

Лекция №9

Оптические фононы.

Фононы в одномерном кристалле с двумя атомами в элементарной ячейке.

Предположим, что в одномерной решетке в каждой элементарной ячейке имеются два атома с массами m_1 и m_2 (**Рисунок**). Положение элементарных ячеек определяется вектором решетки $\mathbf{n} = n\mathbf{a}$. Смещения атомов из равновесных положений 0 и $\mathbf{a}/2$ в элементарной ячейке с вектором \mathbf{n} обозначим буквами $\xi_{n,1}$ и $\xi_{n,2}$. Кинетическая энергия отклонений атомов из равновесных положений имеет простой вид

$$K = \frac{1}{2} \sum_{n,\alpha} m_\alpha \dot{\xi}_{n,\alpha}^2, \quad \alpha = 1, 2. \quad (1)$$

В гармоническом приближении при учете взаимодействия только соседних атомов потенциальная энергия выражается квадратичной формулой

$$U = \frac{\gamma}{2} \sum_{n,\alpha} \left\{ 2(\xi_{n,1} - \xi_{n,2})^2 + (\xi_{n,1} - \xi_{n-\alpha,2})^2 + (\xi_{n,2} - \xi_{n+\alpha,1})^2 \right\}, \quad (2)$$

где γ - коэффициент, характеризующий силы взаимодействия. В качестве граничных условий выбираем равенства (циклические граничные условия):

$$\xi_{n,\alpha} = \xi_{n+Na,\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \quad (3)$$

где N - число ячеек в кристалле.

От смещений $\xi_{n,\alpha}$ удобно перейти к коллективным переменным $e_\alpha(\mathbf{k})A_{\mathbf{k}}$ с помощью соотношений:

$$\xi_{n,\alpha} = (m_\alpha N)^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e_\alpha(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}), \quad (4)$$

где $e_\alpha(\mathbf{k}) = e_\alpha(-\mathbf{k})$ - вещественные постоянные функции, подлежащие определению, \mathbf{k} - приведенный волновой вектор, принимающий N значений в первой зоне Бриллюэна. Из условия вещественности смещений $\xi_{n,\alpha}$ следует, что зависящие от времени обобщенные координаты должны удовлетворять условиям

$$A_{\mathbf{k}} = A_{-\mathbf{k}}^* .$$

Используя это обстоятельство и учитывая равенства

$$\frac{1}{N} \sum_n \exp\{in(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')\} = \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} . \quad (5)$$

после подстановки (4) в (1) и (2),получим:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} e_{\alpha}(\mathbf{k}) e_{\alpha}(\mathbf{k}) \dot{A}_{\mathbf{k}} \dot{A}_{-\mathbf{k}}, \quad U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_{\alpha}(\mathbf{k}) e_{\beta}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}}, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad (6)$$

где

$$D_{11}(\mathbf{k}) = 4\gamma / m_1, \quad D_{22}(\mathbf{k}) = 4\gamma / m_2, \quad (7)$$

$$D_{12}(\mathbf{k}) = D_{21}^*(-\mathbf{k}) = D_{21}^*(\mathbf{k}) = -\frac{2\gamma}{\sqrt{m_1 m_2}} (1 + \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}))$$

- матричные элементы силовой матрицы $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$.

Как и на предыдущей лекции, используя полученные выражения, составим функцию Лагранжа

$$L = K - U .$$

Тогда уравнения Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0, \quad q \equiv e_{\alpha}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}}^*,$$

примут вид:

$$e_{\alpha}(\mathbf{k}) \ddot{A}_{\mathbf{k}} + \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_{\beta}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} = 0 . \quad (8)$$

Эта система дифференциальных уравнений с помощью подстановки

$$\ddot{A}_{\mathbf{k}} = -\omega^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}}$$

преобразуется в систему линейных однородных алгебраических уравнений относительно неизвестных функций $e_{\alpha}(\mathbf{k})$

$$\omega^2(\mathbf{k})e_\alpha(\mathbf{k}) - \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})e_\beta(\mathbf{k}) = 0. \quad (9)$$

Условие разрешимости этой системы уравнений сводится к равенству нулю определителя

$$\left| D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) - \omega^2(\mathbf{k})\delta_{\alpha\beta} \right| = 0. \quad (10)$$

Используя далее явные выражения для компонент матрицы $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$, легко найти следующие два выражения для частоты $\omega^2(\mathbf{k})$ для каждого значения \mathbf{k}

$$\omega_s^2(\mathbf{k}) = 2\gamma \left[\frac{1}{\mu} + (-1)^s \sqrt{\frac{1}{\mu^2} - \frac{4}{m_1 m_2} \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2}} \right], \quad (11)$$

где $S = 1, 2$ и $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ - приведенная масса двух атомов.

