

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА
(для групп Е7-01,02,Т7-31,32,32а,32б,37,70а, 70б)

(Примечание. Для групп Т7-32,32а,32б курс называется «Теория конденсированного состояния»).

Кристаллическое состояние твердых тел. Фононы.

1-я лекция. Конденсированное состояние системы макроскопического числа частиц с произвольным взаимодействием. Кристаллическая и аморфная фазы. Квантовые жидкость и газ.

В конденсированном состоянии частицы расположены на расстояниях порядка $a \sim 10^{-8}$ см, т.е. $a \sim r_0$. Частицы плотно упакованы по всем трем осям; $n_1 \sim 10^{24} \frac{1}{\text{см}^3}$.

Тогда говорят, что мы имеем дело с макроскопически большим числом частиц.

Решение трехмерных задач из $E_{\min} \sim 0 + T_{\text{ост}} \sim \frac{\pi^2}{r^2 U_a}$ уравнений с начальными условиями

представляется неосуществимым.

Когда 10^{24} частиц приведены в соприкосновение, каждая частица “знает” о положении всех остальных, т.е. потенциальная энергия создается всеми окружающими частицами и ей самой. Формально записать невозможно, поэтому распространить однозначный подход на задачу конденсированного состояния непонятно как.

Теорию физических свойств твердых тел было бы практически невозможно построить, если бы стабильные структуры для большинства твердых тел не представляли собой регулярных кристаллических решеток. Мы будем исходить из самого факта существования кристаллов, не описывая, каким образом возникает тот или иной тип решетки.

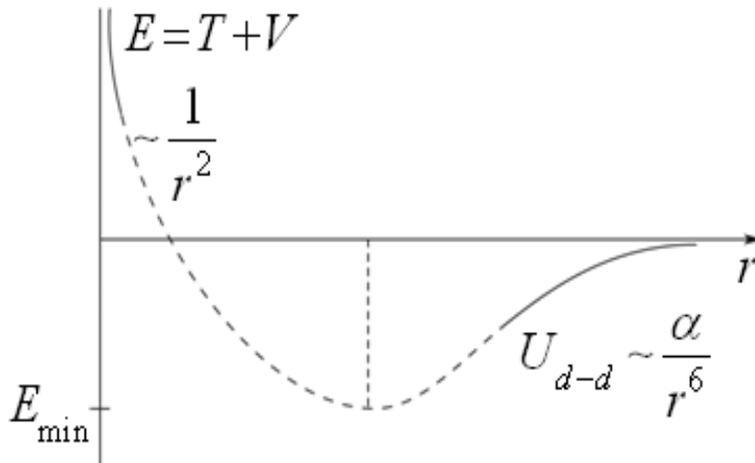
При $T=0$ твердое тело находится в основном состоянии (твердое тело обладает минимальной энергией, она нам неизвестна; мы знаем только о ее существовании).

Избыточную энергию (энергию возбужденных состояний) мы можем рассчитать. Если она невелика, то у нас есть малый параметр.

Пример возбужденного состояния: попытка возбудить один атом в кристалл и реакция всех остальных атомов.

Качественно, предполагая $T=0$, оценим полную энергию системы частиц.

Сочленение графика в единое целое считается строгим в силу теоремы Ролля.



Рассмотрим эту энергию как функцию межчастичного расстояния. Здесь E_{min} - именно энергия основного состояния.

Тело считаем покоящимся (кинетическая энергия как целого равна нулю) и электронейтральным (нет электростатического взаимодействия с внешними телами). Так как у атомов есть центр тяжести “+” ядра и центр тяжести “-” электронного облака, т.е. мы предполагаем существование дипольного момента \Rightarrow есть диполь-дипольное взаимодействие (Ван-дер-Ваальсово притяжение: это теорема для любой системы частиц). При $r \rightarrow 0$: при однородном сжатии по всем трем осям рано или поздно система достигает состояния, когда соприкасаются электронные оболочки разных атомов. При попытке сжатия с перекрытием электронных оболочек начинает работать принцип Паули (чужие электроны проникают на электронные оболочки, и возникает сильное отталкивание обменного характера).

Т.к. это происходит одновременно со всеми атомами, то все атомы будут ионизованы (обменное отталкивание будет открывать электроны). При ионизации последней К-оболочки получим отдельные ядра и газ электронов. Все атомы оголяются одновременно, и все электроны коллективизируются, т.е. в дальнейшем мы сжимаем плазму.

Тогда каждая частица будет находиться в объеме с характерным расстоянием, равным межчастичному расстоянию. Принцип неопределенности дает: $p \sim \frac{\pi}{r}$, кинетическая

энергия только возрастает $T \sim \frac{\hbar^2}{r^2(M_j, m_e)}$, $\frac{M_j}{m_e} \sim 10^5$, т.к. в ядре ~ 100 нуклонов, а их

масса есть $2000 m_e$. $T_s \sim \frac{\pi^2}{r^2 m_e}$; $U \sim \frac{\beta}{r}$ (β разного знака в зависимости от типа частиц).

Рано или поздно кинетическая энергия $T(\sim \frac{1}{r^2})$ станет больше потенциальной $U(\sim \frac{1}{r})$, и мы рассматриваем поведение системы как электронного газа. Следовательно, все вещества в области высоких плотностей есть металлы; плотности, при которых это реализуется для каждого конкретного вещества, разные и, возможно, в земных условиях недостижимы.

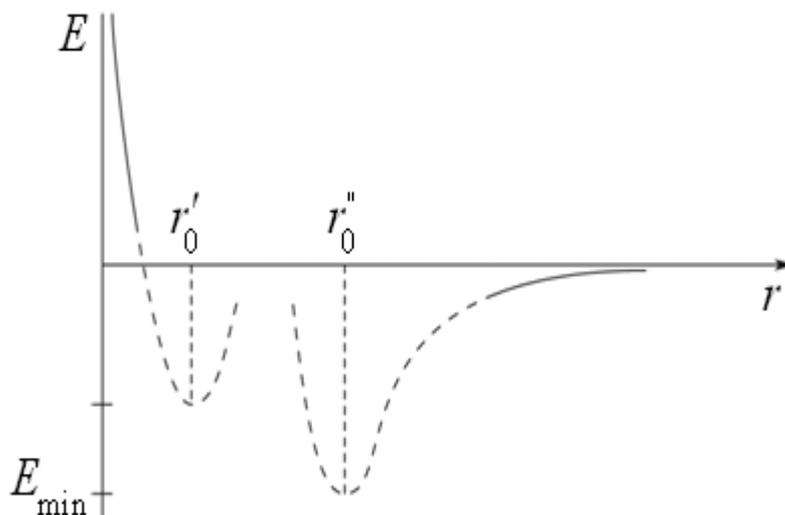
Обязательно существует минимальное значение энергии в области отрицательных энергий, и оно приходится строго на одно межчастичное расстояние.

