

Интегрирование в (70,4) удобно производить теперь в цилиндрических координатах в  $\kappa$ -пространстве:  $\kappa_{\perp}$ ,  $\kappa_z$ ,  $\varphi$ , где  $\kappa_{\perp} = \sqrt{\kappa_x^2 + \kappa_y^2}$ , а  $\varphi$  — полярный угол в плоскости  $\kappa_x$ ,  $\kappa_y$ . Абсолютная величина градиента:  $|\nabla_{\kappa} \omega| = \kappa$ . При  $\omega < \omega_0$  интеграл, берется по двум полостям гиперboloида:

$$df_{\kappa} = \frac{2\pi\kappa_{\perp}\kappa}{|\kappa_z|} d\kappa_{\perp}, \quad g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3 V \gamma} 2 \int_0^K \frac{2\pi\kappa_{\perp} d\kappa_{\perp}}{\sqrt{\kappa_{\perp}^2 + 2(\omega_0 - \omega)}};$$

в качестве верхнего предела  $K$  (значение которого не отражается на виде искомой особенности) можно взять какое-либо значение  $\kappa$ , большое по сравнению с  $\sqrt{\omega_0 - \omega}$ , но в то же время настолько малое, что еще применимо выражение (70,8) для формы изочастотной поверхности. В результате находим

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi^2 V \gamma} [K - \sqrt{2(\omega_0 - \omega)}].$$

При  $\omega > \omega_0$  аналогичным путем находим

$$g(\omega) = \frac{2}{(2\pi)^3 V \gamma} \int_{\kappa_{\perp \min}}^K \frac{2\pi\kappa_{\perp} d\kappa_{\perp}}{\sqrt{\kappa_{\perp}^2 - 2(\omega - \omega_0)}} = \frac{K}{2\pi^2 V \gamma},$$

где  $\kappa_{\perp \min}^2 = 2(\omega - \omega_0)$ . Таким образом, в окрестности седловой точки плотность числа колебаний имеет вид

$$g(\omega) = \begin{cases} g(\omega_0) - \frac{\sqrt{|\omega_0 - \omega|}}{\pi^2 V 2\gamma} & \text{при } \omega < \omega_0, \\ g(\omega_0) & \text{при } \omega > \omega_0. \end{cases} \quad (70,9)$$

И здесь  $g(\omega)$  имеет корневую особенность.

Для седловой точки с нижним знаком в (70,8) получается такой же результат с перестановкой областей  $\omega < \omega_0$  и  $\omega > \omega_0$  (корневая особенность при  $\omega > \omega_0$ ).

## § 71. Фононы.

Обратимся к вопросу о том, как выглядит картина колебаний решетки с точки зрения квантовой теории.

Вместо волн (69,6), в которых атомы испытывают в каждый момент времени определенные смещения, в квантовой теории вводится понятие о так называемых *фононах* как о некоторых распространяющихся по решетке *квазичастицах*, обладающих определенными энергиями и направлениями движения. Поскольку

энергия осциллятора в квантовой механике есть целое кратное от  $\hbar\omega$  (где  $\omega$  — частота классической волны), то энергия фонона связана с частотой  $\omega$  посредством

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad (71,1)$$

подобно тому, как это имеет место для световых квантов — фотонов. Что же касается волнового вектора  $\mathbf{k}$ , то он определяет так называемый *квазиимпульс* фонона  $\mathbf{p}$ :

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (71,2)$$

Это величина, во многом аналогичная обычному импульсу. В то же время между ними имеется существенное отличие, связанное с тем, что квазиимпульс есть величина, определенная лишь с точностью до прибавления постоянного вектора вида  $\hbar\mathbf{b}$ ; значения  $\mathbf{p}$ , отличающиеся на такую величину, физически эквивалентны.

Скорость фонона определяется *групповой скоростью* соответствующих классических волн:  $\mathbf{v} = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$ . Написанная в виде

$$\mathbf{v} = \frac{\partial\varepsilon(\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}, \quad (71,3)$$

эта формула вполне аналогична обычному соотношению между энергией, импульсом и скоростью частиц.

