 0)$ ， $(0, 1, 0)$ ， $(0, 0, 1)$ 。在 $\tilde{q}(1)$ 表象中每个单胞中含有1个原子，第一布里渊区体积等于1。

类似地还可取包含8个原子的正立方体为上述单原子体系的结构单元，平移基矢为 $(2, 0, 0)$ ， $(0, 2, 0)$ ， $(0, 0, 2)$ ；相应于 $\tilde{q}(8)$ 表象，第一布里渊区的体积等于 $1/8$ 。图2给出了 $\tilde{q}(1)$ ， $\tilde{q}(2)$ ， $\tilde{q}(8)$ 表象的第一布里渊区的第一象限的部份，

Γ 为3个布里渊区的共同的中心。图中粗实线给出 $\vec{q}(1)$ 的布里渊区的边界。过 ΓL 连线中点 M 的平面 $ABCDEF$ 是 $\vec{q}(2)$ 表象布里渊区的边界,这个平面恰好将粗实线正立方体削去了一半。图中的点线给出 $\vec{q}(8)$ 表象的第一布里渊区,由图2可见, $\vec{q}(N)$ 表象的结构单元体积增大至 N 倍,而布里渊区的体积缩小至 $1/N$ 。

公式(4)给出单原子体系($M=1$)在 $\vec{q}(2)$ 表象解出的本征值;公式中的正号相应于光学支,负号为声学支;按沿 x, y, z 不同偏振区分,共有3个光学支和3个声学支。当 $M=1$ 时(4)式可简化为

$$E = [2 + 4G(1 + \cos 2\pi\zeta \cos 2\pi\eta)] \pm |(8H - 2)\cos 2\pi\xi - 4(H + G) \cdot (\cos 2\pi\zeta + \cos 2\pi\eta)| \quad (9)$$

上式给出的模的偏振平行于 x 轴,将 $(\xi \zeta \eta)$ 轮换可由(9)式得出 y 和 z 偏振的模的本征值公式。

如果在 $\vec{q}(1)$ 表象解方程(3),则因结构单元中只含一个原子,故可取 $(A_{111}, B_{111}, C_{111})$ 为独立变量。类似于(4)式可得 x 偏振的模的本征值为

$$E = [2 + 4G + 4G\cos 2\pi\zeta \cos 2\pi\eta] + [(8H - 2)\cos 2\pi\xi - 4(H + G)(\cos 2\pi\zeta + \cos 2\pi\eta)] \quad (10)$$

将上式中的 $(\xi \zeta \eta)$ 轮换即得到 y 和 z 偏振的模的本征值。在 $\vec{q}(1)$ 表象的解只给出3个声学支,没有光学支。注意 $\vec{q}(1)$ 表象的(10)式中的波矢 (ξ, ζ, η) 取值遍布体积为1的布里渊区,而 $\vec{q}(2)$ 表象的波矢只限于体积为 $1/2$ 的布里渊区;参阅图2。故(10)和(9)式给出的本征值有一一对应关系。这种关系确定了 $\vec{q}(1)$ 表象和 $\vec{q}(2)$ 表象的波矢量相关,类似于点群理论中的空间对称型相关。 $\vec{q}(1)$ 表象中的两个波矢在 $\vec{q}(2)$ 表象合并为一个;而在 $\vec{q}(1)$ 表象的一支声子模在 $\vec{q}(2)$ 表象分裂为两支。

类似地,当 $M=1$ 时在 $\vec{q}(8)$ 表象也可解方程(3);并且可以证明这样得到的本征值谱也和 $\vec{q}(1)$ 表象的结果重合。但这时的布里渊区体积缩小至 $\vec{q}(1)$ 表象布里渊区体积的 $1/8$,而声子分支的数目增大至 $3 \times 8 = 24$ 。