Отрицательность энергии означает, что состояние – связанное. Связанное состояние существует, т.к. это энергетически выгодно.

Конденсированная фаза с упорядоченным расположением частиц (в основном состоянии) при $T=0$ представляет собой кристаллическую фазу.

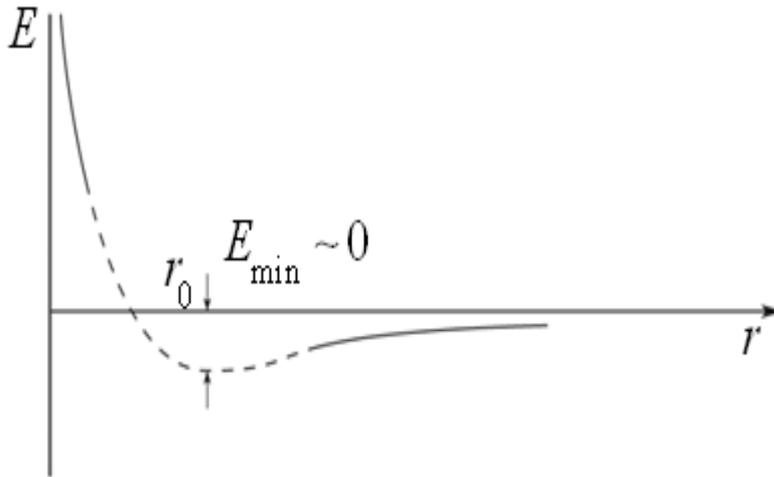
Связи атомов на границе кристалла оборваны, следовательно, кристалл обладает гигантской поверхностной энергией.

Поэтому энергетически более выгодно существование поликристаллов (при этом “торчащие” энергии монокристаллов компенсируются).



Если $E(r)$ имеет несколько минимумов, то частицы “рассядутся” по локальным минимумам (если не дать системе релаксироваться в главный минимум), тогда мы получим аморфное тело (псевдожидкость), т.к. у частиц остается вероятность подбарьерного “просачивания” и “сваливания” в глобальный минимум. (Цитата “Стекло (сущ.) стекло (глагол.)!”).

Реализация того или иного аморфного состояния требует определенных условий (чтобы “рассадить” частицы по локальным минимумам).



При “мелком” минимуме кристалл может и не возникнуть, т.к. необходимо учитывать

энергию атомов: $E_{\min} \sim 0 + T_{am} \sim \frac{\pi^2}{r^2 U_a}$, тогда можем выйти в положительную область, и

кристалльная фаза может не реализоваться.

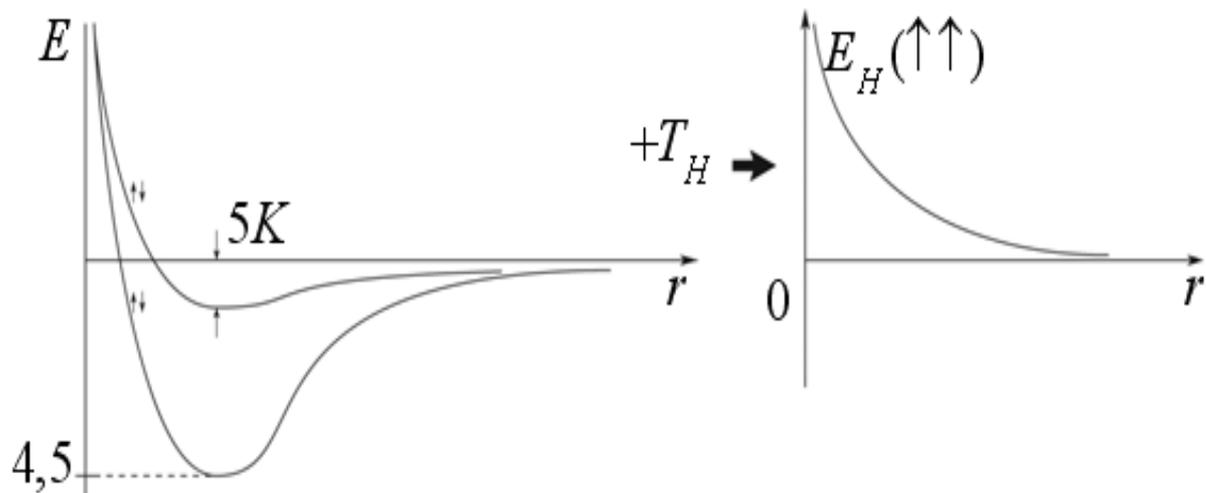
Чтобы положительная энергия была маленькой, а $E = T + U = \sum_n \frac{p_n^2}{2M_n} + U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_n, \dots)$ T_{am}

-большой, необходимо, чтобы масса атома была маленькой.

Гелий (He) в окрестности абсолютного нуля в силу этих условий не образует кристалл, а образует квантовую жидкость. Правда, если немного надавить (примерно 25 атмосфер), получится квантовый кристалл.

С водородом (H) этого не происходит, т.к. при перекрытии электронных облаков спины электронов переориентируются так, что образуются молекулы H_2 , и образуется газ, а потом кристалл из молекул водорода.

Чтобы не дать возможность образования молекулы, необходимо задержать переориентировку спинов (с помощью наложения магнитного поля).



$E_H(\uparrow\uparrow)$ - положительная \Rightarrow нет свободных состояний (газ)- это спин-поляризованный атомарный водород (квантовый газ).

И он остается в газовой фазе (должен оставаться) при $T=0$ с любыми плотностями.

Сейчас проверено до 10^{17} частиц. Температуры достигнуты до тысячных долей К.

Лекция 2-я. Колебания атомов в произвольном твердом теле. Адиабатическое приближение. Система уравнений движения и набор собственных частот в гармоническом приближении.

Рассмотрим случай $T=0$

Вблизи точек равновесия все атомы в кристаллах совершают колебания (на месте атомы не стоят в силу соотношения неопределенности, все атомы расположены упорядоченно).

Уход от положения равновесия приводит к увеличению U и возникновению

возвращающей силы. $\vec{u} = 0 \quad \frac{\sqrt{\vec{u}^2}}{a} \ll 1$ - означает устойчивость системы (не только при

$T=0$).

