элементарной ячейки прямой решетки соотношением

$$V_б = (a_1 [b_1 c_1]) = (2\pi)^3 \frac{[bc]\{[ca][ab]\}}{\{a[bc]\}^2} =$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{a[bc]} = \frac{(2\pi)^3}{v_0}, \quad (46,7)$$

где v_0 — объем элементарной прямой решетки.

§ 47. Колебания решетки

Ионы, или атомы, расположенные в узлах кристаллической решетки, находятся в тепловом движении и колеблются около положений равновесия. В твердых кристаллах при температурах ниже температуры плавления амплитуда этих колебаний мала по сравнению с постоянной решетки.

Обозначим через $\boldsymbol{n}$ положение узла (равновесное положение) $\boldsymbol{n}$-го иона и через ξ_n — смещение $\boldsymbol{n}$-го атома так, что

$$\boldsymbol{R}_n = \boldsymbol{n} + \xi_n. \quad (47,1)$$

Тогда, поступая точно так же, как это было сделано нами в § 50 ч. III в классическом приближении, мы можем разложить в ряд по степеням малых смещений потенциальную энергию $U(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j)$. Мы видели в § 50 ч. III, что характер движения решетки существенно зависит от ее структуры. Уже само наличие ячейки с базисом (например, наличие двух сортов частиц с разными массами) приводит к появлению новых модов колебаний.

Поскольку нас в первую очередь интересует принципиальная сторона дела, мы не будем усложнять выкладок и ограничимся кристаллами с простой решеткой Бравэ. Более того, для простоты записи мы будем опускать векторные индексы, как будто бы кристалл был одномерной цепочкой. Тогда можно написать вблизи положений равновесия

$$U(R_n - R_{n'}) = U(n - n') + \sum_{n', n} \frac{\partial^2 U}{\partial R_n \, \partial R_{n'}} \xi_n \xi_{n'} +$$

$$+ \frac{1}{6} \sum_{n, n', n''} \frac{\partial^3 U}{\partial R_n \, \partial R_{n'} \, \partial R_{n''}} \xi_n \xi_{n'} \xi_{n''} + \ldots . \quad (47,2)$$

Ограничиваясь двумя членами разложения, можно написать гамильтониан в форме

$$H = H_0 + \sum_n \frac{P_n^2}{2M} + \sum_{n, n'} a_{nn'} \xi_n \xi_{n'}, \quad (47,3)$$

где в H_0 включены все слагаемые, не зависящие от смещений.

Уравнения движения гласят:

$$\dot{P}_n = M\ddot{\xi}_n = -\sum_{n'} a_{nn'}\xi_{n'}. \tag{47,4}$$

Решениями уравнений движения, удовлетворяющими условиям трансляционной симметрии, служат функции

$$\xi_n = \sum_f q_n e^{i(fn-\omega_f t)}. \tag{47,5}$$

Подстановка (47,5) в (47,4) дает

$$M\omega_f^2 = \sum_{n'} a_{nn'} e^{if(n-n')}. \tag{47,6}$$

Напомним, что значения волнового числа определяются из граничных условий. Если в качестве граничных условий выбрать условия периодичности на длине $L = Na$, то

$$f = \pm\frac{\pi}{a}\frac{m}{N} \qquad (m = 1,\ 2,\ \ldots,\ N). \tag{47,7}$$

Волновое число f в решетке определено не точно, но с точностью до величины $\frac{2\pi}{a}$: при замене $f \to f + \frac{2\pi}{a}$ смещение не изменяется. Мы будем нормировать волновые числа в интервале

$$-\frac{\pi}{a} \leqslant f \leqslant \frac{\pi}{a}. \tag{47,8}$$

В одномерной цепочке вектор обратной решетки равен $\frac{2\pi}{a}$. Поэтому можно сказать, что вектор f лежит внутри первой зоны Бриллюэна. Не повторяя вычислений § 50 ч. III, перейдем к нормальным координатам, введя переменные p_f и q_f соотношениями

$$p_n = \left(\frac{M}{N}\right)^{1/2} \sum_f e^{ifn} p_f, \tag{47,9}$$

$$\xi_n = \frac{1}{(MN)^{1/2}} \sum_f e^{ifn} q_f. \tag{47,10}$$

Поскольку p_n и q_n вещественные величины, имеют место равенства

$$\left.\begin{aligned} p_{-f} &= p_f^*, \\ q_{-f} &= q_f^*. \end{aligned}\right\} \tag{47,11}$$

Подставляя (47,9) и (47,10) в (47,3), с учетом (47,6), находим

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_f (p_f^2 + \omega_f^2 q_f^2). \tag{47,12}$$

Второе слагаемое в (47,12) представляет гамильтониан системы независимых осцилляторов с частотами ω_f. Переход к квантовому гамильтониану совершается, как обычно, путем замены p_f и q_f операторами, удовлетворяющими перестановочным соотношениям (26,2)—(26,4) ч. V.

