Debye 声子[1]

钟佳杭

摘要

Debye 声子理论在解释固体比热的低温行为的时候获得了成功，然而将声子类比成 k-mode 的不同谐振子尽管富有物理直观且易于计算，但是缺乏物理的严谨性，本文试图逻辑严密（但过程不一定详尽）地推导 Debye 声子的比热。

正文

微观的固体是电子和晶格的理论，其配分函数为 [2]

$$Z = Tr(e^{-\beta H}). \tag{1}$$

其中哈密顿量为微观的哈密顿量，求和的量子态为所有微观的量子态。这一般情况下难以计算，但是在某些特殊的情况下热力学系统的展现出普适性[2]，比如相变临界点附近的系统还有本文接下来要讨论的低温下的固体系统。

如果认为一类微观下不同的事物在热力学观点下是普适的，那么就说明微观的结构对热力学可观测量是无关的，借用重整化群的思想，我们说这样的物理系统满足一定的性质使得小尺度物理都可以被积掉，剩下一个有效场论。积掉小尺度物理的过程在实践上被粗粒化过程实现，有效场论被一个有着待输入参数的长程场论描述。参数个数与需要描述的现象及其对称性有关。

1 声子场

1.1 粗粒化

取定一个特征长度 $1/\Lambda$，使得 $a \ll 1/\Lambda \ll l$，其中 a 是晶格尺度，l 是宏观尺度。将 $1/\Lambda$ 区域内晶格的位移 $\vec{\phi}_i$ 做平均，并且在不同区域间做连续化，得到位移场，也称声子场 $\vec{\phi}(x)$，已知对称性 $V[\vec{\phi}(x)+\vec{a}] = V[\vec{\phi}(x)]$，$V[\vec{\phi}(x)] = V[-\vec{\phi}(x)]$ 和 $SO(3)\times R^4$，声子场拉式密度为:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left(\rho\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial t}\right)^2 - \mu\left(\partial_\alpha u_\beta \partial_\alpha u_\beta\right) - (\mu+\lambda)(\partial_\alpha u_\alpha)^2\right) \tag{2}$$

已忽略掉无关算符（即对动量依赖更强的项），这个拉式量有 3 个参数，分别为 ρ，μ，λ，物理诠释为质量密度和横纵波分量。

值得注意的是，对称性 $V[\vec{\phi}(x)+\vec{a}] = V[\vec{\phi}(x)]$，禁戒掉了质量项和无导数声子自相互作用。

其色散关系为 $v_l = \sqrt{(2\mu+\lambda)/\rho}, v_t = \sqrt{\mu/\rho}$，分别为纵波和横波

1.2 量子化

场论量子化可在任意场论教材中查到，比如 [3]，利用产生湮灭算符可以将哈密顿量表示为

$$H = \sum_\lambda \epsilon_\lambda a_\lambda^\dagger a_\lambda + \sum_\sigma \epsilon_\sigma a_\sigma^\dagger a_\sigma, \tag{3}$$

[1] 2024 年热力学与统计物理

[2] 遗憾的是我目前并不知道如何先验的判断哪些情况有普适性，只知道些现成的例子

其中 λ, σ 分别为横向极化声子和纵向极化声子的量子数。其为无质量玻色子自由场论
两种声子在接下来的过程中无差异，因此简写哈密顿量为：

$$H = \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}, \tag{4}$$

其中 $\epsilon_{\lambda} = vk(\lambda)$

2 量子正则系综

由正则系综知

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Tr(e^{-\beta H})}. \tag{5}$$

对于一个可观察量的系综平均值则为

$$\langle O \rangle = \frac{Tr(\rho O)}{Tr(\rho)}. \tag{6}$$

如果温度等于零则上式就是算符 O 对真空求期望值。

2.1 一条作弊的路

如果允许使用我们在量子统计中得到的结论

$$\langle n_{\lambda} \rangle = n_E(\epsilon_{\lambda}) = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_{\lambda}} - 1}. \tag{7}$$