Две различные функции определяют две различные ветви колебаний. При $\mathbf{k}\mathbf{a} \ll 1$ эти функции имеют вид:

$$\omega_1(\mathbf{k}) \approx \sqrt{\frac{4\gamma}{m_1 + m_2}} \left| \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \right| \approx \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \sqrt{\frac{4\gamma}{m_1 + m_2}}, \quad (12)$$

$$\omega_2(\mathbf{k}) \approx 2\sqrt{\frac{\gamma}{\mu}} \left[1 - \frac{2\mu}{m_1 + m_2} \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \right] \approx 2\sqrt{\frac{\gamma}{\mu}}.$$

Таким образом, видим, что вид функции $\omega_1(\mathbf{k})$ в пределе $\mathbf{k}\mathbf{a} \ll 1$ совпадает с видом, характеризующей частоты акустических волн с одним атомом в элементарной ячейке, если считать, что масса этого атома равна сумме масс $m_1 + m_2$. Поэтому $\omega_1(\mathbf{k})$ называется акустической ветвью колебаний. Функция $\omega_2(\mathbf{k})$ характеризует колебания, частоты которых не стремятся к нулю при приближении \mathbf{k} к центру зоны Бриллюэна. Они определяют оптическую ветвь колебаний. Характер общей зависимости этих функций изображен на **рисунке**.

Подставляя теперь найденные выражения для частот в уравнения (9), получим уравнение для определения функций $e_{\alpha S}(\mathbf{k})$

$$\omega_S^2(\mathbf{k})e_{\alpha S}(\mathbf{k}) - \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})e_{\beta S}(\mathbf{k}) = 0. \quad (13)$$

Решения, соответствующие разным S , ортогональны между собой. Эти решения определяются с точностью до постоянной, которая может быть найдена из условия нормировки

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha S}(\mathbf{k})e_{\alpha S'}(\mathbf{k}) = \delta_{SS'}. \quad (13a)$$

Используя уравнение (13) и явные выражения для элементов силовой матрицы $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$, придем к следующему выражению

$$\frac{e_{1S}(\mathbf{k})}{e_{2S}(\mathbf{k})} = \frac{4\gamma}{\sqrt{m_1 m_2} \left[\frac{4\gamma}{m_1} - \omega_S^2(\mathbf{k}) \right]}. \quad (14)$$

Отношение же амплитуд смещений в соответствии с (4) дается выражением

$$\left(\frac{\xi_{n1}(\mathbf{k})}{e_{n2}(\mathbf{k})} \right)_S = \frac{e_{1S}(\mathbf{k})}{e_{2S}(\mathbf{k})} \frac{\sqrt{m_1}}{\sqrt{m_2}}. \quad (15)$$

При малых $ka \ll 1$ отношение амплитуд смещений в акустической ветви колебаний

$$\left(\frac{\xi_{n1}(\mathbf{k})}{e_{n2}(\mathbf{k})} \right)_{ac} \approx 1 > 0,$$

то есть, атомы в одной элементарной ячейке колеблются в одном направлении. В оптической ветви колебаний имеем в том же приближении

$$\left(\frac{\xi_{n1}(\mathbf{k})}{e_{n2}(\mathbf{k})} \right)_{opt} \approx -\frac{m_2}{m_1} < 0.$$

Иными словами, в данном случае атомы совершают колебания в разных направлениях с амплитудами, обратно пропорциональными их массам. В ионных кристаллах в элементарную ячейку входят ионы с противоположными зарядами. Поэтому оптические колебания связаны с

большим изменением дипольного момента ячейки. Они определяют оптическое поведение кристалла в этой области частот. Последнее обстоятельство и оправдывает название этой ветви колебаний.

