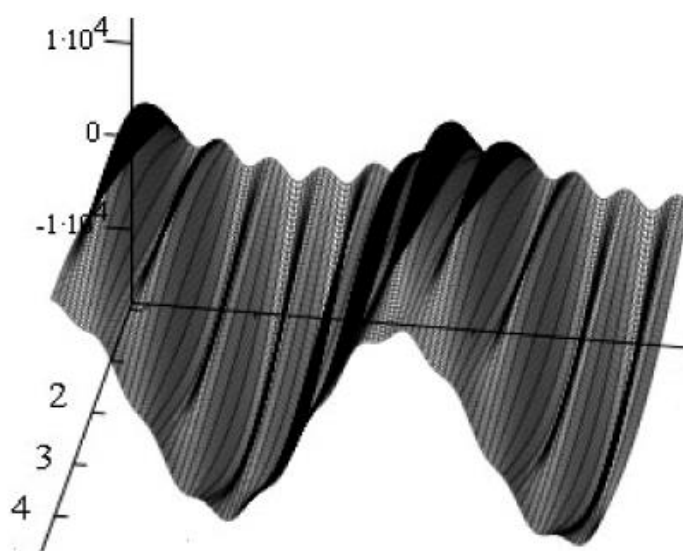


А.В. Жуков

КВАЗИЧАСТИЧНОЕ ОПИСАНИЕ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД.

Учебное пособие



Белгород

2001

Министерство образования Российской Федерации
Белгородский государственный университет

Жуков А.В.

КВАЗИЧАСТИЧНОЕ ОПИСАНИЕ
КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД.

Учебное пособие

Белгород

2001

УДК 530.145

ББК 22.31

Ж 86

Печатается по решению

Ученого совета Белгородского
государственного университета

Рецензент: *Красильников В.В.*, заведующий кафедрой
алгебры БелГУ, доктор физико-математических наук.

Жуков А.В.

Квазичастичное описание конденсированных сред: Учебное пособие.
Белгород: Изд-во БелГУ, 2001. – 36 с.

Данное учебное пособие представляет собой введение в методы квазичастичного описания конденсированных сред. В частности, достаточно подробно рассмотрены квазичастицы, представляющие собой кванты коллективных тепловых возбуждений (фононы, ротонны) в жидкостях и твердых телах. Изложены основные представления теории плазменных колебаний в электронном газе твердых тел и дано представление об экситонах.

Пособие предназначено для студентов физических и математических специальностей БелГУ, изучающих курс «Физика конденсированного состояния» в рамках общего курса «Теоретическая физика».

© Жуков А.В., 2001

© Издательство Белгородского
государственного университета, 2001

1. Введение. Что такое квазичастица?

Любое разумное аналитическое описание макроскопической системы, состоящей из большого числа частиц, должно основываться на ряде адекватных предположений, допускающих доведение результатов «до числа», и при этом, находящиеся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными. Так, если речь идет об изучении достаточно разреженного газа со слабым (или короткодействующим) взаимодействием, то достаточно ограничиться учетом кинетической энергии и энергии парного взаимодействия между частицами. При увеличении плотности числа частиц или характерного радиуса взаимодействия (как говорят, *длины рассеяния*) возникает необходимость учета многочастичных взаимодействий¹. Однако даже при учете только трехчастичного взаимодействия, задача становится аналитически неразрешимой даже в классическом случае, то есть в рамках классической гамильтоновой механики.

Типичные конденсированные среды состоят из макроскопического числа частиц, которые, как правило, сильно взаимодействуют друг с другом. К конденсированным средам относят жидкости и твердые тела, к которым формально относятся также такие экзотические объекты, как квантовые кристаллы, жидкие кристаллы, спиновые стекла, квантовые жидкости и т.д. В некоторых случаях, когда на практике требуются определенные макроскопические характеристики системы, достаточно ограничиться описанием конденсированных сред в рамках теории сплошной среды. В этом случае теория полностью пренебрегает эффектами, связанными с внутренней, микроскопической структурой вещества. Однако, как правило, в реальных ситуациях возникает необходи-

¹ На языке твердых шариков это означает одновременное столкновение трех и более шариков в одной области пространства.

мость в получении информации о микроскопических свойствах системы. Более того, это необходимо даже для корректного построения термодинамических параметров среды. В этих случаях возникает вопрос о том, как достаточно просто, и одновременно достаточно корректно описать такую сильно взаимодействующую систему. Оказывается, что во многих практически важных случаях классическую или квантовую задачу многих сильно взаимодействующих тел можно переформулировать в терминах независимых или почти независимых фиктивных тел, которые называют квазичастицами. В рамках квазичастичного подхода многие задачи для сильно взаимодействующих систем оказываются разрешимыми с требуемой точностью. Заметим, что в литературе часто используется понятие элементарных возбуждений среды, как квантов некоторого коллективного процесса. Мы здесь не будем различать понятия квазичастиц и элементарных возбуждений, чтобы подчеркнуть их общность в рамках квантовомеханического описания. Наиболее распространенными примерами квазичастиц могут служить:

1. **Фононы.** Кванты колебаний плотности конденсированной среды. Это могут быть как звуковые, то есть периодические, колебания, так и тепловые (хаотические).

2. **Магноны.** В ферродиелектриках могут распространяться спиновые волны, то есть регулярные флуктуации вектора намагниченности, или плотности спинового момента. Соответствующие квазичастицы, или кванты спиновых волн, и называют магнонами.

3. **Плазмоны.** В электронном газе металлов могут возникать флуктуации электронной плотности, подобные обычным колебаниям плотности в конденсированной среде. Таким образом, плазмоны являются квантами «плазменных колебаний» и в этом смысле родственны фононам.

4. **Полярон.** Электрон, двигаясь в так называемом полярном кристалле, взаимодействует с ионами кристаллической решетки, возбуждая локальные флуктуации ионной плотности, то есть фононы. Таким образом, полярон это электрон + облако возбужденных им фононов.

5. *Электрон проводимости.* Электрон, двигаясь в периодическом потенциале решетки твердого тела, может быть описан, как свободная частица с помощью введения эффективной массы, которая и отражает влияние решетки.

6. *Экситон.* Электрон проводимости в твердом теле может образовать связанное состояние с дыркой, то есть вакансией в валентной зоне, формально имеющей положительный заряд, равный по модулю заряду электрона. Такая пара, движущаяся сквозь кристалл как водородоподобный атом, называется экситоном.

7. *Куперон.* Во многих металлах при достаточно низких температурах могут образовываться связанные состояния электронов с противоположно направленными спинами и импульсами (но равными по величине). Такие состояния называют куперовскими парами, или куперонами. Именно наличие куперонов приводит к появлению сверхпроводимости, то есть к резкому падению электрического сопротивления металла почти до нуля при достаточно низких температурах.

Кроме указанных выше типов существует большое количество других квазичастиц, которые регулярно возникают в процессе исследования различных узконаправленных проблем физики конденсированного состояния. Ниже мы подробнее рассмотрим некоторые из указанных видов квазичастиц, но в первую очередь покажем, что сама возможность квазичастичного описания является фундаментальным свойством конденсированных сред вблизи их основного состояния.

2. Спектр бозе-жидкости

В качестве примера достаточно общего рассмотрения слабо возбужденного состояния системы рассмотрим жидкость, состоящую из бозе-частиц, то есть частиц, подчиняющихся статистике Бозе – Эйнштейна. Заметим, что все приве-

денные ниже рассуждения с некоторыми усложнениями можно применить и к твердым телам в рамках приближения сплошной среды.

