

Взаимодействие электронов и фононов

Евгений Аникин, 128

10 февраля 2017 г.

1 Звук в упругой среде

Деформацию однородной и изотропной среды можно задать вектором смещений ξ , зависящим от координаты x . Энергия деформации зависит от производных ξ и квадратична по ним, поэтому задаётся тензором:

$$dW = \frac{1}{2} T_{ijkl} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_k}{\partial x_l} d^3x \quad (1)$$

Общий вид изотропного тензора T_{ijkl} —

$$T_{ijkl} = A \delta_{ij} \delta_{kl} + B \delta_{ik} \delta_{jl} + C \delta_{il} \delta_{jk} \quad (2)$$

Связь коэффициентов A , B , C даётся условием, что энергия деформации равна нулю, когда $\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j}$ — матрица бесконечно малого поворота, то есть антисимметрична. Отсюда получается, что $B = C$. Таким образом, потенциальная энергия поля деформаций —

$$W = \frac{1}{2} \int A \left(\frac{\partial \xi_i}{\partial x_i} \right)^2 + B \left(\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \right) d^3x \quad (3)$$

Кинетическая энергия записывается обычным образом:

$$T = \int \frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial \xi}{\partial t} \right)^2 d^3x \quad (4)$$

Уравнения движения получаются такими:

$$\rho \frac{\partial^2 \xi_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(A \frac{\partial \xi_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + B \left(\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \right) \right) \quad (5)$$

В импульсном представлении

$$[(\omega^2 \rho - Bk^2) \delta_{ij} - (A + B) k_i k_j] \xi_j = 0 \quad (6)$$

Это уравнение определяет две поперечные и одну продольную моду.

2 Квантование фононного поля

Гамильтониан фононов —

$$H = \int d^3x \left[\frac{\pi_i^2}{2\rho} + \frac{A}{2} \left(\frac{\partial \xi_i}{\partial x_i} \right)^2 + \frac{B}{2} \left(\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (7)$$

Процедура квантования сводится к замене координат и импульсов операторами с коммутационными соотношениями

$$[\xi_i(x), \pi_j(x')] = (2\pi)^3 \hbar \delta(x - x') \delta_{ij} \quad (8)$$

Переход к операторам рождения и уничтожения фононов удобно делать в несколько шагов. Вначале перейдём к импульсному представлению:

$$\begin{aligned} \xi_i(x) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \xi_i(k) e^{ikx} \\ \pi_i(x) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \pi_i(k) e^{-ikx} \end{aligned} \quad (9)$$

Вещественность ξ , π даёт

$$\begin{aligned} \xi(k) &= \xi(-k)^\dagger, \\ \pi(k) &= \pi(-k)^\dagger \end{aligned} \quad (10)$$

Гамильтониан принимает вид

$$H = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{\pi_i^\dagger \pi_i}{2\rho} + \frac{1}{2} ((A+B)k_i k_j + Bk^2 \delta_{ij}) \xi_i^\dagger \xi_j \right] \quad (11)$$

Далее сделаем замену

$$\begin{aligned} \xi_i &= e_{i\alpha} \xi_\alpha \\ \pi_i &= e_{i\alpha}^* \pi_\alpha \end{aligned} \quad (12)$$

Теперь

$$H = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{\pi_\alpha^\dagger \pi_\alpha}{2\rho} + \frac{\rho \omega_\alpha^2}{2} \xi_\alpha^\dagger \xi_\alpha \right] \quad (13)$$

Наконец, можно ввести операторы рождения и уничтожения.

$$\begin{aligned} a_\alpha &= \sqrt{\frac{\rho \omega_\alpha}{2\hbar}} \xi_\alpha + i \sqrt{\frac{1}{2\rho \omega_\alpha \hbar}} \pi_\alpha^\dagger \\ a_\alpha^\dagger &= \sqrt{\frac{\rho \omega_\alpha}{2\hbar}} \xi_\alpha^\dagger - i \sqrt{\frac{1}{2\rho \omega_\alpha \hbar}} \pi_\alpha \\ b_\alpha^\dagger &= \sqrt{\frac{\rho \omega_\alpha}{2\hbar}} \xi_\alpha - i \sqrt{\frac{1}{2\rho \omega_\alpha \hbar}} \pi_\alpha^\dagger \\ b_\alpha &= \sqrt{\frac{\rho \omega_\alpha}{2\hbar}} \xi_\alpha^\dagger + i \sqrt{\frac{1}{2\rho \omega_\alpha \hbar}} \pi_\alpha \end{aligned} \quad (14)$$

Отсюда можно выразить ξ_α , π_α , а затем ξ_i , π_i :

$$\begin{aligned}\xi_i &= \sum_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_\alpha}}(e_{i\alpha}a_\alpha + e_{i\alpha}b_\alpha^\dagger) \\ \pi_i &= -i \sum_\alpha \sqrt{\frac{\rho\omega_\alpha\hbar}{2}}(e_{i\alpha}b_\alpha - e_{i\alpha}a_\alpha^\dagger)\end{aligned}\tag{15}$$

Кроме того, нужно ещё учесть, что операторы ξ_i , π_i вещественны, и есть соотношение между операторами

$$e_{i\alpha}(k)\xi_\alpha(k) = e_{i\alpha}^*(-k)\xi_\alpha^\dagger(-k)\tag{16}$$