

§ 56. Полный гамильтониан твердого тела

Воспользовавшись полученными выше результатами, мы можем написать полный гамильтониан твердого тела в виде

$$\begin{aligned} \hat{H} = & - \sum \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_j - \frac{\hbar^2}{2m} \sum \Delta_i + \sum U(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum U(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \sum \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) + \\ & + \sum \varepsilon(f) \left(\hat{b}_f^+ \hat{b}_f + \frac{1}{2} \right) + i \sum_{k, f} D_{\omega} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}+f, \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{b}_f - \hat{a}_{\mathbf{k}-f, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{b}_f^+ \right) + \\ & + \sum_{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > \lambda_{\text{min}}} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < \lambda_{\text{min}}} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (56,1) \end{aligned}$$

Здесь $\varepsilon(\mathbf{k})$ — энергия электрона (квазичастицы) с волновым вектором \mathbf{k} . Операторы $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ и $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ представляют операторы уничтожения и рождения электрона (квазичастицы) с волновым вектором \mathbf{k} и спиновым индексом σ . Энергия другой квазичастицы — фонона $\varepsilon(f) = \hbar \omega_f$.

Кулоновское взаимодействие между электронами на больших расстояниях сводится к нулевым плазменным колебаниям, на малых расстояниях — к экранированному взаимодействию и образованию квазичастиц. Что же касается взаимодействия между колеблющейся решеткой и электронами (квазичастицами), то оно формально описывается оператором столкновений двух независимых квазичастиц одного фермиона и одного бозона. Это взаимодействие служит причиной переходов электрона из одних состояний в другие. Гамильтониан твердого тела в представлении вторичного квантования был впервые получен Фрелихом. Примером использования расчетной техники метода вторичного квантования послужит получение важной формулы для вероятности перехода электрона из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' с испусканием или поглощением одного фонона. В нашей задаче стационарные состояния невозмущенной системы представляют состояния с определенным числом фононов n_f и определенным числом электронов $n_{k\sigma}$. Последние в силу принципа запрета равны единице или нулю.

Если мы ограничимся первым приближением теории возмущений, то окажется, что возможны лишь переходы с поглощением или испусканием только одного фонона. Действительно, в оператор возмущения входят операторы \hat{b}_f или \hat{b}_f^+ , но не их произведения. Матричные же элементы от операторов b_f и b_f^+ отличны от нуля только для переходов, при которых число фононов изменяется на единицу [см. § 99 ч. V].

Рассмотрим, для определенности, случай, когда электрон переходит из состояния с волновым числом \mathbf{k} и энергией $E(\mathbf{k})$ в состояние \mathbf{k}' с большей энергией. При этом происходит поглощение фонона с волновым числом \mathbf{f} , так что

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{f}.$$

Поскольку полная энергия системы (электрон + фононы) должна оставаться постоянной, энергия электрона после столкновения

$$E(\mathbf{k}') = E(\mathbf{k}) + \hbar\omega_{\mathbf{f}}.$$

В представлении вторичного квантования процессу перехода отвечает уменьшение на единицу числа электронов в состоянии $\mathbf{k}\sigma$ и фононов в состоянии \mathbf{f} и увеличение на единицу числа электронов в состоянии $\mathbf{k}'\sigma$.

Для нахождения вероятности такого перехода следует вычислить матричный элемент

$$(H_{\text{вз}})_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = (n_{\mathbf{k}'\sigma} = 1, n_{\mathbf{k}\sigma} = 0, n_{\mathbf{f}} - 1 | H_{\text{вз}} | n_{\mathbf{k}'\sigma} = 0, n_{\mathbf{k}\sigma} = 1, n_{\mathbf{f}}). \quad (56,2)$$

Пользуясь правилом вычисления матричных элементов от произведения операторов и используя вид матричных элементов $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ и $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ и $\hat{b}_{\mathbf{f}}^+$, $\hat{b}_{\mathbf{f}}$, мы легко найдем, что из всей суммы (56,1) останется только один матричный элемент. Именно,

$$(H_{\text{вз}})_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -iD_{\omega} (n_{\mathbf{k}'} = 1 | \hat{a}_{\mathbf{k}'}^+ | n_{\mathbf{k}'} = 0) (n_{\mathbf{k}} = 0 | \hat{a}_{\mathbf{k}} | n_{\mathbf{k}} = 1) (n_{\mathbf{f}} - 1 | \hat{b}_{\mathbf{f}} | n_{\mathbf{f}}). \quad (56,3)$$

Используя формулы (99,15) ч. V, мы видим, что произведение матричных элементов \hat{a}^+ , \hat{a} равно плюс или минус единице, в зависимости от чисел заполнения. Матричные элементы оператора $\hat{b}_{\mathbf{f}}$ определяются формулами (47,16).

