

Акустические фононы

Дуализм волн и частиц относится к числу фундаментальных концепций современной физики. В кристаллах имеется много полей, которые проявляют оба эти аспекта — и волновой, и корпускулярный. Кванты энергии таких полей получили собственные названия. Подобно тому, как термин фотон описывает корпускулярный аспект электромагнитного поля в вакууме, термины фонон, магнон, плазмон, полярон и экситон описывают некоторые квантованные поля в кристалле. Фононы связаны с упругими возбуждениями, в частности акустические фононы соответствуют обычным упругим волнам. Магноны — это элементарные возбуждения в системе электронных спинов, связанных между собой обменными силами. Плазмоны — коллективные кулоновские возбуждения электронного газа в металлах. Экситоны — нейтральные квазичастицы, связанные с полем диэлектрической поляризации, а поляроны — заряженные квазичастицы, связанные с полем поляризации (обычно в ионных кристаллах). Все перечисленные выше квазичастицы, кроме поляронов, ведут себя как бозоны. Куперовские электронные пары, вводимые в теории сверхпроводимости, ведут себя в основном, как бозоны. Квазичастицы, соответствующие электронам при их взаимодействиях с электронным газом в металлах, ведут себя как фермионы.

Большая часть настоящей книги посвящена свойствам этих частиц — их квантованию, энергетическим спектрам, их взаимодействиям. Наиболее удобный способ математического описания этих частиц основан на методе вторичного квантования, т. е. на квантовании корпускулярно-волновых полей. Этот метод очень прост как для изучения, так и в приложениях. Основы его прекрасно изложены во многих учебниках по квантовой механике, например в книгах Шиффа [1], Ландау и Лифшица [2], Хенли и Тирринга [3]. Рассматриваемые здесь проблемы нерелятивистской теории поля представляют собой хорошую с педагогической точки зрения иллюстрацию основ квантовой

теории поля. Поля, которые нас интересуют, мы будем рассматривать как для решетки, состоящей из дискретных атомов, так и для непрерывной среды. Хотя трактовка многих конкретных моделей возможна равным образом с обеих точек зрения, но для дискретной решетки дисперсионные соотношения и правила отбора имеют более общий вид, чем для континуума; кроме того, последний можно рассматривать как предельный случай решетки.

Дискретная упругая цепочка

Поперечные колебания натянутой упругой струны представляют собой простейший пример бозонного поля. Начнем с того, что напишем гамильтониан цепочки, состоящей из дискретных материальных точек единичной массы, расположенных на одинаковом (равном единице длины) расстоянии одна от другой, считая, что натяжение тоже единичное. Физические параметры, характеризующие свойства такой системы, мы введем позже, после того как разовьем необходимый математический аппарат. В нужный момент будут введены и граничные условия (периодичность по N). Итак, пусть p_i — поперечный импульс, а q_i — поперечное смещение массы в точке i . Если смещения малы, то

$$H = \frac{1}{2} \sum_i [p_i^2 + (q_{i+1} - q_i)^2]. \quad (2.1)$$

Эта форма для энергии получается из лагранжиана $L = (\text{кинетическая энергия}) - (\text{потенциальная энергия}) =$

$$= \frac{1}{2} \sum \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2} \sum (q_{i+1} - q_i)^2 \quad (2.2)$$

путем введения канонического импульса

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \dot{q}_i \quad (2.3)$$

и привлечения обычной записи функции Гамильтона

$$H = \sum p_i \dot{q}_i - L. \quad (2.4)$$

Квантование вводится обычным условием

$$[q_r, p_s] = i\delta_{rs}; \quad (2.5)$$

при этом полагаем $\hbar = 1$.

Теперь будем искать собственные значения (частоты) и собственные функции (векторы) оператора (2.1). Чтобы перейти к фотонам, описываемым волновыми координатами, Q_h ,

произведем преобразование

$$q_r = N^{-1/2} \sum_k Q_k e^{ikr}, \quad Q_k = N^{-1/2} \sum_s q_s e^{-iks} \quad (2.6)$$

Эти преобразования взаимнообратимы. Как показано в гл. 1

$$\sum_k \exp [ik(s - r)] = N\delta_{sr}.$$

Координаты q_r в квантовой механике должны быть эрмитовыми переменными, так что величина q_r должна быть равна эрмитово сопряженной величине, т. е.

$$q_r = q_r^+ = N^{-1/2} \sum_k Q_k e^{ikr} = N^{-1/2} \sum_k Q_k^+ e^{-ikr}. \quad (2.7)$$

Это требование удовлетворяется, если

$$Q_k = Q_{-k}^+, \quad (2.8)$$

где Q_k^+ — оператор, эрмитово сопряженный Q_k . Таким образом, можно написать

$$q_r = \frac{1}{2} N^{-1/2} \sum_k (Q_k e^{ikr} + Q_k^+ e^{-ikr}), \quad (2.9)$$

где сумма берется по всем допустимым значениям волнового вектора k — положительным и отрицательным.

Допустимые значения k определяются обычно из периодических граничных условий (см. гл. 1)

$$q_{r+N} = q_r, \quad (2.10)$$

причем

$$e^{ikN} = 1. \quad (2.11)$$

Это следующие N значений:

$$k = \frac{2\pi n}{N}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{1}{2}(N-1), \frac{1}{2}N. \quad (2.12)$$

Такой их выбор не является единственно возможным, но он наиболее удобен.

Практически удобно преобразование координат (2.6) делать уже в лагранжиане, так как тогда мы можем сразу ввести импульсы P_k , канонические по отношению к Q_k . Прделаем это:

$$\sum (\dot{q}_r)^2 = N^{-1} \sum_k \sum_{k'} \sum_r \dot{Q}_k \dot{Q}_{k'} \exp [i(k + k')r] = \sum_k \dot{Q}_k \dot{Q}_{-k}. \quad (2.13)$$

Далее имеем

$$\begin{aligned} \sum (q_{r+1} - q_r)^2 &= N^{-1} \sum_k \sum_{k'} \sum_r Q_k Q_{k'} e^{ikr} (e^{ik} - 1) e^{ik'r} (e^{ik'} - 1) = \\ &= 2 \sum_k Q_k Q_{-k} (1 - \cos k). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Итак,

$$L = \frac{1}{2} \sum \dot{Q}_k \dot{Q}_{-k} - \sum (1 - \cos k) Q_k Q_{-k}, \quad (2.15)$$

$$P_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} = \dot{Q}_{-k} = P_{-k}^+ \quad (2.16)$$

и

$$H = \frac{1}{2} \sum P_k P_{-k} + \sum (1 - \cos k) Q_k Q_{-k}. \quad (2.17)$$

Пользуясь новыми координатами, можно записать

$$P_k = N^{-1/2} \sum q_s \dot{q}_s e^{iks} = N^{-1/2} \sum p_s e^{iks}, \quad (2.18)$$

$$p_r = N^{-1/2} \sum P_k e^{-ikr} \quad (2.19)$$

Тогда перестановочные соотношения для Q_k и P_k имеют вид

$$\begin{aligned} [Q_k, P_{k'}] &= N^{-1} \left[\sum_r q_r e^{-ikr}, \sum_s p_s e^{ik's} \right] = \\ &= N^{-1} \sum_{rs} [q_r, p_s] \exp[-i(kr - k's)] = i\delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Если исключить случай $k=0$, индекс волнового вектора k относится к внутренним координатам и никак не связан с полным импульсом системы. Полный импульс равен $\sum p_r$, и, согласно (2.18), можно написать

$$P_0 = N^{-1/2} \sum p_r. \quad (2.21)$$

Полный импульс соответствует только нормальному колебанию с $k=0$, которое является однородной трансляцией всей системы. Многие процессы взаимодействия в кристалле происходят так, как если бы полный волновой вектор для взаимодействующих частиц $\sum \mathbf{k}$ сохранялся; по этой причине вектор \mathbf{k} называют часто *импульсом кристалла*, или квазиимпульсом. Если система инвариантна по отношению к бесконечно малым трансляциям, то полный волновой вектор действительно строго сохраняется. Кристаллическая решетка не инвариантна по отношению к бесконечно малым трансляциям, но инвариантна при трансляции, кратной базисным векторам \mathbf{a} , \mathbf{b} , с элементарной ячейки. Тогда, как мы увидим в следующих главах, закон сохранения принимает вид

$$\sum \mathbf{k}_v = \mathbf{G}, \quad (2.22)$$

где \mathbf{G} — произвольный вектор обратной решетки. Однако этот закон сохранения существенно отличается от закона сохранения импульса центра масс.