Перейдем теперь к квантованию рассмотренной системы. В соответствии с проанализированными решениями кинетическая и потенциальная энергии могут быть записаны в виде:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, S, S'} e_{\alpha S}(\mathbf{k}) e_{\alpha S'}(\mathbf{k}) \dot{A}_{\mathbf{k}S} \dot{A}_{-\mathbf{k}S'}, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad (16)$$

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, S, S'} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_{\alpha S}(\mathbf{k}) e_{\alpha S'}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}S} A_{-\mathbf{k}S'}.$$

С учетом формул (13) и (13а) эти выражения преобразуются к виду:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, S} \dot{A}_{\mathbf{k}S} \dot{A}_{-\mathbf{k}S}, \quad U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, S} \omega_S^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}S} A_{-\mathbf{k}S}. \quad (17)$$

Обобщенной координате $A_{\mathbf{k}S}$ соответствует обобщенный импульс $P_{\mathbf{k}S}$:

$$P_{\mathbf{k}S} = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_{\mathbf{k}S}} = \dot{A}_{-\mathbf{k}S}$$

Следовательно, классическая функция Гамильтона записывается в виде

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, S} \{P_{\mathbf{k}S} P_{-\mathbf{k}S} + \omega_S^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}S} A_{-\mathbf{k}S}\}. \quad (18)$$

Переход к квантовому оператору Гамильтона совершается заменой сопряженных координат и импульсов операторами

$$A_{\mathbf{k}S} \rightarrow \hat{A}_{\mathbf{k}S} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_S(\mathbf{k})}} \{\hat{b}_{\mathbf{k}S} + \hat{b}_{-\mathbf{k}S}^+\}, \quad P_{\mathbf{k}S} \rightarrow \hat{P}_{\mathbf{k}S} = i\sqrt{\frac{\omega_S(\mathbf{k})\hbar}{2}} \{\hat{b}_{\mathbf{k}S}^+ - \hat{b}_{-\mathbf{k}S}\}, \quad (19)$$

где операторы $\hat{b}_{\mathbf{k}S}$ и $\hat{b}_{\mathbf{k}S}^+$ удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[\hat{b}_{\mathbf{k}S}, \hat{b}_{\mathbf{k}'S'}^+] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{S, S'}, \quad [\hat{b}_{\mathbf{k}S}, \hat{b}_{\mathbf{k}'S'}] = 0 \quad (20)$$

в силу того обстоятельства, что операторы $\hat{A}_{\mathbf{k}S}$ и $\hat{P}_{\mathbf{k}S}$ удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{A}_{\mathbf{k}S}, \hat{P}_{\mathbf{k}'S'}] = i\hbar \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{S,S'}.$$

В соответствии с формулами (18) - (20) оператор Гамильтона может быть записан в привычном уже для нас виде

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},S} \hbar \omega_S(\mathbf{k}) \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}S}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}S} + \frac{1}{2} \right\}. \quad (21)$$

Оператор же смещений атомов дается выражением

$$\xi_{n,\alpha}^{(S)} = \sqrt{\frac{\hbar}{2Nm_\alpha}} \sum_{\mathbf{k},S} \frac{e_{\alpha S}(\mathbf{k})}{\sqrt{\omega_S(\mathbf{k})}} \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}S} + \hat{b}_{-\mathbf{k}S}^+ \right\} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}).$$

Фононы в трехмерном кристалле

Для простоты рассмотрим одноатомные кристаллы. Пусть m - масса атома и $r_{n\alpha}$ ($\alpha=1,2,3$) - три компоненты вектора смещения атома из узла ячейки, определяемой вектором \mathbf{n} . Тогда кинетическая энергия смещений атомов из положения равновесия выразится через скорости $\dot{r}_{n\alpha}$ смещений формулой

$$K = \frac{m}{2} \sum_{\mathbf{n},\alpha} \dot{r}_{n\alpha}^2, \quad (\alpha=1,2,3). \quad (22)$$

В трехмерном кристалле число соседей у каждого атома растет пропорционально квадрату расстояния. Поэтому обычно нельзя ограничиваться учетом взаимодействия только между ближайшими соседями. В соответствии с этим запишем потенциальную энергию кристалла в гармоническом приближении в виде:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n},\alpha;\mathbf{m},\beta} V_{\alpha\beta}(\mathbf{n}-\mathbf{m}) r_{n\alpha} r_{m\beta}, \quad (23)$$

где компоненты тензора второго ранга $V_{\alpha\beta}(\mathbf{n}-\mathbf{m})$ удовлетворяют условиям

$$V_{\alpha\beta}(\mathbf{n}-\mathbf{m}) = V_{\beta\alpha}(\mathbf{m}-\mathbf{n}), \quad \sum_{\mathbf{n}} V_{\alpha\beta}(\mathbf{n}-\mathbf{m}) = 0. \quad (24)$$

Последнее равенство следует из того обстоятельства, что равна нулю суммарная сила, действующая на отдельный атом со стороны всех остальных

