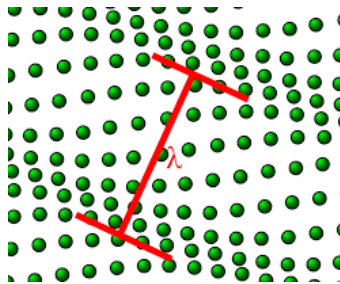


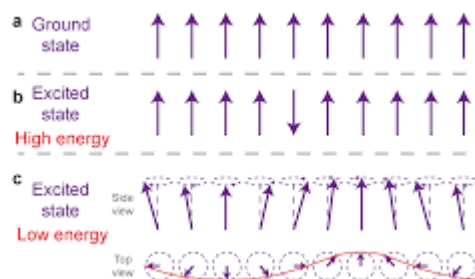
Лекція №8

Акустичні фонони.

Дуалізм хвиль і частинок, як нами вже було зазначено в попередніх лекціях, відноситься до числа фундаментальних концепцій сучасної фізики. У кристалах є багато полів, які проявляють обидва ці аспекти - і хвильовий, і корпускулярний. Кванти енергії цих полів отримали власну назву. Подібно до того, як термін «фотони» описують корпускулярний аспект електромагнітного поля у вакуумі, терміни «фонон, магнон, плазмон, полярон, екситон і поляритон» описують деякі квантовані поля в кристалах. Фонони пов'язані з пружними збудженнями, зокрема, акустичні фонони відповідають звичайним пружним хвилям.



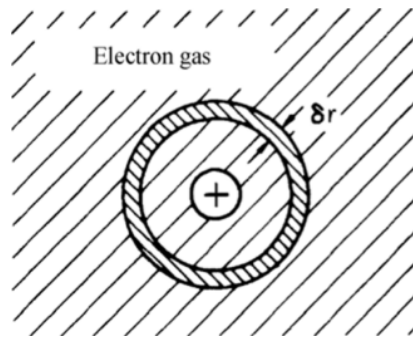
Магнони - це елементарні збудження в системі електронних спінів, пов'язаних між собою обмінними силами.



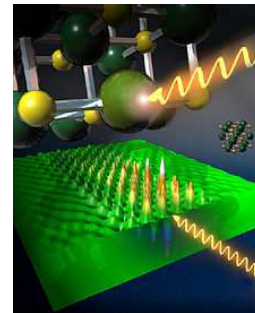
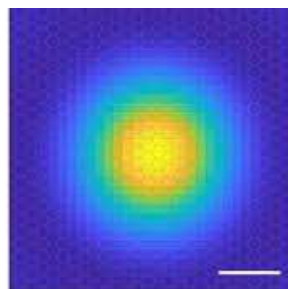
І так буває:

«Небезпечні зв'язки» - фонони й магнони спарюються, перетворюючись один на одного





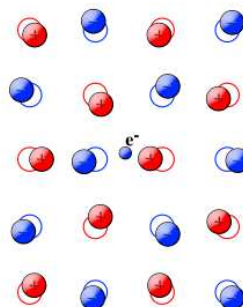
Екситони - нейтральні квазічастинки, пов'язані з полем діелектричної поляризації,



Вікіпедія. Екситон - нейтральна квазічастинка, поняття про яку введено для того, щоб описати переміщення електронного збудження окремих молекул по усьому кристалу. Тобто, це збуджений електронний стан у кристалах, який може переміщатись у сфері останнього, переносючи енергію, але не переносючи заряд. Цей стан полягає в утворенні пари електрон — дірка в йонному або ковалентному кристалі, перенесенні електрона в молекулі на вищий квантовий рівень у молекулярному кристалі.

Фізична природа. За своєю природою екситон — зв'язаний стан електрона й дірки, що мігрує по кристалу. Екситон може бути представлений як зв'язаний стан електрона провідності та дірки, розташованих або в одному вузлі кристалічної ґратки (екситон Френкеля), або на відстанях, значно більших за міжатомні (екситон Ваньє-Мотта). В напівпровідниках, за рахунок великої діелектричної проникності існують тільки екситони Ваньє-Мотта, які утворюють воднеподібні серії рівнів. Поняття екситони Френкеля застосовні перш за все до молекулярних кристалів.

