Колебания кристаллической решетки в гармоническом приближении, часть 3

замена переменных

<u>каноническое преобразование, сохраняющее гамильтонов вид динамических уравнений</u>:

$\dot{\tilde{u}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tilde{p}}$

$\dot{\tilde{p}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tilde{u}}$

Продолжим общее описание колебаний кристаллической решетки в гармоническом приближении. Введем новые переменные:

$$\tilde{u}_{\mathbf{n}\mu} = \alpha_s u_{\mathbf{n}\mu}, \quad \tilde{P}_{\mathbf{n}\mu} = \frac{P_{\mathbf{n}\mu}}{\alpha_s}, \tag{8.1}$$

где $\alpha_s = \sqrt{M_s/M}$, $M = \sum\limits_s M_s$. Уравнения (6.6), (6.7) приобретают вид:

$$\dot{\tilde{u}}_{\mathbf{n}\mu} = \frac{\tilde{P}_{\mathbf{n}\mu}}{M}, \tag{8.2}$$

$$\dot{\tilde{P}}_{\mathbf{n}\mu} = -\sum_{\mathbf{n}',\mu'} \tilde{A}^{\mu\mu'}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}'} \tilde{u}_{\mathbf{n}'\mu'}, \quad \tilde{A}^{\mu\mu'}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}'} = \frac{A^{\mu\mu'}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}'}}{\alpha_s \alpha_{s'}}, \tag{8.3}$$

Для решений в виде бегущих волн: $\tilde{u}_{\mathbf{n}\mu} = \tilde{u}_\mu(\mathbf{k}) \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathbf{n} - \omega t)]$ из (8.2), (8.3) получаем систему уравнений относительно амплитуд $\tilde{u}_\mu(\mathbf{k})$:

$$\sum_{\mu'} \tilde{A}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}) \tilde{u}_{\mu'}(\mathbf{k}) = \omega_j^2(\mathbf{k}) M \tilde{u}_\mu(\mathbf{k}), \tag{8.4}$$

где $\tilde{A}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}) = A^{\mu\mu'}(\mathbf{k})/(\alpha_s \alpha_{s'})$ — <u>эрмитова</u> матрица.

векторы поляризации

Таким образом, корни дисперсионного уравнения являются собственными значениями <u>эрмитовой</u> матрицы <u>положительно определенной</u> квадратичной формы. Это доказывает сделанное в *лекции 6* утверждение о <u>вещественности</u> и <u>неотрицательности</u> всех $3q$ корней дисперсионного уравнения. Компоненты соответсвующих собственных векторов, нормированных на 1, будем обозначать как $\tilde{e}^j_\mu(\mathbf{k})$. Эти векторы взаимно ортогональны:

$$\sum_\mu (\tilde{e}^{j'}_\mu(\mathbf{k}))^* \tilde{e}^j_\mu(\mathbf{k}) = \delta_{j'j}. \tag{8.5}$$

Векторы $e^j_\mu(\mathbf{k}) = \tilde{e}^j_\mu(\mathbf{k})/\alpha_s$ являются решениями (6.14):

$$\sum_{\mu'} A^{\mu\mu'}(\mathbf{k}) e^j_{\mu'}(\mathbf{k}) = \omega_j^2(\mathbf{k}) M_s e^j_\mu(\mathbf{k}), \tag{8.6}$$

и взаимно ортогональны <u>с весом</u>:

$$\sum_\mu M_s (e^{j'}_\mu(\mathbf{k}))^* e^j_\mu(\mathbf{k}) = M\delta_{j'j}. \tag{8.7}$$

<u>векторы поляризации в двухатомной цепочке в длинноволновом пределе</u>:

$\mathbf{e}_{\mathrm{ac}}(\mathbf{k}=0) = \{1, 1\}$

$\mathbf{e}_{\mathrm{opt}}(\mathbf{k}=0) = \left\{\sqrt{\frac{M_2}{M_1}}, -\sqrt{\frac{M_1}{M_2}}\right\}$

