Лекция 8.
Квантование колебаний атомов. Фононы. Оператор смещения и его матричные элементы. Средний квадрат смещения атома.

Перейти к квантовому гамильтониану можно простой заменой x, p на квантовые

операторы : $\varepsilon_{\xi} \to \widehat{H}_{\xi} = \frac{\hat{p}_{\xi}^{2}}{2} + \frac{\omega_{\xi}^{2}}{2}\hat{x}_{\xi}^{2}$

$$p_{\xi}, x_{\xi} \to \begin{pmatrix} \widehat{p_{\xi}} = -i\hbar \frac{d}{dx_{\xi}} \\ \widehat{x_{\xi}} = x_{\xi} \end{pmatrix} \qquad \left[\widehat{p_{\xi}}\widehat{x_{\xi}}\right] = -i\hbar$$

$$E \to \widehat{H} = \sum_{\xi} \widehat{H_{\xi}}$$

$$\widehat{H}_{\xi}\left|n_{\xi}\right\rangle = \varepsilon\left(n_{\xi}\right)\left|n_{\xi}\right\rangle \quad ; \quad \varepsilon\left(n_{\xi}\right) = \pi\omega_{\xi}\left(n_{\xi} + \frac{1}{2}\right); \quad n_{\xi} = 0, 1, 2, ..., +\infty$$

Собственная функция $\left|n_\xi\right\rangle \equiv \psi_{n_\xi}\left(x_\xi\right) = \dfrac{1}{\sqrt{2^{n_\xi} n_\xi! \sqrt{\pi} x_{0\xi}}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x_\xi}{x_{0\xi}}\right)^2} H_{n_\xi}\left(\dfrac{x_\xi}{x_{0\xi}}\right)$;

где $x_{0\xi} = \sqrt{\dfrac{\pi}{\omega_\xi}}$.

Вычислим матричные элементы операторов координат и импульса:

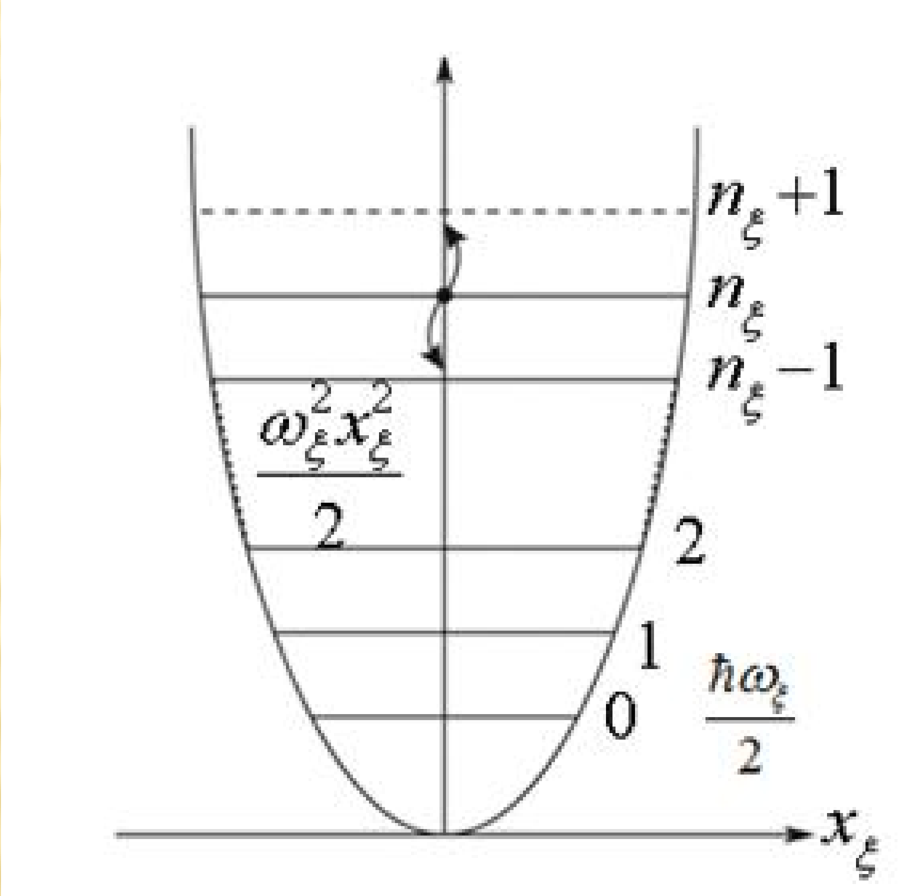
$$\left(\widehat{x_\xi}\right)_{s_\xi n_\xi} \equiv \left\langle s_\xi \left|\widehat{x_\xi}\right| n_\xi\right\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx_\xi \psi_{s_\xi}^*\left(x_\xi\right) x_\xi \psi_{n_\xi}\left(x_\xi\right) = x_{0\xi}\left(\sqrt{\frac{n_\xi}{2}}\delta_{s_\xi, n_\xi - 1} - \sqrt{\frac{n_\xi + 1}{2}}\delta_{s_\xi, n_\xi + 1}\right)$$

