

§ 66. Взаимодействие фононов

Физическая природа кинетических явлений (теплопроводность, электропроводность) в газах состоит в процессах переноса, осуществляемого тепловым движением частиц газа; в кинетических явлениях в твердых телах роль частиц переходит к квазичастицам. Приступая к изучению этих явлений, мы начнем с теплопроводности немагнитных диэлектриков. Сравнительная простота физической картины этого явления, по сравнению с кинетическими процессами в других типах твердых тел, связана с тем, что здесь фигурируют квазичастицы лишь одного сорта — фононы.

Напомним (см. V, § 72), что представление о свободных фононах возникает в результате квантования колебательного движения атомов в кристаллической решетке в гармоническом приближении, т. е. с учетом лишь квадратичных (по смещениям атомов) членов в гамильтониане. Различные же процессы взаимодействия фононов возникают при учете членов следующих порядков малости — ангармонических членов третьего и т. д. порядков по смещениям¹⁾.

Первые ангармонические члены — кубические — в классической энергии решетки имеют вид

$$H^{(3)} = \frac{1}{6} \sum_{(ns)} \Lambda_{\alpha\beta\gamma}^{s_1 s_2 s_3} (n_1 - n_3, n_2 - n_3) U_{s_1\alpha}(n_1) U_{s_2\beta}(n_2) U_{s_3\gamma}(n_3). \quad (66,1)$$

Здесь $U_s(\mathbf{n})$ — векторы смещения атомов в решетке; α, β, γ — векторные индексы, пробегаяющие значения x, y, z ; s_1, s_2, s_3 — номера атомов в элементарной ячейке; n_1, n_2, n_3 — целочисленные «векторы», определяющие положение ячейки в решетке; символ (ns) под знаком суммы означает, что суммирование производится по всем \mathbf{n} и по всем s ; ввиду однородности кристалла функции Λ зависят только от взаимных расстояний $n_1 - n_3, n_2 - n_3$ между ячейками, но не от их абсолютных положений в решетке.

¹⁾ Необходимость учета ангармоничности колебаний атомов в решетке при рассмотрении теплопроводности кристалла была впервые указана Дебаем (P. Debye, 1914) и Борном (M. Born, 1914).

Вторично-квантованный гамильтониан получается подстановкой в (66,1) вместо векторов смещений операторов $\hat{U}_s(\mathbf{n})$, выраженных через операторы рождения $\hat{c}_{\mathbf{k}g}^+$ и уничтожения $\hat{c}_{\mathbf{k}g}$ фононов сорта (т. е. ветви фононного спектра) g и с квазиимпульсом \mathbf{k} формулой

$$\hat{U}_s(\mathbf{n}) = \sum_{\mathbf{k}g} [2M\mathcal{N}\omega_g(\mathbf{k})]^{-1/2} \{ \hat{c}_{\mathbf{k}g} e_s^{(g)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_\mathbf{n}} + \hat{c}_{\mathbf{k}g}^+ e_s^{(g)*}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_\mathbf{n}} \}, \quad (66,2)$$

где \mathcal{N} — число ячеек в решетке, M — суммарная масса атомов в ячейке, $e_s^{(g)}(\mathbf{k})$ — векторы поляризации фононов, $\omega_g(\mathbf{k})$ — энергия фонона сорта g ¹⁾. При подстановке возникают члены, содержащие операторы \hat{c} и \hat{c}^+ в различных комбинациях по три. Эти члены описывают процессы с участием трех фононов: произведения вида $\hat{c}^+\hat{c}^+\hat{c}$ — распад одного фонона на два, а произведения вида $\hat{c}^+\hat{c}\hat{c}$ — слияние двух сталкивающихся фононов в один (члены же $\hat{c}\hat{c}\hat{c}$ и $\hat{c}^+\hat{c}^+\hat{c}^+$ отвечают процессам, запрещенным законом сохранения энергии).

Напишем, например, члены, отвечающие распаду фонона (\mathbf{k}_1g_1) на два фонона (\mathbf{k}_2g_2) и (\mathbf{k}_3g_3). Перейдя в (66,1) от суммирования по $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$ к суммированию по $\mathbf{v}_1 = \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_3, \mathbf{v}_2 = \mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_3, \mathbf{n}_3$, напишем эти члены в виде

$$\hat{H}_{\text{расп}}^{(3)} = \Omega \frac{\hat{c}_1 \hat{c}_2^+ \hat{c}_3^+}{\mathcal{N}^{3/2} (\omega_1 \omega_2 \omega_3)^{1/2}} \sum_{\mathbf{n}_3} \exp \{ i (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \mathbf{r}_{\mathbf{n}_3} \}, \quad (66,3)$$