Когда $|u| \sim \frac{a}{2}$, атомы могут встретиться и поменяться местами, а это есть неустойчивость,

т.к. атомы начинают “течь”.

$$E = T + U = \sum_n \frac{p_n^2}{2M_n} + U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_n, \dots).$$

Учитываем вклад только тяжелых составляющих (ядра, ионы, сами атомы) –

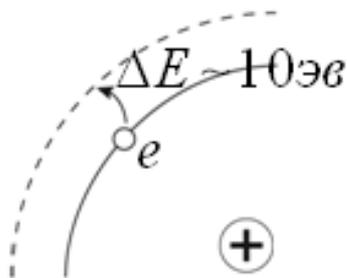
адиабатическое приближение. Т.к. ионы тяжелые, они смещаются медленно. Поэтому

положение электронной подсистемы всегда обусловлено мгновенным положением ионной

подсистемы. Это есть принцип адиабатического приближения; движение электронов – не

учитывается. (принцип Борна - Оппенгеймера).

Типы связей:



1) атомарные молекулярные.

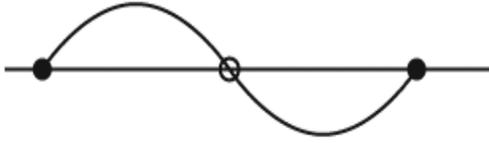
Учитывать электрон надо, если он создает уникальный вклад (способен перейти в

ближнее возбужденное состояние, т.е. обладает избыточной энергией порядка 10 eV)

$$E_{eff} \sim \pi \omega_{eff} \sim \pi c_{36} k \leq \pi c_{36} k_{max}$$

$$k \sim \frac{2\pi}{\lambda} \rightarrow k_{\max} \sim \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} \quad \text{Минимум возможной длины волны есть } 2a \text{ (2 межатомных}$$

расстояния,



чтобы атомы не смещали кристалл как целое)

$$\Delta E \sim 10a \quad \lambda_{\min} \sim 2a; \quad k_{\max} \sim \frac{\pi}{a}; \quad \lambda_{\max} = L \text{ (размер образца)}. \quad E_{\text{eff}} \leq \pi C_{\text{зв}} \frac{\pi}{a}, \quad a \sim 3 \times 10^{-8} \text{ см,}$$

$$E_{\text{eff}} \leq \pi C_{\text{зв}} \frac{1}{10^{-8} \text{ см}}, \quad E_{\text{eff}} \leq 10^{-27} \times 10^5 \times 10^8 \sim \frac{10^{-14} \text{ эрг}}{1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эВ}},$$

$$E_{\text{eff}} \leq 10^{-2} \text{ эВ} \sim 10^2 \text{ К},$$

$$U(\{\vec{R}_n^{(0)} + \vec{u}_n\}) \approx U(\{\vec{R}_n^{(0)}\}) + \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial U}{\partial R_n^\alpha} \right)_0 \cdot u_n^\alpha + \sum_{n, n_1} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial R_n^\alpha \partial R_{n_1}^\beta} \right)_0 u_n^\alpha u_{n_1}^\beta + \dots$$

$$\Delta E \sim 10a, \quad \frac{\Delta E}{E_{\text{eff}}} \sim 10^3$$

Точность принципа адиабатического приближения $\frac{E_{\text{eff}}}{\Delta E} \sim 10^{-3}$

2)ионные. NaCl тот же параметр $\sim 10^{-3}$

3)водородоподобные. (кристаллы типа Ge и Si)

1. атомы, молекулы, $\Delta E \sim 10 \text{ эВ}$

$\Delta E \rightarrow$ 2. ионный тип связи, $\Delta E \sim 10 \text{ эВ}$

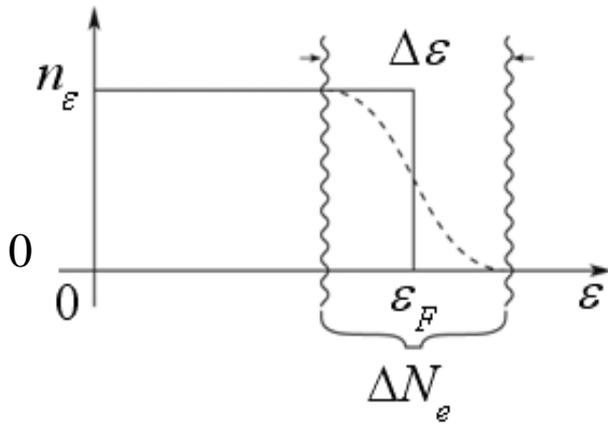
3. водородоподобный

Кристаллы имеют тетраэдрическую схему связей; тетраэдры связываются

вершинами. Здесь $\frac{E_{\text{eff}}}{\Delta E} \sim 10^{-3}$

4. металлическая связь.

Ионы ничего не знают друг о друге, как «кирпичи в стене». Их, как раствор, соединяют валентные электроны (оторванные от атомов).



$T=0$

Температура равна

нулю.

Валентные электроны, разлитые по объему, распределены по энергиям. Имеется некоторая избыточная энергия (сколь угодно малая), которой достаточно, чтобы размыть фермиевскую ступеньку;

ΔN_e - число электронов, изменяющих свое состояние под воздействием избыточной

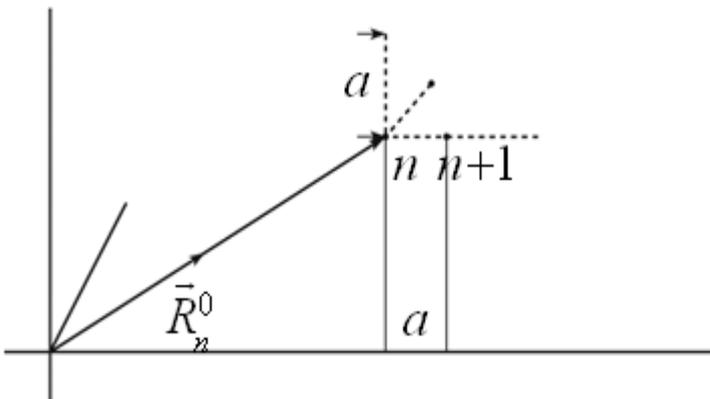
энергии, составляют такую долю $\rightarrow \Delta N_e \sim N_e \frac{\Delta E}{E_F} \sim N_e \frac{E_{eff}}{E_F} \sim N_e \frac{10^{-2} eV}{10 eV} \sim N_e \cdot 10^{-3}$ от

всех электронов, т.е. $N_e - 10^{-3} \times N_e$ электронов будут оставаться в том же состоянии \Rightarrow будут отслеживать движение ионов \Rightarrow адиабатическое приближение в металлах работает.

Т.е. учитываем только тяжелые (ионные, атомные) компоненты. Пусть всего их N (тяжелых частиц)

$$E \cong \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2M_n} + U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_n, \dots, \vec{R}_N); \quad \vec{R}_n = \vec{R}_n^{(0)} + \vec{u}_n \text{ (смещение за счет колебаний)}$$

(амплитуда) $|\vec{R}_n^{(0)}| \sim A \cdot a$.