$$\left(\widehat{p_\xi}\right)_{s_\xi n_\xi} = \frac{-i\hbar}{x_{0\xi}}\left(\sqrt{\frac{n_\xi}{2}}\delta_{s_\xi, n_\xi - 1} - \sqrt{\frac{n_\xi + 1}{2}}\delta_{s_\xi, n_\xi + 1}\right)$$

эти операторы - околодиагональные.

Это означает, что их средние значения по состояниям с заданными числами заполнения возбуждений равны нулю.

равны нулю.



Расстояние между любой парой уровней = $\hbar\omega_\xi$; нулевой уровень (основное состояние) -

$\frac{\hbar\omega_\xi}{2}$ - выражение принципа неопределенности.

Введем новые операторы

$$\widehat{b_\xi}\left|n_\xi\right\rangle = \sqrt{n_\xi}\,|n_\xi + 1\rangle$$ (поглощение (уничтожение) одного кванта)

$$\widehat{b_\xi^+}\left|n_\xi\right\rangle = \sqrt{n_\xi + 1}\left|n_\xi + 1\right\rangle$$ (рождение кванта).

Энергия может меняться только в меру одного кванта)

$$\left(\hat{b}_\xi\right)_{s_\xi, n_\xi} \equiv \left\langle s_\xi \,|\, \hat{b}_\xi \,|\, n_\xi \right\rangle = \sqrt{n_\xi}\left\langle s_\xi \,|\, n_\xi + 1\right\rangle = \sqrt{n_\xi}\,\delta_{s_\xi, n_\xi - 1}$$

$$\left(\hat{b}_\xi^+\right)_{s_\xi, n_\xi} \equiv \left\langle s_\xi \,|\, \hat{b}_\xi^+ \,|\, n_\xi \right\rangle = \sqrt{n_\xi + 1}\left\langle s_\xi \,|\, n_\xi + 1\right\rangle = \sqrt{n_\xi + 1}\,\delta_{s_\xi, n_\xi + 1}$$

Тогда $$\left(\hat{x}_\xi\right)_{s_\xi, n_\xi} = x_{0\xi} \cdot \frac{1}{2}\left(\left(\hat{b}_\xi\right)_{s_\xi, n_\xi} + \left(\hat{b}_\xi^+\right)_{s_\xi, n_\xi}\right)$$

$$x_\xi = \frac{x_{0\xi}}{\sqrt{2}}\left(\hat{b}_\xi + \hat{b}_\xi^{+}\right);$$

Мы проквантовали классическую систему и перевели описание

$$\hat{p}_\xi = \frac{-i\hbar}{x_{0\xi}\sqrt{2}}\left(\hat{b}_\xi - \hat{b}_\xi^{+}\right)$$

на язык операторов рождения и уничтожения, т.е. воспользовались аппаратом вторичного квантования.

