

Фононы

19 марта 2018

Микроскопическая модель

Постановка задачи и модель

Из решения классической задачке о колебаниях атомов в одномерной решётке мы уже знаем множество свойств фононов. В частности, мы знаем о наличии акустических и оптических ветвей; последние отделены некоторой щелью в спектре $\omega_{opt}(\mathbf{k} = 0) = \omega_{opt} > 0$, и возникают только в случае наличия в элементарной ячейке более чем одного атома. Поскольку мы будем интересоваться низкоэнергетической физикой, то оптические ветви мы отбросим, и для простоты будем рассматривать модель с единственным атомом в элементарной ячейке.

Таким образом, пусть имеется трёхмерная кристаллическая решётка из N атомов с периодическими граничными условиями. Атомы мы будем нумеровать их положением в невозмущённой решётке $\mathbf{r}$, и их динамика определяется трёхмерными смещениями $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. В самом общем случае, потенциальная энергия является функцией всех компонент смещений всех атомов, то есть функцией $3N$ переменных вида $U \equiv U(\{\mathbf{u}(\mathbf{r})\})$. Считая смещения малыми, мы всегда можем записать:

$$U(\{\mathbf{u}(\mathbf{r})\}) \approx U(0) + \sum_{\mathbf{r}} \frac{\partial U}{\partial u_{\alpha}(\mathbf{r})} u_{\alpha}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\alpha}(\mathbf{r}) \partial u_{\beta}(\mathbf{r}')} u_{\alpha}(\mathbf{r}) u_{\beta}(\mathbf{r}') + \dots \quad (1)$$

($\alpha, \beta = (x, y, z)$ — пространственные индексы, по ним происходит суммирование). Первый член — некоторая статическая константа, и на динамику решётки никакого влияния не оказывает. Второй член пропадает, поскольку кристалл при нулевых смещениях находится в равновесии, и $\frac{\partial U}{\partial u_{\alpha}(\mathbf{r})} = 0$. Поэтому в ведущем — **гармоническом** — приближении остаётся лишь третий член. Введём следующее обозначение:

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\alpha}(\mathbf{r}) \partial u_{\beta}(\mathbf{r}')} \quad (2)$$

Полученный объект является тензором второго ранга (матрицей) по индексам α, β , и обладает следующими общими свойствами:

- Симметричность: $U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U_{\beta\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$.
- Зеркальная симметрия кристалла приводит к тому, что $U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$.
- Трансляционная инвариантность системы приводит к тому, что неважно какую пару атомов смещать — энергия зависит только от их относительного положения: $U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv U_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$
- Иным следствием трансляционной инвариантности является следующее утверждение: если все атомы сместить одновременно $u_{\alpha}(\mathbf{r}) \equiv u_{\alpha}$, то энергия измениться не должна. Из этого следует ещё одно общее свойство: $\sum_{\mathbf{r}'} U_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0$, что после преобразования Фурье означает $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k} = 0) = 0$.

Это позволяет нам написать следующий гамильтониан:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}} \frac{\hat{p}_{\alpha}^2(\mathbf{r})}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} U_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{u}_{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{u}_{\beta}(\mathbf{r}'), \quad [\hat{u}_{\alpha}(\mathbf{r}), \hat{p}_{\beta}(\mathbf{r}')] = i\delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \quad (3)$$

Нормальные координаты

Как всегда, для диагонализации такого гамильтониана необходимо избавиться от пространственной зависимости и ввести дискретное преобразование Фурье:

$$\hat{p}_{\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \hat{u}_{\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (4)$$

$$\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} \hat{p}_{\alpha}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} \hat{u}_{\alpha}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (5)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что преобразование Фурье приводит к следующим коммутационным соотношениям для новых операторов:

$$[\hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}, \hat{p}_{\alpha,\mathbf{q}}] = i\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (6)$$

Кроме того, в силу эрмитовости $\hat{u}_{\alpha}(\mathbf{r})$ и $\hat{p}_{\alpha}(\mathbf{r})$, имеется условие $\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}}^{\dagger} = \hat{p}_{\alpha,-\mathbf{k}}$ и $\hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}^{\dagger} = \hat{u}_{\alpha,-\mathbf{k}}$. Гамильтониан же приходит к следующему виду:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} \hat{p}_{\alpha,-\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} \hat{u}_{\beta,-\mathbf{k}} \right) \quad (7)$$