Итак, энергия жидкости является функционалом ее локальной плотности $\rho(\mathbf{r})$ и гидродинамической скорости $\mathbf{v}(\mathbf{r})$. Ее можно записать в виде суммы кинетической и «потенциальной» (не зависящей от скорости) частей:

$$E(\rho, \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho v^2 d^3 r + \tilde{E}(\rho), \quad (2.1)$$

где Ω – объем жидкости. Тот факт, что возбуждения в нашей системе малы, отразим требованиями малости скорости $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ и локальных флуктуаций плотности $\delta\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - \rho_0$, где ρ_0 – средняя плотность жидкости:

$$\rho_0 = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (2.2)$$

При этом очевидно

$$\int_{\Omega} \delta\rho(\mathbf{r}) d^3 r = 0. \quad (2.3)$$

С точностью до величин второго порядка малости по $\delta\rho(\mathbf{r})$ и $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ в первом слагаемом выражения (2.1) $\rho(\mathbf{r})$ может быть заменено на ρ_0 . С той же точностью

$$\tilde{E}(\rho) = \tilde{E}(\rho_0) + \int_{\Omega} \psi(\mathbf{r}) \delta\rho(\mathbf{r}) d^3 r + \frac{1}{2} \iint_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta\rho(\mathbf{r}) \delta\rho(\mathbf{r}') d^3 r d^3 r'. \quad (2.4)$$

Здесь

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\delta\xi(\rho)}{\delta\rho(\mathbf{r})}, \quad \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\delta^2\xi(\rho)}{\delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r}')} \quad (2.5)$$

– первая и вторая вариационные производные энергии единицы объема жидкости ξ по локальной плотности. Функции (2.5) определяются только свойствами невозмущенной жидкости, то есть однородной и изотропной. В силу этого функция $\psi(\mathbf{r})$ должна быть константой $\psi(\mathbf{r}) = \text{const}$, а следовательно, с учетом соотношения (2.3), второе слагаемое в правой части выражения (2.4)

обращается в нуль. Из свойства изотропии жидкости следует, что $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ может зависеть только от разности координат, то есть $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$.

Таким образом, из (2.1) и (2.4) следует соотношение

$$E = \tilde{E}(\rho_0) + \frac{\rho_0}{2} \int_{\Omega} v^2 d^3 r + \frac{1}{2} \iint_{\Omega} \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \delta\rho(\mathbf{r}) \delta\rho(\mathbf{r}') d^3 r d^3 r'. \quad (2.6)$$

Прейдем теперь от реальных переменных к их Фурье-компонентам, то есть сделаем преобразования

$$\begin{aligned} \delta\rho(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \\ \varphi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Из закона сохранения массы жидкости следует уравнение непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\mathbf{v}) = 0, \quad (2.8)$$

которое в линеаризованном виде (с точностью до линейных членов по малым величинам $\delta\rho$ и \mathbf{v}) имеет вид

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho_0 \operatorname{div} \mathbf{v} = 0. \quad (2.9)$$

С учетом преобразований (2.7) из уравнения (2.9) следует

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}} = -i\rho_0(\mathbf{k}\mathbf{v}_{\mathbf{k}}). \quad (2.10)$$

Однако малые колебания в жидкости всегда продольны, то есть скорость $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ направлена вдоль волнового вектора \mathbf{k} , поэтому из (2.10) окончательно получаем связь между Фурье-компонентами плотности и скорости

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = i \frac{\dot{\rho}_{\mathbf{k}}}{\rho_0} \frac{\mathbf{k}}{k^2}. \quad (2.11)$$

При этом соотношение (2.6) можно записать в виде

$$E = \tilde{E}(\rho_0) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{|\dot{\rho}_{\mathbf{k}}|^2}{2\rho_0 k^2} + \frac{1}{2} \varphi_{\mathbf{k}} |\rho_{\mathbf{k}}|^2 \right). \quad (2.12)$$

Первое слагаемое в (2.12) представляет собой энергию невозмущенной жидкости, второе является суммой членов, каждый из которых есть энергия гармонического осциллятора с обобщенной координатой ρ_k . Частоты эти осцилляторов даются соотношением

$$\omega_k^2 = \rho_0 k^2 \varphi_k. \quad (2.13)$$

Таким образом, мы пришли к важному выводу о том, что любое малое возмущение жидкости (то есть плотной системы макроскопического числа сильно взаимодействующих частиц) распадается на элементарные колебания, описываемые уравнениями для гармонического осциллятора. В квантовом случае энергия такого осциллятора выражается известной формулой

$$E_k^{(n)} = \hbar \omega_k \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.14)$$

где n – главное квантовое число, принимающее дискретный ряд значений $n = 0, 1, 2, \dots$. В данном случае можно говорить, что энергия нашей системы представима в виде суммы энергии основного состояния и энергий квазичастиц $\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar \omega_k$:

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}), \quad (2.15)$$

где

$$E_0 = \tilde{E}(\rho_0) + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar \omega_k}{2}. \quad (2.16)$$

Последнее слагаемое в (2.16) представляет собой энергию нулевых колебаний осцилляторов.

Из соотношений (2.12), (2.13) и (2.16) можно легко получить закон дисперсии квазичастиц в рассматриваемой системе, то есть зависимость энергии квазичастицы от ее импульса $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2mS(\mathbf{p})}, \quad \text{где } S(\mathbf{p}) = \frac{\langle |\rho_{\mathbf{p}}|^2 \rangle}{m\rho_0\Omega} \quad (2.17)$$

– фурье-компонента так называемой функции корреляции плотности, или структурный фактор жидкости.

Структурный фактор $S(\mathbf{p})$ в общем случае аналитически вычислить невозможно, однако он имеет несколько общих свойств, исходя из которых, можно сделать ряд важных заключений. Во первых, в области малых импульсов $p \rightarrow 0$, $S(\mathbf{p})$ линейно зависит от импульса $S \approx p/2mc$, так что $\varepsilon(p) \approx cp$, то есть при малых импульсах квазичастицы являются *фононами*. При больших импульсах $S(\mathbf{p}) \approx 1 + \nu(p)$, причем $\nu(p) \rightarrow 0$ при $p \rightarrow \infty$. Это означает, что в данном случае $S(\mathbf{p})$ стремиться к единице и

$$\varepsilon(\mathbf{p}) \approx \frac{p^2}{2m},$$

то есть энергия квазичастицы совпадает с энергией свободного атома жидкости. При промежуточных значениях импульса поведение структурного фактора может быть самым различным в зависимости от конкретной системы. В этом случае необходимо руководствоваться данными экспериментов.

3. Квазичастицы в сверхтекучем ${}^4\text{He}$

Из всех известных в природе веществ, два наиболее распространенных изотопа гелия ${}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}$ имеют самые низкие точки кипения, равные (при атмосферном давлении) 4,21 К для ${}^4\text{He}$ и 3,19 К для ${}^3\text{He}$. Гелий с трудом конденсируется по двум причинам – из-за малой массы атомов и из-за чрезвычайно слабого межатомного взаимодействия (гелий – инертный элемент). Слабость межатомного взаимодействия обусловлена простотой и симметричностью атома гелия с его замкнутой оболочкой, содержащей два электрона, а также отсутствием дипольных моментов (за исключением маленького магнитного момента у

ядер ${}^3\text{He}$). Малая масса атомов обеспечивает большую энергию нулевых колебаний атомов в основном состоянии.

Непосредственно ниже точек кипения жидкий гелий ведет себя как обыкновенная жидкость с малой вязкостью. Однако при $T_c = 2,18\text{ К}$ в жидком ${}^4\text{He}$ происходит фазовый переход второго рода. Подобный переход в ${}^3\text{He}$ происходит при гораздо более низких температурах, и мы его рассматривать не будем. Ниже точки фазового перехода гелий (He II) обладает рядом замечательных свойств, наиболее удивительным из которых является сверхтекучесть, а именно отсутствие вязкости при протекании через узкие капилляры.

Эксперименты по определению вязкости He II можно разделить на две группы: к первой относятся измерения вязкого сопротивления потоку, а ко второй – вязких сил, действующих на тело, движущиеся в жидкости. Согласно результатам измерений первым способом вязкость He II практически равна нулю, в то время как эксперименты с осциллирующими дисками в гелии дают конечный результат для коэффициента вязкости. Данный парадокс был успешно разрешен Л.Д. Ландау в 1941 г. Ландау предположил, что ниже температуры фазового перехода T_c жидкий ${}^4\text{He}$ представляет собой двухкомпонентную жидкость. Одна компонента с плотностью ρ_s движется сквозь капилляры без трения и, следовательно, обладает нулевой вязкостью. Она получила название *сверхтекучей компоненты*. Другая, *нормальная компонента* с плотностью ρ_n ведет себя во всех отношениях как нормальная жидкость, то есть обладает отличным от нуля коэффициентом вязкости, и следовательно, оказывает сопротивление движущимся в ней телам. Таким образом, полная плотность жидкого гелия

$$\rho = \rho_s + \rho_n \quad (3.1)$$

а импульс единицы объема

$$\mathbf{j} = \rho_s \mathbf{v}_s + \rho_n \mathbf{v}_n, \quad (3.2)$$

где v_n и v_n – скорости сверхтекучего и нормального движения, соответственно. По мере понижения температуры плотность нормальной компоненты уменьшается, так что при $T \ll T_c$ получаем $\rho \approx \rho_s$.