Гамильтониан (2.17) вовсе не описывает системы гармонических осцилляторов, поскольку он содержит смешанные члены с k и $-k$. Однако нам нужно получить гамильтониан, описывающий систему гармонических осцилляторов, т. е. гамильтониан вида

$$H = \sum \omega_k \hat{n}_k = \sum \omega_k a_k^+ a_k, \quad (2.23)$$

где \hat{n}_k — оператор числа заполнения фононов, a^+ , a — бозе-операторы рождения и уничтожения, подчиняющиеся перестановочному соотношению

$$[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{kk'}. \quad (2.24)$$

Попытаемся для этой цели использовать линейное преобразование

$$\begin{cases} a_k^+ = (2\omega_k)^{-1/2} (\omega_k Q_{-k} - iP_k), \\ a_k = (2\omega_k)^{-1/2} (\omega_k Q_k + iP_{-k}), \end{cases} \quad (2.25)$$

имея в виду (2.8) и (2.16). Величины ω_k определяются здесь соотношением

$$\omega_k = [2(1 - \cos k)]^{1/2} \quad (2.26)$$

и точно совпадают с частотами классических гармонических осцилляторов. При малых k частоты $\omega \sim k$ и дисперсия отсутствует. Дисперсия возникает, когда длина волны $2\pi/k$ близка к межатомному расстоянию и волны начинают «ощущать» дискретную природу решетки. Заметим, что ω является периодической функцией k . Составим $[a_k, a_{k'}^+]$; согласно (2.25),

$$[a_k, a_{k'}^+] = (2\omega_k)^{-1} (-i\omega_k [Q_k, P_{k'}] + i\omega_k [P_{-k}, Q_{-k'}]) = \delta_{kk'}, \quad (2.27)$$

т. е. (2.24) справедливо. Преобразуем теперь гамильтониан (2.17), взяв сумму по всем значениям $\pm k$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (P_k P_{-k} + P_{-k} P_k) + (1 - \cos k) (Q_k Q_{-k} + Q_{-k} Q_k) = \\ = \frac{1}{2} \omega_k (a_k^+ a_k + a_k a_k^+ + a_{-k}^+ a_{-k} + a_{-k} a_{-k}^+). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Итак, наш гамильтониан можно представить в виде

$$H = \sum \omega_k \left(a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right), \quad \omega_k = [2(1 - \cos k)]^{1/2}, \quad (2.29)$$

содержащем в явной форме оператор числа бозонов в состоянии k

$$\hat{n}_k = a_k^+ a_k. \quad (2.30)$$

Если волновая функция Φ описывает состояние, в котором n_k есть собственное значение оператора \hat{n}_k , то уравнение Шредингера записывается следующим образом:

$$H\Phi = E\Phi = (\sum n_k \omega_k) \Phi. \quad (2.31)$$

Когда число n_k возрастает на единицу, говорят, что произошло возбуждение одного фонона с энергией ω_k .

Преобразование, обратное (2.25), имеет вид

$$P_k = i \left(\frac{\omega_k}{2} \right)^{1/2} (a_k^+ - a_{-k}), \quad Q_k = (2\omega_k)^{-1/2} (a_k + a_{-k}^+). \quad (2.32)$$

Подставляя это выражение для Q_k в (2.9), получим

$$q_r = \sum (2N\omega_k)^{-1/2} (a_k e^{ikr} + a_k^+ e^{-ikr}). \quad (2.33)$$

Полученный нами в результате квантования набор собственных колебаний идентичен классическим нормальным колебаниям системы.

Имеются задачи, при рассмотрении которых в фоновых разложениях удобно пользоваться только вещественными координатами. Но введенные выше Q_k не вещественны, так как $Q_k^+ \neq Q_k$. Вещественные Q_k имеют преимущество, если мы хотим записать уравнение Шредингера для собственных функций $|Q_k\rangle$ нормальных колебаний. Простая система вещественных координат (см. [4]) отвечает стоячим волнам

$$q_r = \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sum_{k>0} \{ Q_k^{(c)} \cos kr + Q_k^{(s)} \sin kr \}; \quad (2.34)$$

здесь k принимает значения $2\pi n/N$, где n — положительные целые числа от 1 до $N/2$. Заметим, что собственные векторы $\left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \cos kr$ и $\left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sin kr$ ортогональны и нормированы. Действительно, например,

$$\sum \left(\frac{2}{N} \right) \cos kr \cos k'r = \frac{1}{N} \sum_r \{ \cos(k+k')r + \cos(k-k')r \}. \quad (2.35)$$

Далее

$$\begin{aligned} \sum \cos(k \pm k')r &= \operatorname{Re} \sum_{r=0}^{N-1} \exp(i2\pi nr/N) = \\ &= \operatorname{Re} \frac{1 - \exp(i2\pi n)}{1 - \exp(i2\pi n/N)} = 0. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Равенство нулю имеет место только при $n \neq 0$; при $n = 0$ сумма (2.36) равна N . Поэтому можно написать

$$\sum_r \left(\frac{2}{N} \right) \cos kr \cos k'r = \delta_{kk'} \quad (2.37)$$

и аналогично

$$\sum_r \left(\frac{2}{N} \right) \sin kr \sin k'r = \delta_{kk'}. \quad (2.38)$$

Члены, содержащие смешанные произведения типа $\cos k'r \sin kr$, всегда равны нулю.

Итак, импульс имеет вид

$$p_r = \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sum_{k > 0} (P_k^{(c)} \cos kr + P_k^{(s)} \sin kr). \quad (2.38a)$$

Найдем перестановочные соотношения для P_k и Q_k :

$$Q_k^{(c)} = \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sum_r q_r \cos kr, \quad Q_k^{(s)} = \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sum_r q_r \sin kr; \quad (2.39)$$

$$P_k^{(c)} = \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sum_r p_r \cos kr, \quad P_k^{(s)} = \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sum_r p_r \sin kr. \quad (2.40)$$

С учетом (2.37) получим

$$\begin{aligned} [Q_k^{(c)}, P_{k'}^{(c)}] &= \left(\frac{2}{N} \right) \sum_{r, s} [q_r, p_s] \cos kr \cos k's = \\ &= \left(\frac{2}{N} \right) \sum_r i \cos kr \cos k'r = i \delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

В общем случае

$$[Q_k^{(\alpha)}, P_{k'}^{(\beta)}] = i \delta_{\alpha\beta} \delta_{kk'}. \quad (2.42)$$

Гамильтониан можно записать в виде

$$H = \sum_{k\alpha} \left\{ \frac{1}{2M} (P_k^{(\alpha)})^2 + \frac{1}{2} M \omega_k^2 (Q_k^{(\alpha)})^2 \right\}, \quad (2.43)$$

где α принимает значения c и s , причем предполагается, что $\omega_k^{(c)} = \omega_k^{(s)}$. Это и есть гамильтониан для набора гармонических осцилляторов с частотой ω_k .