$$\hat{H}_\xi = \frac{\hat{p}_\xi^{2}}{2} + \frac{\omega_\xi^2}{2}\hat{x}_\xi^{2} = \frac{1}{2}\left(\frac{-i\hbar}{x_{0\xi}\sqrt{2}}\right)^2\left(\hat{b}_\xi - \hat{b}_\xi^{+}\right)\left(\hat{b}_\xi - \hat{b}_\xi^{+}\right) + \frac{\omega_\xi^2}{2}\left(\frac{x_{0\xi}}{\sqrt{2}}\right)^2\left(\hat{b}_\xi + \hat{b}_\xi^{+}\right)\left(\hat{b}_\xi + \hat{b}_\xi^{+}\right) =$$

$$= \frac{\hbar\omega_\xi}{2}\left(\hat{b}_\xi\hat{b}_\xi^{+} + \hat{b}_\xi^{+}\hat{b}_\xi\right) = \hat{H}_\xi$$

Подействуем $\hat{b}_\xi^+$ на $\hat{b}_\xi \left| n_\xi \right\rangle = \sqrt{n_\xi}\, | n_\xi - 1 \rangle$

$n_\xi = 0,1,...,\infty$

$$\hat{b}_\xi^+ \hat{b}_\xi \,| n_\xi \rangle = \sqrt{n_\xi} \left(\hat{b}_\xi^+ \,| n_\xi - 1 \rangle \right) = \sqrt{n_\xi} \left(\sqrt{n_\xi} \,| n_\xi \rangle \right)$$

$$\hat{b}_\xi^+ \hat{b}_\xi \,| n_\xi \rangle = n_\xi \,| n_\xi \rangle$$

$\Rightarrow \hat{b}_\xi^+ \hat{b}_\xi$ - диагонален ; n_ξ - число квантов.

$\widehat{N}_\xi \equiv \hat{b}_\xi^+ \hat{b}_\xi$ - оператор числа квантов, “запасенных” $\xi -$тым осциллятором.

Аналогично, действуя оператором $\hat{b}_\xi$ на состояние, определенное. оператором $\hat{b}_\xi^+$, получаем :

$$\hat{b}_\xi \hat{b}_\xi^+ \,| n_\xi \rangle = \sqrt{n_\xi + 1} \left(\sqrt{n_\xi + 1}\, | n_\xi + 1 - 1 \rangle \right) = \left(n_\xi + 1 \right) | n_\xi \rangle$$

Вычтем отсюда предыдущий результат ;

$$\left[\hat{b}_{\xi}\hat{b}_{\xi}^{+}\right]=\hat{b}_{\xi}\hat{b}_{\xi}^{+}-\hat{b}_{\xi}^{+}\hat{b}_{\xi}=1$$

$$\hat{b}_{\xi}\hat{b}_{\xi}^{+}=1+\widehat{N}_{\xi}$$

$$\widehat{H}_{\xi}=\frac{\hbar\omega_{\xi}}{2}\left(1+2\widehat{N}_{\xi}\right)=\frac{\hbar\omega_{\xi}}{1}\left(\widehat{N}_{\xi}+\frac{1}{2}\right)$$

$$\widehat{H}_{\xi}\left|n_{\xi}\right\rangle=\hbar\omega_{\xi}\left\{\underbrace{\widehat{H}_{\xi}\left|n_{\xi}\right\rangle}_{n_{\xi}\left|n_{\xi}\right\rangle}+\frac{1}{2}\left|n_{\xi}\right\rangle\right\}=\underbrace{\hbar\omega_{\xi}\left(n_{\xi}+\frac{1}{2}\right)}_{\varepsilon_{\xi}=\varepsilon\left(n_{\xi}\right)}\left|n_{\xi}\right\rangle$$

$\widehat{H}_{\xi}$ - гамильтониан квантовых колебаний кристалла ;

$\hbar\omega_{\xi}$ - квант энергии колебаний атома.

Это коллективные колебания $\left(j,\vec{n}\rightarrow\xi\right)$. Кванты коллективных колебаний называются фононами.

$$\widehat{H}=\sum_{\xi}\widehat{H_{\xi}}=\sum_{\xi}\hbar\omega_{\xi}\left(\widehat{N_{\xi}}+\frac{1}{2}\right),\quad \widehat{N_{\xi}}=\widehat{b_{\xi}^{+}}\widehat{b_{\xi}}$$

Мы представили гамильтониан $\widehat{H}$ как сумму вкладов операторов числа квазичастиц (квантов). Нельзя поставить эксперимент по “отлавливанию” фонона; но мы имеем возможность описывать колебания кристалла на языке, подобном языку описания квантового поля.