При температурах, существенно меньших критической температуры T_c , плотность нормальной компоненты мала, так что ее наличие естественно попытаться описать в рамках концепции квазичастиц. Как было установлено в предыдущем разделе, вид энергетического спектра квазичастиц $\varepsilon(p)$ при малых значениях импульсов p устанавливается легко. Малым импульсам соответствуют длинноволновые возбуждения, которые являются квантами обыкновенных продольных звуковых колебаний с законом дисперсии

$$\varepsilon_{ph} = cp, \quad (3.3)$$

то есть фононами.

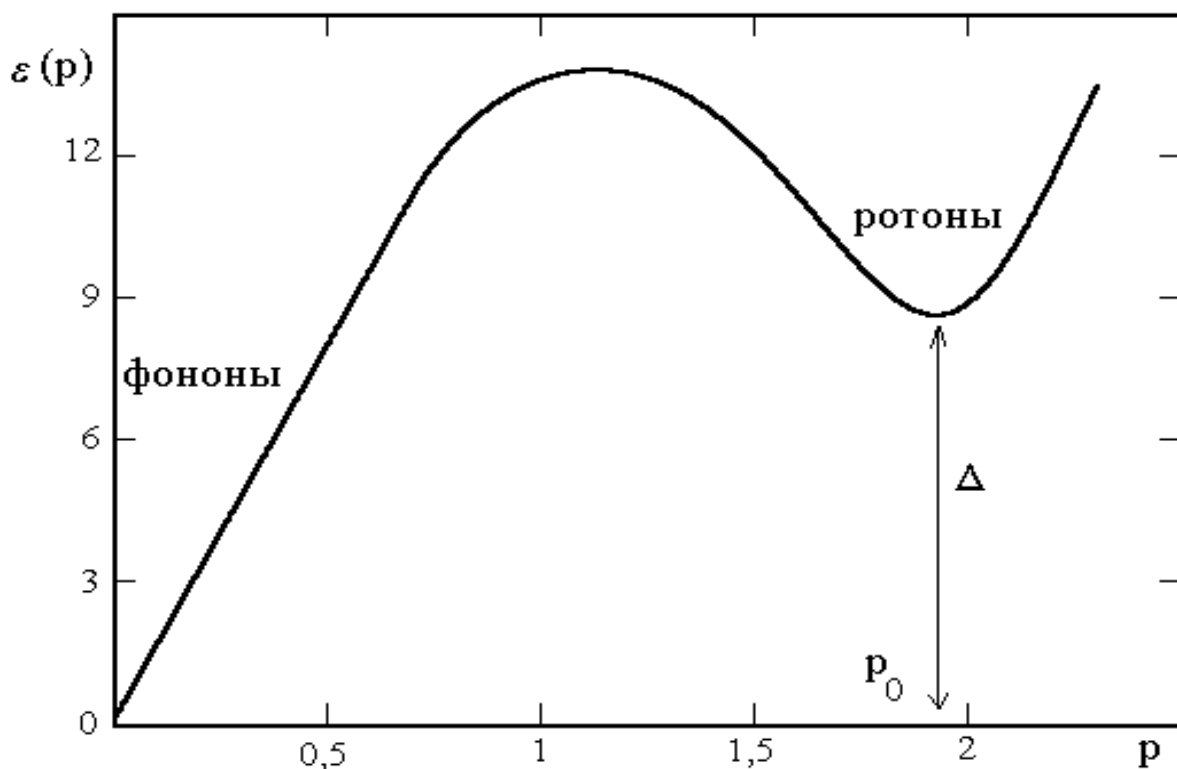


Рис. 1. Энергетический спектр сверхтекучего ^4He .

Как мы установили во втором разделе, спектр квазичастиц полностью определяется структурным фактором жидкости, и при произвольных импульсах

теоретически рассчитан быть не может. Однако Ландау для объяснения экспериментальных значений термодинамических величин жидкого гелия предложил энергетический спектр, изображенный на Рис.1.

Приведенный спектр имеет две ярко выраженные области. Одна – фононная (малые импульсы), другая – ротонная, с импульсами вблизи минимума кривой. Квазичастицы соответствующие второй области называют ротонами. Их энергия из общих свойств функций вблизи минимума может быть представлена в виде

$$\varepsilon_r = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2\mu_r}, \quad (3.4)$$

где p_0 - значение импульса, при котором функция $\varepsilon(p)$ имеет минимум, равный Δ , μ_r - эффективная масса ротона. Экспериментальные значения параметров спектра (3.3), (3.4) на сегодняшний день таковы:

$$\Delta = 8,6 \text{ К}, \quad p_0 = 1,9 \cdot 10^8 \hbar \text{ CGSE}, \quad \mu_r = 0,13m_{He^4}, \quad c = 2,38 \cdot 10^4 \text{ см/с}.$$

Как мы уже выяснили, сама концепция квазичастиц предполагает, что количество их невелико, так что энергия взаимодействия между собой невелика по сравнению с их собственной энергией. В этом случае газ квазичастиц можно рассматривать как идеальный газ, а, следовательно, особенно просто получить все термодинамические параметры системы, зная закон дисперсии. Конечно, во многих случаях (в частности, и в рассмотренных в последующих разделах) именно взаимодействие квазичастиц является определяющим для многих важных характеристик системы, однако, практически в He II уже при температурах 1,7 – 1,8 К и ниже фононный и ротонный газы можно считать идеальными. Это приближение можно считать хорошо обоснованным при изучении всех процессов, кроме тех которые как раз и определяются взаимодействиями в фонон-ротонном газе, например диссипативных процессов.

Для примера вычислим основные термодинамические функции He II. Фононы, как известно, подчиняются статистике Бозе, а распределение ротонов не зависит от конкретного типа статистики благодаря наличию в спектре большо-

го постоянного члена $\Delta \gg kT$. То есть соответственно функции распределения можно записать в виде

$$f_{ph} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_{ph}(p)}{kT}\right) - 1}, \quad f_r = \exp\left(-\frac{\varepsilon_r(p)}{kT}\right). \quad (3.5)$$

Свободная энергия бозе-газа равна

$$F = -\frac{kT}{\Omega} \sum_p \ln(1 + f(p)). \quad (3.6)$$

Дистанция между соседними импульсными состояниями в ограниченной системе обратно пропорциональна ее объему. Поэтому при переходе к бесконечному объему спектр системы становится непрерывным (что мы уже предположили на Рис.1), и в формуле (3.6) суммирование заменяется интегрированием по правилу

$$\sum_p \dots = \int \dots \frac{\Omega d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.7)$$

После однократного интегрирования по частям в (3.6) получаем

$$F = -\frac{1}{3} \int f(p) p \frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.8)$$

Энтропия газа квазичастиц находится дифференцированием свободной энергии (3.8) по температуре

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{1}{3kT^2} \int f'(p) \varepsilon p \frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (3.9)$$

где f' - производная функции распределения по аргументу.

Используя формулы (3.8) и (3.9) легко вычислить основные термодинамические функции фононного и ротонного газов.

Выполняя в (3.8) интегрирование с фононной функцией распределения, получаем

$$F_{ph} = -\frac{1}{3} \int \left(e^{\varepsilon_{ph}/kT} - 1 \right)^{-1} p \frac{\partial \varepsilon_{ph}}{\partial p} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = -\frac{1}{3} E_{ph}, \quad (3.10)$$

где

$$F_{ph} = \frac{4\pi^5}{15} \left(\frac{kT}{2\pi\hbar c} \right)^3 kT \quad (3.11)$$

– энергия фотонов в единице объема Не II. Следуя формуле (3.9) получим

$$S_{ph} = -\frac{\partial F_{ph}}{\partial T} = \frac{16\pi^5}{45} k \left(\frac{kT}{2\pi\hbar c} \right)^3 \quad (3.12)$$

Теплоемкость фононного газа определяется соотношением

$$C_{ph} = T \frac{\partial S_{ph}}{\partial T} = \frac{16\pi^5}{15} k \left(\frac{kT}{2\pi\hbar c} \right)^3 = 3S_{ph} \quad (3.13)$$

Аналогично для ротонного газа имеем

$$F_r = -\frac{2p_0^2 \sqrt{\mu_r}}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3} (kT)^{3/2} e^{-\frac{\Delta}{T}}, \quad (3.14)$$

$$S_r = -\frac{\partial F_r}{\partial T} = -\frac{1}{T} \left(\frac{\Delta}{T} + \frac{3}{2} \right) F_r, \quad (3.15)$$

$$C_r = T \frac{\partial S_r}{\partial T} = -\frac{1}{T} \left(\frac{\Delta^2}{T^2} + \frac{\Delta}{T} + \frac{3}{4} \right) F_r. \quad (3.16)$$

При этом полные энтропия и теплоемкость единицы объема Не II определяются соотношениями

$$S = S_r + S_{ph}, \quad C = C_r + C_{ph}. \quad (3.17)$$

Таким образом, зная только спектр квазичастиц Не II (Рис.1), мы получили аналитические выражения для всех основных термодинамических параметров системы. Теоретические результаты (3.12) - (3.17) дают отличное согласие с экспериментальными данными. Это явилось настоящим триумфом концепции квазичастиц. В заключение данного раздела следует напомнить, что фононы с законом дисперсии (3.3) и ротонны с законом дисперсии (3.4) не являются не-

зависимыми квазичастицами. Это лишь названия одной квазичастицы в различных областях ее спектра, изображенного на Рис.1.