Вероятность перехода с поглощением фонона равна

$$\begin{aligned} dW_{-} &= \frac{2\pi}{\hbar} |(H_{\text{вз}})_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \delta[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} + \mathbf{f}) + \hbar\omega_{\mathbf{f}}] \frac{d\mathbf{f} dV}{(2\pi)^3} = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} D_{\omega}^2 n_{\mathbf{f}} \frac{d\mathbf{f} dV}{(2\pi)^3} \delta[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} + \mathbf{f}) + \hbar\omega_{\mathbf{f}}]. \end{aligned}$$

Если пренебрегать дисперсией и подставить значение D_{ω}^2 из (55,12), мы легко находим, что

$$dW_{-} = \frac{4\pi g^2 n_{\mathbf{f}} \mathbf{f}}{9MNc} \cdot \delta\{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} + \mathbf{f}) + \hbar c\mathbf{f}\} \frac{d\mathbf{f} dV}{(2\pi)^3}.$$

Полная вероятность перехода электрона с поглощением фонона получается интегрированием по всем возможным значениям \mathbf{f}

и объему V :

$$W_- = 4\pi \frac{g^2}{9MNC} \int f n_f \delta \{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} + \mathbf{f}) + \hbar c f\} \frac{df dV}{(2\pi)^3}. \quad (56,4)$$

Совершенно так же можно найти вероятность перехода с излучением одного фонона:

$$W_+ = 4\pi \frac{g^2}{9MNC} \int f (n_f + 1) \delta \{-E(\mathbf{k}) + E(\mathbf{k} - \mathbf{f}) + \hbar c f\} \frac{df dV}{(2\pi)^3}. \quad (56,5)$$

Процессы с поглощением и испусканием одного фонона можно наглядно представить в виде диаграммы Фейнмана (рис. 49).

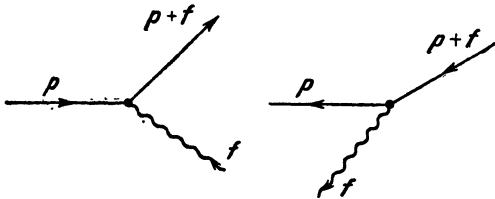


Рис. 49.

Здесь волнистой линией изображен фонон, сплошной — электрон. Если не ограничиваться переходами первого порядка, то возможны и другие процессы, изображенные на диаграммах Фейнмана (рис. 50 и 51).

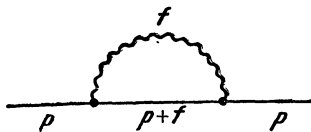


Рис. 50.

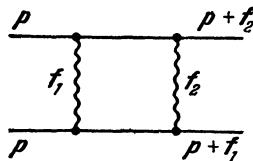


Рис. 51.

Электрон может излучать виртуальный фонон и тут же его поглощать. Благодаря этому процессу электрон оказывается окруженным облаком или шубой виртуальных фононов с различными частотами. При движении электрона по решетке облако фононов следует за ним, изменяя его массу. Количественный расчет этого эффекта выходит за рамки этой книги.

Второй важный эффект второго порядка изображается диаграммой (рис. 51). Один из электронов испускает фонон f_1 , а поглощает фонон f_2 . Другой, наоборот, поглощает первый и испускает второй фонон.

Этот обмен фононами приводит в известных условиях к слабому притяжению между электронами. Несмотря на малость

эффекта, он играет важнейшую роль в явлениях, происходящих в металлах при низких температурах (см. § 64).

Следует заметить, что в приведенном выводе гамильтониана взаимодействия содержалось неявное допущение о том, что в результате взаимодействия с фононом электрон всегда может перейти в новое состояние. Это справедливо для электронов, находящихся в зоне размытости распределения Ферми.

При рассмотрении кинетических эффектов, например, электропроводности, нас будет интересовать взаимодействие именно с этими электронами. Однако при изучении некоторых других свойств металлов, таких, как влияние электронов на энергетический спектр системы фононов, оказывается существенным учет поведения всей системы электронов, в том числе электронов заполненной зоны. Эти электроны не могут совершать переходов между состояниями внутри зоны. Поэтому описание эффектов, включающих поведение всей системы электронов не может проводиться на основе гамильтониана (55,11).