$\widehat{H}\Phi=\mathrm{E}\Phi\rightarrow ?$ возможно ли описать всю систему осцилляторов единым уравнением Шредингера?

$$|\Phi|^2 = \prod_{\xi} \left|\psi_{n_\xi}\right|^2$$

$$\widehat{H}\Phi = \left(\sum_{\xi} \widehat{H_\xi}\right)\left(\prod_{\xi} \psi_{n_\xi}\right) = \sum_{\xi}\left(\widehat{H}_\xi \prod_{\xi} \psi_{n_\xi}\right) = \sum_{\xi}\left(\prod_{\xi_1 \neq \xi} \psi_{n_{\xi_1}}\right)\left(\underbrace{\widehat{H}_\xi \psi_{n_\xi}}_{\varepsilon(n_\xi)\psi_{n_\xi}}\right) =$$

$$\left(\sum_{\xi} \varepsilon(n_\xi)\right)\prod_{\xi_1} \psi_{n_{\xi_1}} \equiv \mathrm{E}\Phi$$

$\uparrow$ ξ, ξ_1 пробегают один и тот же ряд значений.

Таким образом, волновой функции $\Phi = \prod_{\xi} \psi_{n_\xi}$ отвечает

$\boxed{E = \sum_{\xi} \varepsilon(n_\xi) = \sum_{\xi} \hbar\omega_\xi \left(n_\xi + \frac{1}{2}\right)}$, и стационарное уравнение Шредингера для Φ

вполне уместно.

$$\Phi = \prod_{\xi} \psi_{n_\xi} = | n_1, n_2, ..., n_{gdN} \rangle \equiv | \{n\} \rangle$$, здесь $n_\xi = 0, 1, 2, ..., \infty$.

$$Q_\xi \to \widehat{Q}_\xi = \frac{1}{2}\left(\widehat{x}_\xi - \frac{\widehat{p}_\xi}{i\omega_\xi} \right)$$ (классическое выражение $\to$ квантовый оператор)

$$Q_\xi^* \to \widehat{Q}_\xi^* = \frac{1}{2}\left(\widehat{x}_\xi + \frac{\widehat{p}_\xi}{i\omega_\xi} \right)$$

Получим явный вид операторов $\widehat{Q}$.

$$\left. \begin{aligned} \widehat{Q}_\xi &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\xi}} \widehat{b}_\xi \\ \widehat{Q}_\xi^+ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\xi}} \widehat{b}_\xi^+ \end{aligned} \right]$$ коэффициент разложения атома по набору собственнных смещений в кристалле.

Теперь получим явное выражение для оператора смещения

$$\boxed{\widehat{u_{j\vec{n}}^{\alpha}}(t)=\sum_{\xi}\underbrace{\sqrt{\frac{\hbar}{2NM_j\omega_\xi}}\left(l_{j\xi}^{\alpha}e^{i\vec{f}\vec{n}-i\omega_\xi t}\widehat{b_\xi}+l_{j\xi}^{*\alpha}e^{-i\vec{f}\vec{n}+i\omega_\xi t}\widehat{b_\xi^{+}}\right)}_{\widehat{u_{j\vec{n}\xi}^{\alpha}}}}$$

Пусть начальное и конечное состояния совпадают;

$$\left\langle\{n\}|\widehat{u_{j\vec{n}}^{\alpha}}|\{n\}\right\rangle\equiv\overline{u_{jn}^{\alpha}}=0 \quad !!!$$

$$\left\langle\{n\}^{\xi},n_\xi+1|\widehat{u_{j\vec{n}}^{\alpha}}|\{n\}\right\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2NM_j\omega_\xi}}\times\begin{cases}l_{j\xi}^{*\alpha}e^{-i\vec{f}\vec{n}+i\omega_\xi t}\sqrt{n_\xi+1}\\ l_{j\xi}^{\alpha}e^{i\vec{f}\vec{n}-i\omega_\xi t}\sqrt{n_\xi}\end{cases}$$

$\{n\}^{\xi}$ отличается от $\{n\}$ изменением только в одном осцилляторе (с номером ξ) – там n увеличилось или уменьшилось на 1. Возникла плоская бегущая волна смещения (изменение состояние первого осциллятора на 1 квант порождает отклик во всех атомах). Все атомы : $j, \vec{n}$ - произвольные.