где

$$\Omega = (2M)^{-3/2} \sum_{(\mathbf{v}_s)} \Lambda_{\alpha\beta\gamma}^{s_1 s_2 s_3}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) e_{1\alpha} e_{2\beta}^* e_{3\gamma}^* \exp \{ i (\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_{\mathbf{v}_1} - \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_{\mathbf{v}_2}) \}, \quad (66,4)$$

$$\hat{c}_1 \equiv \hat{c}_{\mathbf{k}_1 g_1}, \quad \omega_1 = \omega_{g_1}(\mathbf{k}_1), \quad \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_{s_1}^{(g_1)}(\mathbf{k}_1), \dots$$

В (66,3) выделен экспоненциальный множитель, зависящий от абсолютного положения \mathbf{n}_3 ячейки в решетке. Суммирование этого множителя по всем \mathbf{n}_3 дает \mathcal{N} , если $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3$ совпадает с каким-либо периодом обратной решетки \mathbf{b} , или нуль в противном случае. Поэтому

$$\hat{H}_{\text{расп}}^{(3)} = \Omega \frac{\hat{c}_1 \hat{c}_2^+ \hat{c}_3^+}{\mathcal{N}^{3/2} (\omega_1 \omega_2 \omega_3)^{1/2}}, \quad (66,5)$$

причем квазиимпульсы фононов удовлетворяют закону сохранения

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{b}. \quad (66,6)$$

¹⁾ В этой главе пользуемся системой единиц, в которой $\hbar = 1$. В этой системе размерности импульса и волнового вектора совпадают; то же относится к размерностям энергии и частоты.

Условие (66,6) следует рассматривать как уравнение, определяющее значение, скажем, квазиимпульса k_3 , по заданным значениям k_1 и k_2 . При этом надо брать значения k_1 и k_2 внутри некоторой выбранной одной элементарной ячейки обратной решетки (закрывающей в себе все физически различные значения квазиимпульса) и следить за тем, чтобы и k_3 тоже оказалось в этой ячейке. Последнее условие определяет необходимое значение \mathbf{b} в (66,6), причем однозначным образом. Действительно, если при заданных k_1, k_2, \mathbf{b} вектор k_3 лежит в выбранной ячейке, то любое изменение \mathbf{b} заведомо выведет бы k_3 из этой ячейки. Процессы (в данном случае — распад фонона), при которых закон сохранения квазиимпульса содержит отличный от нуля вектор \mathbf{b} , называются процессами с *перебросом*¹⁾, в отличие от *нормальных* процессов с $\mathbf{b} = 0$. Надо сказать, что различие между этими двумя категориями процессов в известном смысле условно: каждый конкретный процесс может оказаться нормальным или с перебросом в зависимости от выбора основной ячейки. Существенно, однако, что никаким выбором нельзя обратить \mathbf{b} в нуль одновременно для всех возможных процессов. Целесообразно выбирать основную ячейку обратной решетки так, чтобы точка $\mathbf{k} = 0$ (бесконечная длина волны) находилась в ее центре; это будет подразумеваться везде ниже. При таком выборе всем низкочастотным фононам отвечают малые значения квазиимпульса ($k \ll 1/d$, d — постоянная решетки), а все процессы с участием одних только низкочастотных фононов являются нормальными²⁾. Большие же значения квазиимпульса ($k \sim 1/d$) будут отвечать коротковолновым фононам с большой энергией (порядка величины дебаевской температуры Θ).

Вернемся к процессу распада фонона. Согласно общим правилам квантовой механики (см. III, (43,1)), вероятность распада, при котором квазиимпульс одного из двух возникающих новых фононов лежит в интервале d^3k_2 , дается квадратом соответствующего матричного элемента оператора возмущения (66,5) согласно формуле

$$dW = 2\pi |\langle N_1 - 1, N_2 + 1, N_3 + 1 | H^{(3)} | N_1, N_2, N_3 \rangle|^2 \times \\ \times \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) \frac{\mathcal{V}^3 d^3k_2}{(2\pi)^3}, \quad (66,7)$$

где $N_1 \equiv N_{k,g}$, N_2, N_3 — числа заполнения фононов в начальном состоянии кристалла. Матричные элементы операторов рождения и уничтожения фононов даются формулами

$$\langle N - 1 | \hat{c} | N \rangle = \langle N | \hat{c}^+ | N - 1 \rangle = \sqrt{N}. \quad (66,8)$$

¹⁾ Umklapp — по немецкой терминологии.

²⁾ Если же, например, выбрать основную ячейку так, чтобы точка $\mathbf{k} = 0$ лежала в одной из ее вершин, то малым частотам будут отвечать также и окрестности других вершин, вблизи которых k уже не малы.