考虑一个极限情况,设晶体由 $N_1 \times N_2 \times N_3$ 个原子组成,则在 $\vec{q}(N_1 N_2 N_3)$ 表象的第一布里渊区缩小为一个点 $\vec{q} = 0$,而本征值谱则分为 $3N_1 N_2 N_3$ 支,每支只有一个模。并且在不同的 \vec{q} 表象解得的本征值谱均相同。在 $\vec{q}(N_1 N_2 N_3)$ 表象的方程(3)可写为本征方程的形式

$$EP = \hat{E}P \quad (11)$$

其中, P 为以 $(A_{111}, B_{111}, C_{111}, A_{112}, \dots, C_{N_1 N_2 N_3})$ 为元素的列矩阵, \hat{E} 为 $3N_1 N_2 N_3 \times 3N_1 N_2 N_3$ 力系数矩阵。称 P 为声子模矢量。前面证明了矩阵 \hat{E} 的本征值等同于通常在 $\vec{q}(1)$ 表象解出的声子本征值。

注意 \vec{q} 表象的使用前提为引入了附加的循环边界条件。这相当于认为例如第 $(\alpha=1,$

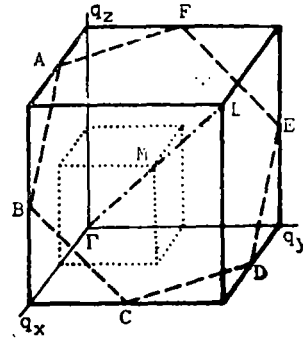


图2 不同 \vec{q} 表象中的布里渊区
Fig.2 The Brillouin zone of various \vec{q} representations

β, γ) 个原子和第 ($\alpha = N_1, \beta, \gamma$) 个原子如同互为最近邻一样具有各种键长力, 键角力和二面角力相互作用。将这些人为附加的而事实上并不存在的力对 \hat{E} 的贡献部分记为矩阵 \hat{B} , 令 $\hat{F} = \hat{E} - \hat{B}$, 则由本征方程

$$\hat{F}Q = EQ \quad (12)$$

解出的 $E = \sqrt{m_+ m_-} \Omega^2 / f a^2$ 才是晶体的真简谐振动本征值, 称 Q 为简谐子模矢量; Ω 是真简谐振动频率, 它不同于波矢表象中得出的声子频率 $\omega^{(3)}$ 。在(12)式中采用了自由边界条件以代替(11)式采用的循环边界条件。类似于(11)和(12)式关于单原子体系的讨论完全适用于氯化钠结构双原子体系。

由于(12)式的自由度很大, 所以过去只能附加循环边界条件代替为(11)式以便利用平移群理论在 \vec{q} 表象求解。至于方程(11)和(12)的解之间的差别到底有多大, 迄今是未解决的问题。近代计算机技术的发展使这个问题的解决有了可能。

4 数字计算结果

在常见的70多种具有氯化钠结构的AB型晶体中, M 值最小的是LiI ($M = 0.234$), 最大的是TaC ($M = 3.881$)。KCl的 M ($= 1.049$) 值较接近于1。图3~5给出的各种代号的曲线相应的理论参数列于表1。

表1 图3~5各曲线所用参数
Tab.1 The parameters of curves in Fig.3 to Fig.5

| 代码 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12* |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| M | 4.000 | 2.000 | 1.400 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 1.049 | 1.000 |
| H | 0.140 | 0.140 | 0.140 | 0.140 | 0.140 | 0.140 | 0.186 | 0.120 | 0.100 | 0.140 | 0.140 | 0.140 |
| G | 0.010 | 0.010 | 0.010 | 0.040 | 0.020 | 0.010 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.010 | 0 |
| E_m | 8.840 | 5.200 | 4.398 | 4.640 | 4.320 | 4.160 | 4.000 | 4.000 | 4.000 | 4.000 | 4.165 | 3.95 |

