

## Лекция №8

### Акустические фононы.

Дуализм волн и частиц, как нами уже было отмечено в предыдущих лекциях, относится к числу фундаментальных концепций современной физики. В кристаллах имеется много полей, которые проявляют оба этих аспекта – и волновой, и корпускулярный. Кванты энергии этих полей получили собственное название. Подобно тому, как термин **«фотоны»** описывают корпускулярный аспект электромагнитного поля в вакууме, термины **«фонон, магнон, плазмон, полярон, экситон и поляритон»** описывают некоторые квантованные поля в кристаллах. **Фононы** связаны с упругими возбуждениями, в частности, акустические фононы соответствуют обычным упругим волнам. **Магноны** – это элементарные возбуждения в системе электронных спинов, связанных между собою обменными силами. **Плазмоны** – коллективные кулоновские возбуждения электронного газа в металлах. **Экситоны** – нейтральные квазиастицы, 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 как бозоны. Квазичастицы, соответствующие электронам при их взаимодействии с электронным газом в металлах, ведут себя как фермионы.

Наиболее удобный способ математического описания систем таких квазичастиц основан, как уже неоднократно отмечалось, на методе вторичного квантования, то есть, на квантовании корпускулярно-волновых полей. Этот метод, как мы уже имели возможность убедиться, очень прост как для изучения, так и в конкретных применениях. Отметим, что рассматриваемые нами в будущих лекциях проблемы нерелятивистской теории поля будут служить хорошей иллюстрацией основ квантовой теории поля.

### Квантование поля акустических фононов.

Рассмотрим цепочку длины  $Na$  (одномерный кристалл), образованную атомами одного сорта с массой  $m$ , связанными попарно упругими силами с коэффициентом жесткости  $\gamma$ , равновесные положения которых определяется вектором решетки  $\mathbf{n}$ :

$$\mathbf{n} = l\mathbf{a}, \quad l = 1, 2, \dots, N. \quad (1)$$

Предположим, что поперечные и продольные смещения атомов независимы. Величину смещения  $n$ -го атома из положения равновесия обозначим  $\xi_n$ . В потенциальной энергии  $U$  смещений нейтральных атомов из положения

равновесия можно учитывать только взаимодействия соседних атомов (более сложный случай будет рассмотрен ниже):

$$U = \frac{1}{2} \gamma \sum_n (\xi_{n+1} - \xi_n)^2, \quad (2)$$

Кинетическая энергия выражается через скорости смещения  $\dot{\xi}_n$

$$K = \frac{m}{2} \sum_n \dot{\xi}_n^2. \quad (3)$$

Введем циклические условия (условие периодичности):

$$\xi_n = \xi_{n+Na}. \quad (4)$$

Одномерной решетке (1) соответствует зона Бриллюэна в  $\mathbf{k}$  - пространстве с границами

$$-\pi \leq \mathbf{k}a \leq \pi. \quad (5)$$

Внутри этой зоны располагаются  $N$  неэквивалентных волновых векторов

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi\mu}{Na^2} \mathbf{a}, \quad \mu = 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{N}{2}, \quad (6)$$

От смещений отдельных атомов  $\xi_n$  удобно перейти к новым обобщенным координатам  $A_{\mathbf{k}}$ , которые характеризуют коллективное движение атомов, соответствующих определенным значениям  $\mathbf{k}$ . Для этого введем преобразование

$$\xi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}n). \quad (7)$$

Поскольку смещения  $\xi_n$  являются действительными величинами, новые переменные  $A_{\mathbf{k}}$  должны удовлетворять условию

$$A_{\mathbf{k}} = A_{-\mathbf{k}}^*. \quad (8)$$

Суммирование в (7) выполняется по всем значениям волнового вектора  $\mathbf{k}$ . Используя (1) и (5), можно доказать два весьма важных равенства:

$$\frac{1}{N} \sum_n \exp\{i\mathbf{n}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')\} = \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'}. \quad (9)$$

С помощью этих формул можно найти обратное преобразование:

$$A_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \xi_n \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{n}). \quad (10)$$

В терминах новых коллективных переменных потенциальная и кинетическая энергии кристалла имеют вид:

$$U = \frac{1}{2} m \sum_{\mathbf{k}} \omega^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}}, \quad K = \frac{1}{2} m \sum_{\mathbf{k}} \dot{A}_{\mathbf{k}} \dot{A}_{-\mathbf{k}}, \quad (11)$$

где

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega^2(-\mathbf{k}) = 4 \frac{\gamma}{m} \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2}. \quad (12)$$

Лагранжиан  $L$  такой системы, как мы знаем из теорем механики, строится из кинетической и потенциальной энергий:

$$L = K - U, \quad (13)$$

откуда с учетом (11) имеем:

$$L = \frac{1}{2} m \sum_{\mathbf{k}} \{ \dot{A}_{\mathbf{k}} \dot{A}_{-\mathbf{k}} - \omega^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}} \}. \quad (14)$$