Величину Q_k можно рассматривать как амплитуду осциллятора k . Волновая функция $\varphi_{nk}(Q_k) \equiv |Q_k n_k\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left\{ -\frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial Q_k^2} + \frac{1}{2} M \omega_k^2 Q_k^2 \right\} |Q_k n_k\rangle = \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \omega_k |Q_k n_k\rangle. \quad (2.44)$$

Волновая функция всей системы осцилляторов может быть записана в виде произведения $\prod |Q_k n_k\rangle$.

Если операторы Q_k и P_k выразить через операторы рождения и уничтожения a_k^+ , a_k , т. е.

$$Q_k^{(\alpha)} = (2M\omega_k)^{-1/2} (a_{k\alpha} + a_{k\alpha}^+), \quad (2.45)$$

$$P_k^{(\alpha)} = i \left(\frac{M\omega_k}{2} \right)^{1/2} (a_{k\alpha} - a_{k\alpha}^+), \quad (2.46)$$

то

$$H = \sum_{k\alpha} \left(\hat{n}_{k\alpha} + \frac{1}{2} \right) \omega_k. \quad (2.47)$$

Квантовая теория непрерывной упругой струны

Рассмотрим упругую струну с линейной плотностью ρ , находящуюся под натяжением T . Классический лагранжиан такой системы $L = \int dx \mathcal{L}$ легко получить, воспользовавшись известным из классической механики выражением для плотности лагранжиана

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \rho \dot{\psi}^2 - \frac{1}{2} T \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2, \quad (2.48)$$

где $\psi(x, t)$ — смещение в точке x струны из положения равновесия. Выражение (2.48) сразу же получается из лагранжиана (2.2) для дискретной цепочки, если перейти к соответствующему пределу.

В классическом выводе уравнений движения Лагранжа обычно применяется вариационный принцип

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0 \quad (2.49)$$

при условиях

$$\delta \psi(x, t_1) = 0, \quad \delta \psi(x, t_2) = 0. \quad (2.49a)$$

Тогда $\int \int \delta \mathcal{L} dt dx = 0$, где

$$\delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta \dot{\psi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} \delta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \delta t. \quad (2.50)$$

Здесь $\delta \dot{\psi} = \frac{\partial}{\partial t} \delta \psi$, $\delta \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \delta \psi$. Тогда

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \frac{\partial}{\partial t} \delta \psi dt = \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta \psi \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) \delta \psi dt; \quad (2.51)$$

первый член в правой части (2.51) равен нулю в силу условий (2.49а) вариационного принципа. Далее имеем

$$\int \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} \frac{\partial}{\partial x} \delta \psi dx = - \int \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} \right) \delta \psi dx. \quad (2.52)$$

Условия экстремума принимают вид

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} = 0. \quad (2.53)$$

Это и есть уравнение движения для \mathcal{L} , которое в случае упругой струны (см. 2.48) приводит к известному волновому уравнению

$$\rho \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - T \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0. \quad (2.54)$$

Плотность импульса, которую мы обозначим через Π , определяется как

$$\Pi \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}}, \quad (2.55)$$

по аналогии с обычным определением импульса частицы $p \equiv \partial L / \partial \dot{q}$.

Плотность гамильтониана \mathcal{H} определяется выражением

$$\mathcal{H} = \Pi \dot{\psi} - \mathcal{L} = \frac{1}{2\rho} \Pi^2 + \frac{1}{2} T \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2. \quad (2.56)$$

Определение плотности импульса (2.55) находится в согласии с определением импульса частицы цепочки, если в дискретном случае перейти к пределу, считая объем элементарной ячейки равным $\Delta\tau$:

$$(\Delta\tau) \Pi = p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial (\Delta\tau) \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}.$$

Квантование в случае непрерывной струны. В случае частицы квантовые условия имеют вид $[q_r, p_s] = i\delta_{rs}$. Если непрерывную среду (в данном случае струну) разделить на ячейки (участки) протяжением $\Delta\tau_s$, то, заменяя q_r на $\psi(r)$, вместо коммутатора $[q_r, p_s] = i\delta_{rs}$ получим

$$[\psi(r), \Pi(s) \Delta\tau_s] = i\delta_{rs} \quad (2.57)$$

или в трехмерном случае

$$[\psi(\mathbf{x}), \Pi(\mathbf{x}')]=i\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \quad (2.58)$$

где $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')=1/\Delta\tau$, если \mathbf{x} и \mathbf{x}' относятся к одной ячейке $\Delta\tau$; если они относятся к разным ячейкам, то $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')=0$. Функция $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ обладает тем свойством, что интеграл $\int f(\mathbf{x})\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')d\tau$ равен среднему значению функции f для ячейки с координатами \mathbf{x}' . Переходя к пределу при $\Delta\tau\rightarrow 0$, получим

$$\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\rightarrow\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'), \quad (2.59)$$

где $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ — дельта-функция для трехмерного случая. В пределе $\Delta\tau\rightarrow 0$ условия (2.58) примут вид

$$[\psi(\mathbf{x}, t), \Pi(\mathbf{x}', t)]=i\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'); \quad (2.60)$$

напомним при этом, что наше рассмотрение относится только к одному и тому же моменту времени t .

Имеется, очевидно, два пути дальнейшего исследования проблемы на основе полученного гамильтониана упругой струны. Один состоит в решении квантового уравнения движения непосредственно в гейзенберговском представлении. В некоторых задачах при использовании этих уравнений помогает физическая интуиция. Однако получение этих уравнений часто оказывается весьма трудоемким делом. Поэтому мы предпочтем другой путь, а именно преобразуем квантовые операторы в гамильтониане так, чтобы он приобрел форму, удобную для рассмотрения.

Отыскивая подходящий способ преобразования гамильтониана

$$\mathcal{H}=\frac{1}{2\rho}\Pi^2+\frac{1}{2}T\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2, \quad (2.61)$$

мы можем использовать наш опыт, накопленный при анализе дискретной цепочки. Применим периодические граничные условия на концах струны, имеющей длину L . Положим

$$\psi(x)=L^{-1/2}\sum_k Q_k e^{ikx}, \quad Q_k=Q_{-k}^*. \quad (2.62)$$

Согласно (1.22) можно записать Q_k в виде

$$Q_k=L^{-1/2}\int d\xi\psi(\xi)e^{-ik\xi}, \quad (2.63)$$

где интеграл берется между $-L/2$ и $L/2$. Тогда

$$\int \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)^2 dx = -\left(\frac{1}{L}\right) \sum_k \sum_{k'} k k' Q_k Q_{k'} \int \exp[i(k+k')x] dx = \\ = \sum_k k^2 Q_k Q_{-k}. \quad (2.64)$$

Операторы $P_k = P_{-k}^+$ возьмем в виде

$$P_k = L^{-1/2} \int \Pi(\xi) e^{ik\xi} d\xi, \quad \Pi(x) = L^{-1/2} \sum_k P_k e^{-ikx}. \quad (2.65)$$

Тогда

$$\int \Pi^2 dx = \sum P_k P_{-k} \quad (2.66)$$

и гамильтониан принимает вид

$$H = \int \mathcal{H} dx = \sum \left(\frac{1}{2\rho} P_k P_{-k} + \frac{1}{2} T k^2 Q_k Q_{-k} \right). \quad (2.67)$$

Квантовое условие (коммутатор) для $[Q_k, P_{k'}]$ находится без труда:

$$[Q_k, P_{k'}] = L^{-1} \int \int [\Psi(x), \Pi(x')] \exp[i(k'x' - kx)] dx dx' = \\ = iL^{-1} \int \exp[i(k' - k)x] dx = i\delta_{kk'}. \quad (2.68)$$