Если выбрать $\vec{R}_n^{(0)}$ вдоль оси расположения ядер, то A – целое число; если вдоль произв. оси – то A есть корень из суммы квадратов трех чисел. В любом случае $A \gg 1$; или

$$\frac{\sqrt{\bar{U}_n^2}}{|\vec{R}_n^{(0)}|} \ll 1. \text{ Используя смещение по сравнению с равновесным положением как малый}$$

параметр, разложим в ряд Тейлора:

$$U(\{\vec{R}_n^{(0)} + \vec{u}_n\}) \approx U(\{\vec{R}_n^{(0)}\}) + \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial U}{\partial R_n^\alpha} \right)_0 u_n^\alpha + \sum_{n,n_1} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial R_n^\alpha \partial R_{n_1}^\beta} \right)_0 u_n^\alpha u_{n_1}^\beta + \dots$$

Кубические и т.д. слагаемые. $+\omega^2 M_n u_n^\alpha = + \sum_{n_1} A_{nn_1}^{\alpha\beta} u_{n_1}^\beta \{ \}$ - система $\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N$; α -

координаты (1,2,3 или x,y,z), по α - суммирование автоматически (градиент \vec{U});

$U(\{\vec{R}_n^{(0)}\})$ - эта энергия есть, но она неизвестна, это энергия основного состояния

системы U_0 ; $\left(\frac{\partial U}{\partial R_n^\alpha} \right)_0 = 0$, т.к. это есть сила, действующая на атом в положении

равновесия, поэтому необходимо учитывать следующий член разложения;

$\alpha, \beta = 1, \dots, d, d = \dim$ пространства; $n, n_1 = 1, 2, \dots, N$; $u_n^\alpha, u_{n_1}^\beta$ - независимые поправки.

Суммирование по α, β - автоматически (мы ищем произведение тензоров второго ранга),

всего слагаемых $d^2 N^2$. Тогда получим: $E \approx U_0 + H$, H - классическая функция

Гамильтона, связанная с движением атомов.

$$H \approx T + \Delta U = \sum_{n=1}^N \frac{P_n^2}{2M_n} + \frac{1}{2} \sum_{n,n_1} A_{nn_1}^{\alpha\beta} U_n^\alpha U_{n_1}^\beta; \quad A_{nn_1}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial R_n^\alpha \partial R_{n_1}^\beta} \right)_0 - \text{симметричный}$$

тензор (т.к. U – гладкая функция (непрерывна вместе со своей производной)). H и есть та энергия, которая описывает возбуждение атомов. Учет квадратичных членов разложения

называется гармоническим приближением. $H = H(\{P_n^\alpha\}, \{U_n^\alpha\})$, их $N*d$ штук,

$$\dot{U}_n^\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_n^\alpha} \quad (\alpha, n - \text{те же с обеих сторон}), \quad \dot{p}_n^\alpha = -\frac{\partial H}{\partial U_n^\alpha},$$

$$\dot{U}_n^\alpha = \frac{\partial}{\partial p_n^\alpha} \left(\sum_{n_1=1}^N \frac{P_{n_1}^2}{2M_{n_1}} \right) = \frac{\partial}{\partial p_n^\alpha} \cdot \frac{P_n^2}{2M_n} = \frac{1}{2M_n} \cdot 2P_n^\alpha = \frac{P_n^\alpha}{M_n}$$

$$\dot{p}_n^\alpha = -\frac{\partial}{\partial U_n^\alpha} \left(\frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} A_{n_1 n_2}^{\beta\gamma} U_{n_1}^\beta U_{n_2}^\gamma \right) = -\sum_{n_1} A_{n n_1}^{\alpha\beta} U_{n_1}^\beta, \text{ мы получили } \dot{U}_n^\alpha = \frac{P_n^\alpha}{M_n};$$

$$M_n \ddot{U}_n^\alpha = \dot{p}_n^\alpha = -\sum_{n_1} A_{n n_1}^{\alpha\beta} U_{n_1}^\beta - \text{сюда входят слагаемые от всех частиц, в том числе } n_1 = n$$

(самовзаимодействие), $\alpha = 1, \dots, d; n = 1, \dots, N$. Мы получили систему dN уравнений (линейную однородную дифференциальную второго порядка) с неизвестными смещениями атомов. A – силовая матрица.

Для решения предполагаем: $U_n^\alpha(t) = V_n^\alpha e^{-i\omega t}$ (метод вариации

постоянной) $\rightarrow \dot{U}_n^\alpha = -i\omega U_n^\alpha; \ddot{U}_n^\alpha = (-i\omega)^2 U_n^\alpha = -\omega^2 U_n^\alpha$. Подставляем в исходную

$$\text{систему, получаем: } +\omega^2 M_n U_n^\alpha = +\sum_{n_1} A_{n n_1}^{\alpha\beta} U_{n_1}^\beta$$

$$(*) \sum_{n_1} (\omega^2 M_n \delta^{\alpha\beta} - A_{n n_1}^{\alpha\beta}) U_{n_1}^\beta = 0 \quad (\text{внесли под одну сумму})$$

$$\text{Роль “} i \text{” играет } \sim (\alpha, n) \quad \sim \sum_j a_{ij} x_j = 0$$

$j \sim (\beta, n_1)$ имеем матрицу этой системы. Система имеет нетривиальное решение, если

$$\det \|a\| = 0, \text{ или } \det \|\omega^2 M_n \delta^{\alpha\beta} \delta_{n n_1} - A_{n n_1}^{\alpha\beta}\| = 0. \text{ Неизвестными величинами в полученном}$$

уравнении являются частоты (ω^2) . В общем случае получим уравнение

$$D_0 + D_1 \omega^2 + D_2 (\omega^2)^2 + \dots + D_{2N} (\omega^2)^{2N} = 0.$$

Получим набор решений $(\omega_s^2), s=1, 2, \dots, d^*N$; все корни (в общем случае) являются

различными. Вырождение возможно только при выполнении какого-то дополнительного условия на коэффициенты. Итак, всего корней d^*N и это число макроскопически велико.

d^*N – полный набор колебательных степеней свободы твердого тела.

$$(*) \rightarrow \omega^2 \sum_n M_n U_n^2 = \sum_{n n_1} A_{n n_1}^{\alpha\beta} U_n^\alpha U_{n_1}^\beta \quad (\text{умножаем } U_n^\alpha \text{ и просуммируем по } \alpha \text{ и по } n);$$

$$\omega^2 = \frac{2(\Delta U) > 0}{\sum_n M_n U_n^2} > 0(!!!) \Rightarrow \text{все частоты } \omega - \text{действительные.}$$

