

ПРИБЛИЖЕНИЕ РЕШЕТОЧНЫХ СУММ В ДИНАМИКЕ КРИСТАЛЛОВ*Александр КЛЮКАНОВ, Александр КОЧЕМАСОВ, Денис НИКА**Молдавский государственный университет*

Предложена модель рассмотрения электрон-фононной системы кристалла как системы новых квазичастиц, где учитываются как электронные, так и фононные свойства системы. Выведен гамильтониан, описывающий эти квазичастицы, и на его основе получены элементы динамической матрицы в случае одноатомного кристалла. В отличие от классической теории показано, что зависимость динамической матрицы от векторов решетки является интегральной.

Ключевые слова: решеточные суммы, динамика кристаллов, электроны, фононы, теория возмущений, уравнения движения Гейзенберга, динамическая матрица.

APROXIMAȚIA SUMELOR DE REȚEA ÎN DINAMICA CRISTALELOR

În articol este propus un model, care consideră sistemul electron-fofonic al cristalului drept un sistem de cvasiparticule noi, în care sunt luate în considerare atât proprietățile electronice, cât și fononice ale sistemului. Este dedus hamiltonianul ce descrie aceste cvasiparticule și, în baza lui, sunt obținute elementele matricei dinamice în cazul cristalului monoatomic. Este demonstrat că, spre deosebire de teoria clasică, dependența matricei dinamice de vectorii de rețea este integrală.

Cuvinte-cheie: sume de rețea, dinamica cristalelor, electroni, fononi, teoria perturbațiilor, ecuații de mișcare Heisenberg, matrice dinamică.

LATTICE SUMS APPROXIMATION IN CRYSTAL DYNAMICS

A model describing an electron-phonon system of a crystal as a system of new quasiparticles, that takes into account both electron and phonon properties of the system, is proposed in this article. The corresponding Hamiltonian of quasiparticles is deduced and on its basis the dynamical matrix elements for a monoatomic crystal are obtained. It is demonstrated that unlike the classical theory the dependence of the dynamical matrix on the lattice vectors is integral.

Keywords: lattice sums, crystal dynamics, electrons, phonons, perturbation theory, Heisenberg equations of motion, dynamical matrix.

*Prezentat la 08.04.2014**Publicat: august 2014*