где введено преобразование Фурье матрицы $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}} U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Можно вывести уравнения движения для новых переменных, коммутируя их с гамильтонианом:

$$\begin{cases} \frac{d\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}}] &= -U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\beta,\mathbf{k}} \\ \frac{d\hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}] &= \frac{1}{m} p_{\alpha,\mathbf{k}} \end{cases} \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} + \frac{1}{m} U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\beta,\mathbf{k}} = 0 \quad (8)$$

Для решения классических уравнений движения мы приходим к необходимости диагонализации матрицы $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$. Это делается посредством введения тройки единичных собственных векторов поляризации $e_{\beta}^{(i)}(\mathbf{k})$ ($i = 1, 2, 3$) с собственными числами $m\omega_i^2(\mathbf{k})$:

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_{\beta}^{(i)}(\mathbf{k}) = m\omega_i^2(\mathbf{k}) e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k}) \quad (9)$$

Обсудим свойства матрицы и её собственных чисел, а также векторов поляризации.

- Как было сказано, $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k} = 0) = 0$ в силу трансляционной симметрии. Поэтому все три ветви $\omega_i(\mathbf{k} \rightarrow 0) = 0$.
- $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ положительно определена, поскольку мы имеем дело с устойчивым равновесием. Поэтому все $\omega_i(\mathbf{k})$ чисто вещественны.
- В силу вещественности энергии, $U_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) = U_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k})$. Кроме того, в силу зеркальной симметрии, $U_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) = U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$. Поэтому спектр симметричен $\omega_i(-\mathbf{k}) = \omega_i(\mathbf{k})$.
- Матрица $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ вещественна и симметрична, поэтому вектора поляризации тоже можно выбрать вещественными $e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k}) \in \mathbb{R}^3$.
- Вектора поляризации ортонормированы $e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k}) e_{\alpha}^{(j)}(\mathbf{k}) = \delta_{ij}$ и образуют полную систему $\sum_i e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k}) e_{\beta}^{(i)}(\mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta}$.
- Они определены с точностью до выбора константы вида ± 1 (для произвольного $\mathbf{k}$). Удобно наложить дополнительное требование на них: $e_{\alpha}^{(i)}(-\mathbf{k}) = -e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k})$; дальше будет видно, что это соответствует гладкости $e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k})$ (в частности, для продольной поляризации они имеют вид $e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}}{k}$, что удовлетворяет этому свойству).

Проведём теперь разложение $p_{\alpha,\mathbf{k}}$ и $u_{\alpha,\mathbf{k}}$ по поляризациям:

$$\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} = \sum_i e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k}) \hat{p}_{\mathbf{k},i}, \quad \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} = \sum_i e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\mathbf{k},i} \quad (10)$$

Тут стоит обратить внимание, что из-за наложенного условия на вектора поляризации, возникает несколько дополнительных минусов в разных соотношениях, включая следующие:

$$\hat{p}_{-\mathbf{k},i}^{\dagger} = \sum_{\alpha} e_{\alpha}^{(i)}(-\mathbf{k}) \hat{p}_{\alpha,-\mathbf{k}}^{\dagger} = -\hat{p}_{\mathbf{k},i}, \quad \hat{u}_{-\mathbf{k},i}^{\dagger} = -\hat{u}_{\mathbf{k},i} \quad (11)$$

$$[\hat{u}_{\mathbf{k},i}, \hat{p}_{-\mathbf{k}',j}] = e_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{k}) e_{\beta}^{(j)}(-\mathbf{k}') [u_{\alpha,\mathbf{k}}, \hat{p}_{\beta,-\mathbf{k}'}] = -i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{ij} \quad (12)$$

$$\hat{H} = - \sum_{\mathbf{k},i} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_{\mathbf{k},i} \hat{p}_{-\mathbf{k},i} + \frac{1}{2} m\omega_i^2(\mathbf{k}) \hat{u}_{\mathbf{k},i} \hat{u}_{-\mathbf{k},i} \right) \quad (13)$$

(что, конечно, никак не противоречит положительной определённости гамильтониана). Наконец, всё это было сделано, чтобы диагонализировать уравнения движения, которые принимают следующий (осцилляторный) вид:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \hat{p}_{\mathbf{k},i} &= -m\omega_i^2(\mathbf{k}) \hat{u}_{\mathbf{k},i} \\ \frac{d}{dt} \hat{u}_{\mathbf{k},i} &= \frac{1}{m} \hat{p}_{\mathbf{k},i} \end{cases} \quad (14)$$

