Ангармонизм колебаний решетки

кубичный ангармонизм

Учтем теперь в эффективной потенциальной энергии U члены, <u>кубичные</u> по смещениям узлов решетки:

$$U=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\mathbf{n},\mathbf{n}'\\ \mu,\,\mu'}} A^{\mu\mu'}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}'}\, u_{\mathbf{n}\mu}u_{\mathbf{n}'\mu'}+\underbrace{\frac{1}{3!}\sum_{\substack{\mathbf{n},\mathbf{n}',\mathbf{n}''\\ \mu,\mu',\mu''}} B^{\mu\,\mu'\mu''}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}',\mathbf{n}-\mathbf{n}''}u_{\mathbf{n}\mu}u_{\mathbf{n}'\mu'}u_{\mathbf{n}''\mu''}}_{\equiv W}, \quad (9.1)$$

где

$$B^{\mu\,\mu'\mu''}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}',\mathbf{n}-\mathbf{n}''}=\left.\frac{\partial^3 U}{\partial u_{\mathbf{n}\mu}\partial u_{\mathbf{n}'\mu'}\partial u_{\mathbf{n}''\mu''}}\right|_{\mathbf{R}_\mathbf{n}+\mathbf{r}_s}.$$

Гамильтониан решетки приобретает вид

$$H' = H+W, \qquad (9.2)$$

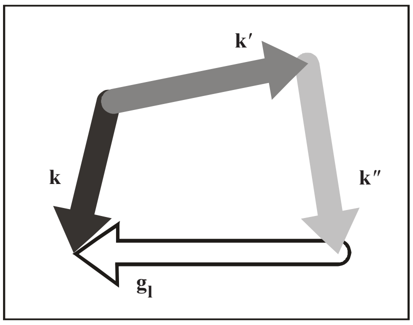
где H — гамильтониан (8.26).

оператор возмущения

Воспользуемся разложением (8.29) для операторов $u_{\mathbf{n}\mu}$, подставив его в выражение для возмущения W:

$$W=\frac{1}{6(2N)^{3/2}}\sum_{\substack{\mathbf{n},\mathbf{n}',\mathbf{n}''\\ \mu,\mu',\mu''}} B^{\mu\,\mu'\mu''}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}',\mathbf{n}-\mathbf{n}''}\sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''\\ j,j',j''}}\sqrt{\frac{\hbar^3}{M^3\omega_j(\mathbf{k})\omega_{j'}(\mathbf{k}')\omega_{j''}(\mathbf{k}'')}}\times$$

$$\times e^{j}_{\mu}(\mathbf{k})e^{j'}_{\mu'}(\mathbf{k}')e^{j''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')a_{\mathbf{k}j}a_{\mathbf{k}'j'}a_{\mathbf{k}''j''}e^{i(\mathbf{k}\mathbf{R}_\mathbf{n}+\mathbf{k}'\mathbf{R}_{\mathbf{n}'}+\mathbf{k}''\mathbf{R}_{\mathbf{n}''})}+\left\{\begin{matrix}7\\ \text{слагаемых}\end{matrix}\right\}.$$



При суммировании по узлам решетки учтем, что

$$\sum_{\mathbf{n},\mathbf{n}',\mathbf{n}''} B_{\mathbf{n}-\mathbf{n}',\mathbf{n}-\mathbf{n}''}\,u_\mathbf{n}u_{\mathbf{n}'}u_{\mathbf{n}''}=\sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}',\mathbf{m}''} B_{\mathbf{m}',\mathbf{m}''}\,u_\mathbf{n}u_{\mathbf{n}-\mathbf{m}'}u_{\mathbf{n}-\mathbf{m}''},$$

$$\mathbf{R}_{\mathbf{n}'}=\mathbf{R}_\mathbf{n}-\mathbf{R}_{\mathbf{m}'},\quad \mathbf{R}_{\mathbf{n}''}=\mathbf{R}_\mathbf{n}-\mathbf{R}_{\mathbf{m}''}$$

и воспользуемся формулой — аналогом (8.20):

$$\sum_\mathbf{n}\exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{k}'')\mathbf{R}_\mathbf{n}]=N\delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}''+\mathbf{g}_\mathbf{l},\mathbf{k}}, \qquad (9.3)$$

где $\mathbf{g}_\mathbf{l}$ — произвольный вектор обратной решетки.