Полученный результат (2.68) аналогичен (2.20), и поэтому последующие преобразования можно производить тем же способом, которым мы пришли к (2.25) и (2.32). В итоге получим

$$\left. \begin{aligned} a_k^+ &= -i(2\rho\omega_k)^{-1/2} P_k + \left(\frac{T}{2\omega_k}\right)^{1/2} k Q_{-k}; \\ a_k &= i(2\rho\omega_k)^{-1/2} P_{-k} + \left(\frac{T}{2\omega_k}\right)^{1/2} k Q_k, \end{aligned} \right\} \quad (2.69)$$

где

$$\omega_k = \left(\frac{T}{\rho}\right)^{1/2} |k|. \quad (2.70)$$

Акустические колебания с большой длиной волны. Фононы в изотропном кристалле

Оператор, отвечающий вектору смещения в твердом теле¹⁾, обозначим через $\mathbf{R} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$, где \mathbf{x} — начальное положение атома (или элемента объема) в твердом теле, а \mathbf{x}' — его положение

¹⁾ См. книгу автора [5], гл. 4. Вектор \mathbf{R} играет теперь роль скаляра Ψ , применявшегося в предыдущем разделе. В книге [5] величина \mathbf{R} обозначалась через ρ .

после деформации. Предположим, что кристалл упруго изотропен, т. е. что упругая энергия при данной деформации не зависит от ориентации кристаллических осей. Оказывается, что в этом случае (когда плотность упругой энергии изотропна) собственные колебания системы можно строго разделить на продольные и поперечные. Кубические кристаллы с большими элементарными ячейками (например, феррит-гранат иттрия) можно во многих случаях считать упруго изотропными.

Сначала найдем выражения, зависящие от квадратов компонент деформаций $\partial R_\mu / \partial x_\nu$ и инвариантные относительно произвольных поворотов системы координатных осей. Таких инвариантов имеется три: $(\operatorname{div} \mathbf{R})^2$, $|\nabla \mathbf{R}|^2$, $|\operatorname{rot} \mathbf{R}|^2$. Операция $\operatorname{rot} \mathbf{R}$ является чистым вращением тела как целого и в сущности не может рассматриваться как деформация. Соответствующий член в выражении для упругой энергии не появится. Приближенно (с точностью до квадратичных членов) для плотности упругой энергии можно записать

$$U = \frac{1}{2} \alpha (\operatorname{div} \mathbf{R})^2 + \frac{1}{2} \beta |\nabla \mathbf{R}|^2 = \frac{1}{2} \alpha \frac{\partial R_\mu}{\partial x_\mu} \frac{\partial R_\nu}{\partial x_\nu} + \frac{1}{2} \beta \frac{\partial R_\mu}{\partial x_\nu} \frac{\partial R_\mu}{\partial x_\nu}, \quad (2.71)$$

где α , β — константы, выражаемые через упругие модули среды. По повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Координатные оси x_μ считаются ортогональными. Первый член (с α) равен шпuru тензора деформаций, второй (с β) — сумме квадратов компонент этого тензора.

Плотность гамильтониана для изотропной упругой непрерывной среды (континуума) записывается в виде

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\rho} \Pi_\mu \Pi_\mu + \frac{1}{2} \alpha \frac{\partial R_\mu}{\partial x_\mu} \frac{\partial R_\nu}{\partial x_\nu} + \frac{1}{2} \beta \frac{\partial R_\mu}{\partial x_\nu} \frac{\partial R_\mu}{\partial x_\nu}, \quad (2.72)$$

где ρ — обычная плотность, а Π_μ — компоненты плотности импульса. Предположим, что на границах единичного куба выполняются циклические граничные условия и определим преобразование к фоновым переменным Q_k^μ ($\mu = x, y, z$) следующим образом:

$$Q_k^\mu = \int d^3x R_\mu(x) e^{-ikx}, \quad R_\mu(x) = \sum_k Q_k^\mu e^{ikx}, \quad (2.73)$$

при условии, что $Q_k^\mu = (Q_{-k}^\mu)^*$. Итак,

$$\int d^3x \frac{\partial R_\mu}{\partial x_\mu} \frac{\partial R_\nu}{\partial x_\nu} = \sum_k k_\mu k_\nu Q_k^\mu Q_{-k}^\nu. \quad (2.74)$$

Определим теперь компоненты импульса P_k^μ следующим образом:

$$\Pi_\mu = \sum_k P_k^\mu e^{-ik \cdot x}, \quad P_k^\mu = (P_{-k}^\mu)^\dagger, \quad (2.75)$$

$$P_k^\mu = \int d^3x \Pi_\mu(x) e^{ik \cdot x}; \quad (2.76)$$

тогда

$$\int d^3x \Pi_\mu \Pi_\mu = \sum_k P_k^\mu P_{-k}^\mu \quad (2.77)$$

и гамильтониан примет вид

$$H = \frac{1}{2\rho} \sum_k P_k^\mu P_{-k}^\mu + \frac{1}{2} \alpha \sum_k k_\mu k_\nu Q_k^\mu Q_{-k}^\nu + \frac{1}{2} \beta \sum_k k_\nu^2 Q_k^\mu Q_{-k}^\mu. \quad (2.78)$$

Этот гамильтониан «устроен» так, что он инвариантен по отношению к поворотам кристаллических осей, и поэтому мы можем выбирать направления координатных осей, как нам удобно. Поскольку в членах (2.78) различные k встречаются только в комбинации $\pm k$, мы можем для каждого данного k выбрать специальные оси координат. Удобно, например, выбрать одну из осей x_i параллельной k . Тогда

$$H = \frac{1}{2\rho} \sum_{k, \mu} P_k^\mu P_{-k}^\mu + \sum_k k^2 \left(\frac{1}{2} \alpha Q_k^l Q_{-k}^l + \frac{1}{2} \beta \sum_\mu Q_k^\mu Q_{-k}^\mu \right). \quad (2.79)$$

Теперь введем бозе-операторы

$$\left. \begin{aligned} a_{k\mu}^+ &= - (i2\rho\omega_{k\mu})^{-1/2} P_k^\mu + \omega_{k\mu}^{-1/2} (\alpha\delta_{\mu l} + \beta)^{1/2} k Q_{-k}^\mu, \\ a_{k\mu} &= i(2\rho\omega_{k\mu})^{-1/2} P_{-k}^\mu + \omega_{k\mu}^{-1/2} (\alpha\delta_{\mu l} + \beta)^{1/2} k Q_k^\mu. \end{aligned} \right\} \quad (2.80)$$

Здесь по повторяющимся индексам суммирование не подразумевается. Индекс μ теперь рассматривается как индекс поляризации, связывающий смещение частицы с волновым вектором. Легко убедиться в том, что применение преобразования (2.80) позволяет получить следующее выражение для энергии:

$$E = \sum_{k, \mu} \omega_{k\mu} \left(n_{k\mu} + \frac{1}{2} \right); \quad \omega_{k\mu} = [(\alpha\delta_{\mu l} + \beta)\rho]^{1/2} k, \quad (2.81)$$

где индекс l — относится к продольным фононам ($Q_k \parallel k$), а два других выбора для μ — к поперечным фононам. В изотропном твердом теле два поперечных фонона с данным значением k вырождены, но в общем случае для данного направления в кубическом кристалле имеется по три колебания для каждого

значения k ; все они не вырождены и их нельзя считать чисто продольными или чисто поперечными. Из выражения для $\omega_{k\mu}$ в (2.81) получаем для скоростей звука

$$v_{\mu} = \frac{\partial \omega_{\mu}}{\partial k} = [(\alpha \delta_{\mu l} + \beta)/\rho]^{1/2}. \quad (2.82)$$

Выражение для оператора смещения решетки R можно найти, воспользовавшись (2.73) и (2.80), в виде

$$R(x) = \sum_k e_{k\mu} (2\rho\omega_{k\mu})^{-1/2} (a_{k\mu} e^{ik \cdot x} + a_{k\mu}^+ e^{-ik \cdot x}), \quad (2.83)$$

где $e_{k\mu}$ — единичный вектор в направлении поляризации фона. Оператор «расширения» $\Delta(x)$ определяется выражением

$$\Delta(x) = \frac{\partial R_{\mu}}{\partial x_{\mu}} = i \sum_k (2\rho\omega_{k\mu})^{-1/2} k (a_{k\mu} e^{ik \cdot x} - a_{k\mu}^+ e^{-ik \cdot x}); \quad (2.84)$$

с классической точки зрения Δ есть относительное изменение объема $\delta V/V$.