Правильный способ выбрать нормальные координаты — которые соответствуют лестничным операторам $\hat{a}_{\mathbf{k},i}$ и $\hat{a}_{\mathbf{k},i}^{\dagger}$ — это составить линейные комбинации операторов $\hat{p}_{\mathbf{k},i}$ и $\hat{u}_{\mathbf{k},i}$ (поскольку уравнения движения не «перемешивают» $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$,

то этого будет достаточно), для которых уравнения расцепятся, а коммутационные соотношения будут каноническими $[\hat{a}_{\mathbf{k},i}, \hat{a}_{\mathbf{k}',j}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{ij}$. Несложно видеть, что они имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \hat{a}_{\mathbf{k},i} = \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} \left(\hat{u}_{\mathbf{k},i} + \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} \hat{p}_{\mathbf{k},i} \right) \\ \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} \left(-\hat{u}_{-\mathbf{k},i} + \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} \hat{p}_{-\mathbf{k},i} \right) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \hat{u}_{\mathbf{k},i} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega_i(\mathbf{k})}} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} - \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger) \\ \hat{p}_{\mathbf{k},i} = \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} (-i)(\hat{a}_{\mathbf{k},i} + \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger) \end{cases} \quad (15)$$

Непосредственной проверкой убеждаемся, что коммутационные соотношения канонические:

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},i}, \hat{a}_{\mathbf{q},j}^\dagger] = \frac{m\sqrt{\omega_i(\mathbf{k})\omega_j(\mathbf{q})}}{2} \left(\frac{i}{m\omega_j(\mathbf{q})} [\hat{u}_{\mathbf{k},i}, \hat{p}_{-\mathbf{q},j}] - \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} [\hat{p}_{\mathbf{k},i}, \hat{u}_{-\mathbf{q},j}] \right) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}\delta_{ij} \quad (16)$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},i}, \hat{a}_{\mathbf{q},j}] = \frac{m\sqrt{\omega_i(\mathbf{k})\omega_j(\mathbf{q})}}{2} \left(\frac{i}{m\omega_j(\mathbf{q})} [\hat{u}_{\mathbf{k},i}, \hat{p}_{\mathbf{q},j}] + \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} [\hat{p}_{\mathbf{k},i}, \hat{u}_{\mathbf{q},j}] \right) = 0 \quad (17)$$

И, наконец, подстановкой в гамильтониан убеждаемся, что он становится диагональным:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= - \sum_{\mathbf{k},i} \left(-\frac{1}{2m} \cdot \frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} + \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger)(\hat{a}_{-\mathbf{k},i} + \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger) + \frac{1}{2} m\omega_i^2(\mathbf{k}) \cdot \frac{1}{2m\omega_i(\mathbf{k})} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} - \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger)(\hat{a}_{-\mathbf{k},i} - \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger) \right) = \\ &= \sum_{\mathbf{k},i} \frac{1}{4} \omega_i(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k},i} + \hat{a}_{\mathbf{k},i} \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k},i} + \hat{a}_{\mathbf{k},i} \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger \right) = \boxed{\sum_{\mathbf{k},i} \omega_i(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},i} + \frac{1}{2} \right)} \quad (18) \end{aligned}$$

Приведём для справки окончательный ответ в виде разложения операторов смещения через вектора поляризации и операторы, диагонализующие гамильтониан:

$$\begin{cases} \hat{u}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k},i} \frac{e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k})}{\sqrt{2m\omega_i(\mathbf{k})}} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} e^{-i\omega_i(\mathbf{k})t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger e^{i\omega_i(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \\ \hat{p}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k},i} e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} (-i)(\hat{a}_{\mathbf{k},i} e^{-i\omega_i(\mathbf{k})t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger e^{i\omega_i(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \end{cases} \quad (19)$$

Продольные и поперечные моды

Тем самым, в законе дисперсии фононов имеется три ветви $\omega_i(\mathbf{k})$; и различные фононы характеризуются различными поляризациями $e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k})$. При малых векторах $\mathbf{k}$ (а именно длинноволновым пределом мы будем интересоваться) — на больших масштабах, когда решётка уже не играет никакой роли — имеет место следующее разложение, параметризуемое парой чисел¹ μ и λ :