Полярони - заряджені квазічастинки, пов'язані з полем поляризації (зазвичай в іонних кристалах).

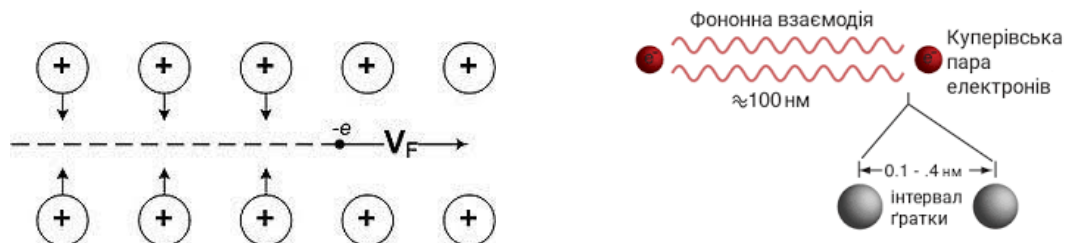


Вікіпедія. Полярон — [квазічастинка](#), узгоджене розповсюдження [електронного](#) збудження й локальної [деформації кристалічної ґратки](#). Визначення використовується у [фізиці конденсованих середовищ](#) для розуміння взаємодії між електронами та атомами

твердого тіла. Явище приводить до зниження рухливості електронів та збільшення ефективної маси.

Фізична природа. Негативно заряджений електрон, розповсюджуючись в кристалі притягає до себе позитивно заряджені остови йонів. Таким чином, електрон оточує себе хмаркою фононів, і рухається разом із нею. Зважаючи на велику в порівнянні з електроном інерційність іонних остовів атомів, полярон має ефективну масу, яка значно перевищує масу вільного електрона. Полярони виникають в іонних кристалах, які характеризуються великими значеннями зарядів іонних остовів атомів і значною електрон-фононною взаємодією. Ефективна маса полярона, наприклад, для кристалу NaCl, за оцінками Пекара перевищує масу вільного електрона в 140 разів.

Всі перераховані вище квазічастинки, крім полярону, поводяться як бозони. Куперівські електронні пари, що вводяться в теорії надпровідності, поводяться як бозони.



Квазічастинки, відповідні електронам при їх взаємодії з електронним газом у металах, поводяться як ферміони.

Найбільш зручний спосіб математичного опису систем таких квазічастинок заснований, як уже неодноразово зазначалося, на методі вторинного квантування, тобто, ґрунтується на мові квантування корпускулярно-хвильових полів. Цей метод, як ми вже мали можливість переконатися, дуже простий як для вивчення, так і в конкретних застосуваннях. Відзначимо, що розглянуті нами в майбутніх лекціях проблеми нерелятивістської теорії поля будуть служити доброю ілюстрацією основ квантової теорії поля.

Квантування поля акустичних фононів.

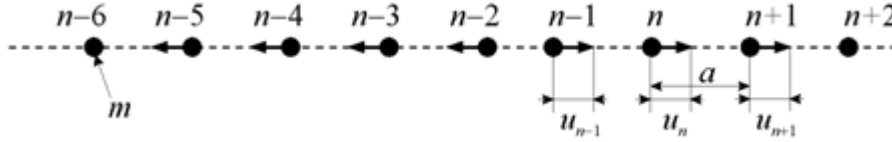
Вікіпедія. **Фонон** — квазічастинка в кристалічному твердому тілі, яка є хвилею коливань атомів навколо їхніх рівноважних положень. Фонони відіграють велику роль у фізиці твердого тіла, оскільки великою мірою зумовлюють теплопровідність кристалів і обмежують електричну провідність.

Фізична природа. При скінченній температурі атоми кристалічної ґратки хаотично рухаються, зміщуючись із положень рівноваги. Зміщений атом штовхає сусідні атоми, ті, своєю чергою, теж зміщуються і штовхають наступні. В результаті кристалом поширюється хвиля зміщень, яка називається фононом.

Опис почнемо з моделі одновимірного ланцюжка.