Фононы в конденсированном бозонном газе

Пользуясь методом Боголюбова, покажем, как в системе слабо взаимодействующих частиц могут возникать фононы. Рассмотрим систему, состоящую из большого числа слабо взаимодействующих бозонов, описываемую гамильтонианом

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \sum V(k_1 - k_1') a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_2} a_{k_1} \Delta(k_1 + k_2 - k_1' - k_2'), \quad (2.85)$$

где символ Кронекера Δ обеспечивает сохранение волнового вектора. Если $V=0$, то в основном состоянии все частицы системы находятся в конденсированной фазе, так как в силу бозе-статистики в наименьшем одночастичном состоянии k равно нулю. При наличии слабого взаимодействия на малых расстояниях большинство частиц будет находиться в основном состоянии и лишь немногие ($n \ll N$) окажутся в возбужденных состояниях с $k > 0$. При расчетах макроскопических величин различные случаи, когда мы рассматриваем состояния N частиц или $N+n$ частиц, невелико, но ожидаемое значение полного числа частиц достаточно хорошо определено в обоих случаях. В жидком He^4 потенциал взаимодействия нельзя считать очень слабым; на основании результатов нейтронно-дифракционных иссле-

дований можно предположить, что в основном состоянии менее 0,1 всех атомов обладают нулевым импульсом (см. [6]). Поэтому рассматриваемая нами модель имеет, видимо, лишь качественное сходство с реальным He⁴.

Полагая $V_k = V_{-k}$, гамильтониан (2.85) можно переписать в виде

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2} N_0^2 V_0 + N_0 V_0 \sum_k' a_k^+ a_k + N_0 \sum_k' V_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2} N_0 \sum_k' V_k (a_k a_{-k} + a_k^+ a_{-k}^+) + \text{члены более высокого порядка.} \quad (2.86)$$

Здесь $N_0 = a_0^+ a_0$ и при суммировании всюду исключается член с $k=0$. Члены в правой части (2.86) можно интерпретировать (перемещаясь слева направо) следующим образом:

- а. Кинетическая энергия: $\epsilon_k a_k^+ a_k$.
- б. Взаимодействия в основном состоянии $a_0^+ a_0^+ a_0 a_0$.
- в. Безобменные процессы, не изменяющие числа частиц в основном и возбужденном состояниях: $a_0^+ a_k^+ a_k a_0$ и $a_k^+ a_0^+ a_0 a_k$.
- г. Обмен возбужденной частицы с одной частицей в основном состоянии: $a_k^+ a_0^+ a_k a_0$ и $a_0^+ a_k^+ a_0 a_k$.
- д. Возбуждение двух частиц при уничтожении пары частиц в основном состоянии или уничтожение пары частиц в возбужденном состоянии при появлении двух частиц в основном состоянии: $a_0^+ a_0^+ a_k a_{-k}$ и $a_k^+ a_{-k}^+ a_0 a_0$.

Члены, содержащие три одночастичных оператора в основном состоянии, исключаются в силу закона сохранения импульса. Будем считать ожидаемое значение величины $N_0 + \sum_k' a_k^+ a_k$ числом N частиц системы. Соберем соответствующие члены и перепишем (2.86) в виде

$$H_{\text{прив}} = \frac{1}{2} N^2 V_0 + \sum_k' (\epsilon_k + N V_k) a_k^+ a_k + \frac{1}{2} N \sum_k' V_k (a_k a_{-k} + a_{-k}^+ a_k^+) + \dots \quad (2.87)$$

Гамильтониан (2.87) будем называть приведенным. Он представляет собой билинейную форму по бозе-операторам и допускает точную диагонализацию. Приведенный гамильтониан не коммутирует с оператором числа частиц, но для больших систем это обстоятельство не приводит к сколько-нибудь существенным ошибкам (см. [7]). Метод функций Грина, рассматриваемый в

гл. 21 настоящей книги, позволяет естественным путем ввести матричные элементы, связывающие состояния с различным числом частиц.

Однако мы прежде всего рассмотрим подход теории возмущений (детальнее см. статью Бракнера [8]). Невозмущенной энергией естественно считать $\sum \varepsilon_k a_k^+ a_k$, а возмущением

$$\frac{1}{2} \sum V_k (2a_k^+ a_k + a_k a_{-k} + a_{-k}^+ a_k^+).$$

Легко показать, что возмущение может привести к появлению расходящихся членов при расчетах высших порядков теории возмущений. Боголюбов называет расходящиеся члены «опасными» диаграммами. На самом же деле, расходящиеся члены можно просуммировать и получить конечные (сходящиеся) результаты, но лучше, если возможно, обойтись без теории возмущений и осуществить точную диагонализацию приведенного гамильтониана (2.87), что мы сейчас и сделаем.

Для выполнения диагонализации мы воспользуемся уравнениями движения. Этот метод указывает систематический путь нахождения преобразований типа (2.25), которые автоматически дадут все, что требуется. Мы должны найти новые бозе-операторы α_k^+ , α_k , которые удовлетворяли бы следующим перестановочным соотношениям:

$$[\alpha_k^+, H] = -\lambda \alpha_k^+, [\alpha_k, H] = \lambda \alpha_k, [\alpha_k, \alpha_k^+] = \delta_{kk}. \quad (2.88)$$

Первые два соотношения удовлетворяются, когда гамильтониан H можно записать в диагональной форме

$$H = \sum_k \lambda_k a_k^+ a_k + \text{const.} \quad (2.89)$$

Представим (2.87) в виде

$$H_{\text{прив}} = \frac{1}{2} N^2 V_0 + \sum H_k, \quad (2.90)$$

$$H_k = \omega_0 (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) + \omega_1 (a_k a_{-k} + a_{-k}^+ a_k^+), \quad (2.91)$$

где

$$\omega_0 = \varepsilon_k + NV_k, \quad \omega_1 = NV_k. \quad (2.92)$$

Заметим, что уравнения движения $i\dot{a}_k = \omega_0 a_k + \omega_1 a_{-k}^+$ содержат только операторы a_k и a_{-k}^+ . Выполним преобразование

$$\alpha_k = u_k a_k - v_k a_{-k}^+, \quad \alpha_k^+ = u_k a_k^+ - v_k a_{-k}, \quad (2.93)$$

где u_k, v_k — вещественные четные функции k . Коммутатор

$$[\alpha_k, \alpha_k^+] = u_k^2 - v_k^2 \quad (2.94)$$

можно сделать равным единице при надлежащем выборе u_k , v_k . При именно таком выборе получим

$$a_k = u_k a_k^+ + v_k a_{-k}^+.$$

Воспользовавшись (2.91) и (2.93), найдем

$$[a_k^+, H_k] = u_k (-\omega_0 a_k^+ - \omega_1 a_{-k}) - v_k (\omega_0 a_{-k} + \omega_1 a_k^+). \quad (2.95)$$