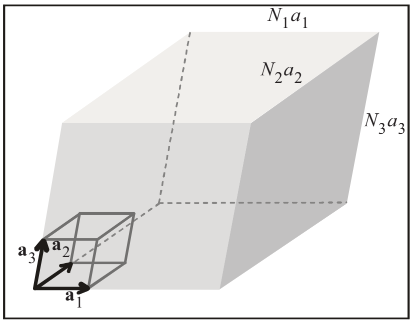
$\tilde{\mathbf{e}}_{\mathrm{ac}}(\mathbf{k}=0) = \left\{\sqrt{\frac{M_1}{M}}, \sqrt{\frac{M_2}{M}}\right\}$

$\tilde{\mathbf{e}}_{\mathrm{opt}}(\mathbf{k}=0) = \left\{\sqrt{\frac{M_2}{M}}, -\sqrt{\frac{M_1}{M}}\right\}$

> Итак, каждой колебательной моде, характеризуемой номером j и волновым вектором $\mathbf{k}$, соответсвует <u>собственная частота</u> $\omega_j(\mathbf{k})$ и <u>вектор поляризации</u> с $3q$ компонентами $e^j_\mu(\mathbf{k})$, определяющими для данной моды относительную амплитуду и направление смещений атомов базиса в элементарной ячейке.

кристалл конечных размеров

Предположим, что кристалл имеет форму параллелепипеда, подобного примитивной элементарной ячейке, которая построена на векторах основных трансляций решетки Браве $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ и $\mathbf{a}_3$; длины ребер параллелепипеда кратны длинам a_1, a_2 и a_3: N_1a_1, N_2a_2 и N_3a_3, где $N_{1,\,2,\,3}>>1$ — целые числа (для удобства выбранные четными). Зададим периодические граничные условия на противоположных гранях кристалла:



кристалл содержит $N = N_1N_2N_3$ элементарных ячеек

$$
\begin{aligned}
&u_{\mathbf{n}=\{0,\,n_2,\,n_3\},\,\mu} = u_{\mathbf{n}=\{N_1,\,n_2,\,n_3\},\,\mu} \text{ при любых } n_{2,\,3}, \\
&u_{\mathbf{n}=\{n_1,\,0,\,n_3\},\,\mu} = u_{\mathbf{n}=\{n_1,\,N_2,\,n_3\},\,\mu} \text{ при любых } n_{1,\,3}, \qquad (8.8) \\
&u_{\mathbf{n}=\{n_1,\,n_2,\,0\},\,\mu} = u_{\mathbf{n}=\{n_1,\,n_2,\,N_3\},\,\mu} \text{ при любых } n_{1,\,2}.
\end{aligned}
$$

Для решений в виде бегущих плоских волн условия (8.8) принимают вид

использование периодических граничных условий сохраняет решения в виде бегущих волн

$$e^{iN_j\mathbf{k}\mathbf{a}_j} = 1, \; j = 1, 2, 3. \qquad (8.9)$$

Условиям (8.9) удовлетворяют дискретные значения $\mathbf{k}$:

$$\mathbf{k} \;=\; \frac{m_1}{N_1}\mathbf{g}_1 + \frac{m_2}{N_2}\mathbf{g}_2 + \frac{m_3}{N_3}\mathbf{g}_3, \qquad (8.10)$$

ограничиваемся значениями из 1-й зоны Бриллюэна

$$m_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, -N_i/2 < m_i \le N_i/2, \; i = 1, 2, 3.$$

NB!

разложение по нормальным модам

Дискретным значениям $\mathbf{k}$ соответствует полный набор нормированных и взаимно ортогональных векторов с компонентами

$$\tilde{e}^{j}_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\,\tilde{e}^{j}_{\mu}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathbf{n}} \qquad (8.11)$$

такими, что

$$\sum_{\mathbf{n},\,\mu}(\tilde{e}^{j'}_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}'))^*\tilde{e}^{j}_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}) \;=\; \delta_{j'j}\delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \qquad (8.12)$$

Векторам поляризации $e^{\,j}_{\mu}(\mathbf{k})$ соответстствует полный набор решений

в старых переменных

$$e^{j}_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\,e^{j}_{\mu}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathbf{n}}, \qquad (8.13)$$