Розглянемо ланцюжок довжини Na (одновимірний кристал), утворений атомами одного сорту з масою m , пов'язаними попарно пружними силами з коефіцієнтом жорсткості β , рівноважні положення яких визначається вектором ґратки \mathbf{n} :

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



Припустимо, що поперечні і поздовжні зміщення атомів незалежні. Величину зміщення n -го атома з положення рівноваги позначимо u_n . У потенціальній енергії U зсувів нейтральних атомів із положення рівноваги можна враховувати тільки взаємодії сусідніх атомів (більш складний випадок буде розглянутий нижче):

$$U = \frac{1}{2} \beta \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2, \quad (2)$$

Кінетична енергія виражається через швидкості зсуву \dot{u}_n

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

Уведемо циклічні умови (умова періодичності):

$$u_n = u_{n+Na}. \quad (4)$$

Одновимірній ґратці (1) відповідає зона Брілюена в \mathbf{k} - просторі з межами

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

Усередині цієї зони розташовуються N нееквівалентних хвильових векторів

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

Від зсувів окремих атомів u_n зручно перейти до нових узагальнених координат $A_{\mathbf{k}}$, які характеризують колективний рух атомів, що відповідають певним значенням \mathbf{k} . Для цього введемо перетворення

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

Оскільки зміщення u_n є дійсними величинами,

$$u_n = u_n^* = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^* \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{n})$$

нові змінні $A_{\mathbf{k}}$ повинні задовольняти умові

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

Підсумовування в (7) виконується за всіма значеннями хвильового вектора \mathbf{k} . Використовуючи (1) і (5), можна довести дві дуже важливі рівності:

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

За допомогою цих формул можна знайти зворотне перетворення:

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

У термінах нових колективних змінних потенційна й кінетична енергії кристала мають вигляд:

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

де

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

Лагранжіан L такої системи, як ми знаємо з теоремеханіки, будується з кінетичної і потенційної енергій:

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

звідки з урахуванням (11) маємо:

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

Узагальнені імпульси, пов'язані з колективними координатами $A_{\mathbf{k}}$, знаходяться звичайним способом (треба згадати теоретичну механіку):

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

Якщо ввести імпульс

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

пов'язаний зі зміщенням u_n , то з огляду на (10), можна (15) надати вигляду

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

Гамільтоніан системи $H = K + U$ в термінах узагальнених координат і імпульсів має вигляд:

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

Перехід до квантової механіки зводиться до заміни в попередніх формулах величин u_n і p_n операторами \hat{u}_n и \hat{p}_n , які задовольняють комутаційним співвідношенням

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

При такій заміні величин операторами оператори узагальнених координат $\hat{A}_{\mathbf{k}}$ та імпульсів $\hat{P}_{\mathbf{k}}$ задовольняють, як неважко переконатися, комутаційним співвідношенням:

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

Функція сумарної енергії H повинна перетворитися тепер в оператор Гамільтона

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

Вид цього гамільтониана далекий від діагонального виду, властивого оператору Гамільтона ідеального газу, до чого необхідно прагнути, як уже нами неодноразово обговорювалося. Із метою діагоналізації гамільтоніану введемо нові оператори \hat{b}_k, \hat{b}_k^+ формулами

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

Відзначимо, що в термінах уведених таким чином операторів оператор зміщення \hat{u}_n відповідно до формул (7), (20) може бути записаний у вигляді:

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

Щоб виконувалися співвідношення (18), необхідно, щоб задовольнялися наступні комутаційні співвідношення для операторів \hat{b}_k, \hat{b}_k^+

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

Підставляючи вирази (20) в (19) і враховуючи комутаційні співвідношення (21), гамільтоніан в термінах введених нових операторів отримаємо у вигляді:

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

Таким чином, ми звели вихідний квантовомеханічний гамільтоніан до діагонального вигляду, увівши до розгляду нові оператори \hat{b}_k, \hat{b}_k^+ . Ці оператори діють у гільбертовому просторі векторів

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

що залежать від чисел заповнення станів, які характеризуються відповідними хвильовими векторами. Характер їх дії в цьому просторі визначається законами комутації (21). А саме, ці оператори є операторами народження та знищення якихось «елементарних» об'єктів.