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = V_0((\lambda + \mu)k_\alpha k_\beta + \mu k^2 \delta_{\alpha\beta}), \quad k a \ll 1 \quad (20)$$

(других тензоров составить нельзя; величина V_0 определяет объем элементарной ячейки). Можно показать, что определённые таким образом коэффициенты λ и μ являются термодинамическими величинами и называются **модулями упругости**². Такую матрицу можно явно диагонализировать, заметив, что $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \cdot k_\beta = V_0(\mu k^2 + \frac{1}{2} \lambda k^2) k_\alpha$. Первая мода тем самым «паралельна» $\mathbf{k}$:

$$e_\alpha^{(l)}(\mathbf{k}) \equiv \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}, \quad \omega_l^2(\mathbf{k}) = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} k^2 \equiv c_l^2 k^2, \quad c_l^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} \quad (21)$$

(обратим внимание, что введённый таким образом вектор обладает требуемым ранее свойством $e_\alpha^{(l)}(-\mathbf{k}) = e_\alpha^{(l)}(\mathbf{k})$; а величина $\rho = \frac{m}{V_0}$ даёт обычную плотность кристалла). Величина c_l определяет **скорость продольного звука**, а сама мода называется **продольной (longitudinal)**. По аналогии, если мы теперь рассмотрим пару векторов $e_\alpha^{(t,1/2)} \perp \mathbf{k}$, то:

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_\beta^{(t,1/2)} = V_0 \mu k^2 e_\alpha^{(t,1/2)} \Rightarrow \omega_t^2(\mathbf{k}) = \frac{\mu}{\rho} k^2 \equiv c_t^2 k^2, \quad c_t^2 = \frac{\mu}{\rho} \quad (22)$$

Соответственно, мы имеем дело с парой совпадающих ветвей **поперечного звука (transversal)**. Мы видим, что продольная скорость звука всегда больше.

¹Такое разложение работает для кристаллов без выделенного направления — сферически симметричных кристаллов. В частности, оно не работает для одноосных и двuosных кристаллов

²Вообще говоря, различных модулей упругости имеется огромное количество, и с частью из них вы уже должны были быть знакомы из курса общей физики. Примеры модулей: модуль Юнга E , или модуль всестороннего сжатия K , или коэффициент Пуассона σ . Все эти модули упругости выражаются через любые два; в качестве пары основных мы выберем так называемый второй коэффициент Ламэ λ и модуль сдвига μ .

В кристаллах с имеющимся выделенным направлением предположение об отсутствии важности кристаллической решётки на больших масштабах может нарушаться — из-за чего величина $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ уже не будет являться тензором на малых $\mathbf{k}$; как следствие, в случае общего положения мы будем иметь три различные моды, которые, вообще говоря, не будут являться ни продольными, ни поперечными, а какими-то их линейными комбинациями.

Макроскопическая модель

Вместо разработанной тут микроскопической теории, можно было бы стартовать сразу с полевого описания, известного из теории упругости. В рамках теории упругости, кристалл рассматривается как непрерывный объект, который характеризуется полем смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ (полный аналог микроскопии). Кинетический вклад в упругую энергию тем самым имеет следующий вид:

$$T = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \rho \dot{\mathbf{u}}^2(\mathbf{r}) \quad (23)$$

Потенциальная энергия связана с деформациями, и при однородном смещении $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \text{const}$ она не возникает. Поэтому вводится **тензор деформации** $u_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(\partial_\alpha u_\beta(\mathbf{r}) + \partial_\beta u_\alpha(\mathbf{r}))$, и потенциальная энергия в общем случае записывается через него. Её можно связать с различными модулями упругости; в частности, в терминах введённых выше коэффициента Ламе λ и модуля сдвига μ она имеет наиболее простой вид:

$$\Pi = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (\lambda u_{\gamma\gamma}^2 + 2\mu u_{\alpha\beta}^2) \equiv \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} [(\lambda + \mu)(\partial_\gamma u_\gamma)^2 + \mu(\partial_\alpha u_\beta)^2] \quad (24)$$