Мы хотим, чтобы это выражение в соответствии с (2.88) было равно

$$-\lambda (u_k a_k^+ - v_k a_{-k}).$$

Приравнявая коэффициенты при a_k^+ , a_{-k} , получим

$$\left. \begin{aligned} \omega_0 u_k + \omega_1 v_k &= \lambda u_k, \\ \omega_1 u_k + \omega_0 v_k &= -\lambda v_k. \end{aligned} \right\} \quad (2.96)$$

Эта система уравнений имеет решение, если

$$\begin{vmatrix} \omega_0 - \lambda & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega_0 + \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (2.97)$$

или

$$\lambda^2 = \omega_0^2 - \omega_1^2 = (\varepsilon_k + NV_k)^2 - (NV_k)^2. \quad (2.98)$$

Поскольку $\varepsilon_k = k^2/2M$, то

$$\lambda_{k \rightarrow 0} = \left(\frac{NV_0}{M} \right)^{1/2} k. \quad (2.99)$$

Это предельное выражение для формулы дисперсии фононов, имеющих скорость

$$v_s = \left(\frac{NV_0}{M} \right)^{1/2} \quad (2.100)$$

При малых k можно предположить, что $V_k \approx V_0$. Результат (2.99) справедлив, очевидно, лишь при положительных V , что соответствует потенциалу отталкивания. При больших k

$$\lambda_{k \rightarrow \infty} \approx \varepsilon_k + NV_k, \quad (2.101)$$

т. е. получается другое предельное выражение для формулы дисперсии, которое соответствует случаю системы дискретных частиц. Частота в (2.98) представляет собой монотонно возрастающую функцию волнового вектора, в чем мы немедленно убедимся ниже. Спектр возбуждений квазичастиц в жидком гелии определяется непосредственно из результатов исследования неупругого рассеяния нейтронов (рис. 2.1). Провал на кривой дисперсии вблизи $k = 1,9 \text{ \AA}^{-1}$ находится в полном согласии с расчетами Фейнмана и Козна [9, 10] (см. также задачу 2.6 в конце настоящей главы). По этой упрощенной модели такой

провал может быть следствием зависимости V_k от k . Участок спектра возбуждений вблизи провала называют *ротонным спектром*.

Сверхтекучесть [9—11]. Элементарные возбуждения, описываемые операторами α_k^\dagger , являются коллективным свойством

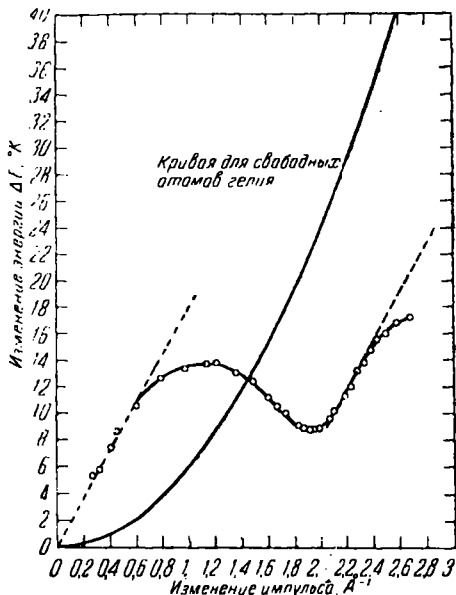


Рис. 2.1. Спектр элементарных возбуждений в жидком гелии при $1,12^\circ\text{K}$ и при нормальном давлении паров.

Экспериментальная кривая получена Хеншоу и Вудсом путем изучения неупругого рассеяния нейтронов. Используемые в опыте нейтроны имели скорость, соответствующую длине волны, равной $4,04 \text{ \AA}$. Пунктирная линия, выходящая из начала координат, соответствует скорости звука, равной $2,37 \cdot 10^4 \text{ см/сек}$. Сплошная параболическая кривая, выходящая из начала координат, получена путем расчета для свободных атомов гелия.

то движение тела будет замедляться. В каждом акте создания элементарного возбуждения с энергией ω_k должны выполняться закон сохранения энергии

$$\frac{1}{2} Mv^2 = \frac{1}{2} Mv'^2 + \omega_k \quad (2.102)$$

и закон сохранения импульса

$$Mv = Mv' + k. \quad (2.103)$$

системы, проявляющимся, в частности, при малых k . Проще всего это показать путем разложения аргументов функций, рассматриваемых в задаче 2.5, в ряд, каждый член которого соответствует одному элементарному возбуждению. Имеется, однако, важное различие между теми фононами, которые мы сейчас рассматриваем, и фононами кристаллической решетки. В решетке фононы связаны с координатной системой и не несут импульса, как мы уже отмечали, обсуждая выражение (2.21). В газе фононные возбуждения действительно переносят импульс и это обстоятельство позволяет установить критерий для сверхтекучести.

Предположим, что в сосуде с находящимся в покое жидким гелием при 0°K перемещается со скоростью v тело с массой M . Если это тело при перемещении в гелии может создавать в нем элементарные возбуждения,

Из равенств (2.102) и (2.103) следует, что

$$0 = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \frac{1}{2M} k^2 + \omega_{\mathbf{k}}. \quad (2.104)$$

Наименьшее значение v , при котором еще может удовлетворяться соотношение (2.104), соответствует случаю, когда $\mathbf{v} \parallel \mathbf{k}$. Эта критическая скорость равна

$$v_c = \min \left(\frac{k}{2M} + \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k} \right). \quad (2.105)$$

При $M \rightarrow \infty$ критическая скорость определяется минимумом отношения $\omega_{\mathbf{k}}/k$. Если в спектре имеется энергетическая щель, т. е. все $\omega_{\mathbf{k}} > 0$, то $v_c > 0$. Случай, иллюстрируемый данными, приведенными на рис. 2.1, также соответствует положительному минимальному значению отношения $\omega_{\mathbf{k}}/k$. Если дисперсия элементарных возбуждений описывается законом $\omega \sim k^2$, соответствующим случаю свободных частиц, то критическая скорость будет равна нулю. Проведенное выше рассмотрение приводит к выводу, что при $v < v_c$ тело при 0°K будет перемещаться в жидком гелии без потери энергии, т. е. не передавая энергии жидкому гелию. В этом случае говорят, что жидкий гелий обладает сверхтекучестью. Наблюдаемые в действии критические скорости в жидком гелии часто на 2—3 порядка величины меньше, чем вычисленное значение. Это связано, по-видимому, с образованием особых элементарных возбуждений малой энергии типа вихревых нитей. При конечных температурах движущееся в жидком гелии тело будет испытывать сопротивление. Одна из причин этого обусловлена рамановскими процессами неупругого рассеяния тепловых фононов на движущемся теле.

Второй звук в кристалле. Мы рассмотрели акустические фононы в кристаллах и в жидком гелии. Акустические фононы на граничных поверхностях между кристаллом и газом или между жидкостью и газом аналогичны обычным звуковым волнам в газе. Говоря о распространении акустических фононов применяют термин обычный, или *первый, звук*.

Сами по себе акустические фононы обладают многими свойствами, родственными свойствам частиц. Такие частицы слабо взаимодействуют между собой; эти взаимодействия описываются ангармоническими членами в выражении для потенциала решетки. При низких температурах процессы столкновений между фононами должны подчиняться законам сохранения энергии и волнового вектора (импульса), но при этом не обязательно сохранение числа фононов. При высоких темпера-

турах полный волновой вектор сталкивающихся частиц может изменяться на величину вектора обратной решетки. Проведенное выше рассмотрение становится неприменимым, если такие процессы переброса происходят часто. Закон дисперсии для фононов с достаточно малыми k имеет вид $\omega = c_1 k$, где c_1 — скорость первого звука.