4. Конденсация Бозе – Эйнштейна. Квазичастицы в слабонеидеальном бозе-газе

Как уже неоднократно указывалось, задача о теоретическом определении энергетического спектра реальной жидкости, естественно, не может быть аналитически решена. Поэтому особенную ценность представляют собой какие-либо более простые модели, в которых возникал бы энергетический спектр со свойствами, близкими к описанным выше, и которые позволяли бы получить аналитические результаты. В данном разделе мы рассмотрим задачу о нахождении энергетического спектра слабонеидеального бозе-газа в первом порядке теории возмущений, которая может быть решена точно. Основным предложением, позволившим Н.Н. Боголюбову решить эту задачу, является возможность «конденсации» макроскопического числа бозе-частиц в импульсном пространстве. Действительно частицы, подчиняющиеся статистике Бозе – Эйнштейна могут находиться в одном квантовом состоянии в любом количестве, в отличие от Ферми-статистики, где это запрещено принципом Паули. Это означает, что при температуре ниже некоторой критической T_c , появляется макроскопическое число частиц с импульсом $\mathbf{p} = 0$. Их называют конденсатными частицами. Число таких частиц в однородной системе дается формулой

$$N_0 = N \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right\}. \quad (4.1)$$

Гамильтониан системы бозе-частиц с парным взаимодействием в представлении вторичного квантования может быть записан в следующем виде

$$\hat{H} = \sum_{p,k} \langle p | \hat{H}^{(1)} | k \rangle \hat{a}_p^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{p,k,g,l} \langle p,k | \hat{U}^{(2)} | g,l \rangle \hat{a}_p^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_g \hat{a}_l, \quad (4.2)$$

где

$$\langle p | \hat{H}^{(1)} | k \rangle = - \int \psi_p^*(\mathbf{r}) \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu \right\} \psi_p(\mathbf{r}) d^3 r, \quad (4.3)$$

$$\langle p,k | \hat{U}^{(2)} | g,l \rangle = - \int \psi_p^*(\mathbf{r}) \psi_k^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_g(\mathbf{r}') \psi_l(\mathbf{r}) d^3 r d^3 r', \quad (4.4)$$

– матричные элементы одночастичного и двухчастичного операторов в базисе шредингеровских волновых функций $\psi_p(\mathbf{r})$, μ – химический потенциал газа, $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ – потенциал парного взаимодействия между частицами. Выберем в качестве $\psi_p(\mathbf{r})$ собственные волновые функции свободного гамильтониана $H^{(1)}$, то есть плоские волны

$$\psi_p(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp\left(-i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right),$$

при этом, с учетом соотношения

$$\frac{1}{\Omega} \int \exp\left(i \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{k})\mathbf{r}}{\hbar}\right) d^3 r = \delta_{p,k}, \quad (4.5)$$

получаем

$$\hat{H} = \sum_p \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) \hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \frac{1}{2\Omega} \sum_{p,k,g} v(\mathbf{p}) \hat{a}_{p+k}^+ \hat{a}_{g-p}^+ \hat{a}_g \hat{a}_k, \quad (4.6)$$

где $v(\mathbf{p})$ - Фурье-образ межатомного потенциала $U(\mathbf{r})$

$$v(\mathbf{p}) = \int \exp\left(i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right) U(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (4.7)$$

Напомним, что операторы рождения и уничтожения \hat{a}_p^+ и \hat{a}_p бозе-частиц подчиняются коммутационным соотношениям

$$[\hat{a}_p, \hat{a}_k^+] = \delta_{p,k}, \quad [\hat{a}_p, \hat{a}_k] = [\hat{a}_p^+, \hat{a}_k^+] = 0. \quad (4.8)$$

Основная идея Боголюбова состояла в предложении, что если в конденсате находится большое число частиц, то можно положить

$$\hat{a}_0^+ = \hat{a}_0 = \sqrt{N_0} \quad (4.9)$$

и считать \hat{a}_0^+ и \hat{a}_0 коммутирующими (фактически это означает выполнение условия $N_0 \gg 1$). При этом число частиц с нулевым импульсом N_0 можно рассматривать как вариационный параметр.

Теперь гамильтониан (4.6) может быть представлен в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}^{(-2)} + \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)} + \hat{H}^{(2)} \quad , \quad (4.10)$$

где

$$\hat{H}^{(-2)} = -\mu N_0 + \frac{1}{2\Omega} N_0^2 \nu(0), \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(0)} = \sum_p^* \left\{ \frac{p^2}{2m} - \mu + \frac{N_0}{\Omega} [\nu(0) + \nu(\mathbf{p})] \right\} \hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \\ + \frac{N_0}{2\Omega} \sum_p^* \nu(\mathbf{p}) (\hat{a}_p^+ \hat{a}_{-p}^+ + \hat{a}_{-p} \hat{a}_p), \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{\sqrt{N_0}}{\Omega} \sum_{p,k,q}^* \delta_{p+k,q} \nu(\mathbf{p}) (\hat{a}_p^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_q + \hat{a}_q \hat{a}_k \hat{a}_p), \quad (4.13)$$

$$\hat{H}^{(2)} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{p,k,q,l}^* \delta_{p+k,q+l} \nu(\mathbf{p}-\mathbf{q}) \hat{a}_p^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_q \hat{a}_l, \quad (4.14)$$

где звездочка над знаком суммы \sum^* означает суммирование по ненулевым значениям переменной. Заметим, что выражение (4.10) может естественно рассматриваться как разложение по возрастающим степеням величины $N_0^{-1/2}$, если формально считать $\nu(\mathbf{p})$ величиной пропорциональной N_0^{-1} . Это находится в полном соответствии с общими принципами квантовой механики, сог-

ласно которым конкуренция кинетической и потенциальной энергий определяет спектр низко лежащих энергетических уровней системы.

Очевидно, наиболее простое приближение в нашей задаче состоит в удержании только $\hat{H}^{(-2)}$ (4.11) в \hat{H} . Минимизируя $\hat{H}^{(-2)}$ варьированием по N_0 , находим оптимальное соотношение между N_0 и химическим потенциалом

$$\mu = \frac{N_0}{\Omega} \nu(0) \quad (4.15)$$

Следующее приближение, рассмотренное Боголюбовым, состоит в учете следующего слагаемого $\hat{H}^{(0)}$ (4.12) в H . При этом, полученный квадратичный по операторам рождения и уничтожения гамильтониан необходимо привести к диагональному виду. Это означает, что результирующий гамильтониан должен содержать только произведения равного числа операторов \hat{a}_p^+ и \hat{a}_p . Для диагонализации гамильтониана (4.12) применим к операторам рождения и уничтожения преобразование Боголюбова:

$$\hat{a}_p = u_p \hat{\alpha}_p + v_p \hat{\alpha}_{-p}^+, \quad (4.16a)$$

$$\hat{a}_p^+ = u_p \hat{\alpha}_p^+ + v_p \hat{\alpha}_{-p}. \quad (4.16b)$$

Легко проверить непосредственным вычислением, что если коэффициенты преобразования u_p и v_p удовлетворяют соотношению

$$u_p^2 - v_p^2 = 1, \quad (4.17)$$

то новые операторы $\hat{\alpha}_p^+$ и $\hat{\alpha}_p$ подчиняются тем же коммутационным соотношениям (4.8), что и старые \hat{a}_p^+ и \hat{a}_p . Это означает, что преобразование Боголюбова (4.16) – каноническое. Ввиду условия (4.17) удобно перейти к одному неопределенному пока параметру λ_p :

$$u_p = \frac{\lambda_p + 1}{2\sqrt{\lambda_p}}, \quad v_p = \frac{\lambda_p - 1}{2\sqrt{\lambda_p}}. \quad (4.18)$$