ортогональных и нормированных с весом:

$$\sum_{\mathbf{n},\,\mu}M_s(e^{j'}_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}'))^*e^{j}_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}) \;=\; M\delta_{j'j}\delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \qquad (8.14)$$

корнем дисперсионного уравнения является $\omega_j^2(\mathbf{k})$; частота $\omega_j(\mathbf{k})$ выбирается неотрицательной

Разложения произвольного смещения по нормальным модам в переменных $\tilde{u}_{\mathbf{n}\mu}$, $\tilde{P}_{\mathbf{n}\mu}$ и $u_{\mathbf{n}\mu}$, $P_{\mathbf{n}\mu}$ соответственно имеют вид:

$$\tilde{u}_{\mathbf{n}\mu} = \sum_{\mathbf{k},\,j}[u_{\mathbf{k}j}\tilde{e}^{j}_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}) + \text{c.c.}]\,, \qquad (8.15)$$

$$u_{\mathbf{n}\mu} = \sum_{\mathbf{k},\,j}[u_{\mathbf{k}j}e^{j}_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}) + \text{c.c.}]\,, \qquad (8.16)$$

где коэффициенты $u_{\mathbf{k}j}$ зависят от времени: $u_{\mathbf{k}j} = U_{\mathbf{k}j}e^{-i\omega_j(\mathbf{k})t}$.

разложение по нормальным модам

Для импульсов получаем:

$$P_{\mathbf{n}\mu} = M_s \dot{u}_{\mathbf{n}\mu} = -iM_s \sum_{\mathbf{k},j} \omega_j(\mathbf{k})[u_{\mathbf{k}j} \tilde{e}^j_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}) - \text{c.c.}], \quad (8.17)$$

$$\tilde{P}_{\mathbf{n}\mu} = \frac{P_{\mathbf{n}\mu}}{\alpha_s} = -iM \sum_{\mathbf{k},j} \omega_j(\mathbf{k})[u_{\mathbf{k}j} \tilde{e}^j_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}) - \text{c.c.}]. \quad (8.18)$$

функция Гамильтона

Запишем функцию Гамильтона $\mathcal{H}$ системы [см. (6.5)] в переменных $\tilde{u}_{\mathbf{n}\mu}$, $\tilde{P}_{\mathbf{n}\mu}$:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M} \sum_{\mathbf{n},\mu} \tilde{P}^2_{\mathbf{n}\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{n},\mathbf{n}' \\ \mu,\mu'}} \tilde{A}^{\mu\mu'}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}'} \tilde{u}_{\mathbf{n}\mu} \tilde{u}_{\mathbf{n}'\mu'}. \quad (8.19)$$

Подставим в (8.19) разложения (8.15) и (8.18) и учтем, что $\tilde{e}^j_\mu(\mathbf{k})$ — собственный вектор матрицы $\tilde{A}^{\mu\mu'}(\mathbf{k})$ и что имеет место равенство

$$\sum_{\mathbf{n}} \exp[i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{R}_{\mathbf{n}}] = N\delta_{\mathbf{k}',-\mathbf{k}}. \quad (8.20)$$

В итоге получаем компактное выражение для $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H} = 2M \sum_{\mathbf{k},j} \omega^2_j(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}j} u^*_{\mathbf{k}j}. \quad (8.21)$$

переход к квантовому описанию

Переход к квантовому описанию состоит в замене классических переменных — координат $u_{\mathbf{n}\mu}$ и импульсов $P_{\mathbf{n}\mu}$ — соответствующими квантовомеханическими <u>операторами</u>, которые удовлетворяют комутационным соотношениям

$$[u_{\mathbf{n}\mu}, u_{\mathbf{n}'\mu'}] = 0, [P_{\mathbf{n}\mu}, P_{\mathbf{n}'\mu'}] = 0, [u_{\mathbf{n}\mu}, P_{\mathbf{n}'\mu'}] = i\hbar\delta_{\mathbf{n}'\mathbf{n}}\delta_{\mu'\mu}. (8.22)$$

