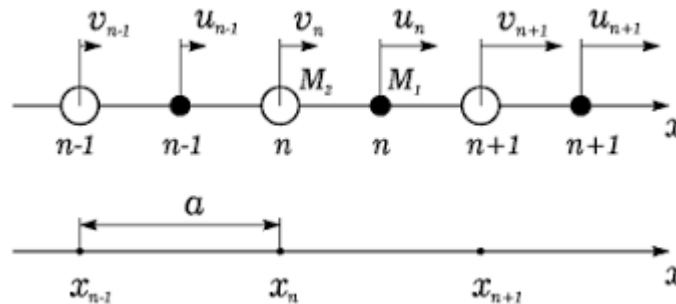


Лекція №9

Оптичні фонони.

Фонони в одновимірному кристалі з двома атомами в елементарній комірці.

Припустимо, що в одновимірній ґратці в кожній елементарній комірці є два атоми з масами M_1 і M_2



Положення елементарних комірок визначається вектором решітки $\mathbf{n} = n\mathbf{a}$. Зміщення атомів із рівноважних положень 0 та $\mathbf{a}/2$ в елементарній ґратці з вектором \mathbf{n} позначимо літерами $\xi_{n,1}$ та $\xi_{n,2}$. Кінетична енергія відхилень атомів із рівноважних положень має простий вигляд

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

У гармонічному наближенні при обліку взаємодії сусідніх атомів потенціальна енергія виражається квадратичною формулою

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

де β - коефіцієнт, що характеризує сили взаємодії. Як граничні умови вибираємо рівності (циклічні граничні умови):

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

де N - число комірок у кристалі.

Особливо звернемо увагу на ту обставину, що зміщення у кожному вузлі ґратки тепер є ще й двовимірним вектором. Завдяки цьому від зміщень $\xi_{n,\alpha}$ зручно перейти до колективних змінних $e_\alpha(\mathbf{k})A_{\mathbf{k}}$ за допомогою співвідношень:

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

де $e_\alpha(\mathbf{k}) = e_\alpha(-\mathbf{k})$ - двовимірні вектори, компоненти яких є дійсними постійними функціями, що підлягають визначенню, \mathbf{k} - приведений хвильовий вектор, що приймає N значень у першій зоні Бріллюена. З умови дійсності зміщень $\xi_{n,\alpha}$ витікає, що залежні від часу узагальнені координати повинні відповідати умовам

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

Використовуючи цю обставину та враховуючи рівності (відповідають умовам унітарності перетворень

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

після підстановки (4) в (1) і (2), отримаємо:

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

де

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

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

- матричні елементи так званої силової матриці $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$.

Як і на попередній лекції, використовуючи отримані вирази, складемо функцію Лагранжа

$$L = K - U.$$

Тоді рівняння Лагранжа

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

набувають вигляду:

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

Ця система диференціальних рівнянь за допомогою підстановки

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

перетворюється на систему лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь щодо невідомих функцій $e_{\alpha}(\mathbf{k})$

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

Умова розв'язності цієї системи рівнянь зводиться до рівності нулю визначника

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

Використовуючи далі явні вирази для компонентів матриці $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$, легко знайти наступні два вирази для частоти $\omega^2(\mathbf{k})$ для кожного значення \mathbf{k}

$$\omega_s^2(\mathbf{k}) = 2\beta \left[\frac{1}{\mu} + (-1)^s \sqrt{\frac{1}{\mu^2} - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2}} \right], \quad (11)$$

де $S = 1, 2$ і $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ - приведена маса двох атомів.

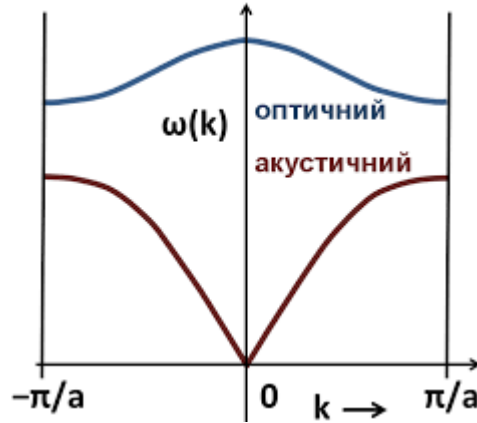
Дві різні функції визначають дві різні гілки коливань. При $\mathbf{k}\mathbf{a} \ll 1$ ці функції мають вигляд:

$$\omega_1(\mathbf{k}) \approx \sqrt{\frac{4\beta}{M_1 + M_2} \left| \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \right|} \approx \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \sqrt{\frac{4\beta}{M_1 + M_2}}, \quad (12)$$

$$\omega_2(\mathbf{k}) \approx 2\sqrt{\frac{\beta}{\mu}} \left[1 - \frac{2\mu}{M_1 + M_2} \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \right] \approx 2\sqrt{\frac{\beta}{\mu}}.$$