Все сказанное в §§ 69, 70 о свойствах спектра классических колебаний кристаллической решетки, полностью переносится (с соответствующим изменением терминологии) на энергетический спектр фононов — зависимость их энергии от квазиимпульса. В частности, энергетический спектр фононов  $\varepsilon(\mathbf{p})$  имеет  $3\nu$  ветвей, в том числе три акустические ветви. Рассмотренная в § 70 плотность числа колебаний становится теперь плотностью числа квантовых состояний фононов.

Свободному распространению волн в гармоническом приближении соответствует в квантовой картине свободное движение не взаимодействующих друг с другом фононов. В следующих же приближениях появляются различного рода процессы упругих и неупругих столкновений фононов. Эти столкновения и составляют механизм, приводящий к установлению теплового равновесия в фононном газе, т. е. к установлению равновесного теплового движения в решетке.

При всех таких процессах должен соблюдаться закон сохранения энергии, а также закон сохранения квазиимпульса. Последний, однако, требует сохранения суммарного квазиимпульса фононов лишь с точностью до прибавления любого вектора вида  $\hbar\mathbf{b}$ , что связано с неоднозначностью самого квазиимпульса. Таким образом, начальные ( $\mathbf{p}$ ) и конечные ( $\mathbf{p}'$ ) квазиимпульсы

при каком-либо процессе столкновения фононов должны быть связаны соотношением вида <sup>1)</sup>

$$\sum p = \sum p' + \hbar b. \quad (71,4)$$

В решетке может быть возбуждено одновременно сколько угодно одинаковых фононов; другими словами, в каждом квантовом состоянии фононов может находиться любое их число (в классической картине этому отвечает произвольная интенсивность волн). Это значит, что фононный газ подчиняется статистике Бозе. Поскольку к тому же полное число частиц в этом газе не является заданным и само определяется условиями равновесия, то его химический потенциал равен нулю (см. § 63). Поэтому среднее число фононов в каждом квантовом состоянии (с квазиимпульсом  $p$  и энергией  $\varepsilon$ ) определяется в тепловом равновесии функцией распределения Планка

$$\bar{n}_p = \frac{1}{e^{\varepsilon(p)/T} - 1}. \quad (71,5)$$

Отметим, что при высоких температурах ( $T \gg \varepsilon$ ) это выражение переходит в

$$\bar{n}_p = \frac{T}{\varepsilon(p)}, \quad (71,6)$$

т. е. число фононов в данном состоянии пропорционально температуре.

Понятие о фононах является частным случаем более общего понятия, играющего основную роль в теории квантовых энергетических спектров всяких макроскопических тел. Всякое слабо возбужденное состояние макроскопического тела может рассматриваться в квантовой механике как совокупность отдельных *элементарных возбуждений*. Эти элементарные возбуждения ведут себя как некоторые квазичастицы, движущиеся в занимаемом телом объеме. До тех пор, пока число элементарных возбуждений достаточно мало, они «не взаимодействуют» друг с другом (т. е. их энергии просто складываются), так что их совокупность можно рассматривать как идеальный газ квазичастиц. Подчеркнем лишний раз, что понятие элементарных возбуждений возникает как способ квантовомеханического описания коллективного движения атомов тела, и они ни в какой мере не могут быть отождествлены с отдельными атомами или молекулами.

В случае фононов их взаимодействию отвечает (в классической картине) ангармонизм колебаний атомов в решетке. Но, как уже

<sup>1)</sup> Процессы, в которых суммарный квазиимпульс не остается постоянным, а меняется на  $\hbar b$ , называют *процессами переброса*.

было отмечено в § 64, в твердых телах эти колебания фактически всегда малы, а потому и «почти гармоничны». Поэтому взаимодействие фононов в твердых телах фактически всегда слабо.

В заключение выпишем формулы, определяющие термодинамические величины твердого тела по спектру фононов в нем.