оператор возмущения

Окончательное выражение для W:

$$W = \frac{1}{6\sqrt{8N}} \sum_{\substack{\mathbf{k}',\mathbf{k}'' \\ j,j',j''}} \sqrt{\frac{\hbar^3}{M^3 \omega_j(\mathbf{k}) \omega_{j'}(\mathbf{k}') \omega_{j''}(\mathbf{k}'')}} B_{jj'j''}(\mathbf{k}',\mathbf{k}'') \times$$

$$\times \, a_{\mathbf{k}j} a_{\mathbf{k}'j'} a_{\mathbf{k}''j''} + \left\{ \begin{array}{c} 7 \\ \text{слагаемых} \\ \text{(см. таблицу)} \end{array} \right\}, \qquad (9.4)$$

где

$$B_{jj'j''}(\mathbf{k}',\mathbf{k}'') = \sum_{\substack{\mathbf{m}',\mathbf{m}'' \\ \mu,\mu',\mu''}} B^{\mu\mu'\mu''}_{\mathbf{m}',\mathbf{m}''} e^{-i(\mathbf{k}'\mathbf{R}_{\mathbf{m}'} + \mathbf{k}''\mathbf{R}_{\mathbf{m}''})} \times$$

$$\times \, (e^{j}_{\mu}(\mathbf{k}' + \mathbf{k}''))^{*} e^{j'}_{\mu'}(\mathbf{k}') e^{j''}_{\mu''}(\mathbf{k}'') \qquad (9.5)$$

восемь слагаемых	три фононных моды: $\mathbf{k}j$	$\mathbf{k}'j'$	$\mathbf{k}''j''$	$\pm\omega_j$	$\pm\omega_{j'}$	$\pm\omega_{j''}$	$\Delta = \pm\omega_j \pm\omega_{j'} \pm\omega_{j''}$
уничтожение трех фононов	a	a	a	−	−	−	выполнение условия $\Delta = 0$ невозможно
рождение трех фононов	a^+	a^+	a^+	+	+	+	
распад одного фонона на два	a^+	a^+	a	+	+	−	выполнение условия $\Delta = 0$ возможно
	a^+	a	a^+	+	−	+	
	a	a^+	a^+	−	+	+	
слияние двух фононов	a	a	a^+	−	−	+	
	a	a^+	a	−	+	−	
	a^+	a	a	+	−	−	

время жизни фонона

Вероятность распада в единицу времени

$$\Gamma_i = \tau_i^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |\langle f | W(-++) | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i), \qquad (9.6)$$

$$|i\rangle = |m_{\mathbf{k}j}, m_{\mathbf{k}'j'}, m_{\mathbf{k}''j''}\rangle, \; |f\rangle = |m_{\mathbf{k}j} - 1, m_{\mathbf{k}'j'} + 1, m_{\mathbf{k}''j''} + 1\rangle,$$

$$\langle f | W(-++) | i \rangle \propto \langle f | a_{\mathbf{k}j} a^{+}_{\mathbf{k}'j'} a^{+}_{\mathbf{k}''j''} | i \rangle = \sqrt{m_{\mathbf{k}j}(m_{\mathbf{k}'j'} + 1)(m_{\mathbf{k}''j''} + 1)}.$$

$$\omega_j(\mathbf{k}) = \omega_{j'}(\mathbf{k}') + \omega_{j''}(\mathbf{k}''), \; \mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{k}'', \qquad (9.7)$$