(сравните с разложением $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$). Тем самым, можно рассмотреть теорию поля с действием $S[\mathbf{u}(\mathbf{r})] = T - \Pi$, и проквантовать её; полученная теория поля будет эквивалентна В качестве промежуточного действия, выпишем уравнения движения для $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ (которые будут такими же и в операторном формализме):

$$\rho \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) - \mu \text{grad} \text{div} \mathbf{u} - \frac{1}{2} \lambda \Delta \mathbf{u} = 0 \quad (25)$$

Произвольное векторное поле $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ можно разложить на продольную часть $\mathbf{u}_l(\mathbf{r})$, которая характеризуется тем, что $\text{rot} \mathbf{u}_l(\mathbf{r}) = 0$, и поперечную часть $\mathbf{u}_t(\mathbf{r})$, которая характеризуется тем, что $\text{div} \mathbf{u}_t(\mathbf{r}) = 0$. Это утверждение можно видеть хотя бы потому, что в Фурье такое разложение можно непосредственно предъявить:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k},l} = \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}}) \mathbf{k}}{k^2} \Rightarrow \mathbf{k} \times \mathbf{u}_{\mathbf{k},l} = 0, \quad \mathbf{u}_{\mathbf{k},t} \equiv \mathbf{u}_{\mathbf{k}} - \mathbf{u}_{\mathbf{k},l} \Rightarrow \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k},t} = 0 \quad (26)$$

Рассматривая такое разложение, и беря ротор и дивергенцию такого уравнения, мы приходим к следующей паре волновых уравнений:

$$\begin{cases} \ddot{\mathbf{u}}_l(\mathbf{r}) - c_l^2 \Delta \mathbf{u}_l = 0 \\ \ddot{\mathbf{u}}_t(\mathbf{r}) - c_t^2 \Delta \mathbf{u}_t = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} c_l^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} \\ c_t^2 = \frac{\mu}{\rho} \end{cases} \quad (27)$$

Эта пара уравнений показывает, что продольные и поперечные компоненты поля $\mathbf{u}$ подчиняются волновым уравнениям с различными групповыми скоростями — это и есть наши продольные и поперечные фононы. Построенная тут теория полностью эквивалентна выведенной выше микроскопической.

Деформационный потенциал и электрон-фононное взаимодействие

В кристаллических веществах, электроны движутся в коллективном периодическом потенциале, создаваемом атомами и имеющим, как правило, Кулоновскую природу. Фононы представляют собой смещение атомов из их положения равновесия; и поскольку электроны гораздо легче атомов, то для описания такой системы хорошо работает адиабатическое приближение, в рамках которого нужно научиться решать задачу о движении электронов в статическом потенциале, создаваемом **неподвижными**, но произвольным образом смещёнными атомами. Тем самым, достаточно очевидно, что электроны и фононы в таких системах взаимодействуют, и в гамильтониан должен быть эффективный вклад, который зависит как от электронных степеней свободы $\hat{\psi}(\mathbf{r})$, так и от фононных $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r})$.

Выберем следующую модель взаимодействия. Пусть потенциал отдельного иона имеет вид $U_0(\mathbf{r})$ (скажем, это Кулоновский потенциал $U_0(r) = \frac{Ze^2}{r}$). Тогда коллективный потенциал можно представить в виде $V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Если теперь атом $\mathbf{r}'$ сместился на малое расстояние $\mathbf{u}(\mathbf{r}')$, то поправку к потенциалу, в котором движутся электроны, можно записать в следующем виде:

$$\hat{H}_{e-ph} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \delta V(\mathbf{r}), \quad \delta V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} u_\alpha(\mathbf{r}') \partial_\alpha U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx \int \frac{d\mathbf{r}'}{V_0} u_\alpha(\mathbf{r}') \partial_\alpha U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d\mathbf{r}'}{V_0} \partial_\alpha u_\alpha(\mathbf{r}') U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (28)$$

(в последнем тождестве мы проинтегрировали по частям). Мы имеем дело со свёрткой; преобразование Фурье имеет вид: $\delta V_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V_0} i k_\alpha u_{\alpha, \mathbf{k}} U_0(\mathbf{k})$. На малых импульсах (имея дело с эффективной теорией поля, мы всегда подразумеваем низкоэнергетическое разложение!) ядро Кулоновского взаимодействия $U_0(\mathbf{k}) = \frac{4\pi Z e^2}{k^2}$ сильно сингулярно. Причина этой сингулярности — в дальнотействующей природе Кулоновского взаимодействия.