Таким чином бачимо, що вигляд функції $\omega_1(\mathbf{k})$ у границі $\mathbf{k}\mathbf{a} \ll 1$ збігається з виглядом, що характеризує частоти акустичних хвиль із одним атомом в елементарній комірці, якщо вважати, що маса цього атома дорівнює сумі мас $M_1 + M_2$. Тому $\omega_1(\mathbf{k})$ називається акустичною гілкою коливань. Функція

$\omega_2(\mathbf{k})$ характеризує коливання, частоти яких не прямують до нуля при наближенні \mathbf{k} до центру зони Бріллюена. Вони визначають оптичну гілку коливань. Характер загальної залежності цих функцій зображено на рисунку.



Підставляючи тепер знайдені вирази для частот у рівняння (9), отримаємо рівняння для визначення функцій $e_{\alpha S}(\mathbf{k})$

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

Розв'язки, що відповідають різним S , ортогональні між собою. Ці розв'язки визначаються з точністю до постійної, яка може бути знайдена з умов нормування

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

Використовуючи рівняння (13) та явні вирази для елементів силової матриці $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$, прийдемо до наступного виразу

$$\frac{e_{1S}(\mathbf{k})}{e_{2S}(\mathbf{k})} = \frac{4\beta}{\sqrt{M_1 M_2} \left[\frac{4\beta}{M_1} - \omega_S^2(\mathbf{k}) \right]}. \quad (14)$$

Відношення ж амплітуд зсувів відповідно до (4) дається виразом

$$\left(\frac{\xi_{n1}(\mathbf{k})}{\xi_{n2}(\mathbf{k})} \right)_S = \frac{e_{1S}(\mathbf{k})}{e_{2S}(\mathbf{k})} \frac{\sqrt{M_1}}{\sqrt{M_2}}. \quad (15)$$

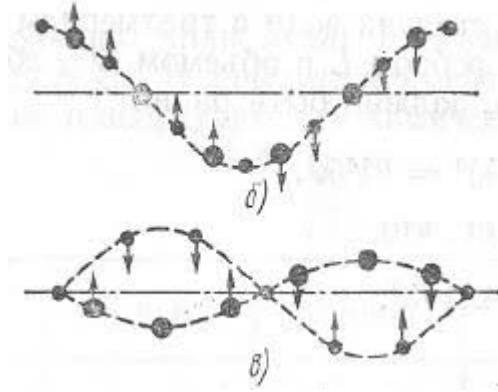
За малих $ka \ll 1$ відношення амплітуд зміщень в акустичній гілці коливань

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

тобто, атоми в одній елементарній комірці коливаються в одному напрямку. В оптичній гілці коливань маємо у тому ж наближенні

$$\left(\frac{\xi_{n1}(\mathbf{k})}{\xi_{n2}(\mathbf{k})} \right)_{opt} \approx -\frac{M_2}{M_1} < 0.$$

Інакше кажучи, у даному разі атоми здійснюють коливання в різних напрямках з амплітудами, зворотно пропорційними їх масам. В іонних кристалах до елементарної комірки входять іони з протилежними зарядами. Тому оптичні коливання пов'язані з великою зміною дипольного моменту комірки. Вони визначають оптичну поведінку кристала у цій гілці частот. Остання обставина і виправдовує назву цієї гілки коливань.