Подставляя выражения (4.16) и (4.18) в гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(-2)}$ и зануляя коэффициенты при недиагональных членах (тем самым, фиксируя параметр λ_p), получаем

$$\hat{H} = \sum_p^* \varepsilon_p \hat{\alpha}_p^+ \hat{\alpha}_p + E_0, \quad (4.19)$$

где

$$\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m\lambda_p} \quad (4.20)$$

– энергия квазичастиц (ср. с формулой (2.17)); структурный фактор нашей системы определяется выражением

$$\lambda_p = p \left\{ p^2 + \frac{4mN_0}{\Omega} v(p) \right\}^{-1/2}; \quad (4.21)$$

$$E_0 = -\frac{N_0^2}{2\Omega} v(0) - \frac{1}{2} \sum_p^* \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{N_0}{\Omega} v(p) - \varepsilon_p \right). \quad (4.22)$$

– энергия основного состояния слабонеидеального бозе-газа.

Таким образом, мы совершили переход от приближенного гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(-2)}$ (4.11), (4.12), описывающего слабонеидеальный газ бозе-частиц, к гамильтониану, записанному в терминах невзаимодействующих квазичастиц с энергетическим спектром (4.20). Новые операторы $\hat{\alpha}_p^+$ и $\hat{\alpha}_p$, введенные посредством канонического преобразования Боголюбова, имеют смысл операторов рождения и уничтожения квазичастиц в состоянии с импульсом p . Заметим, что из формулы (4.21) в предельных случаях следуют общие свойства структурного фактора, рассмотренные в Разделе 2. Действительно, в случае коротковолновых возбуждений, то есть больших импульсов, вторым слагаемым (взаимодействием) в скобках формулы (4.21) можно пренебречь. При этом $\lambda_p \approx 1$, а формула (4.20) переходит в спектр свободной частицы $\varepsilon(p) = p^2/2m$. В обратном предельном случае длинноволновых возбуждений,

то есть малых импульсов квазичастиц, основную роль в (4.21) играет второе слагаемое в скобках, так что $\lambda_p \approx p\sqrt{\Omega/4mN_0\nu(0)}$, а спектр (4.20) приобретает обычный фононный вид $\varepsilon(\mathbf{p}) = cp$, где величина $c = \sqrt{N_0\nu(0)/m\Omega}$ имеет смысл скорости звука в слабонеидеальном бозе-газе.

Рассмотренная в данном разделе задача не только помогает понять, как концепция квазичастиц естественным образом возникает в описании слабо возбужденных состояний, но и демонстрирует насколько сильным и изящным может быть метод вторичного квантования при решении задач квантовой статистической физики.

5. Фононы в твердых телах

Как мы уже выяснили в предыдущих разделах, возможность квазичастичного описания конденсированных сред при определенных условиях является их универсальным свойством. Анализ, примененный к свойствам слабо возбужденного состояния жидкости в Разделе 2, в равной степени подходит и к твердому телу, если мы отвлечемся от его внутренней структуры и ограничимся рассмотрением в рамках теории сплошных сред. Однако свойственная большинству твердых тел структурная периодичность приводит к очень важным и интересным свойствам соответствующего газа квазичастиц, в частности их энергетического спектра. В данном разделе мы рассмотрим систему фононов в твердых телах на примере одномерного кристалла. Эта модель позволяет получить ряд важных аналитических результатов, не загромождая вычислений, и может быть с некоторыми дополнениями обобщена на трехмерный кристалл. В конце раздела будут указаны некоторые различия между свойствами квазичастиц в одномерном и трехмерном кристаллах. Самым простым случаем является ситуация, когда в каждой элементарной ячейке кристалла имеется всего по одному атому. Мы, однако, немного услож-

ним задачу, предположив наличие двух атомов в одной ячейке.

Итак, рассмотрим одномерный кристалл, в каждой элементарной ячейке которого находится два атома с массами m_1 и m_2 . Положение элементарных ячеек определяется вектором решетки

$$\mathbf{n} = n\mathbf{a}, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots, N, \quad (5.1)$$

$a = |\mathbf{a}|$ – расстояние между соседними ячейками. Пусть u_{n1} и u_{n2} – смещения атомов относительно их равновесных положений 0 и $\mathbf{a}/2$ в элементарной ячейке с вектором \mathbf{n} ¹. Кинетическая энергия таких колеблющихся атомов определяется обычной формулой

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \sum_{n,\alpha} m_\alpha \dot{u}_{n\alpha}^2. \quad (5.2)$$

Здесь и далее в этом разделе индексы α и β нумерует атомы внутри каждой элементарной ячейки, то есть принимают значения 1 или 2. При учете взаимодействия только соседних атомов (гармоническое приближение) потенциальная энергия выражается формулой

$$E_{\text{pot}} = \frac{\gamma}{2} \sum_n \left\{ 2(u_{n,1} - u_{n,2})^2 + (u_{n,1} - u_{n-a,2})^2 + (u_{n,2} - u_{n+a,1})^2 \right\}, \quad (5.3)$$

где γ – константа взаимодействия. В качестве граничных условий выберем следующие циклические условия, обычные в физике твердого тела:

$$u_{n,\alpha} = u_{n+Na,\alpha}, \quad (5.4)$$

где N – число элементарных ячеек в кристалле. Одномерной решетке (5.1) соответствует зона Бриллюэна в пространстве волновых векторов \mathbf{k} :

$$-\pi \leq \mathbf{k}\mathbf{a} < \pi.$$

Внутри этой зоны располагаются N неэквивалентных волновых векторов

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

¹ Мы предполагаем, что поперечные и продольные смещения атомов независимы.

От смещений отдельных атомов $u_{n,\alpha}$ удобно перейти к новым обобщенным координатам $e_\alpha(\mathbf{k})A_{\mathbf{k}}$, которые характеризуют коллективные движения атомов, соответствующие определенным значениям волнового вектора \mathbf{k} . Для этого введем преобразование

$$u_{n,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{m_\alpha N}} \sum_{\mathbf{k}} e_\alpha(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}n), \quad (5.5)$$

где $e_\alpha(\mathbf{k}) = e_\alpha(-\mathbf{k})$ – вещественные постоянные функции, смысл которых будет ясен из дальнейшего, величины $A_{\mathbf{k}}$, как следует из условия вещественности смещений $u_{n,\alpha}$, удовлетворяют соотношениям

$$A_{\mathbf{k}} = A_{-\mathbf{k}}^*. \quad (5.6)$$

Подставив (5.5) в (5.2) и (5.3), преобразуем их с учетом (5.6) к виду

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\alpha} e_\alpha^2(\mathbf{k}) \dot{A}_{\mathbf{k}} \dot{A}_{-\mathbf{k}}, \quad (5.7)$$

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\alpha,\beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_\alpha(\mathbf{k}) e_\beta(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}}, \quad (5.8)$$

где мы ввели так называемую силовую матрицу $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$, элементы которой определяются соотношениями

$$D_{11}(\mathbf{k}) = \frac{4\gamma}{m_1}, \quad D_{22}(\mathbf{k}) = \frac{4\gamma}{m_2}, \quad D_{12}(\mathbf{k}) = D_{21}(\mathbf{k}) = -\frac{2\gamma}{\sqrt{m_1 m_2}} (1 + \exp(i\mathbf{k}a)). \quad (5.9)$$

Заметим, что при получении выражений (5.7) и (5.8) мы использовали известные соотношения

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{n}] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')] = \delta_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}. \quad (5.10)$$

Используя полученные выражения для кинетической (5.7) и потенциальной энергии запишем функцию Лагранжа нашей системы как $L = E_{\text{kin}} - E_{\text{pot}}$. Тогда уравнения Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{\partial L}{\partial q}, \quad q = e_\alpha(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}}, \quad (5.11)$$

примут вид

$$e_\alpha(\mathbf{k}) \ddot{A}_{\mathbf{k}} + \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_\beta(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} = 0. \quad (5.12)$$

Полученная система линейных дифференциальных уравнений второго порядка (5.12) с помощью подстановки

$$A_{\mathbf{k}}(t) = f_{\mathbf{k}} \exp[i\omega(\mathbf{k})t], \quad (5.13)$$

где $f_{\mathbf{k}}$ – не зависящая от времени функция, может быть сведена к системе однородных линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных функций $e_\alpha(\mathbf{k})$:

$$e_\alpha(\mathbf{k}) \omega^2(\mathbf{k}) - \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_\beta(\mathbf{k}) = 0. \quad (5.14)$$

Условие разрешимости системы уравнений (5.14) сводится к равенству нулю определителя

$$\left| D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) - \omega^2(\mathbf{k}) \delta_{\alpha\beta} \right| = 0. \quad (5.15)$$

Подставляя матричные элементы (5.9) силовой матрицы $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ в квадратное уравнение (5.15), находим для каждого значения \mathbf{k} два независимых решения

$$\omega_s^2(\mathbf{k}) = 2\gamma \left\{ \frac{1}{\mu} + (-1)^s \sqrt{\frac{1}{\mu^2} - \frac{4}{m_1 m_2} \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2}} \right\}, \quad (5.16)$$

где индекс $s = 1, 2$ нумерует решения, а $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ – приведенная масса двух атомов.