Свободная энергия твердого тела в термодинамическом равновесии дается формулой (64,1). Перейдя в ней от суммирования к интегрированию по непрерывному ряду фоновых состояний, имеем

$$F = N\varepsilon_0 + T \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \int \ln \left[ 1 - \exp \left( -\frac{\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})}{T} \right) \right] \frac{Vd^3k}{(2\pi)^3}, \quad (71,7)$$

где суммирование производится по всем ветвям спектра, а интегрирование — по значениям  $\mathbf{k}$  в одной ячейке обратной решетки<sup>1)</sup>. Введя плотности  $g_{\alpha}(\omega)$  числа состояний в каждой ветви спектра и перейдя к интегрированию по частотам, эту формулу можно записать также и в виде

$$F = N\varepsilon_0 + TV \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \int \ln (1 - e^{-\hbar\omega/T}) g_{\alpha}(\omega) d\omega. \quad (71,8)$$

Неравновесное макроскопическое состояние твердого тела описывается некоторым неравновесным распределением фононов по их квантовым состояниям, подобно тому, как это делается для идеального газа. Энтропия тела в таком состоянии может быть вычислена с помощью полученных в § 55 (для бозе-газа) формул. В частности, если в каждом состоянии имеется много фононов, энтропия равна

$$S = \sum_j G_j \ln \frac{eN_j}{G_j},$$

где  $N_j$  — число фононов в группе из  $G_j$  близких состояний (см. (55,8)). Этот случай отвечает высоким температурам ( $T \gg \Theta$ ). Перепишем эту формулу в интегральном виде, отвечающем классической картине тепловых колебаний. Число состояний фононов (в каждой из ветвей спектра), приходящихся на интервал  $d^3k$  значений волнового вектора и элемента  $dV$  пространственного объема, есть  $d\tau = d^3k dV / (2\pi)^3$ . Пусть  $U_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) d\tau$  — энергия тепловых колебаний в том же элементе фазового пространства  $d\tau$ . Соответствующее число фононов есть

$$\frac{U_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})} d\tau.$$

<sup>1)</sup> Эта формула была уже использована в § 68 для вклада в свободную энергию от акустических ветвей спектра.

Подставляя эти выражения вместо  $G_j$  и  $N_j$  и переходя к интегрированию, получим следующую формулу для энтропии твердого тела с заданным неравновесным распределением энергии в спектре тепловых колебаний:

$$S = \sum_{\alpha=1}^{3v} \int \ln \frac{e^{U_{\alpha}}(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{k})} d\tau. \quad (71,9)$$

## § 72. Операторы рождения и уничтожения фононов

Покажем теперь, каким образом введенные в предыдущем параграфе понятия появляются при последовательном проведении квантования колебаний решетки. Получающиеся при этом формулы имеют и самостоятельное значение, — на них основана математическая техника для изучения элементарных актов взаимодействия фононов.

Произвольное колебательное движение кристаллической решетки может быть представлено в виде наложения бегущих плоских волн<sup>1)</sup>. Если рассматривать объем решетки как большой, но конечный, то волновой вектор  $\mathbf{k}$  будет пробегать ряд хотя и близких друг к другу, но дискретных значений. Смещения атомов  $\mathbf{u}_s(t, \mathbf{n})$  изобразятся тогда дискретной суммой вида

$$\mathbf{u}_s(t, \mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha=1}^{3v} \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\alpha} \mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_n} + a_{\mathbf{k}\alpha}^* \mathbf{e}_s^{(\alpha)*}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_n}) \quad (72,1)$$

( $N$  — число элементарных ячеек в решетке). Суммирование производится по всем (не эквивалентным) значениям  $\mathbf{k}$  и по всем ветвям спектра колебаний, а остальные обозначения имеют следующий смысл.

Векторы  $\mathbf{e}_s^{(\alpha)}$  в (72,1) — векторы поляризации колебаний, т. е. амплитуды, которые не только удовлетворяют уравнениям (69,7), но и предполагаются теперь нормированными определенным условием. Это условие (вместе с соотношениями ортогональности (69,11)) запишем в виде

$$\sum_{s=1}^v \frac{m_s}{m} \mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k}) [\mathbf{e}_s^{(\alpha')}(\mathbf{k})]^* = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (72,2)$$

( $m = \sum m_s$  — суммарная масса атомов в одной ячейке). Условия (72,2) оставляют еще произвольным общий (не зависящий от  $s$ ) фазовый множитель в векторах  $\mathbf{e}_s^{(\alpha)}$ . Этот произвол позволяет наложить на эти векторы дополнительные условия

$$\mathbf{e}_s^{(\alpha)}(-\mathbf{k}) = [\mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k})]^* \quad (72,3)$$

<sup>1)</sup> Вполне аналогично тому, как это делается для свободного электромагнитного поля — ср. II, § 52.