Перейдемо тепер до квантування розглянутої системи. Відповідно до проаналізованих розв'язків кінетична та потенціальна енергії можуть бути записані у вигляді:

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

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

З урахуванням формул (13) і (13а) ці вирази набувають вигляду:

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

Узагальненій координаті $A_{\mathbf{k}S}$ відповідає узагальнений імпульс $P_{\mathbf{k}S}$:

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

Отже, класична функція Гамільтон записується у вигляді

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

Перехід до квантового оператора Гамільтона відбувається заміною сполучених координат та імпульсів операторами

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

де оператори $\hat{b}_{\mathbf{k}S}$ і $\hat{b}_{\mathbf{k}S}^+$ задовольняють перестановним співвідношенням

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

через ту обставину, що оператори $\hat{A}_{\mathbf{k}S}$ і $\hat{P}_{\mathbf{k}S}$ задовольняють комутаційним співвідношенням

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

Відповідно до формул (18) - (20) оператор Гамільтона може бути записаний у звичному вже для нас вигляді

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

Оператор же зміщень атомів дається виразом

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

Фонони в тривимірному кристалі

Для простоти розглянемо одноатомні кристали. Нехай M - маса атома и $r_{n\alpha}$ ($\alpha=1,2,3$) - три компоненти вектора зміщення атома з вузла комірки, що визначається вектором \mathbf{n} . Тоді кінетична енергія зміщень атомів із положення рівноваги виразиться через швидкості $\dot{r}_{n\alpha}$ зміщень формулою

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

У тривимірному кристалі число сусідів кожного атома зростає пропорційно квадрату відстані. Тому зазвичай не можна обмежуватися врахуванням взаємодії лише між найближчими сусідами. Попарна взаємодія атомів у \mathbf{m} - му й \mathbf{n} вузлі кристалічної ґратки дається виразом:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{n,m} W(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m),$$

де сума по m і n вираховується за всіма вузлами кристалічної ґратки, $R_{n\alpha}$ - α - а компонента в декартовому просторі радіуса - вектора положення даного вузла. Якщо розглядати малі зміщення \mathbf{r}_n атома в n -му вузлі від його стану рівноваги \mathbf{R}_n^0

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^0 + \mathbf{r}_n, \quad |\mathbf{R}_n^0| \gg |\mathbf{r}_n|,$$

і врахувавши, що

$$W^0 = \frac{1}{2} \sum_{n,m} W(\mathbf{R}_n^0 - \mathbf{R}_m^0)$$

від зміщень не залежить і має фізичний сенс енергії соновного стану, а похідна

$$\left[\frac{\partial W(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)}{\partial R_{n\alpha}} \right]_{\substack{\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^0 \\ \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_m^0}} = 0,$$

оскільки мова йде про рівноважний стан, прийдемо до наступного виразу для потенціальної енергії кристалу в гармонічному наближенні:

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

де компоненти тензора другого рангу $V_{\alpha\beta}(\mathbf{n} - \mathbf{m})$, визначеного формулою

$$V_{\alpha\beta}(\mathbf{n} - \mathbf{m}) \equiv \left[\frac{\partial W(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)}{\partial R_{n\alpha} \partial R_{m\beta}} \right]_{\substack{\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^0 \\ \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_m^0}},$$

повинні задовольняти умови

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

Остання рівність впливає з тієї обставини, що дорівнює нулю сумарна сила, яка діє на окремий атом з боку інших атомів, якщо вона обумовлена перенесенням всього кристала як цілого. Справді,

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

При зміщенні кристала як цілого, $r_{n\alpha} = c_\alpha$ (зміщення не залежить від номера вузла!), маємо

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

Але, оскільки за такого зміщення має бути $F_{m\beta} = 0$, то ми повинні прирівняти коефіцієнти нулю при кожній компоненті вектора c_α , звідки й отримаємо другу з умов (24).

Використовуючи далі циклічні граничні умови і припустивши, що в основній області кристала є N елементарних комірок, перейдемо до колективних змінних $A_{\mathbf{k}} = A_{-\mathbf{k}}^*$, як неодноразово нами вже робилося, за допомогою канонічних перетворень:

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

де $e_\alpha(\mathbf{k}) = e_\alpha(-\mathbf{k})$ - дійсні постійні, які будуть визначені нижче. Унітарність перетворень забезпечується умовами:

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

де підсумовування здійснюється за всіма N векторами ґратки \mathbf{n} й за всіма N хвильовим векторам із першої зони Бріллюена. Після відповідних перетворень отримуємо

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

де

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

- елементи силової матриці.