* 采用自由边界条件

图3~5给出的是归一化本征值分布函数 $\phi(E)$,

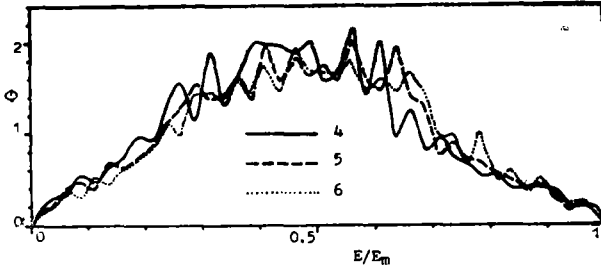
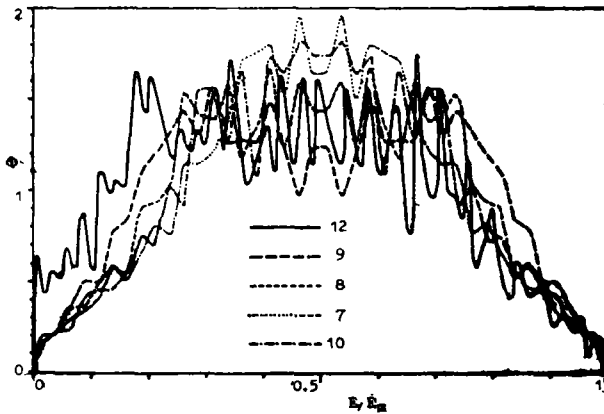
$$\int_0^{E_m} \phi(E) dE = 1 \quad (13)$$

E_m 为最大本征值, 计算结果给出于表1最下行。除曲线12外, 所有结果均采用 \vec{q} 表象计算。当引入循环边界条件时, 由(4)式可得到最大本征值

$$E_m = [(1/M) + M](2 + 8G) \quad (14)$$

上式表明在 \vec{q} 表象中 E_m 值和键角力系数 H 无关。

公式(14)和图3表明, 二面角力系数 G 的变化会影响 E_m 值以及分布函数 $\phi(E)$ 。由于 $G = g/f \ll 1$, 这种影响是不大的。因此, 为了比较 \vec{q} 表象和自由边界条件的结果的差别, 可以近似地令 $G = 0$ 。图4中的曲线7至10表明, 如果 $G = 0$, 则函数 $\phi(E)$ 对于 $E = E_m/2$ 两侧是对称的。但是用自由边界条件由(12)式解出的 $\phi(E)$ 却不具有这种对称性, 参见图4中的曲线12。

图3 不同 G 值的分布函数Fig.3 The distribution function of various values of G 图4 不同 H 值的分布函数Fig.4 The distribution function of various values of H

传统地认为方程(12)涉及自由度高达 10^{23} 的问题,因而无法求解。但事实并非如此。对于 $N_1 \times N_2 \times N_3$ 单原子体系,可以令 $N_j (j=1, 2, 3)$ 值由小到大解方程(12)。计算表明当 $N_j > 6$ 时得到的各种结果开始迅速地收敛。为得到足够精确的结果,只需处理10至12左右的 N_j 值^[3]。图4中的曲线12就是这样得出的稳定收敛的函数 $\phi(E)$ 。表1给出用自由边界条件这样得到的 E_m 值为3.95,它和用同样力系数由循环边界条件得到的结果($E_m = 4$)相差只有1%。因此可认为两种边界条件给出的 E_m 值是相同的。但另一方面,自由边界条件给出的曲线12和图4中用循环边界条件得到的其它4条曲线相比,前者的低频成份明显地增多了。这是一个十分重要的差别。公式(7)表明,循环边界条件容许 H 值增大至不超过0.25仍不会给出负的 E 值;图4中的曲线7用 $H = 0.180$,仍没有出现软模。而公式(8)表明,在自由边界条件下这样的结构是不稳定的。就是说因循环边界条件附加的事实上并不存在的相互作用 \hat{B} ,导致损失了晶格频谱中许多低频振动模,其中有些甚至是软模。因此,用 \hat{q} 表象来研究晶格振动的稳定性所得结果是不可靠的。

图5给出了 M 值对分布函数 $\phi(E)$ 的影响,图中只有曲线6采用了质量参数 $M = 1$,而其它4条曲线均有 $M \neq 1$ 。循环边界条件给出的公式(4)使得所有氯化钠结构AB型

双原子晶体（不可能有 $M = 1$ ）的振动频谱中，在光学支和声学支之间出现禁区。即使是曲线6采用了很接近于1的 $M (= 1.049)$ ，相当于KCl的情况）值，从图5可以看到它的 E 值禁区仍十分显著。图5表明， M 值偏离1越大，则频谱中出现的禁区越宽。NaCl和KCl等碱卤化合物晶体的振动频谱很早就被详细计算过^[3]，但未发现有类似禁区。这和计算中没有采用严格的简谐近似有关。过去的晶格动力学计算中经常都不是从独立内坐标来定义力系数，而这样得到的结果不是真正的简谐近似^[1]。值得注意的是在解真简谐近似振动方程（2）时，若不附加循环边界条件而是采用自由边界条件，则本征值谱中的上述禁区消失。