Принимая во внимание (9.4) и (9.5), получим

$$\Gamma_j(\mathbf{k}) = \frac{1}{288N} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\substack{\mathbf{k}' \\ j',j''}} \frac{\hbar^3}{M^3 \omega_j(\mathbf{k}) \omega_{j'}(\mathbf{k}') \omega_{j''}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} |B_{jj'j''}(\mathbf{k}', \mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \times$$

$$\times \, m_{\mathbf{k}j}(m_{\mathbf{k}'j'} + 1)(m_{\mathbf{k}''j''} + 1) \, \delta(\hbar\omega_j(\mathbf{k}) - \hbar\omega_{j'}(\mathbf{k}') - \hbar\omega_{j''}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) . \qquad (9.8)$$

Учитывая, что $\Gamma_j(\mathbf{k}) \propto m_{\mathbf{k}j}$, введем удельную величину — скорость распада, отнесенную к одному фонону в моде $\mathbf{k}j$:

$$\gamma_j(\mathbf{k}) \equiv \frac{\Gamma_j(\mathbf{k})}{m_{\mathbf{k}j}} .$$

время жизни фонона

Условия (9.7) могут быть одновременно выполнены при распаде длинноволнового $(\mathbf{k} \approx 0)$ оптического фонона с частотой $\omega_0 \equiv \omega_{\text{opt}}(\mathbf{k} = 0)$ на два акустических с волновыми векторами $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}'' = -\mathbf{k}'$ и частотой $\omega_{\text{ac}}(\mathbf{k}') = \omega_{\text{ac}}(\mathbf{k}'') = \dfrac{\omega_0}{2}$.

При оценках вопользуемся приближением Дебая, аппроксимируя закон дисперсии акустических фононов во всей 1-й зоне Бриллюэна изотропной линейной зависимостью

$$\omega_{\text{ac}}(\mathbf{k}') = v_s|\mathbf{k}'|, \tag{9.9}$$

где v_s — скорость звука в кристалле. Саму 1-ю зону Бриллюэна будем приближенно считать сферой радиуса $k_{\max}$, определяемого условием

$$\frac{4\pi k_{\max}^3/3}{(2\pi)^3/(N\mathcal{V})} = N$$

$(\mathcal{V} = (\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3)$ — объем элементарной ячейки), откуда

$$k_{\max} = \left(\frac{6\pi^2}{\mathcal{V}}\right)^{1/3} \sim \frac{2\pi}{a_0} \tag{9.10}$$

время жизни фонона

Заменим суммирование по $\mathbf{k}'$ интегрированием:

$$\sum_{\mathbf{k}'} \approx \frac{N\mathcal{V}}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}' \cdot$$

В результате получим

$$\gamma_{\text{opt}}(0) = \frac{\hbar^2}{72\pi M^3\omega_0^3}\int_0^{k_{\max}} k'^2 |B_{\text{opt,ac,ac}}(\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{k}')|^2 \delta(\hbar\omega_0 - 2\hbar v_s k')\,dk'\,. \tag{9.11}$$

С учетом оценок

$$|B_{\text{opt,ac,ac}}(\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{k}')| \sim \left|\frac{\partial^3 U}{\partial u^3}\right| \sim \frac{I_0}{a_0^3}, \quad v_s \sim \frac{\omega_0}{k_{\max}} \sim \frac{\omega_0 a_0}{2\pi}, \quad \hbar\omega_0 \sim \sqrt{\frac{m}{M}} I_0$$

получаем окончательную оценку для времени жизни длинноволнового оптического фонона:

$$\hbar\gamma_{\text{opt}}(0) = \frac{\hbar}{\tau_{\text{opt}}(0)} \sim \frac{\hbar^2 I_0^2}{M^3\omega_0 a_0^3 v_s^3} \sim \frac{m}{M}\, I_0 \sim \sqrt{\frac{m}{M}}\hbar\omega_0, \tag{9.12}$$

т.е. $\tau_{\text{opt}}(0) \sim 10^{-11}$ с при $\omega_0^{-1} \sim 10^{-13}$ с.