Взаимодействие электронов и фононов

Евгений Аникин, 128

15 января 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:

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

Общий вид изотропного тензора T_{ijkl} —

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

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

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

Кинетическая энергия записывается обычным образом:

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

Уравнения движения получаются такими:

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

В импульсном представлении

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

Это уравнение определяет две поперечные и одну продольную моду.

2 Квантование фононного поля

Гамильтониан фононов —

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

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

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

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

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

Вещественность ξ, π даёт

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

Гамильтониан принимает вид

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

Далее сделаем замену

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

Теперь

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

Наконец, можно ввести операторы рождения и уничтожения.

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