Обобщенные импульсы, сопряженные коллективным координатам  $A_{\mathbf{k}}$  находятся обычным способом:

$$P_{\mathbf{k}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_{\mathbf{k}}} = m \dot{A}_{-\mathbf{k}}. \quad (15)$$

Если ввести импульс

$$p_n = m \dot{\xi}_n,$$

сопряженный смещению  $\xi_n$ , то учитывая (10), можно преобразовать (15) к виду

$$P_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n p_n \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}). \quad (16)$$

Гамильтониан системы  $H = K + U$  в терминах обобщенных координат и импульсов имеет вид:

$$H = \frac{1}{2} m \sum_{\mathbf{k}} \{ P_{\mathbf{k}} P_{-\mathbf{k}} + \omega^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}} \}, \quad (16)$$

Переход к квантовой механике сводится к замене в предыдущих формулах величины  $\xi_n$  и  $p_n$  операторами  $\hat{\xi}_n$  и  $\hat{p}_n$ , удовлетворяющими коммутационным соотношениям

$$[\hat{\xi}_n, \hat{p}_{n'}] = i\hbar \delta_{n,n'}. \quad (17)$$

При такой замене величин операторами операторы обобщенных координат  $\hat{A}_{\mathbf{k}}$  и импульсов  $\hat{P}_{\mathbf{k}}$  удовлетворяют, как нетрудно убедиться, коммутационным соотношениям:

$$[\hat{A}_{\mathbf{k}}, \hat{P}_{\mathbf{k}'}] = i\hbar \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \quad (18)$$

Суммарная энергия  $H$  преобразуется теперь в оператор Гамильтона

$$\hat{H} = \frac{1}{2} m \sum_{\mathbf{k}} \{ \hat{P}_{\mathbf{k}} \hat{P}_{-\mathbf{k}} + \omega^2(\mathbf{k}) \hat{A}_{\mathbf{k}} \hat{A}_{-\mathbf{k}} \}. \quad (19)$$

Вид этого гамильтониана далек от диагонального вида, свойственного оператору Гамильтона идеального газа, к чему, как уже нами неоднократно обсуждалось, необходимо стремиться. С целью диагонализации гамильтониана введем, как это делалось нами в теории слабо неидеального бозе-газа, новые операторы  $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ ,  $\hat{b}_{\mathbf{k}}^+$  формулами

$$\hat{A}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\mathbf{k})}} (\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+), \quad \hat{P}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega(\mathbf{k})}{2}} (\hat{b}_{\mathbf{k}}^+ - \hat{b}_{-\mathbf{k}}). \quad (20)$$

Отметим, что в терминах введенных таким образом операторов оператор смещения  $\hat{\xi}_n$  в соответствии с формулами (7), (20) может быть записан в виде:

$$\hat{\xi}_n = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega(\mathbf{k})}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}) (\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+). \quad (20a)$$

Чтобы выполнялись соотношения (18), необходимо, чтобы удовлетворялись следующие коммутационные соотношения для операторов  $\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}}^+$

$$[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^+] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}] = 0. \quad (21)$$

Подставляя выражения (20) в (19) и учитывая коммутационные соотношения (21), гамильтониан в терминах введенных новых операторов получим в виде:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega(\mathbf{k}) \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right\}. \quad (22)$$

Таким образом, мы свели исходный квантовомеханический гамильтониан к диагональному виду, введя в рассмотрение новые операторы  $\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}}^+$ . Эти операторы действуют в гильбертовом пространстве векторов

$$|..., \nu_{\mathbf{k}}, ... \rangle, \quad \langle ..., \nu_{\mathbf{k}}, ... | ..., \nu_{\mathbf{k}'}, ... \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}.$$

зависящих от чисел заполнения состояний, характеризуемых волновыми векторами. Характер их действия в этом пространстве определяется законами коммутации (21). А именно, эти операторы являются операторами рождения и уничтожения каких-то «элементарных» объектов.

Энергия основного состояния кристалла  $H_0$  определяется вектором состояния вакуума  $|0\rangle$

$$H_0 = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega(\mathbf{k}) \langle 0 | \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} | 0 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega(\mathbf{k}). \quad (23)$$

Энергия кристалла в состоянии  $|\nu_{\mathbf{k}}\rangle$  определяется выражением

$$H_{\mathbf{k}} = \langle \nu_{\mathbf{k}} | \hat{H} | \nu_{\mathbf{k}} \rangle = H_0 + \nu_{\mathbf{k}} \hbar \omega(\mathbf{k}). \quad (24)$$

Рассмотрим теперь среднее значение величины  $\hat{\xi}_n$ , определенной выше формулой (20a). Так как

$$\langle \nu_{\mathbf{k}} | \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ | \nu_{\mathbf{k}} \rangle = 0, \quad \langle \nu_{\mathbf{k}} | \hat{b}_{\mathbf{k}} | \nu_{\mathbf{k}} \rangle = 0,$$