Пусть существует решение $\omega = \omega' + i\omega''$; подставим его в $U_n^\alpha(t)$:

$$U_n^\alpha(t) = \left(V_n^\alpha e^{-i\omega' t} \right) e^{\omega'' t} \quad - \text{получаем } \infty \text{ либо на } t = +\infty, \text{ либо на } t = -\infty \quad - \text{ это}$$

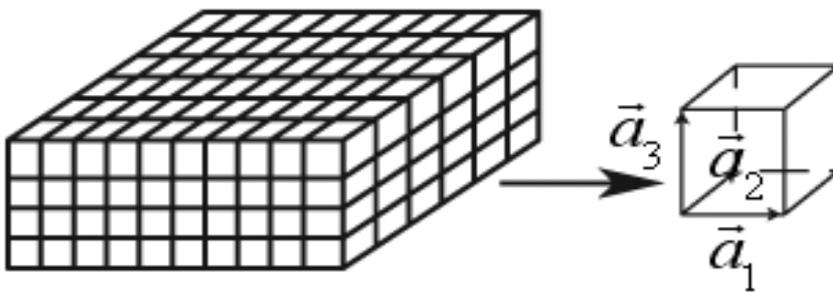
противоречит изначально заложенному ограничению (требование устойчивости системы).

Точка, в которой ω^2 (квадрат частоты) обращается в ноль, а затем становится отрицательным, является точкой потери устойчивости. Наличие этой точки означает неправильный выбор положения равновесия.

Нет полной теории описания аморфных тел (т.к. мы не можем решить полученное нами уравнение). Аморфное состояние не является устойчивым изначально , а является метастабильным; устойчивым состоянием является кристалл.

Лекция 3. Кристаллическая симметрия, элементарная ячейка. Одно- и многоатомные кристаллы. Примеры одномерных кристаллов. Система уравнений движения атомов элементарной ячейки. Квазиволновой вектор.

Кристаллический образец может быть представлен в общем случае как некий косоугольный параллелепипед.



Элементарная ячейка геометрически абсолютно подобна исходному кристаллу.

То есть, существуют три семейства непараллельных плоскостей, которые можно провести через эквивалентно расположенные атомы.

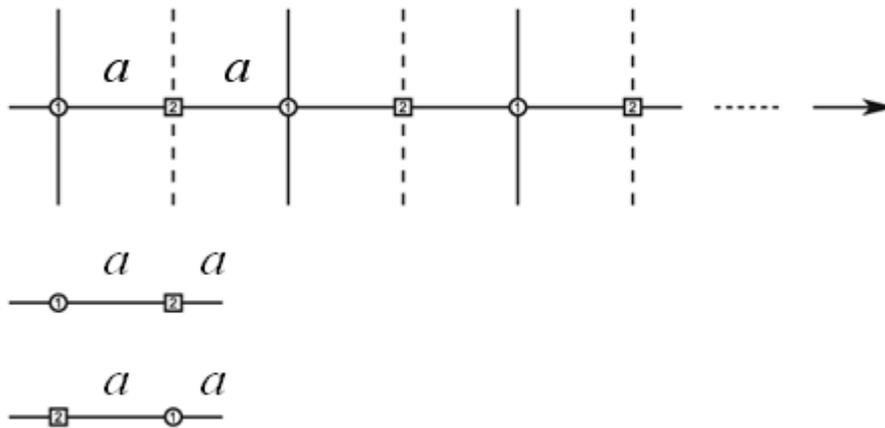
Кристалл обладает трансляционной симметрией - можно всегда переставить любые две элементарные ячейки.

Размер и вид электронной оболочки неизменны и задаются природой. А вот выбор размера и ориентации базисных векторов $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ в некоторой степени произволен.

Предположим, например, что некоторая точка структуры есть центр симметрии (следовательно, и все эквивалентные точки обладают этим свойством). Такую точку удобно выбрать в качестве центра ячейки. Можно предложить регулярный прием построения ячеек, центрированных таким образом, так называемых ячеек *Вигнера – Зейтца*. Из выбранного центра нужно провести векторы трансляций к ближайшим эквивалентным узлам решетки; затем построить плоскости, перпендикулярные этим векторам и проходящие через их середину. Тогда область, которую ограничат все такие плоскости, будет, очевидно элементарной ячейкой. Все точки этой области лежат ближе к выбранному центру, чем к любому другому узлу решетки. Элементарная ячейка может содержать один или более атомов. Если она содержит только один атом, мы помещаем его в узел решетки. Такая структура называется *решеткой Бравэ*.

Если бесконечную цепочку сдвинуть (“продернуть”) на целое число p атомов, то ничего не изменится.

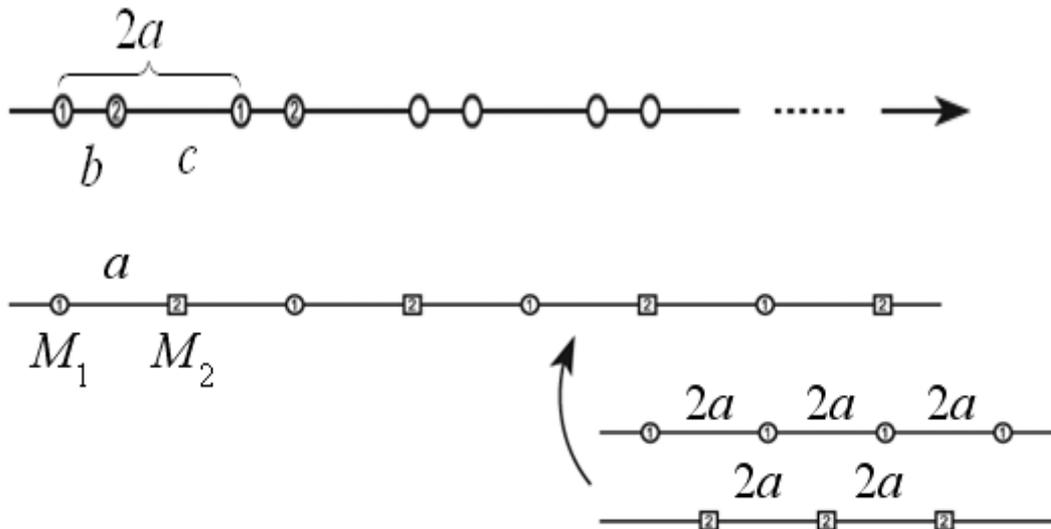
На одну ячейку приходится один атом \Rightarrow кристалл одноатомный.



Теперь продергивать надо на расстояние, кратное $2a$.

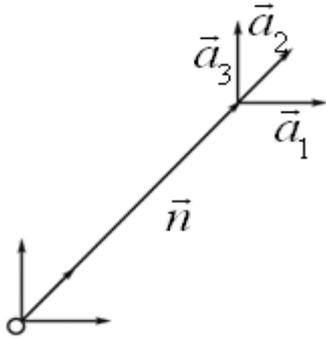
Выбор элементарных ячеек может быть неоднозначным. Однако геометрическая форма элементарной ячейки не изменилась. Это двухатомный кристалл.