Сравнивая выражения (47,5) и (47,12) с соответствующими формулами для операторов электромагнитного поля, мы убеждаемся в их формальной тождественности.

Как и в случае электромагнитного поля, удобно ввести операторы рождения $\hat{b}_f$ и уничтожения $\hat{b}_f^+$, удовлетворяющие перестановочным соотношениям (101,3) ч. V.

Пользуясь результатами § 101 ч. V, мы можем сразу написать квантованную энергию решетки

$$E = \sum_f \left(\hat{b}_f^+ \hat{b}_f + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_f = \sum_f \left(n_f + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_f. \tag{47,13}$$

Так же как и в случае электромагнитного поля, системе квантованных волн можно сопоставить систему независимых квантовых частиц — бозонов, получивших название фононов. Формула (47,13) показывает, что энергия фонона с волновым числом f равна $\hbar\omega_f$.

При переходе к трехмерному кристаллу общая ситуация, по существу, усложняется лишь в малой степени. Смещение ξ_n можно представить в виде вектора

$$\xi_n = \sum_f \sum_{j=1}^{3} e_{fj} q_{fj} e^{i(fn - \omega_f t)}, \tag{47,14}$$

где e_{fj} — три вектора поляризации: продольной поляризации, при которой вектор e_{f1} направлен параллельно вектору f, и поперечной, при которой векторы e_{f2} и e_{f3} перпендикулярны к вектору f. Из вещественности ξ_n следует, что $q_{fj}^* = q_{-fj}$. Волновой вектор f определен с точностью до вектора обратной решетки K.

Гамильтониан трехмерной решетки имеет вид

$$H = \frac{1}{2} \sum_{fj} (p_{fj}^* p_{fj} + \omega_{fj}^2 q_{fj}^* q_{fj}). \tag{47,15}$$

При данном значении f существуют три фонона с частотами ω_{f1}, ω_{f2} и ω_{f3}.

В отличие от фотонов, у которых имеется линейная связь между частотой ω и волновым числом f, у фононов всегда имеется сложный закон дисперсии.

В линейной цепочке закон дисперсии определен формулой (50,13) ч. III, в трехмерном кристалле имеются разные законы дисперсии для различных поляризаций, т. е. $\omega_{fj} = \omega(f_j)$.

Лишь при малых значениях волнового вектора в кристаллах с кубической симметрией можно полагать

$$\omega_{fj} = \omega_f = cf, \tag{14,16}$$

где c — скорость звука.

Для выполнения квантования удобно ввести операторы рождения $\hat{b}^+_{fj}$ и уничтожения $\hat{b}_{fj}$ фононов, положив

$$\hat{q}_{fj} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_f}}\,\hat{b}_{fj}; \quad \hat{q}^+_{fj} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_f}}\,\hat{b}^+_f. \tag{47,17}$$

Правила коммутации для операторов рождения и уничтожения фононов (101,3) ч. V следует записать в виде

$$\hat{b}_{fj}\hat{b}^+_{f'j'} - \hat{b}^+_{f'j'}\hat{b}_{fj} = \delta_{ff'}\delta_{jj'}. \tag{47,18}$$

При этом

$$E = \sum_f \sum_j \left(\hat{b}^+_{fj}b_{fj} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{fj} = \sum_f \sum_j \left(n_{fj} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{fj}. \tag{47,19}$$

Обобщение теории на случай решеток с базисом также не вносит принципиально новых моментов. В самом общем случае можно утверждать, что тепловое возбуждение решетки описывается системой элементарных независимых частиц — фононов.