Нас интересует возможность возникновения и распространения в фононном газе коллективных возбуждений, представляющих собой модулированное локальное изменение плотности или концентрации фононов, которое проявляется в виде особого рода волн. Процесс распространения таких волн называют *вторым звуком*. Достоверно установлено, что подобные волны возникают в жидком гелии II, но нет никаких сообщений об их существовании в кристаллах. Проблема второго звука в жидком гелии во многом существенно отличается от проблемы второго звука в кристаллах. Здесь мы рассмотрим лишь последнюю. Предположим, что средняя длина свободного пробега фонона значительно меньше длины волны второго звука. В процессе обычной теплопроводности в кристалле создается также градиент плотности фононов, однако никаких волн в фононном газе не возникает, так как волновой вектор при этом не сохраняется из-за процессов переброса.

Выведем выражение для скорости второго звука в фононном газе в кристалле. Для простоты рассмотрим только продольные фононы. Пусть

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{x}) d^3k d^3x$$

— число фононов, обладающих волновыми векторами \mathbf{k} в области d^3k вблизи \mathbf{k} и находящихся в объеме d^3x вблизи точки \mathbf{x} . Согласно кинетическому уравнению Больцмана ¹⁾ для функции распределения f имеем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \Delta_c f, \quad (2.106)$$

где $\Delta_c f$ — скорость изменения функции распределения f за счет столкновений. Мы опустили в уравнении член $\alpha \cdot (\partial f / \partial \mathbf{v})$, соответствующий ускорению, поскольку в отсутствие внешних сил ускорение $\alpha \equiv 0$. Для длинноволновых фононов v -я компонента скорости равна $v_v = c_1 k_v / k$ и вместо (2.106) получим

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_1 \frac{k_v}{k} \frac{\partial f}{\partial x_v} = \Delta_c f. \quad (2.107)$$

¹⁾ Об уравнении Больцмана см., например, книгу Киттеля [12].

Запишем теперь плотность импульса кристалла \mathbf{P} и плотность энергии U :

$$\mathbf{P} = \int d^3k \mathbf{k} f, \quad U = \int d^3k c_1 k f. \quad (2.108)$$

Поскольку мы считаем, что при всех столкновениях волновой вектор и энергия сохраняются, то

$$\int d^3k \mathbf{k} \Delta_c f = 0, \quad \int d^3k c_1 k \Delta_c f = 0. \quad (2.109)$$

Тогда, умножая (2.107) на k_μ и интегрируя, получим

$$\frac{\partial P_\mu}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\nu} \int d^3k \frac{c_1 k_\nu k_\mu}{k} f = 0, \quad (2.110)$$

а умножая на $c_1 f$ и интегрируя, получим

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\nu} \int d^3k c_1^2 k_\nu f = \frac{\partial U}{\partial t} + c_1^2 \frac{\partial P_\nu}{\partial x_\nu} = 0. \quad (2.111)$$

Если возмущение мало изменяет функцию распределения f по сравнению с изотропным случаем, то

$$\int d^3k \frac{c_1 k_\nu k_\mu}{k} f = \delta_{\mu\nu} \frac{1}{3} U, \quad (2.112)$$

и уравнение (2.110) примет вид

$$\frac{\partial P_\mu}{\partial t} + \frac{1}{3} \frac{\partial U}{\partial x_\mu} = 0. \quad (2.113)$$

Объединяя (2.111) и (2.113), получим

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - \frac{c_1^2}{3} \frac{\partial^2 U}{\partial x_\nu \partial x_\nu} = 0, \quad (2.114)$$

т. е. уравнение для волн, распространяющихся со скоростью $c_1/\sqrt{3}$. Отношение $c_1/c_2 = \sqrt{3}$, т. е. численное значение отношения скоростей первого и второго звука, приближенно соответствует наблюдаемому значению для жидкого гелия при $T \rightarrow 0$; однако достижимая в экспериментах точность измерений недостаточна для того, чтобы уверенно это утверждать, поскольку при очень низких температурах второй звук сильно затухает, так как средняя длина свободного пробега фононов становится значительно больше длины волны второго звука.

Волны, называемые вторым звуком, представляют собой периодические изменения энергии возбуждения, связанные с периодическими изменениями концентрации фононов. Приведенный выше расчет был сделан Уордом и Уилксом [13]. В нашем результате для c_2^2 отсутствует множитель $[1 - (\rho_n/\rho)]$, имею-

щийся в работе [13] и содержащий отношение плотности эффективных возбуждений ρ_n к плотности среды ρ . Этот множитель фигурирует в теории для жидкого гелия, но не очевидно, что он должен быть и в случае кристалла. Можно лишь утверждать, что в обоих случаях для фононов при $T \rightarrow 0$ отношение $\rho_n/\rho \rightarrow 0$. Вопрос о втором звуке в жидком гелии обсуждается в работе [14].

Частотное распределение для фононов. Фононная функция распределения частот $g(\omega)$ для кристалла определяется как число собственных фононных частот на единицу интервала частот, деленное на полное число собственных частот. Частотное распределение определяет большую часть термодинамических свойств кристалла. Это распределение можно найти при помощи численных расчетов, пользуясь формулой для дисперсии¹⁾, но обычно этот путь весьма трудоемок. Точное решение задачи для двумерной решетки с квадратными ячейками было получено Монтроллом [16], который установил, что функция распределения в этом случае имеет логарифмически бесконечный пик. Такая сингулярность имеет важное значение для вычисления термодинамических характеристик. Общее исследование сингулярностей функции распределения провел Ван Хове [17] (см. также [18]), который использовал топологическую теорему Морза. Эта теорема утверждает, что любая функция более чем одной независимой переменной, периодическая, как и $\omega(\mathbf{k})$, по всем своим переменным, имеет определенное число седловых точек. Это число определяется из топологических соображений и зависит только от числа независимых переменных. Наличие седловой точки у функции типа $\omega(\mathbf{k})$ ведет к сингулярности у функции распределения. В двумерном случае сингулярность логарифмическая. В трехмерном случае функция $g(\omega)$ непрерывна, но ее производная $dg/d\omega$ имеет бесконечные разрывы.

Тот факт, что $\omega(\mathbf{k})$ — периодическая функция, будет установлен в гл. 9 о блоховских функциях. Выше мы уже встретились с этим обстоятельством в частном примере, когда получили периодичность для функции ω_n (см. (2.26)). Плотность состояний $g(\omega)$ прямо пропорциональна $\int d\mathbf{k}$, где интеграл берется по объему слоя в \mathbf{k} -пространстве между поверхностями постоянной энергии, соответствующими ω и $\omega + d\omega$. Толщина слоя в направлении, нормальном к этим поверхностям, определяется соотношением

$$|\nabla_{\mathbf{k}}\omega| d\mathbf{k}_n = d\omega, \quad (2.115)$$

¹⁾ Обзор этого вопроса дан в [15].

и, следовательно,

$$g(\omega) = \frac{V_0}{Zl} \int_{S(\omega)} \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} \omega|}, \quad (2.116)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки, Z — число атомов на элементарную ячейку, l — размерность пространства. Интегрирование выполняется по поверхности S при фиксированном значении ω . Можно ожидать сингулярности, когда равенство

$$|\nabla_{\mathbf{k}} \omega| = \left[\left(\frac{\partial \omega}{\partial k_x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \omega}{\partial k_y} \right)^2 \right]^{1/2} = 0 \quad (2.117)$$

записано для случая двух измерений. Очевидно, что аналитические сингулярности функции $g(\omega)$ возникают в критических точках функции $\omega(\mathbf{k})$, когда все производные в (2.117) обращаются в нуль.