атомов, если она обусловлена переносом всего кристалла как целого. В самом деле,

$$F_{m\beta} = -\frac{\partial U}{\partial r_{m\beta}} = -\sum_{\mathbf{n}, \alpha} V_{\alpha\beta} (\mathbf{n} - \mathbf{m}) r_{n\alpha}.$$

При смещении кристалла как целого, $r_{n\alpha} = c_\alpha$ (смещение не зависит от номера узла!), имеем

$$F_{m\beta} = -\sum_{\mathbf{n}, \alpha} V_{\alpha\beta} (\mathbf{n} - \mathbf{m}) c_\alpha.$$

Но, поскольку при таком смещении должно быть $F_{m\beta} = 0$, то мы должны приравнять нулю коэффициенты при каждой компоненте вектора c_α , откуда и получим второе из условий (24).

Используя далее циклические граничные условия и предположив, что в основной области кристалла имеется N элементарных ячеек, перейдем к коллективным переменным $A_{\mathbf{k}} = A_{-\mathbf{k}}^*$, как неоднократно нами уже делалось, при помощи канонических преобразований:

$$r_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{Nm}} \sum_{\mathbf{k}} e_\alpha(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}), \quad (\alpha = 1, 2, 3), \quad (25)$$

где $e_\alpha(\mathbf{k}) = e_\alpha(-\mathbf{k})$ - вещественные постоянные, которые будут определены ниже. Унитарность преобразований обеспечивается условиями:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{n}] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp[i(\mathbf{n} - \mathbf{m})\mathbf{k}] = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{m}},$$

где суммирование производится по всем N векторам решетки \mathbf{n} и по всем N волновым векторам из первой зоны Бриллюэна. После соответствующих преобразований получаем

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} e_\alpha(\mathbf{k}) e_\alpha(\mathbf{k}) \dot{A}_{\mathbf{k}} \dot{A}_{-\mathbf{k}}, \quad U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_\alpha(\mathbf{k}) e_\beta(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}}, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad (26)$$

где

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = D_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k}) = D_{\alpha\beta}^*(-\mathbf{k}) = \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{n}} V_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}) \quad (27)$$

- элементы силовой матрицы.

Как и ранее, введем функцию Лагранжа $L = K - U$. Тогда уравнения Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0, \text{ при } q \equiv e_\alpha(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}},$$

принимают вид

$$e_\alpha(\mathbf{k}) \ddot{A}_{\mathbf{k}} + \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_\beta(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} = 0. \quad (28)$$

С помощью подстановки

$$\ddot{A}_{\mathbf{k}} = -\omega(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}}$$

эти дифференциальные уравнения преобразуются к алгебраической системе трех уравнений относительно трех неизвестных $e_\alpha(\mathbf{k})$:

$$\omega^2(\mathbf{k}) e_\alpha(\mathbf{k}) - \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_\beta(\mathbf{k}) = 0. \quad (29)$$

Из условия нетривиальной разрешимости этих уравнений следует дисперсионное уравнение

$$\left\| \omega^2(\mathbf{k}) \delta_{\alpha\beta} - D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \right\| = 0, \quad (30)$$

определяющее частоты $\omega(\mathbf{k})$ для каждого значения \mathbf{k} .

Это уравнение имеет три корня $\omega_s^2(\mathbf{k})$ ($s = 1, 2, 3$). Соответственно имеется три вектора $e_\alpha^{(s)}(\mathbf{k})$. Эти векторы взаимно ортогональны и определяются из уравнений (29) с точностью до константы, которая может быть определена из условия

$$\sum_{\alpha} e_\alpha^{(s)}(\mathbf{k}) e_\alpha^{(s')}(\mathbf{k}) = \delta_{ss'}.$$

При $\mathbf{k} \rightarrow 0$ матричные элементы $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ в соответствии с (24), (27) стремятся к нулю. Поэтому предельные значения всех трех частот стремятся к нулю при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Эти ветви называются тремя ветвями акустических колебаний.

В кристаллах кубической сингонии один из векторов $\mathbf{e}^{(s)}(\mathbf{k})$ направлен вдоль \mathbf{k} . Соответствующие колебания называются продольными. Двое других векторов перпендикулярные между собой и перпендикулярные \mathbf{k} .

Они определяют ветви поперечных колебаний. В изотропном кристалле частоты $\omega_s(\mathbf{k})$ не зависят от направления \mathbf{k} . При этом две ветви поперечных колебаний имеют одинаковые частоты $\omega_t(k)$ для каждого k . Частота продольных колебаний $\omega_l(k)$ обычно выше частот поперечных колебаний. В анизотропных кристаллах три решения $e_\alpha^{(s)}(\mathbf{k})$ взаимно ортогональны, однако только для некоторых выделенных направлений в кристалле один из векторов направлен вдоль \mathbf{k} .