Таким образом, описание коллективных возбуждений — волн в кристаллической решетке, весьма сходно с описанием поля электромагнитного излучения в полости. Необходимо, однако, подчеркнуть, что эта аналогия является до известной степени формальной. В то время как фотоны обладают той же степенью реальности, что и любые другие частицы — электроны, мезоны или протоны, — фононы являются фиктивными, формально введенными образованиями. Действительно, гамильтониан в форме (47,3), допускающий введение нормальных координат и преобразование к виду (47,19), не является точным. Он был получен в результате пренебрежения в формуле (47,2) членами третьего и более высокого порядка малости, т. е. в гармоническом приближении. Учет ангармоничности делает невозможным приведение гамильтониана к форме (47,3), т. е. к сумме квадратичных слагаемых. Поэтому сама возможность введения понятия фононов тесно связана с приближенным рассмотрением теплового движения кристаллической решетки. В отличие от истинных бозе-частиц — фотонов, фононы именуются квазичастицами. Отличие квазичастиц — фононов от истинных частиц — фотонов особенно наглядно проявляется в том, что фононам нельзя приписать определенное значение импульса. Действительно, импульс свободной частицы, как и ее энергия, пробегает непрерывный и ничем не ограниченный ряд значений. В любых взаимодействиях энергия и импульс сохраняются. У фонона роль импульса формально играет величина $\hbar\boldsymbol{f}$. Однако значения этой величины лежат в определенном интервале (47,8). Более того, значение вектора $\hbar\boldsymbol{f}$ определено не однозначно, но лишь с точностью до величины $\hbar\boldsymbol{K}$, где $\boldsymbol{K}$ — вектор обратной решетки. Поэтому вектор $\hbar\boldsymbol{f}$ получил название квазиимпульса. В отличие от истинного импульса, значение квазиимпульса при взаимодействиях фонона с другими фононами или электронами может не сохраняться. Кристаллическая решетка может произвольным образом добавить или отнять у фонона квазиимпульс $\hbar\boldsymbol{K}$. Несмотря на фиктивный характер квазичастиц — фононов, их введение оказалось весьма плодотворным. Оно является основной для рассмотрения всех процессов, происходящих в твердых телах. Более того, введение элементарных возбуждений как некоторых квазичастиц, является типичным для современной физики методом подхода к описанию возбужденных состояний в системах с большим числом частиц.

В ряде проблем возбуждение, отвечающее коллективному движению макроскопической системы, удается описать при помощи некоторых координат X_i так, что полный гамильтониан системы $\hat{H}$ оказывается равным

$$\hat{H} = \sum \hat{H}_i, \qquad \text{где } \hat{H}_i = aP_i^2 + f(X_i).$$

При этом и энергия ситемы представляется в виде суммы

$$E = \sum E_i.$$

Очень часто оказывается при этом возможным найти такие переменные, в которых оператор Гамильтона $\hat{H}_i$ имеет вид, сходный с оператором Гамильтона для осциллятора. Тогда говорят, что коллективное возбуждение системы можно разложить на совокупность элементарных возбуждений. Собственным значениям $\hat{H}_i$, отвечающим i-й степени свободы коллективного движения, можно сопоставить энергию некоторой квазичастицы. Разобранный выше случай колебаний решетки кристалла как целого приводит к одному из видов квазичастиц — фононам. Каждая квазичастица отвечает одной степени свободы коллективного движения системы. Введение квазичастиц имеет то преимущество, что оно позволяет сопоставить движению системы реальных взаимодействующих частиц систему невзаимодействующих или слабо взаимодействующих квазичастиц.

Энергетический спектр совокупности квазичастиц совпадает со спектром реальной системы. Возможность введения квазичастиц выявилась в ряде задач, связанных с теорией систем со многими частицами и главным образом в теории твердого тела. Поэтому в настоящее время в теоретической физике имеется множество квазичастиц, например, поляроны (электроны в полярных кристаллах, окруженные «облаком» фононов), экситоны (пара, образованная в полупроводнике электроном и дыркой); магноны (элементарные возбуждения в парамагнитных диэлектриках), плазмоны и т. п. Все эти квазичастицы не являются реально существующими частицами. Однако их формальное введение отражает характер процессов, происходящих в системах многих частиц, и позволяет пользоваться удобным и хорошо разработанным расчетным аппаратом.

Понятие о фононах является основным при рассмотрении движения электронов в кристаллической решетке. Мы увидим, что взаимодействие электронов с колеблющейся решеткой и рассеяние их на атомах решетки обусловливает появление электрического сопротивления. Это взаимодействие, как будет видно из дальнейшего, можно формально описывать как взаимодействие сталкивающихся частиц и электронов, свободно движущихся в объеме тела.

Для того чтобы понятие квазичастиц имело смысл, необходимо, чтобы их время жизни было достаточно велико. Если $\bar{\varepsilon}$ — средняя энергия квазичастицы, а $\Delta\varepsilon$ — неопределенность в ее энергии, то должно выполняться неравенство

$$\bar{\varepsilon} \gg \Delta\varepsilon \sim \frac{\hbar}{\tau}, \tag{47,20}$$

где τ — время жизни квазичастицы.

Процессами, определяющими длительность жизни квазичастиц, могут быть всякого рода процессы поглощения и рассеяния. В случае фононов источниками поглощения и рассеяния могут служить примеси в кристалле и ангармоничность, отвечающая столкновениям фононов между собой.

В чистом кристалле число примесей мaлó. При низких температурах ангармоничность также мала. Поэтому при низких температурах, достаточно далеких от температуры плавления, время жизни фононов оказывается весьма малым и понятие о фононах как о квазичастицах, имеет полный смысл.