ЗАДАЧИ

2.1. Пользуясь уравнением движения для полевых операторов ψ в гейзенберговском представлении $i\dot{\psi} = [\psi, H]$, показать, что для упругой струны (гамильтониан вида (2.56)) справедливо соотношение $\dot{\psi} = \Pi/\rho$, что совпадает с результатом, получающимся из классического уравнения. Заметим, что ψ и производная функция от ψ , например $\partial\psi/\partial x$, коммутируют, и поэтому оператор T не дает вклада в $\dot{\psi}$. В силу (2.60) член

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{r}), \int \Pi(\mathbf{r}')^2 d\tau'] &= \int [\psi(\mathbf{r}), \Pi(\mathbf{r}')] \Pi(\mathbf{r}') d\tau' + \\ &+ \int \Pi(\mathbf{r}') [\psi(\mathbf{r}), \Pi(\mathbf{r}')] d\tau' \end{aligned} \quad (2.118)$$

может быть опущен.

2.2. Показать, что для упругой струны квантовое уравнение движения дает

$$\dot{\Pi} = T \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (2.119)$$

и вместе с соотношением $\dot{\psi} = \Pi/\rho$ позволяет получить волновое уравнение для полевого оператора ψ в виде

$$\rho \ddot{\psi} = T \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (2.120)$$

Заметим, что

$$\dot{\Pi} = -\frac{1}{2} iT \int dx' \left\{ \left[\Pi(x), \frac{\partial \psi(x')}{\partial x'} \right] \frac{\partial \psi(x')}{\partial x'} + \frac{\partial \psi(x')}{\partial x'} \left[\Pi(x), \frac{\partial \psi(x')}{\partial x'} \right] \right\}, \quad (2.121)$$

где

$$\left[\Pi(x), \frac{\partial \psi(x')}{\partial x'} \right] = -i \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x - x') = i \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x'). \quad (2.122)$$

Теоремы относительно производных δ -функций см. в книге Мессиа [19].

2.3. Рассмотрим непрерывную упругую струну длиной L с закрепленными концами, так что $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Разложение функции ψ в ряд имеет вид

$$\psi(x, t) = \sum_k Q_k(t) u_k(x), \quad \text{где} \quad u_k = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin kx; \quad (2.123)$$

здесь $k = n\pi/L$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Требуется выполнить следующие операции:

а) диагонализировать гамильтониан задачи и найти явный вид шредингеровской волновой функции основного состояния в Q -представлении;

б) вычислить среднюю квадратичную флуктуацию ψ для основного состояния струны (усреднение производить по длине струны).

2.4. Показать, что дебаевская модель при низких температурах ($T \ll \Theta$) дает для теплоемкости на единицу объема изотропного одноатомного твердого тела следующее выражение:

$$C = \frac{12}{5} \pi^4 n k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3, \quad (2.124)$$

где n — число атомов на единицу объема, k_B — постоянная Больцмана, а дебаевская температура Θ определяется соотношением

$$\frac{3}{\Theta^3} = \frac{1}{\Theta_1^3} + \frac{1}{\Theta_2^3}. \quad (2.125)$$

Здесь

$$k_B \Theta_1 = \hbar v_l (6\pi^2 n)^{1/3}; \quad k_B \Theta_2 = \hbar v_t (6\pi^2 n)^{1/3}.$$

2.5. Нормировка коммутатора (2.94) обеспечена, если функции u_k и v_k взять в виде

$$u_k = \text{ch} \chi_k, \quad v_k = \text{sh} \chi_k. \quad (2.126)$$

а) Показать, что оператор H (см. (2.91)) диагонален, если

$$\text{th} 2\chi_k = -\frac{NV_k}{\epsilon_k + NV_k}. \quad (2.127)$$

б) Показать, что

$$a_k^+ a_k = u_k^2 a_k^+ a_k + v_k^2 + v_k^2 a_{-k}^+ a_{-k} + u_k v_k (a_k^+ a_{-k}^+ + a_{-k} a_k). \quad (2.128)$$

в) Волновая функция основного состояния Φ_0 обладает тем свойством, что действие на нее любого оператора a_k дает нуль:

$$a_k \Phi_0 = 0. \quad (2.129)$$

Показать, пользуясь (2.129), что смесь элементарных возбуждений, характеризующихся вектором \mathbf{k} , в основном состоянии описывается средним от оператора $a_k^+ a_k$ по основному состоянию:

$$\langle a_k^+ a_k \rangle_0 = \langle \Phi_0 | a_k^+ a_k | \Phi_0 \rangle = v_k^2 = \frac{1}{2} (\text{ch} 2\chi_k - 1). \quad (2.130)$$

Нарисовать схематический график величины $\langle a_k^+ a_k \rangle$ как функции $|\mathbf{k}|$, считая $V_k = \text{const}$. Заметим, что

$$\text{ch} 2\chi_k = \frac{\epsilon_k + NV_k}{\{(\epsilon_k + NV_k)^2 - N^2 V_k^2\}^{1/2}}. \quad (2.131)$$

2.6. Предположим, что взаимодействия в конденсированном бозонном газе таковы, что при малых k элементарные возбуждения можно трактовать как свободные квазичастицы и закон дисперсии для них дается некоторой функцией $\omega(k)$. Тогда (при малых k) динамический структурный фактор $S(\omega k)$ выражается приближенной формулой

$$S(\omega k) \approx N S(k) \delta(\omega - \omega(k)), \quad (2.132)$$

где $S(k)$ — структурный фактор для жидкости, вводимый в гл. 6. Выражение (2.132) удовлетворяет правилу сумм, о котором пойдет речь в задаче 6.9. Показать, пользуясь правилом сумм (см. ниже задачу 6.10), что структурный фактор для жидкости определяется формулой Фейнмана

$$\omega(k) = \frac{k^2}{2M S(k)}. \quad (2.133)$$

Структурный фактор для жидкости, измеренный методом дифракции нейтронов (см. [20], рис. 2), имеет острый максимум при $k=2,0 \text{ \AA}^{-1}$, что хорошо согласуется с предсказаниями, вытекающими из положения минимума функции дисперсии элементарных возбуждений.

Замечание. К этой задаче следует вернуться после изучения гл. 6 и особенно задач 6.9 и 6.10.

2.7. Диагонализировать гамильтониан

$$H = \omega a + a + \varepsilon (ab + ba^+),$$

где a, b — бозе-операторы.

Литература

1. Шифф Квантовая механика, ИЛ, 1959, гл. 13.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Квантовая механика, «Наука», 1964.
3. Хенли Э., Тирринг В., Элементарная квантовая теория поля, ИЛ, 1963.
4. Лейбфрнд Г., Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов, Физматгиз, 1963.
5. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела, Физматгиз, 1963.
6. Miller A., Pines D., Nozières P., Phys. Rev. 127, 2452 (1962).
7. Пайнс Д., Проблема многих тел, ИЛ, 1963.
8. Вгюескпер К. А., в сб. «Many Body problems», ed. by C. DeWitt, N. Y., 1959, p. 205—241.
9. Феупман R., в сб. «Progress in Low Temperature Physics», vol. 1. N. Y., 1955, p. 17.
10. Феупман R., Соһен M., Phys. Rev. 102, 1189 (1956).
11. Боголюбов Н. Н., J. Phys. (USSR) 11, 23 (1947).
12. Киттель Ч., Элементарная статистическая физика, ИЛ, 1960.
13. Ward J. C., Wilks J., Phil. Mag. 43, 48 (1952).
14. Dingle R. B., Adv. Phys. 1, 112—168 (1952).
15. De Launay J. в сб. «Solid State Physics», vol. 2. N. Y., 1956, p. 268.
16. Montroll E., J. Chem. Phys. 15, 575 (1947).
17. Van Hove L., Phys. Rev. 89, 1189 (1953).
18. Rosenstock H. P., Phys. Rev. 97, 290 (1955).
19. Messiah A., Quantum Mechanics, Sec. ed., Amsterdam, 1961—1962.
20. Henshaw D. G., Phys. Rev. 119, 9 (1960).