Две полученные функции $\omega_s(\mathbf{k})$ являются частотами двух независимых колебаний в рассматриваемом одномерном кристалле. В длинноволновом пределе, то есть при малых значениях волнового вектора $\mathbf{k} \ll \mathbf{a}^{-1}$ эти функции имеют вид

$$\omega_1(\mathbf{k}) \approx \sqrt{\frac{4\gamma}{m_1 + m_2}} \left| \sin \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \right| \approx \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \sqrt{\frac{4\gamma}{m_1 + m_2}}, \quad (5.17)$$

$$\omega_2(\mathbf{k}) \approx 2\sqrt{\frac{\gamma}{\mu}} \left\{ 1 - \frac{2\mu}{m_1 + m_2} \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \right\} \approx 2\sqrt{\frac{\gamma}{\mu}}. \quad (5.18)$$

Функция $\omega_1(\mathbf{k})$, как видно из (5.17) при малых волновых векторах пропорциональна волновому вектору (что на языке квазичастиц означает пропорциональность энергии квазичастицы ее импульсу), то есть закон дисперсии первой ветви колебаний стремится к линейному. Как мы уже знаем из предыдущих разделов, такие колебания являются акустическими, а соответствующими квазичастицы – фононами¹. Поэтому $\omega_1(\mathbf{k})$ называют *акустической ветвью колебаний*.

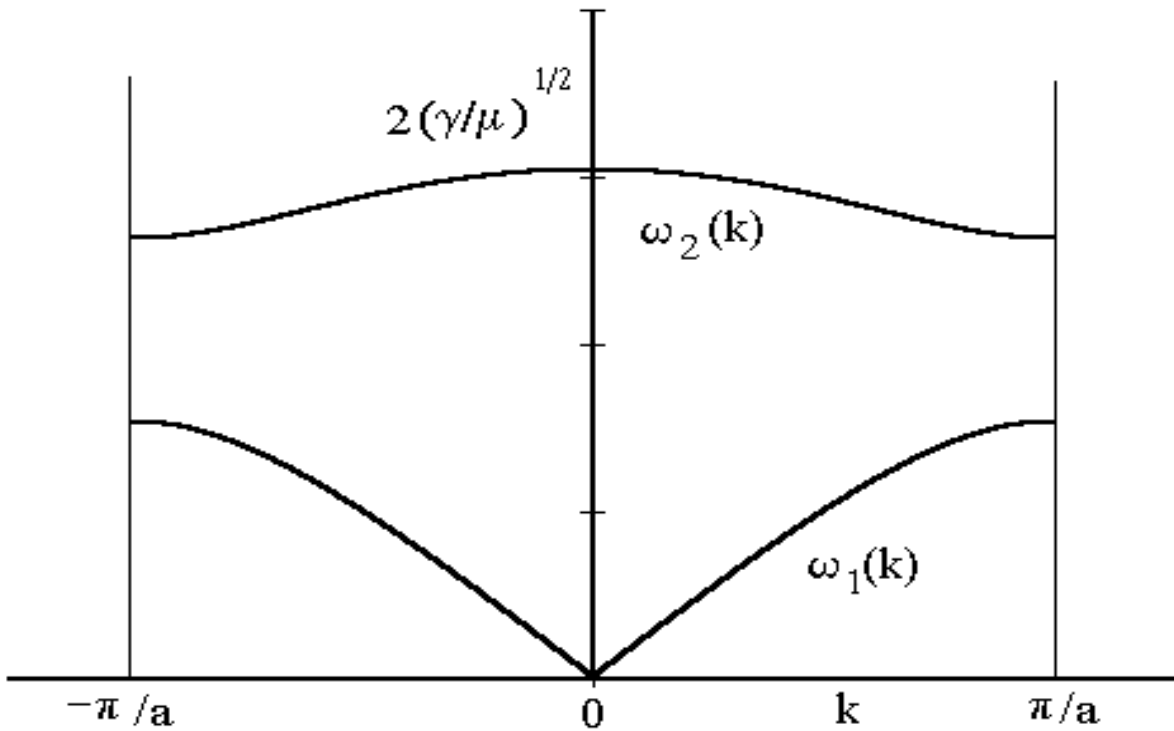


Рис. 2. Характерный вид энергетического спектра фононов в твердом теле.

¹ Следует отметить, что все проведенные до сих пор вычисления были классическими и, строго говоря, не произведя переход к квантовому рассмотрению, мы не можем говорить о квазичастицах как о квантах некоторого коллективного движения.

Функция $\omega_2(\mathbf{k})$ характеризует колебания, частоты которых не стремятся к нулю при приближении волнового вектора к центру зоны Бриллюэна ($\mathbf{k} = 0$). В этом случае говорят, что спектр коллективных колебаний системы имеет щель, в нашем случае равную $2\sqrt{\gamma/\mu}$. $\omega_2(\mathbf{k})$ называют *оптической ветвью колебаний*. Характер общей зависимости частот $\omega_1(\mathbf{k})$ и $\omega_2(\mathbf{k})$ от волнового вектора показан на Рис. 2.

Используя полученные решения (5.16) для частот $\omega_1(\mathbf{k})$ и $\omega_2(\mathbf{k})$, из системы уравнений (5.14) легко получить уравнение, определяющее функции $e_{\alpha s}(\mathbf{k})$, соответствующие каждой из ветвей колебаний,

$$e_{\alpha s}(\mathbf{k})\omega_s^2(\mathbf{k}) - \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})e_{\beta s}(\mathbf{k}) = 0. \quad (5.19)$$

Решения уравнения (5.19), соответствующие разным ветвям s , ортогональны между собой. Поскольку они определены уравнением (5.19) лишь с точностью до произвольной постоянной, то их можно нормировать условием

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha s}(\mathbf{k})e_{\alpha s'}(\mathbf{k}) = \delta_{ss'}. \quad (5.20)$$

Подставляя матричные элементы (5.9) силовой матрицы $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ в уравнение (5.19), находим, что при малых значениях волнового вектора, соответствующих длинноволновым колебаниям, имеет место соотношение

$$\Delta_s^{(12)}(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} u_{n1} \\ u_{n2} \end{pmatrix}_s = \frac{e_{1s}(\mathbf{k})}{e_{2s}(\mathbf{k})} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} = \frac{4\gamma}{4\gamma - m_1\omega_s^2(\mathbf{k})}. \quad (5.21)$$

Очевидно, что в акустической ветви колебаний $\Delta_{ac}^{(12)}(\mathbf{k}) \approx 1$, то есть атомы, находящиеся в одной элементарной ячейке кристалла, колеблются в одинаковом направлении. В оптической ветви они совершают колебания в противоположных направлениях с амплитудами, обратно пропорциональными их массам, так как $\Delta_{opt}^{(12)}(\mathbf{k}) \approx -m_2/m_1$. В некоторых кристаллах, в которых взаимодействие определяется в основном дальнедействующей кулоновской частью (их называют *ионными кристаллами*), в элементарную ячейку входят ионы с противо-

положными зарядами. Поэтому оптические колебания связаны с большим изменением электрического дипольного момента ячейки. Они определяют оптическое поведение кристалла в этой области частот. По этой причине такие колебания и назвали оптическими.