那么我们的逻辑虽然不是一路通畅的，而是兵分两路的，但逻辑上也是严密的。

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle &= \langle \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \rangle \\
&= \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} \langle a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \rangle \\
&= \sum_{\lambda} \epsilon \langle n_{\lambda} \rangle = \sum_{\lambda} \frac{\epsilon_{\lambda}}{e^{\beta \epsilon_{\lambda}} - 1} \\
&\propto \int^{\Lambda} d^3k \frac{vk}{e^{\beta vk} - 1} \propto \beta^{-4}.
\end{aligned} \tag{8}$$

其中 Λ 为粗略化尺度倒数亦是截断能标。这样就证明了 $E \propto T^4, C \propto T^3$。

3 虚时场论

一种在完全在场论框架下计算能量的方法是

$$Z = Tr(e^{-\beta H}) = Tr(e^{-iH(-i\beta)}). \tag{9}$$

利用路径积分的解析延拓：

$$\begin{aligned}
Tr(\rho) &= \int (D\phi) \langle \phi | e^{-\beta H} | \phi \rangle \\
&= \int (D\phi) \langle \phi | e^{-iH(-i\beta)} | \phi \rangle \\
&= \int (D\phi)_{t=0} \int (D\phi)_{\phi,0}^{\phi,-i\beta} \exp(i \int_0^{-i\beta} d^4x \mathcal{L}) \\
&= \int (D\phi)_{\phi(0)=\phi(\tau)} \exp(- \int_0^{\tau} d^4x_E \mathcal{L}_E).
\end{aligned}$$

注意到路径积分里的循环边界条件。一般的，Wick 转动 $it \to \tau$ 使一个有限温度场论变成 $S^1 \times R^3$ 时空上的零温度场论。对应规则为:$\tau := it, \mathcal{L}_E := -\mathcal{L}(\phi)$ 我们几乎可以挪用一切有关零温度场论的结论，关联函数的表达式为（以 2 点关联为例）

$$\langle T\phi_H(\tau_1)\phi_H(\tau_2)\rangle = \frac{\int (D\phi)_{\phi(0)=\phi(\tau)}\phi(\tau_1)\phi(\tau_2)\exp[-\int_0^\beta d^4x_E\mathcal{L}_E]}{\int (D\phi)\exp[-\int_0^\beta d^4x_E\mathcal{L}_E]} \tag{10}$$

对玻色子而言时间循环意味这场是周期的（对费米子而言有负号），傅里叶变换会给出我们分立的能量谱

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta}, n \in Z$$

与标准量子场论不同，让我们专注于产生湮灭算符的传播子，参考 [1]，零温下

$$\mathcal{G}_k(w) = -\langle Ta_k(w)a_k^\dagger(0)\rangle = \frac{1}{w - \epsilon_k + i\delta_k} \tag{11}$$

在虚时情况下可以被简单地挪用 $w \to iw_n = i2\pi n/\beta$，得到:

$$\mathcal{G}_\lambda(iw_n) = \frac{1}{iw_n - \epsilon_\lambda}. \tag{12}$$

做傅里叶反变换得到:

$$\mathcal{G}(\tau) = T\sum_n \mathcal{G}(iw_n)e^{-iw_n\tau} = -e^{-\epsilon_\lambda\tau}(1 + n_E(\epsilon_\lambda)). \tag{13}$$

注意到:

$$\langle a_\lambda^\dagger a_\lambda\rangle = -1 + \langle a_\lambda a_\lambda^\dagger\rangle. \tag{14}$$

有:

$$\langle a_\lambda^\dagger(\tau = 0)a_\lambda(0)\rangle = n_E(\epsilon_\lambda) \tag{15}$$

于是也可以得到:

$$E \propto T^4, C \propto T^3. \tag{16}$$

4 总结

本文整理了有效声子场的构造，量子化，以及热力学可观察量（低温热容）的计算。其中我们可以看见在场论框架下也可以导出玻色子粒子数分布，这是因为玻色子场论量子化时已经完成了所有状态的对称化，而虚时形式相当于考虑统计效应，这于量子统计的前提无异，因此得到相同的结果是正常的。但是可以看见的是，如果只考虑粒子数分布，量子统计的思想使得问题大大简化。

References

[1] Piers Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, 2015.

[2] Mehran Kardar. *Statistical Physics of Fields*. Cambridge University Press, 1995.

[3] Michael E. Peskin and Daniel V. Schroeder. *An Introduction to Quantum Field Theory*. Addison-Wesley Publishing Company, 1995.