В соответствии с тремя решениями $e_\alpha^{(s)}(\mathbf{k})$ системы уравнений (29), компоненты смещения атомов в кристалле будут определяться тремя коллективными переменными $A_{\mathbf{k}}$ для каждого вектора \mathbf{k} с помощью выражения

$$r_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, S} e_\alpha^{(S)}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}S} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}), \quad S = 1, 2, 3. \quad (31)$$

Кинетическая и потенциальная энергии колебаний могут быть преобразованы к виду:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, S} \dot{A}_{\mathbf{k}S} \dot{A}_{-\mathbf{k}S}, \quad \dot{A}_{\mathbf{k}S} = -i\omega_S(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}S}, \quad U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, S} \omega_S^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}S} A_{-\mathbf{k}S}. \quad (32)$$

Обобщенные импульсы $P_{\mathbf{k}S}$, сопряженные обобщенным координатам $A_{\mathbf{k}S}$, определяются равенством

$$P_{\mathbf{k}S} = \frac{\partial}{\partial \dot{A}_{\mathbf{k}S}} (K - U) = \dot{A}_{-\mathbf{k}S}.$$

Выражая в (32) скорости через импульсы, находим классическую функцию Гамильтона

$$H = K + U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, S} [P_{\mathbf{k}S} P_{-\mathbf{k}S} + \omega_S^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}S} A_{-\mathbf{k}S}]. \quad (33)$$

Переход к квантовому оператору Гамильтона осуществляется заменой обобщенных координат и импульсов операторами:

$$A_{\mathbf{k}S} \rightarrow \hat{A}_{\mathbf{k}S} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_S(\mathbf{k})}} (\hat{b}_{\mathbf{k}S} + \hat{b}_{-\mathbf{k}S}^+), \quad P_{\mathbf{k}S} \rightarrow \hat{P}_{\mathbf{k}S} = i\sqrt{\frac{1}{2}\hbar\omega_S(\mathbf{k})} (\hat{b}_{\mathbf{k}S}^+ - \hat{b}_{-\mathbf{k}S}), \quad (34)$$

где $\hat{b}_{\mathbf{k}S}^+$ и $\hat{b}_{\mathbf{k}S}$ -операторы рождения и уничтожения фононов в состояниях $|\nu_{\mathbf{k}S}\rangle$, характеризующих число фононов каждой ветви колебаний. Они введены таким образом, чтобы удовлетворялись коммутационные соотношения для бозонов

$$[\hat{b}_{\mathbf{k}S}, \hat{b}_{\mathbf{k}'S'}^+] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{S,S'}, \quad [\hat{b}_{\mathbf{k}S}, \hat{b}_{\mathbf{k}'S'}] = 0. \quad (35)$$

В терминах введенных операторов гамильтониан системы и оператор смещения атомов обретают вид:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},S} \hbar \omega_S(\mathbf{k}) \left[\hat{b}_{\mathbf{k}S}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}S} + \frac{1}{2} \right], \quad (36)$$

$$\hat{r}_{n\alpha} = \sqrt{\frac{1}{2mN}} \sum_{\mathbf{k},S} \frac{e_{\alpha}^{(S)}(\mathbf{k})}{\sqrt{\omega_S(\mathbf{k})}} \left[\hat{b}_{\mathbf{k}S} + \hat{b}_{-\mathbf{k}S}^+ \right] \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}), \quad S = 1, 2, 3. \quad (37)$$

Таким же образом можно найти операторы других физических величин, если известны их выражения через обобщенные координаты и импульсы.

Колебания атомов в кристаллах проявляются в ряде явлений. В частности, при поглощении и испускании инфракрасного света, при неупругом рассеянии света видимых и инфракрасных частот (раман-эффект); при неупругом рассеянии нейтронов, при исследовании резонансного поглощения гамма-квантов ядрами атомов (эффект Мёссбауэра) и др. В разных явлениях проявляются разные ветви колебаний. Например, поглощение и испускание света связано с рождением и исчезновением фононов, соответствующих поперечным колебаниям, изменяющим электрический дипольный момент кристалла. Раман-эффект связан с фононами, соответствующим поперечным колебаниям атомов, изменяющим поляризуемость кристалла, рассеяние нейтронов связано с продольными фононами, которые вызывают локальные изменения плотности кристалла.