Аналогично можно построить цепочки из g атомов. Сейчас известно до $g=15$.

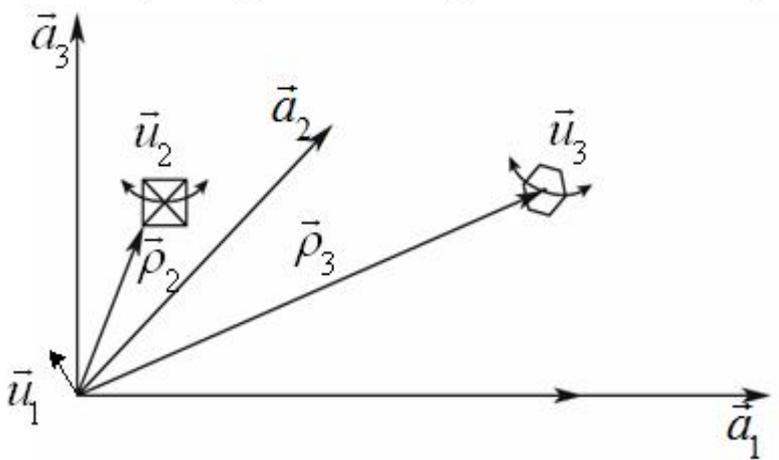


Все многоатомные кристаллы могут быть представлены как вложения (последовательное) кристаллов.

Если в элементарной ячейке d разных атомов, то ячейка d -атомная, и ее можно образовать последовательным вложением d кристаллов с отслеживанием порядка расположения.



$\vec{n} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$; $n_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - в зависимости от положения начала отсчета. Вектора \vec{n} задают вершины всех элементарных ячеек.



$$|\vec{\rho}_l| < a_\alpha \text{ (внутри!).}$$

$$\vec{\rho}_1 = 0$$

$$\vec{\rho}_2 \neq 0$$

$$\vec{\rho}_3 \neq 0$$

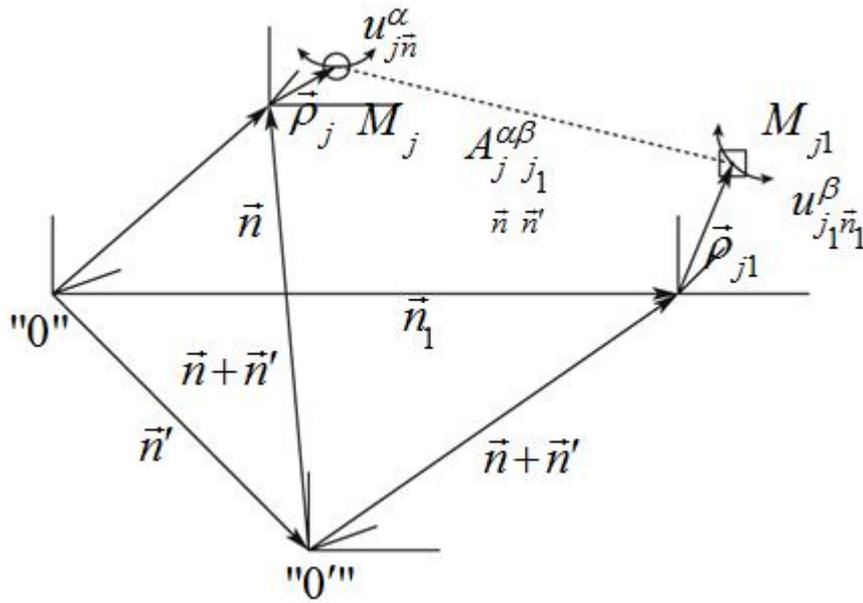
Мгновенное положение каждого атома в решетке будет задаваться двумя

индексами. $\vec{R}_{j\vec{n}} = \underbrace{(\vec{n} + \vec{\rho}_j)}_{\vec{R}_{j\vec{n}}^{(0)}} + \vec{U}_{j\vec{n}}$, где $\vec{U}_{j\vec{n}}$ - колебания вокруг положения равновесия.

$$M_n \ddot{U}_{j\vec{n}}^\alpha = - \sum_{n_1} A_{nn_1}^{\alpha\beta} U_{n_1}^\beta \quad \text{“расселяем” атомы по ячейкам, а затем внутри них } \vec{n}, \vec{n}_1 -$$

$$\text{нумеруют} \quad M_n \ddot{U}_{j\vec{n}}^\alpha = - \sum_{j_1, \vec{n}_1} A_{j\vec{n}, j_1\vec{n}_1}^{\alpha\beta} U_{j_1\vec{n}_1}^\beta \quad \text{ячейки; } j, j_1 - \text{ атомы.}$$

Все ячейки абсолютно идентичны. Переместим "0" \rightarrow "0'",



$$M_j \ddot{U}_j^\alpha(\vec{n}_1 + \vec{n}) = - \sum_{j_1, \vec{n}_1} A_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} + \vec{n}', \vec{n}_1 + \vec{n}') U_{j_1}^\beta(\vec{n}_1 + \vec{n}') \quad , \text{Т.Е. МЫ}$$

поменяли номера атомов, а это неважно.

Извилистая силовая линия никак не зависит от начала отсчета $\Rightarrow A_{j j_1}^{\alpha\beta} \equiv A_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} + \vec{n}')(\vec{n}_1 + \vec{n}')$

$\Rightarrow A_{j j_1}^{\alpha\beta} \equiv A_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1)$, (где $(\vec{n} - \vec{n}_1)$ - аргумент)

Это что-то вроде коэффициента жесткости; каким бы не было \vec{n}' , А- одинаковое.

Таким образом, мы получили две системы уравнений с одинаковыми коэффициентами \Rightarrow решения могут отличаться только в фазе. Это отличие вызвано перенумерацией ячеек.

Ищем решение в виде: $U_{j\vec{n}}^\alpha(t) = V_{j\vec{n}}^\alpha e^{-i\omega t}$. Всю зависимость от \vec{n} предполагаем “сидящей”

в фазе: $U_{j\vec{n}}^\alpha(t) = V_{j\vec{n}}^\alpha e^{-i\omega t} = W_j^\alpha e^{i\vec{f}\vec{n}} e^{-i\omega t}$. Чтобы это всегда была фаза, $(\vec{f}\vec{n})$ должно быть действительным.