В результате получаем вероятность распада в виде

$$dW = w N_1 (N_2 + 1) (N_3 + 1) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3}, \quad (66,9)$$

где

$$w = w(g_2 \mathbf{k}_2, g_3 \mathbf{k}_3; g_1 \mathbf{k}_1) = \frac{2\pi v}{\omega_1 \omega_2 \omega_3} |\Omega|^2 \quad (66,10)$$

($v = \mathcal{V}^2/\mathcal{N}$ — объем ячейки кристаллической решетки). Таким образом, вероятность процессов пропорциональна числу N_1 начальных фононов в начальном состоянии кристалла, а также числам конечных фононов ($N_2 + 1$ и $N_3 + 1$) в конечном состоянии кристалла. Последнее свойство связано со статистикой Бозе, которой подчиняются фононы, и характерно вообще для всех процессов с участием бозонов¹⁾.

Процессом, обратным распаду, является «слияние» двух фононов \mathbf{k}_2 и \mathbf{k}_3 в один фонон \mathbf{k}_1 . Легко найти, что члены в гамильтониане, ответственные за этот процесс, отличаются от (66,5) заменой произведения c -операторов в числителе на $\hat{c}_1^+ \hat{c}_2 \hat{c}_3$ и заменой Ω на Ω^* . Поэтому вероятность этого процесса дается формулой, отличающейся от (66,9) лишь N -множителями:

$$dW = w N_2 N_3 (N_1 + 1) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3}. \quad (66,11)$$

Функции же w здесь и в (66,9) одинаковы. Последнее обстоятельство отвечает общему правилу: в борновском приближении (первое приближение теории возмущений) вероятности прямого и обратного элементарных актов рассеяния одинаковы (см. III, § 126).

Среди различных ветвей фононного спектра всегда имеется три *акустических*, в которых энергия стремится к нулю при $\mathbf{k} \rightarrow 0$; для длинноволновых (малые \mathbf{k}) акустических фононов зависимость $\omega(\mathbf{k})$ линейна. Для дальнейшего будет существенным поведение функции w (66,10) для таких фононов.

Его можно выяснить, заметив свойство коэффициентов Λ в гамильтониане (66,1), выражающее собой тот факт, что простое смещение кристалла как целого не меняет его энергии — вне зависимости от того, деформирован ли уже кристалл или нет. Это значит, что энергия $H^{(3)}$ не должна измениться, если заменить в ней любой из множителей $U_s(\mathbf{n})$ на $U_s + a$ с независящим от \mathbf{n} , s вектором a . Для этого необходимо, чтобы

¹⁾ Функция распределения фононов $N_{\mathbf{k}}$ (или $N(\mathbf{k})$) будет определяться как числа заполнения квантовых состояний с различными значениями квазиимпульса \mathbf{k} . Число состояний, приходящих на элемент $d^3 k$ \mathbf{k} -пространства, есть $d^3 k / (2\pi)^3$, так что распределение, отнесенное к $d^3 k$, есть $N_{\mathbf{k}} / (2\pi)^3$.

было

$$\sum_{n_1 s_1} \Lambda_{\alpha\beta\gamma}^{s_1 s_2 s_3} (n_1, n_2, n_3) = 0, \quad (66,12)$$

где суммирование производится хотя бы по одной паре переменных $n_i s_i$.

Из трех участвующих в процессе фононов могут быть длинноволновыми акустическими либо один, либо все три (с двумя такими фононами при третьем коротковолновом не могут быть соблюдены законы сохранения импульса и энергии). Для акустического фонона в пределе $k \rightarrow 0$ поляризационные векторы $e_s(k)$ стремятся к независимой от s постоянной, так как все атомы в ячейке колеблются вместе; множители же $\exp(ikr_n)$ стремятся к единице. В силу свойства (66,12), величина Ω (66,4) стремится, следовательно, к нулю, а при малых k пропорциональна k или (что то же для акустического фонона) пропорциональна ω . В результате находим, что

$$\omega \propto k_1, \quad (66,13)$$

если длинноволновым является один фонон, или

$$\omega \propto k_1 k_2 k_3, \quad (66,14)$$

если длинноволновые все три фонона.

К результату (66,13—14) можно прийти и более наглядным путем, вспомнив, что длинноволновые акустические фононы отвечают макроскопическим звуковым волнам, которые допускают рассмотрение с помощью макроскопической теории упругости. В этой теории энергия деформированного кристалла выражается через тензор деформации

$$U_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial U_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \quad (66,15)$$

где $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ — вектор макроскопического смещения точек упругой среды. Именно компоненты этого тензора являются теми малыми величинами, по которым происходит разложение упругой энергии. При вторичном квантовании вектор \mathbf{U} заменяется оператором $\hat{\mathbf{U}}$, аналогичным (66,2). Дифференцирование же $\hat{\mathbf{U}}$ по координатам для построения операторов $\hat{U}_{\alpha\beta}$ дает тот дополнительный множитель k , который и приводит к законам (66,13—14).

§ 67. Кинетическое уравнение для фононов в диэлектрике

В твердом кристалле фононы образуют разреженный газ, и кинетическое уравнение для них составляется подобно тому, как это делается для обычного газа.