Теперь, решив систему уравнений (5.14) кинетическую (5.7) и потенциальную (5.9) энергии можно записать в виде

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, s, s'} e_{\alpha s}(\mathbf{k}) e_{\alpha s'}(\mathbf{k}) \dot{A}_{\mathbf{k}s} \dot{A}_{-\mathbf{k}, s'}, \quad (5.22)$$

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \beta, s, s'} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_{\alpha s}(\mathbf{k}) e_{\beta s'}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}s} A_{-\mathbf{k}, s'}. \quad (5.23)$$

С учетом (5.19) и (5.20) эти выражения преобразуются к виду

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, s} \dot{A}_{\mathbf{k}s} \dot{A}_{-\mathbf{k}, s}, \quad E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, s} \omega_s^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}s} A_{-\mathbf{k}, s}. \quad (5.24)$$

Очевидно, что полная энергия (5.24) представляет собой сумму энергий гармонических осцилляторов аналогично тому, как это было в Разделе 2 (см. формулу (2.12)). Таким образом, после квантования можно записать энергию в виде суммы энергий квантованных осцилляторов

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \sum_{\mathbf{k}, s} \hbar \omega(\mathbf{k}) \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k}s}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \right\}, \quad (5.25)$$

где $\hat{a}_{\mathbf{k}s}^+$ и $\hat{a}_{\mathbf{k}s}$ – операторы рождения и уничтожения фононов с импульсом \mathbf{k} в ветви s , которые определяются правилом квантования обобщенной координаты

$$A_{\mathbf{k}s} \rightarrow \hat{A}_{\mathbf{k}s} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_s(\mathbf{k})}} (\hat{a}_{\mathbf{k}s} + \hat{a}_{-\mathbf{k}, s}^+) \quad (5.26)$$

и обобщенного импульса

$$P_{\mathbf{k}s} = \frac{\partial E}{\partial \dot{A}_{\mathbf{k}s}} = \dot{A}_{-\mathbf{k}, s} \rightarrow \hat{P}_{\mathbf{k}s} = i \sqrt{\frac{\hbar \omega_s(\mathbf{k})}{2}} (\hat{a}_{\mathbf{k}s}^+ - \hat{a}_{-\mathbf{k}, s}). \quad (5.27)$$

Из правил коммутации импульса и координаты $[\hat{A}_{k_s}, \hat{P}_{k's'}] = i\hbar \delta_{k,k'} \delta_{s,s'}$ легко получить правила коммутации операторов рождения и уничтожения фононов

$$[\hat{a}_{k_s}, \hat{a}_{k's'}^+] = \delta_{k,k'} \delta_{s,s'}, \quad [\hat{a}_{k_s}, \hat{a}_{k's'}] = [\hat{a}_{k_s}^+, \hat{a}_{k's'}^+] = 0, \quad (5.28)$$

которые полностью аналогичны соотношениям (4.8).

Таким образом, мы показали, что коллективные колебания периодической структуры также могут быть описаны введением системы квазичастиц, а именно фононов. Однако, в отличие от обычных акустических фононов, с которыми мы уже сталкивались в жидкости, в твердых телах при наличии более одного атома в элементарной ячейке появляется дополнительная оптическая ветвь колебаний (см. Рис. 2). Соответствующие квазичастицы называют оптическими фононами.

Полученные результаты можно обобщить на случай кристаллов с σ атомами в элементарной ячейке. Фононный спектр таких кристаллов состоит из σ ветвей с частотами $\omega_s(\mathbf{k})$ ($s = 1, 2, \dots, \sigma$). Частота одной из этих ветвей стремится к нулю при стремлении к нулю волнового вектора. Эта ветвь называется акустической. Остальные $\sigma - 1$ ветвей колебаний называются оптическими.

В случае трехмерного кристалла количество ветвей колебаний просто умножается на три, так что если в трехмерной элементарной ячейке находится σ атомов. То фононный спектр состоит из трех акустических ветвей и $3\sigma - 3$ оптических.

В заключение данного раздела следует отметить, что фононная модель твердых тел позволяет описывать большинство релаксационных процессов и поведение различных термодинамических величин в зависимости от внешних параметров, таких как теплопроводность, теплоемкость и т.д.

6. Электронный газ в твердых телах. Плазмоны

В предыдущем разделе мы рассмотрели квазичастицы, описывающие коллективные колебания структурных единиц кристаллической решетки твердого тела, то есть нейтральных атомов, молекул или тяжелых ионов. Как выяснилось, квантами этих возбуждений являются фононы. Рассмотрим теперь возбуждения, связанные с коллективным движением электронов относительно тяжелых ионов в твердых телах. Эти возбуждения обусловлены кулоновским взаимодействием между электронами и положительными ионами. Им соответствуют продольные волны, которые получили название *плазменных* волн. Соответствующие квазичастицы, то есть кванты плазменных волн называют *плазмонами*. Плазменные колебания не очень высоких частот возникают в металлах и полупроводниках, то есть в твердых телах, имеющих слабосвязанные с ионами электроны.

В основном (невозбужденном) состоянии электроны полностью компенсируют положительный заряд ионов и каждая элементарная ячейка кристалла нейтральна. Пусть n_0 – среднее число электронов в единице объема кристалла, соответствующее такому нейтральному состоянию. Если e – единичный положительный заряд, то изменение плотности электрического заряда ρ_e дается формулой

$$\delta\rho_e = \rho_e(\mathbf{r}, t) - \rho_e^{(0)} = en_0 \operatorname{div} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \quad (6.1)$$

где $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ – вектор малого локального смещения электронного газа из своего нормального положения. При таком изменении плотности электрического заряда появляется электростатический потенциал, удовлетворяющий уравнению Пуассона

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}, t) = -4\pi\delta\rho_e = 4\pi en_0 \operatorname{div} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t). \quad (6.2)$$

Вследствие смещения электронов в их энергии появляется потенциальная добавка, которая состоит из изменений упругой и электростатической энергий.

Рассматривая только продольные смещения, то есть, полагая $\text{rot } \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = 0$, потенциальную энергию можно записать в виде

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \int \left[\eta (\text{div } \mathbf{u})^2 + \varphi \delta \rho_e \right] d^3 r, \quad (6.3)$$

где η – модуль упругости электронного газа. Кинетическая энергия запишется в обычном виде

$$E_{\text{kin}} = \frac{mn_0}{2} \int \dot{\mathbf{u}}^2(\mathbf{r}, t) d^3 r, \quad (6.4)$$

где m – масса электрона. Предположив, что кристалл имеет форму куба с объемом $\Omega = L^3$ и используя циклические граничные условия, аналогичные (5.4), можно показать, что волновые функции имеют вид

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (6.5)$$

где каждая компонента волнового вектора k_j ($j = x, y, z$) принимает дискретный ряд значений

$$k_j = \frac{2\pi l_j}{L}, \quad \text{где } l_j = 0, \pm 1, \dots \quad (6.6)$$

Легко проверить, что при этих условиях функции (6.5) образуют полную ортонормированную систему. Разложим вектор смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ по этой системе

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}(t) \mathbf{e}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (6.7)$$

Здесь единичный вектор $\mathbf{e}(\mathbf{k})$ удовлетворяет условиям

$$\mathbf{e}^2(\mathbf{k}) = 1, \quad \mathbf{e}(\mathbf{k}) = \mathbf{e}(-\mathbf{k}), \quad \mathbf{k} \parallel \mathbf{e}(\mathbf{k}).$$

Поэтому его называют вектором продольной поляризации. Так как смещения (6.7) по определению вещественны, на коэффициенты $A_{\mathbf{k}}$ накладывается условие $A_{\mathbf{k}} = A_{-\mathbf{k}}^*$. Раскладывая потенциал $\varphi(\mathbf{r}, t)$ аналогично смещению (6.7)

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(t) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (6.8)$$

и подставляя (6.7), (6.8) в потенциальную (6.3) и кинетическую (6.4) энергии, получаем

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (k^2 \eta + 4\pi e^2 n_0^2) A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}}, \quad E_{\text{kin}} = \frac{mn_0}{2} \sum_{\mathbf{k}} \dot{A}_{\mathbf{k}} \dot{A}_{-\mathbf{k}}. \quad (6.9)$$

Используя уравнения Лагранжа (5.11) для функции Лагранжа $L = E_{\text{kin}} - E_{\text{pot}}$, с учетом (6.9) получаем систему уравнений

$$mn_0 \ddot{A}_{\mathbf{k}} + (\eta k^2 + 4\pi e^2 n_0^2) A_{\mathbf{k}} = 0. \quad (6.10)$$