Итак, каждый фонон есть квант упругого смещения всех атомов как системы (единого ансамбля). Любое движение атома в твердом теле может быть представлено как сумма колебаний с разрешенным набором частот и определенными соответствующими амплитудами. Колебания характеризуются средним квадратом смещения;

$$\overline{u^2_{j\vec{n}}} \equiv \overline{u^\alpha_{j\vec{n}} u^\alpha_{j\vec{n}}} = \left\langle \{n\}, | \widehat{u^\alpha_{jn}} \widehat{u^\alpha_{jn}} | \{n\} \right\rangle =$$

$$= \sum_\xi \frac{\hbar}{2NM_j\omega_\xi} 1 \left\langle n_\xi \,\middle|\, \left(l^\alpha_{j\xi} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_\xi t} \widehat{b_\xi} + l^{*\alpha}_{j\xi} e^{-i\vec{f}\vec{n} + i\omega_\xi t} \widehat{b^+_\xi} \right) \underline{\overline{\times}} \left(l^\alpha_{j\xi} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_\xi t} \widehat{b_\xi} + l^{*\alpha}_{j\xi} e^{-i\vec{f}\vec{n} + i\omega_\xi t} \widehat{b^+_\xi} \right) \middle| n_\xi \right\rangle =$$

$$= \sum_\xi \frac{\hbar}{2NM_j\omega_\xi} \left\{ l^\alpha_{j\xi} l^\alpha_{j\xi} e^{2\left(i\vec{f}\vec{n} - i\omega_\xi t\right)} \underbrace{\left\langle n_\xi \,|\, \widehat{b_\xi} \widehat{b_\xi} \,|\, n_\xi \right\rangle}_{\equiv 0 < n_\xi | n_\xi - 2 >} + l^{*\alpha}_{j\xi} l^\alpha_{j\xi} \underbrace{e^{-i\vec{f}\vec{n} + i\omega_\xi t} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_\xi t}}_{1} \underbrace{\left\langle n_\xi \,|\, \widehat{b^+_\xi} \widehat{b_\xi} \,|\, n_\xi \right\rangle}_{n_\xi} + \right.$$

$$\left. + l^\alpha_{j\xi} l^{*\alpha}_{j\xi} \underbrace{e^{-i\vec{f}\vec{n} + i\omega_\xi t} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_\xi t}}_{1} \underbrace{\left\langle n_\xi \,|\, \widehat{b_\xi} \widehat{b^+_\xi} \,|\, n_\xi \right\rangle}_{\left(n_\xi + 1\right)} + l^{*\alpha}_{j\xi} l^{*\alpha}_{j\xi} e^{2\left(-i\vec{f}\vec{n} + i\omega_\xi t\right)} \underbrace{\left\langle n_\xi \,|\, \widehat{b^+_\xi} \widehat{b^+_\xi} \,|\, n_\xi \right\rangle}_{\equiv 0 < n_\xi | n_\xi + 2 >} \right\} =$$

$$= \boxed{\sum_\xi \frac{\hbar}{2NM_j\omega_\xi} \left| \vec{l}_{j\xi} \right|^2 \left(2n_\xi + 1 \right)}$$

$$n_\xi = 0, 1, \ldots, \infty$$

Видим, что, если даже все осцилляторы находятся в основном состоянии (в n_ξ равны нулю), есть вклад нулевых колебаний. Т.е. каждый атом “ощущает”, что он является носителем квантовой информации. Средний квадрат смещения не опускается ниже значения, определяемого нулевыми колебаниями.

$E = \overline{H} = \sum_\xi \hbar\omega_\xi (n_\xi + \frac{1}{2})$ - все зависит от n_ξ .