В действительности же это не так — дело в том, что, как и в плазме — в электронном газе имеет место экранировка. Свободные электроны перераспределяются, создавая дополнительную зарядовую плотность $-e\delta n(\mathbf{r})$, в результате чего реальный потенциал взаимодействия электронов с ионами изменяется с $U_0(\mathbf{r})$ на некоторый другой $U(\mathbf{r})$; последний оказывается короткодействующим, с типичным радиусом в несколько ангстрем.

Экранировка Томаса-Ферми Можно предложить достаточно простые рассуждения, которые позволяют вывести асимптотику экранированного потенциала взаимодействия $U(\mathbf{r})$ на больших расстояниях. Ключевым тут является предположение о том, что если потенциал достаточно плавный (меняется на масштабах сильно больших, чем обратный импульс Ферми — он задаёт типичное расстояние между электронами), то его можно трактовать как просто локальную *постоянную* поправку к энергии. Поэтому можно сказать, что локальная функция распределения фермионов — ферми-ступенька, имеющая при нуле температур вид $n_F(E) \approx \theta(E_F - E)$ (E_F — энергия Ферми, θ — функция Хевисайда), заменяется на $n_F(E + U(\mathbf{r}))$. Это в свою очередь приводит к локальной изменении концентрации электронов:

$$\delta n(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} [n_F(E_{\mathbf{p}} + U(\mathbf{r})) - n_F(E_{\mathbf{p}})] \approx U(\mathbf{r}) \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\partial n_F}{\partial E} \approx -U(\mathbf{r}) \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \delta(E_F - E_{\mathbf{p}}) \equiv -\nu U(\mathbf{r}) \quad (29)$$

Последнее просто по определению задаёт *плотность одночастичных состояний на уровне Ферми* $\nu(E_F)$; это является одной из самых важных характеристик Ферми-газа и металла в целом. Поправка к концентрации приводит к возникновению электростатического потенциала, который удовлетворяет уравнению Лапласа:

$$\nabla^2 \phi = -4\pi e \delta n(\mathbf{r}) \Rightarrow \phi_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi e}{k^2} \delta n_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi \nu e}{k^2} U_{\mathbf{k}} \quad (30)$$

Наконец, полный потенциал $U(\mathbf{r})$ *самосогласованным* образом определяется как сумма $U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) - e\phi(\mathbf{r})$. Таким образом, мы приходим к уравнению согласования, которое определяет экранированное взаимодействие $U(\mathbf{r})$, а точнее — его Фурье-образ:

$$U_{\mathbf{k}} = U_{0, \mathbf{k}} - \frac{4\pi \nu e^2}{k^2} U_{\mathbf{k}} \Rightarrow U_{\mathbf{k}} = \frac{k^2 U_{0, \mathbf{k}}}{k^2 + 4\pi \nu e^2} = \frac{4\pi Z e^2}{k^2 + 4\pi \nu e^2} \quad (31)$$

Это уравнение эквивалентно экранировке Дебая в плазме. Масштаб экранировки даётся выражением $\frac{1}{\sqrt{4\pi \nu e^2}}$; наконец, на малых импульсах это выражение выходит на универсальную константу $U_{\mathbf{k}=0} = \frac{Z}{\nu}$; эффективно это означает, что с точки зрения больших масштабов взаимодействие можно заменить на дельта-функциональное $U(\mathbf{r}) \approx \frac{Z}{\nu} \delta(\mathbf{r})$. Это позволяет записать модельный гамильтониан электрон-фононного взаимодействия в следующем виде:

$$\hat{H}_{e-ph} = \frac{Z}{\nu V_0} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \text{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) \quad (32)$$

Взаимодействие такого вида носит название *деформационного потенциала*. Это — не единственный способ описание электрон-фононного взаимодействия, а всего лишь одна из моделей. Стоит обратить внимание на несколько важных деталей.