Енергія основного стану кристалу H_0 визначається вектором стану вакууму $|0\rangle$

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

Енергія кристалу в стані $|\nu_{\mathbf{k}}\rangle$ дається виразом

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

Розглянемо тепер середнє значення величини \hat{u}_n , визначеної вище формулою (20а). Оскільки

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

то і $\langle \nu_{\mathbf{k}} | \hat{u}_n | \nu_{\mathbf{k}} \rangle = 0$. Однак, середнє значення квадрата оператора зсуву відмінне від нуля:

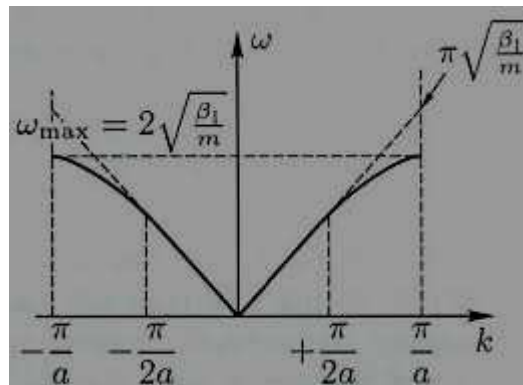
$$\langle \nu_{\mathbf{k}} | \hat{u}_n^2 | \nu_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\hbar \nu_{\mathbf{k}}}{mN\omega(\mathbf{k})} + \sum_{\mathbf{k}' \neq 0} \frac{\hbar}{2mN\omega(\mathbf{k}')} . \quad (25)$$

Другий доданок у цій формулі характеризує внесок нульових коливань (коли всі $\nu_{\mathbf{k}}$ дорівнюють нулю). Значення $\mathbf{k} = 0$ відповідає зсуву кристала як цілого. При цьому $\omega(\mathbf{k}) = 0$. Іншими словами, при $\mathbf{k} = 0$ коливання кристала відсутні і другий доданок в (25) можна опустити.

Отже, стаціонарні збудження кристала розподілені по всьому кристалу і характеризуються хвильовим вектором \mathbf{k} (а отже, квазіімпульсом $\hbar\mathbf{k}$ та енергією $\hbar\omega(\mathbf{k})$). Ці збуджені стани називаються фононами. Згідно виразу для частоти, стани з хвильовими векторами \mathbf{k} і $-\mathbf{k}$ мають однакову енергію.

На рисунку зображена залежність частоти фононів від хвильового вектора у відповідності з виразом (12):

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



Знаючи частоту фононів, можна обчислити фазову u_p і групову u_g швидкості відповідних елементарних збуджень:

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

У наближенні довгохвильових збуджень, $ka = \frac{2\pi a}{\lambda} \ll 1$, для цих величин отримаємо:

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

у зв'язку з чим вираз для частоти в цьому ж наближенні може бути записаним у вигляді:

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

Довгохвильові збудження можна розглядати як пружні коливання в середовищі. Швидкість пружних хвиль (швидкість звуку) визначається в механіці виразом

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

де E - модуль Юнга і ρ - густина середовища. У нашому одновимірному випадку $\rho = m/a$, і модуль Юнга, що визначає відношення сили $\beta(u_n - u_{n-1})$ до викликаної нею відносної деформації $(u_n - u_{n-1})/a$, дорівнює

$$E = \beta a.$$

Таким чином,

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

Отже, розглянуті нами збудження в довгохвильовій границі збігаються з акустичними хвилями в пружному середовищі. Тому такі збудження й називаються акустичними фононами.

Коли хвильовий вектор наближається до межі зони Бріллюена, $ka \rightarrow \pi$, або $\lambda \rightarrow 2a$, групова швидкість прямує до нуля, а фазова швидкість наближається до значення

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

Якщо необхідно відійти від наближення найближчих сусідів, то потенціальна енергія повинна бути записана у вигляді

$$U = \frac{1}{2} \sum_{l, n \neq l} \beta_l (u_n - u_{n-l})^2,$$

У цьому випадку, переходячи до узагальнених координат, ми знову прийдемо до виразу

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

тільки квадрат частоти буде вже визначатися формулою

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

У сумі цій досить урахувати декілька перших доданків. Наприклад, при ван-дер-ваальсівській взаємодії між атомами $\beta_l \sim \beta_1 a^6 / l^6$. Тому вже при $l = 2a$ внесок до суми складає 0,016 частини внеску першого доданку.