$U_{j(\vec{n}+\vec{n}')}^\alpha = W_j^\alpha e^{i\vec{f}(\vec{n}+\vec{n}')} e^{-i\omega t} = e^{i\vec{f}\vec{n}'} (W_j^\alpha e^{i\vec{f}\vec{n}} e^{-i\omega t}) = e^{i\vec{f}\vec{n}'} U_{j\vec{n}}^\alpha$ Подставим в исходную систему:

$M_j W_j^\alpha e^{i\vec{f}\vec{n}} (+\omega^2 e^{-i\omega t}) = + \sum_{j_1, \vec{n}_1} A_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) W_{j_1}^\beta e^{i\vec{f}\vec{n}_1} e^{-i\omega t}$, домножаем на $e^{-i\vec{f}\vec{n}}$, получим:

$$\omega^2 M_j W_j^\alpha = \sum_{j_1} \left\{ \underbrace{A_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) e^{-i\vec{f}(\vec{n} - \vec{n}_1)}}_* \right\} W_{j_1}^\beta = \sum_{j_1} \left\{ \underbrace{\sum_{\vec{n}_2} A_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n}_2) e^{-i\vec{f}\vec{n}_2}}_{**} \right\} W_{j_1}^\beta, \text{ где * - здесь есть}$$

суммирование по всем элементарным ячейкам, в том числе $\vec{n}_1 = \vec{n} \Rightarrow$ выбор нуля неважен, и зависимость от \vec{n} исчезает ; ** - здесь переменная \vec{n} лишь поменяет местами

слагаемые в сумме. Переобозначим $W_j^\alpha = \frac{l_j^\alpha}{\sqrt{M_j}}$ и поделим на $\sqrt{M_j}$:

$$\omega^2 l_j^\alpha = \sum_{j_1} C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) l_{j_1}^\beta$$

$$C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}} \sum_{\vec{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) e^{-i\vec{f}(\vec{n} - \vec{n}_1)} \equiv \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}} \sum_{\vec{n}} A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n}) e^{-i\vec{f}\vec{n}}, \text{ таким образом}$$

$$\omega^2 e_j^\alpha(\vec{f}) = \sum_j C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) l_{j_1}^\beta(\vec{f}) - \text{и решения тоже зависят от вспомогательного вектора } \vec{f}.$$

$$\sum_{j_1} \left\{ \omega^2(\vec{f}) \delta^{\alpha\beta} \delta_{jj_1} - C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) \right\} l_{j_1}^\beta(\vec{f}) = 0 ; \quad \begin{matrix} \alpha, \beta = 1, \dots, d \\ j, j_1 = 1, 2, \dots, g \end{matrix}, \quad g - \text{ полное число атомов в}$$

ячейке. $(\alpha_j) \times (\beta_{j_1}) = dg \times dg$, $(\alpha_j - \text{уравнений}, \beta_{j_1} - \text{неизвестных})$

- гораздо меньше, чем было раньше $(d*N)$. Отличие на 23 порядка, если $g=15$, уравнений, dg – число колебаний степеней свободы элементарной ячейки.

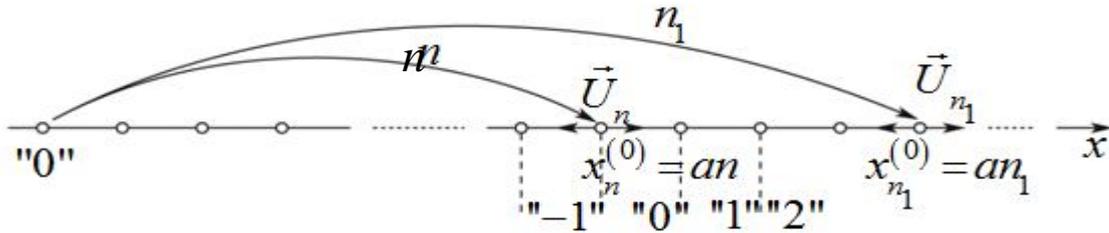
Используем теорему Крамера : $\det \left\| \omega^2(\vec{f}) \delta^{\alpha\beta} \delta_{jj_1} - C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) \right\| = 0$. Отсюда получим

$\omega_s^2(\vec{f})$, $S=1, \dots, d, d+1, \dots, dg$; ω_s^2 положительны и, в общем случае, разные.

Лекция 4.

Колебания атомов линейного одноатомного кристалла. Акустический спектр. Отношение смещений соседних атомов, групповая и фазовая скорости распространения волн смещений.

Линейный одноатомный кристалл.



$\alpha, \beta = 1$
 $j, j_1 = 1$ $dg=1$ (!!!), таким образом уравнение одно : $\{\omega^2(f) \cdot 1 \cdot 1 - C(f)\} l(f) = 0$,

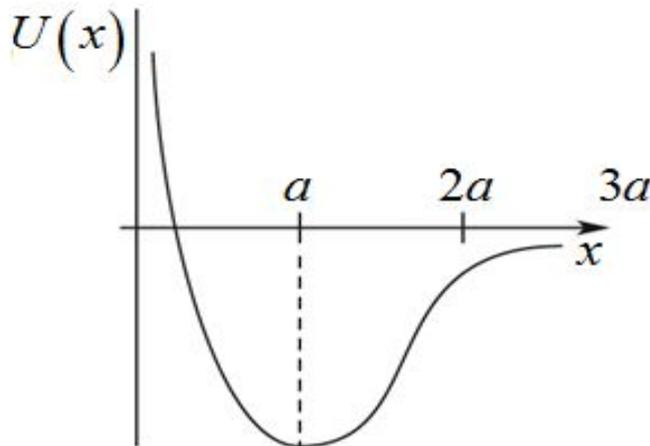
$$C(f) = \frac{1}{M} \sum_{n_1} A(a(n - n_1)) e^{-ifa(n-n_1)} \equiv \frac{1}{M} \sum_n A(an) e^{-ifan} \quad (\text{здесь суммируем с "0" в точке}$$

$x_n^{(o)}$).

$$C(f) = \frac{1}{M} \{ A(0) \cdot 1 + A(+a) e^{-ifa} + A(-a) e^{-if(-a)} + \dots \}$$

Требование нетривиальности ($l(f) \neq 0$) $\rightarrow \omega^2(f) = C(f)$; $A(a \cdot n) = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_0 \partial x_n} \right)_0$ - в

равновесном положении.



Учитываем взаимодействие только ближайших соседей. $A(a) \equiv A(-a) \equiv -\gamma$ -- это силовые константы взаимодействия ближайших соседей.

$A(0) = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_0 \partial x_0} \right)_0$ – самодействие, на первый взгляд – нечто непонятное.