- В металлах, как правило, концентрация электронов сама имеет порядок $n \sim \frac{1}{V_0}$, а плотность состояний — $\nu \sim \frac{n}{E_F}$. Поэтому префактор имеет характерный порядок $\sim E_F$. Типичное значение кинетической энергии электронов — тоже имеет порядок E_F . Поэтому такое взаимодействие, наивно, *не содержит малого параметра* (хотя в дальнейшем подразумевается применение теории возмущений по $\hat{H}_{e-ph}$). В действительности же такой малый параметр будет иметься — это параметр адиабатичности, отношение энергии Дебая к энергии Ферми ω_D/E_F ; это примерно то же самое, что и отношение скорости звука к скорости Ферми $\sim c/v_F$, которое, в свою очередь связано с отношением масс электрона и иона как $\sim \sqrt{m/M}$.
- Взаимодействие происходит только с продольными фононами (это утверждение, конечно, не абсолютно точное, но в главном порядке это действительно так); поэтому поперечные фононы можно вообще не рассматривать.
- Величина $\text{div} \mathbf{u}(\mathbf{r})$ совпадает с локальным относительным изменением объема $\frac{\delta V}{V}$. Кроме того, все характеристики Кулоновского взаимодействия — в частности, заряд электрона — полностью выпали из гамильтониана, хотя взаимодействие и имеет Кулоновскую природу.

Последнее замечание неспроста. Имеется ещё один элементарный механизм электрон-фононного взаимодействия, который приводит к сходному результату. Дело в том, что если происходит локальное сжатие на величину $\frac{\delta V}{V}$, то это эквивалентно локальному изменению плотности электронов $\delta n = n \frac{\delta V}{V} = n \text{div} \mathbf{u}$. Это изменение, в свою очередь, приводит к локальному повышению химического потенциала — энергии Ферми — на величину $\delta \mu = \frac{\partial E_F}{\partial n} \delta n \equiv \frac{\nu}{\nu} \text{div} \mathbf{u}$ (ν — опять-таки совпадает

с плотностью состояний на уровне Ферми). Поскольку электроны — быстрая подсистема, то они приходят в равновесие гораздо быстрее фононов; в частности, они быстро перераспределяются так, чтобы полный электрохимический потенциал был постоянным по всей системе. Перераспределение электронной плотности создаёт электрический потенциал, который как раз представляет собой эффективное электрон-фононное взаимодействие, и который компенсирует изменение химического потенциала. Это позволяет записать гамильтониан в следующем виде:

$$\hat{H}_{e-ph} = \frac{gn}{\nu} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \text{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) \quad (33)$$

(величина $g \sim 1$ — безразмерный параметр электрон-фононного взаимодействия, вводимый феноменологически). Внешне этот гамильтониан устроен так же (с учётом $n \sim \frac{1}{V_0}$), хотя и имеет немного другую природу. В дальнейшем мы будем пользоваться именно таким видом гамильтониана, и считать параметр $g \ll 1$, устраивая теорию возмущений по этому параметру.

Замечание (литература) У Левитова и Шитова, разложение поля $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r})$ имеет буквально такой же вид, как и в формуле (19) (с учётом того, что плотность кристалла связана с объемом элементарной ячейки согласно $\rho = \frac{m}{V_0}$, и $V = NV_0$). Электрон-фононное взаимодействие выражается через поле

$$\hat{\varphi}(\mathbf{r}) = c\sqrt{\rho} \text{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\omega(\mathbf{k})}{2}} \cdot i(\hat{a}_{\mathbf{k},||} e^{-i\omega(\mathbf{k})t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k},||}^\dagger e^{i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{r}}), \quad \omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}| \quad (34)$$

Гамильтониан взаимодействия в таком случае выражается согласно $\hat{H}_{e-ph} = \frac{gn}{\nu c \sqrt{\rho}} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\varphi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r})$; поэтому константа связи у нас и у ЛШ связаны соотношением $g_{\text{ЛШ}} = \frac{n}{\nu c \sqrt{\rho}} g$. Наконец, ЛШ вводит безразмерную константу ζ согласно соотношению $\zeta = g_{\text{ЛШ}}^2 \nu_0$; это соответствует определению в наших терминах $\zeta = \frac{n^2 g^2}{\nu \rho c^2}$. Эта константа находится из следующих соотношений $\nu = \frac{mp_F}{2\pi^2}$, $n = \frac{p_F^3}{3\pi^2}$; тем самым:

$$\zeta = \frac{g^2}{3\pi^2} \cdot \frac{mp_F^3}{\rho} \cdot \frac{v_F^2}{c^2} \sim 1 \cdot \frac{m}{M} \cdot \frac{M}{m} \sim 1 \quad (35)$$