Используя подстановку (5.13), получаем закон дисперсии плазменных колебаний в длинноволновой области (мы заложили это при записи упругой части потенциальной энергии (6.3), предположив локальные смещения электронного газа малыми)

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_p^2 + \frac{\eta}{mn_0} k^2, \quad (6.11)$$

где мы ввели понятие *плазменной частоты* ω_p , которая определяется выражением

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2}{m} n_0. \quad (6.12)$$

Если теперь произвести квантование, аналогично тому, как это уже делалось в предыдущем разделе путем замены обобщенной координаты

$$A_{\mathbf{k}} \rightarrow \hat{A}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2mn_0\omega(\mathbf{k})}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^+) \quad (6.13)$$

и обобщенного импульса

$$P_{\mathbf{k}} = \frac{\partial E}{\partial \dot{A}_{\mathbf{k}}} \rightarrow \hat{P}_{\mathbf{k}} = i \sqrt{\frac{\hbar\omega(\mathbf{k})mn_0}{2}} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^+ - \hat{a}_{-\mathbf{k}}), \quad (6.14)$$

где $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ и $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ – бозевские операторы рождения и уничтожения плазмонов в состоянии с импульсом $\hbar\mathbf{k}$, то полная энергия системы выразится уже известным соотношением

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega(\mathbf{k}) \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right\}. \quad (6.15)$$

Таким образом, проквантовав поле флуктуаций электронной плотности в твердом теле, мы пришли к понятию плазмона, как кванта коллективных колебаний электронной подсистемы.

Кроме очевидной аналогии между плазмонами и фононами, следует также отметить их непосредственную связь. Так плазмоны в твердом теле можно в некотором смысле считать фононами в газе с поправкой на электростатические эффекты. Действительно, при $e = 0$ электростатические эффекты исчезают, и закон дисперсии можно записать в чисто фононном виде $\omega(k) \approx sk$, где $s = \sqrt{\eta/mn_0}$ имеет смысл некоторой эффективной скорости звука. На практике однако плазменная частота оказывается гораздо большей «акустической» частоты $\omega_{ac}(k) \approx k\sqrt{\eta/mn_0}$. Так даже для максимального характерного для большинства ионных кристаллов значения волнового вектора $k_{\text{max}} \approx 10^8 \text{ см}^{-1}$ приближенные оценки дают $\omega_{ac}/\omega_p \approx 10^{-3}$. Таким образом дисперсия плазмов очень мала и в большинстве конкретных физических задач ее можно не учитывать.

7. Экситоны

До сих пор мы рассматривали квазичастицы появляющиеся в результате некоторых коллективных процессов в ансамбле реальных частиц (их часто называют элементарными возбуждениями). Такого рода квазичастицы трудно представить себе в реальном пространстве ввиду того, что они строго определены лишь в пространстве импульсов. Существует, однако, класс квазичастиц, которые тесно связаны с конкретными реальными частицами (а не с ансамблем в целом) и могут быть идентифицированы в координатном пространстве.

К таким квазичастицам относятся, например экситоны. Представим себе идеальный ионный кристалл, в котором один из ионов находится в возбужденном состоянии (имеется ввиду конечно возбуждение электронного состояния). Поскольку в возбужденном состоянии может находиться любой ион, а между внешними электронными оболочками ионов имеется сильное взаимодействие, энергия возбуждения может передаваться от одного иона к другому. Картину такого «блуждания» возбужденного состояния можно сделать наглядной введя понятие некоторой квазичастицы, имеющей энергию, равную энергии возбуждения иона. Такая квазичастица называется *экситоном Френкеля*. Поскольку экситон делокализован его движение никак не связано с реальным движением ионов в кристалле, и следовательно подвижность таких квазичастиц может быть очень высокой.

Наиболее простым случаем экситона является модель, когда пространственные размеры области, в которой локализованы электронные и дырочные уровни, значительно превышают постоянную решетки. В этом случае электрон в зоне проводимости и дырку в валентной зоне можно рассматривать, как частицы с массами m_e ¹ и m_h . Экситоны, удовлетворяющие такой модели, называют *экситонами Ванье – Мотта*. В простейшем случае параболических зон с экстремумами при $\mathbf{k} = 0$, энергии электронов проводимости и дырок определяются формулами

$$E_e(\mathbf{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad E_h = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}, \quad (7.1)$$

где Δ – энергетическая щель между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны. Вводя взаимодействие между электроном и дыркой в кулоновском виде

¹ Заметим, что здесь m_e – эффективная масса электрона проводимости, которая, вообще говоря, отлична от массы свободного электрона из-за влияния периодического потенциала кристаллической решетки.

$$U(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|) = -\frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \quad (7.2)$$

и переходя к системе центра инерции, получим уравнение, определяющее энергию электронно-дырочной пары

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{e^2}{\varepsilon r} \right) \varphi_n(\mathbf{r}) = \left\{ E_n(\mathbf{k}) - \Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)} \right\} \varphi_n(\mathbf{r}), \quad (7.3)$$

где $r = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|$, ε – диэлектрическая проницаемость, n – главное квантовое число, μ – приведенная масса электрона и дырки. В общем случае при расчете энергетических уровней экситонов в выражении (7.3) необходимо было бы учесть пространственную дисперсию диэлектрической проницаемости и тензорный характер эффективных масс электрона и дырки. В нашем простом случае результирующая энергия может быть представлена в виде трех слагаемых

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)} - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2 n^2} + \Delta. \quad (7.4)$$

Первое слагаемое в этом выражении отвечает кинетической энергии свободного совместного движения электрона и дырки. Второе слагаемое соответствует дискретным ($n = 1, 2, \dots$) возбужденным состояниям водородоподобного атома с приведенной массой μ . Эффективный радиус экситона можно выразить формулой

$$R_n = \frac{n^2 \varepsilon m}{\mu} a_B, \quad (7.5)$$

где $a_B = \hbar^2 / m e^2 \approx 0,5 \cdot 10^{-8}$ см – боровский радиус. В кристалле германия ($\mu \approx 0,2m$, $\varepsilon \approx 16$) радиус наинизшего первого состояния $R_1 \approx 80a_B$ значительно превышает постоянную решетки, что и оправдывает макроскопическое описание взаимодействия между электроном и дыркой по закону Кулона (7.2).

Следует отметить, что в уравнении (7.3) мы не учли спиновых состояний электрона и дырки. Поскольку электрон и дырка имеют спин $1/2$ (в единицах \hbar), то полный спин экситона равен нулю либо единице. В первом случае экс-

тон называют *синглетным* либо *параэкситон*ом, во втором – *триплетным* или *ортоэкситон*ом. Понятно, что энергия триплетного экситона лежит ниже энергии синглетного экситона на величину, равную удвоенной энергии обменного взаимодействия между электроном и дыркой.

В настоящее время открыто огромное количество новых типов экситонов, и они интенсивно изучаются ввиду их определяющей роли во многих процессах, протекающих в твердых телах.

Литература.

1. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. – М.: Добросвет, 1998.
2. И.М. Халатников. Теория сверхтекучести. – М.: Наука, 1971.
3. Н.Н. Боголюбов, Н.Н. Боголюбов (мл.). Введение в квантовую статистическую механику. – М.: Наука, 1984.
4. В.Л. Гуревич. Кинетика фононных систем. – М.: Наука, 1980.
5. А.С. Давыдов. Теория твердого тела. – М.: Наука, 1976.
6. М.И. Каганов, И.М. Лифшиц. Квазичастицы. – М.: Наука, 1989.

Содержание

1. Введение. Что такое квазичастица?	3
2. Спектр бозе-жидкости	5
3. Квазичастицы в сверхтекучем ^4He	9
4. Конденсация Бозе – Эйнштейна. Квазичастицы в слабонеидеальном бозе-газе	15
5. Фононы в твердых телах	20
6. Электронный газ в твердых телах. Плазмоны	28
7. Экситоны	31
8. Литература	34

Александр Владимирович Жуков

КВАЗИЧАСТИЧНОЕ ОПИСАНИЕ
КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Учебное пособие

В авторской редакции

ЛР № 040327

Подписано в печать 20.02.2001. Формат 60×84/16.

Гарнитура Times. Усл. п. л. 2,09.

Тираж 50 экз. Изд. №110. Заказ 15.

Оригинал-макет подготовлен на кафедре теоретической физики и
тиражирован в издательстве

Белгородского государственного университета,
308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 12.