Як і раніше, введемо функцію Лагранжа $L = K - U$. Тоді рівнянням Лагранжа

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

(тобто, вважаючи $q \equiv e_\alpha(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}}$ узагальненими координатами, а $\dot{q} \equiv e_\alpha(\mathbf{k}) \dot{A}_{\mathbf{k}}$ - узагальненими швидкостями) можна надати наступного вигляду

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

За допомогою підстановки

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

ці диференціальні рівняння перетворюються на алгебраїчну систему трьох рівнянь щодо трьох невідомих $e_\alpha(\mathbf{k})$:

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

З умови нетривіальної розв'язності цих рівнянь випливає дисперсійне рівняння

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

Яке визначає частоти $\omega(\mathbf{k})$ для кожного значення \mathbf{k} .

Це рівняння має три корені $\omega_S^2(\mathbf{k})$ ($S = 1, 2, 3$). Відповідно є три вектори $e_\alpha^{(S)}(\mathbf{k})$. Ці вектори взаємно ортогональні та визначаються з рівнянь (29) з точністю до константи, яка може бути визначена з умови повноти

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

При $\mathbf{k} \rightarrow 0$ матричні елементи $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ відповідно (24), (27) прямують до нуля. Тому граничні значення всіх трьох частот прямують до нуля при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Ці гілки називаються трьома гілками акустичних коливань.

У кристалах кубічної сингонії один із векторів спрямований уздовж \mathbf{k} . Відповідні коливання називаються поздовжніми. Двоє інших векторів перпендикулярні між собою та перпендикулярні \mathbf{k} . Вони визначають гілки

поперечних коливань. В ізотропному кристалі частоти $\omega_s(\mathbf{k})$ не залежать від напрямку \mathbf{k} . При цьому дві гілки поперечних коливань мають однакові частоти $\omega_l(k)$ для кожного k . Частота поздовжніх коливань $\omega_l(k)$ зазвичай вище частот поперечних коливань. В анізотропних кристалах три розв'язки $e_\alpha^{(s)}(\mathbf{k})$ взаємно ортогональні, проте тільки для деяких виділених напрямків у кристалі один із векторів спрямований уздовж \mathbf{k} .

Відповідно до трьох розв'язків $e_\alpha^{(s)}(\mathbf{k})$ системи рівнянь (29), компоненти зміщення атомів у кристалі будуть визначатися трьома колективними змінними $A_{\mathbf{k}}$ для кожного вектора \mathbf{k} за допомогою виразу

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

Кінетична та потенціальна енергії коливань можуть бути зведені до вигляду:

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

Узагальнені імпульси $P_{\mathbf{k}S}$, спряжені до узагальнених координат $A_{\mathbf{k}S}$, визначаються рівністю

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

Виражаючи в (32) швидкості через імпульси, знаходимо класичну функцію Гамільтона

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

Перехід до квантового оператора Гамільтона здійснюється заміною узагальнених координат та імпульсів операторами:

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

де $\hat{b}_{\mathbf{k}S}^+$ і $\hat{b}_{\mathbf{k}S}$ - оператори народження та знищення фононів у станах $|\nu_{\mathbf{k}S}\rangle$, характеризують число фононів кожної гілки коливань. Вони введені таким чином, щоб задовольнялися комутаційні співвідношення для бозонів

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

У термінах введених операторів гамільтоніан системи та оператор зміщення атомів набувають вигляду:

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

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

Так само можна знайти оператори інших фізичних величин, якщо відомі їх вираження через узагальнені координати та імпульси.

Коливання атомів у кристалах проявляються у ряді явищ. Зокрема, при поглинанні та випромінюванні інфрачервоного світла, при непружному розсіюванні світла видимих та інфрачервоних частот (раман-ефект); при непружному розсіюванні нейтронів, при дослідженні резонансного поглинання гамма-квантів ядрами атомів (ефект Мессбауера) та ін. У різних явищах проявляються різні гілки коливань. Наприклад, поглинання та випромінювання світла пов'язане з народженням та зникненням фононів, які відповідають поперечним коливанням, що змінює електричний дипольний момент кристала. Раман-ефект пов'язаний із фононами, відповідними поперечним коливанням атомів, що змінює поляризацію кристала, розсіювання нейтронів пов'язане з поздовжніми фононами, які викликають локальні зміни густини кристала.