то и  $\langle \nu_{\mathbf{k}} | \hat{\xi}_n | \nu_{\mathbf{k}} \rangle = 0$ . Однако, среднее значение квадрата оператора смещения отлично от нуля:

$$\langle \nu_{\mathbf{k}} | \hat{\xi}_{\mathbf{k}}^2 | \nu_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\hbar \nu_{\mathbf{k}}}{mN\omega(\mathbf{k})} + \sum_{\mathbf{k}' \neq 0} \frac{\hbar}{2mN\omega(\mathbf{k}')} . \quad (25)$$

Второе слагаемое в этой формуле характеризует вклад нулевых колебаний (когда все  $\nu_{\mathbf{k}}$  равны нулю). Значение  $\mathbf{k}=0$  соответствует смещению кристалла как целого. При этом  $\omega(\mathbf{k})=0$ . Иными словами, при  $\mathbf{k}=0$  колебания кристалла отсутствуют и второе слагаемое в (25) можно опустить.

Итак, стационарные возбуждения кристалла распределены по всему кристаллу и характеризуются волновым вектором  $\mathbf{k}$  (а следовательно, квазиимпульсом  $\hbar\mathbf{k}$  и энергией  $\hbar\omega(\mathbf{k})$ ). Эти возбужденные состояния называются **фононами**. Согласно выражению для частоты, состояния с волновыми векторами  $\mathbf{k}$  и  $-\mathbf{k}$  имеют одинаковую энергию.

На рисунке изображена зависимость частоты фононов от волнового вектора

$$\omega(\mathbf{k}) = \omega(-\mathbf{k}) = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \left| \sin \frac{(\mathbf{k}\mathbf{a})}{2} \right|, \quad -\pi \leq \mathbf{k}\mathbf{a} \leq \pi . \quad (26)$$

Зная частоту фононов, можно вычислить фазовую  $u_p$  и групповую  $u_g$  скорости соответствующих элементарных возбуждений:

$$u_p = \frac{\omega(\mathbf{k})}{k} = \frac{2}{k} \sqrt{\frac{\gamma}{m}} \left| \sin \frac{(\mathbf{k}\mathbf{a})}{2} \right|, \quad u_g = \frac{d\omega(\mathbf{k})}{dk} = a \sqrt{\frac{\gamma}{m}} \left| \cos \frac{(\mathbf{k}\mathbf{a})}{2} \right|.$$

В пределе длинноволновых возбуждений,  $ka = \frac{2\pi a}{\lambda} \ll 1$ , для этих величин получим:

$$u_p = u_g = a\sqrt{\frac{\gamma}{m}},$$

в связи с чем выражение для частоты в этом же пределе может быть записано в виде:

$$\omega(\mathbf{k}) = ku_g.$$

Длинноволновые возбуждения можно рассматривать как упругие колебания в среде. Скорость упругих волн (скорость звука) определяется в механике выражением

$$u_{ac} = \sqrt{\frac{E}{\rho}},$$

где  $E$  - модуль Юнга и  $\rho$  - плотность среды. В нашем случае  $\rho = m/a$ , и модуль Юнга, определяющий отношение силы  $\gamma(\xi_n - \xi_{n-1})$  к вызванной ею относительной деформации  $(\xi_n - \xi_{n-1})/a$ , равен

$$E = \gamma a.$$

Таким образом,

$$u_{ac} = a\sqrt{\frac{\gamma}{m}}.$$

Следовательно, рассмотренные нами возбуждения в длинноволновом пределе совпадают с акустическими волнами в упругой среде. Поэтому такие возбуждения называются **акустическими фононами**.

Когда волновой вектор приближается к границе зоны Бриллюэна,  $ka \rightarrow \pi$ , или  $\lambda \rightarrow 2a$ , групповая скорость стремится к нулю, а фазовая скорость стремится к значению

$$u_p \rightarrow \frac{2a}{\pi} \sqrt{\frac{\gamma}{m}}.$$

Если необходимо отойти от приближения ближайших соседей, то потенциальная энергия должна быть записана в виде

$$U = \frac{1}{2} \sum_{n \neq l} \gamma_l (\xi_n - \xi_{n-l})^2,$$

В этом случае, переходя к обобщенным координатам, мы снова придем к выражению

$$U = \frac{1}{2} m \sum_{\mathbf{k}} \omega^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}},$$

только квадрат частоты будет определяться формулой

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \frac{4}{m} \sum_l \gamma_l \sin^2 \frac{(\mathbf{k}\mathbf{l})}{2}, \quad \mathbf{l} = l\mathbf{a}, \quad l = 1, 2, \dots, N.$$

В сумме этой достаточно учесть несколько первых слагаемых. Например, при ван-дер-ваальсовском взаимодействии между атомами  $\gamma_l \sim \gamma_1 a^6 / l^6$ . Поэтому уже при  $l = 2a$  вклад в сумму составляет 0,016 части вклада первого слагаемого.