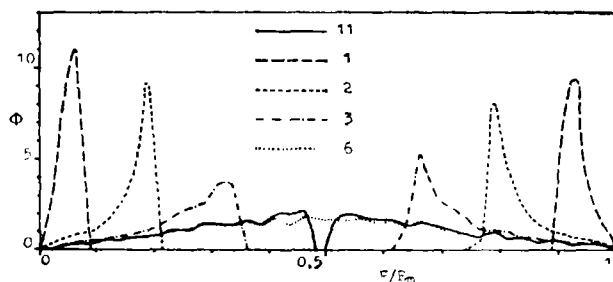


图5 不同 M 值的分布函数

Fig.5 The distribution function of various values of M

5 讨论

在凝聚态理论中通常用绝热近似将电子和原子实的运动分开考虑。处理电子的运动时将原子实设想为各种固定的骨架而用自洽场方法计算体系的总能量，由总能量为极小的条件确定体系的稳定结构。因此晶体的基态能量中包含有骨架的结构参数；其中的独立参数就是键长，键角和二面角。讨论原子实在其平衡位置作微小振动时利用这些独立的内坐标来定义恢复力系数，就已经包括了各种相互作用而不必考虑晶体的结构性质，例如是共价或离子性结构。只要绝热近似成立，用这样的力系数写出的晶格振动方程就可给出简谐独立模。晶体结构对称性将使独立的力系数个数减小，对于氯化钠结构只有3个独立力系数。这些力系数不难从各种有关的实验数据中求出。

波矢量表象这个概念的引入有两方面的意义。第一，由此可以清楚地说明循环边界条件和自由边界条件两者之间的关系；同时说明了后者比前者更为接近实际。第二，由波矢量表象证明了波矢量相关的规律；说明了对于晶体中的微观效应波矢不是一个好的量子数，因为它和结构单元的划分方式有关；与此相联系的是声子模分支的方法也不是绝对的。

利用循环边界条件和自由边界条件对同一个晶格振动方程的计算可以得出相同的最高振动频率；但两种条件给出的其他结果的差别是显著的。公式（7）和（8）表明前者可以使一个本来不稳定的结构成为稳定，因为它附加了和矩阵 B 相应的额外的作用力。前者使本征值分布函数 $\phi(E)$ 损失了大量的低频成份；这些低频成份的存在和体系的自由表面有关，循环边界条件使真实的体系失去了自由表面。可以预期， $\phi(E)$ 在低

频端出现的这种严重差别将会在晶体的低温性质有关的实验中反映出来。关于循环边界条件导致光学支和声学支之间出现禁区的问题和采用的振动方程的形式有关,尚须作进一步研究;但无论如何,这表明两种边界条件在频谱中段造成的差别也是显著的。图4中的曲线10和12采用的力系数相同而只是边界条件不同,可以看出它们的高频部彼此较为接近,当晶体足够大时其边界效应对振动频谱的高端影响较小。

参 考 文 献

- 1 Böttger H. Principles of the Theory of Lattice Dynamics. Physik Verlag, Weinheim, 1983
- 2 Wilson E B. Molecular Vibrations, New York: McGraw-Will, 1955
- 3 李景德, 陆夏莲, 李家宝. 中国科学, A, 1991(6): 614
- 4 Li Jingde. Ferroelectrics, 1990, 101:145
- 5 Kellermann E W. Phil Trans Roy Soc A, 1940, 238: 513

The Wave Vector Representations in Lattice Dynamics

Li Jingde Jiang Zhijie*

Abstract By representing bond length, bond angle, and dihedral angle interactions respectively with force constants f, h, g , the vibrational equations are given for a lattice having sodium chloride structure. The concept of wave vector representation is defined to explain the correlation between cyclic and free boundary conditions. The two conditions lead to important differences in vibrational frequency spectrum, particularly for its lower frequency part. But the maximum frequency given by the two conditions is invariant. Some numerical results for various values of force constants are given.

Keywords lattice dynamics, wave vector, internal coordinate, Brillouin zone, phonon spectrum

* Department of Physics, Zhongshan University