Это означает, что коэффициенты разложений по нормальным модам $u_{\mathbf{k}j}$ и $u^*_{\mathbf{k}j}$ становятся эрмитово сопряженными <u>операторами</u> $u_{\mathbf{k}j}$ и $u^+_{\mathbf{k}j}$ с коммутационными соотношениями

$$[u_{\mathbf{k}j}, u_{\mathbf{k}'j'}] = 0, [u_{\mathbf{k}j}, u^+_{\mathbf{k}'j'}] = \frac{\hbar}{2M\omega_j(\mathbf{k})} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \delta_{j'j}, \quad (8.23)$$

Вводя <u>безразмерные</u> операторы

$$a_{\mathbf{k}j} = \sqrt{\frac{2M\omega_j(\mathbf{k})}{\hbar}} u_{\mathbf{k}j}, \quad a^+_{\mathbf{k}j} = \sqrt{\frac{2M\omega_j(\mathbf{k})}{\hbar}} u^+_{\mathbf{k}j}, \quad (8.24)$$

из (8.23) получаем, что они удовлетворяют коммутационным соотношениям для <u>бозе</u>-операторов рождения ($a^+_{\mathbf{k}j}$) и уничтожения ($a_{\mathbf{k}j}$) соотетствующих квазичастиц — <u>фононов</u>:

$$[a_{\mathbf{k}j}, a_{\mathbf{k}'j'}] = 0, [a_{\mathbf{k}j}, a^+_{\mathbf{k}'j'}] = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \delta_{j'j}. \quad (8.25)$$

переход
к квантовому описанию

Для гамильтониана H, соответствующего функции Гамильтона $\mathcal{H}$ из (8.21), получим

$$H = M\sum_{\mathbf{k},j}\omega_j^2(\mathbf{k})(u_{\mathbf{k}j}u_{\mathbf{k}j}^+ + \text{h.c.}) = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},j}\hbar\omega_j(\mathbf{k})(a_{\mathbf{k}j}a_{\mathbf{k}j}^+ + \text{h.c.}) =$$

$$= \sum_{\mathbf{k},j}\hbar\omega_j(\mathbf{k})\left(n_{\mathbf{k}j} + \frac{1}{2}\right), \qquad (8.26)$$

где $n_{\mathbf{k}j} = a_{\mathbf{k}j}^+ a_{\mathbf{k}j}$ — оператор числа фононов в моде $\mathbf{k}j$.

Оператор $n_{\mathbf{k}j}$ является эрмитовым оператором с неотрицательными целочисленными собственными значениями:

$$n_{\mathbf{k}j}|m_{\mathbf{k}j}\rangle = m_{\mathbf{k}j}|m_{\mathbf{k}j}\rangle, \quad m_{\mathbf{k}j} = 0, 1, 2, \ldots . \qquad (8.27)$$

Имеют место следующие соотношения

$$a_{\mathbf{k}j}|0_{\mathbf{k}j}\rangle = 0, \quad n_{\mathbf{k}j}|0_{\mathbf{k}j}\rangle = 0, \quad |m_{\mathbf{k}j}\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_{\mathbf{k}j}!}}(a_{\mathbf{k}j}^+)^{m_{\mathbf{k}j}}|0_{\mathbf{k}j}\rangle,$$

$$a_{\mathbf{k}j}^+|m_{\mathbf{k}j}\rangle = \sqrt{m_{\mathbf{k}j}+1}\;|m_{\mathbf{k}j}+1\rangle,$$

$$a_{\mathbf{k}j}|m_{\mathbf{k}j}\rangle = \sqrt{m_{\mathbf{k}j}}\;|m_{\mathbf{k}j}-1\rangle.$$

переход
к квантовому описанию

Для энергии E, соответствущей собственному значению гамильтониана (8.26), получим

$$E = \sum_{\mathbf{k},j}\hbar\omega_j(\mathbf{k})\left(m_{\mathbf{k}j} + \frac{1}{2}\right). \qquad (8.28)$$

Квантовомеханический аналог разложения (8.16) по нормальным модам принимает вид:

$$u_{\mathbf{n}\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{\mathbf{k},j}\sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_j(\mathbf{k})}}\,[a_{\mathbf{k}j}e^j_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}) + a^+_{\mathbf{k}j}(e^j_{\mathbf{n}\mu}(\mathbf{k}))^*]. \qquad (8.29)$$