$M_n \ddot{U}_n^\alpha = -\sum_{n_1} A_{nn_1}^{\alpha\beta} U_{n_1}^\beta$, просуммируем по всем n :

$$\sum_n M_n \ddot{U}_n^\alpha = -\sum_{n_1} \left(\sum_n A_{nn_1}^{\alpha\beta} \right) U_{n_1}^\beta \Rightarrow \sum_n A_{nn_1}^{\alpha\beta} \equiv 0 \Leftrightarrow \sum_{n_1} A_{nn_1}^{\alpha\beta} = 0$$

$$\Downarrow F^\alpha \equiv 0$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j\bar{n}} A_{j\bar{n}}^{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{n}_1) \equiv 0$$

$$\sum_{j\bar{n}} A_{j\bar{n}}^{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{n}_1) \equiv 0 \Leftrightarrow \sum_{j\bar{n}_1} A_{j\bar{n}_1}^{\alpha\beta} (\vec{n}) = 0$$

Спроецируем это условие на наш одномерный (линейный) кристалл. $f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a}$

$\sum_n A(an) = 0$ – это сумма полная! $A(0) + A(a) + A(-a) \simeq 0$;

$A(0) = -A(a) - A(-a) = 2\gamma > 0$, $A(0) = -\sum_{n \neq 0} A(an)$, сумма всех силовых констант

взаимодействий с соседями.

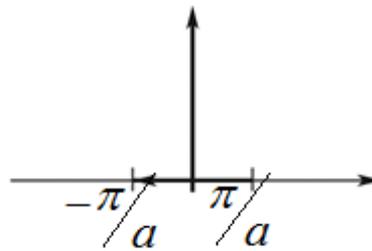
$A(0) = A(an)|_0 = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_0^2} \right)_0 > 0!!!$ -- Вторая производная в точке минимума.

$$\omega^2(f) \simeq \frac{1}{M} \{ 2\gamma - \gamma e^{ifa} - \gamma e^{-ifa} \} = \frac{2\gamma}{M} \left\{ 1 - \underbrace{\frac{e^{ifa} + e^{-ifa}}{2}}_{\cos fa = \cos^2 \frac{fa}{2} - \sin^2 \frac{fa}{2}} \right\} = \frac{4\gamma}{M} \sin^2 \frac{fa}{2}$$

$$\omega^2(f) \simeq \frac{4\gamma}{M} \sin^2 \frac{fa}{2} > 0$$

$$\frac{fa}{2} \rightarrow \frac{fa}{2} + \pi l$$

$$\omega^2\left(f + \frac{2\pi}{a}l\right) \equiv \omega^2(f)$$



Выбирают $-\frac{\pi}{a} < f \leq \frac{\pi}{a}$ (первый период)

1) $f \sim 0 \sim fa \ll 1, f \rightarrow e^{ifan}$, f играет роль волнового вектора (к в e^{ikx})

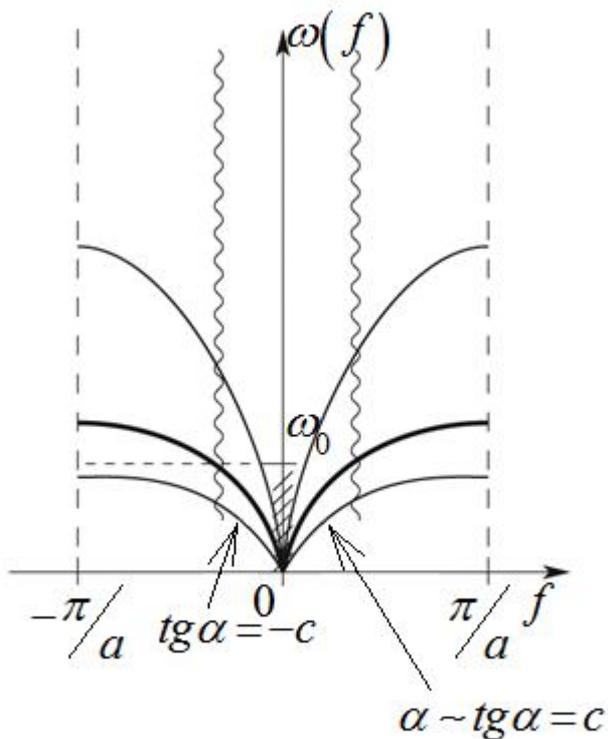
f - квазиволновой вектор (т.к. an - дискретная переменная)

$f = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow f \rightarrow 0 \sim \lambda \rightarrow \infty$, $fa \ll 1$ $\frac{a}{\lambda} \ll 1$ - длинноволновое приближение.

$$\omega(f) = \omega_0 \left| \sin \frac{fa}{2} \right|, \omega_0 \equiv \sqrt{\frac{4\gamma}{M}}$$

$$\left| \sin \frac{fa}{2} \right|_{fa \ll 1} \approx \frac{a}{2} |f|$$

$$\omega(f \rightarrow 0) \approx \omega_0 \frac{a}{2} |f| \equiv C |f|, C = \sqrt{\frac{\gamma a^2}{M}} > 0$$



Это есть ни что иное, как звуковая волна в нашей среде ; C - скорость звука.

$$2) \quad f \sim \pm \frac{\pi}{a}, \text{ и это экстремум (истинный максимум)}$$

$$\omega(f \rightarrow \pm \frac{\pi}{a}) \rightarrow \omega_0$$

$0 \leq \omega(t) \leq \omega_0$, и все значения этого отрезка разрешены.

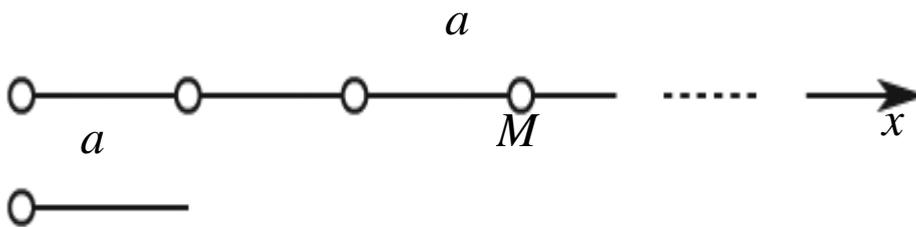
Возможно явления резонанса.

Если через систему пропускать сигналы с частотой до ω_0 , то атомы будут реагировать (поглощение сигнала); если частота сигнала $2\omega_0$, то сигнал отразится жестко (вся цепочка отреагирует как целое).

Для разных кристаллов ω_0 - разное. Чем больше ω_0 , тем сильнее взаимодействие между соседями (в зависимости от этого кристаллы могут быть жесткими или рыхлыми). Любой волновой процесс характеризуется V_{gp} (групповой скоростью) и V_{faz} (фазовой скоростью)

$$\omega^2(\vec{f})e_j^\alpha(\vec{f}) = \sum_{j_1} C_{j_1 j_1}^{\alpha\beta}(\vec{f})l_{j_1}^\beta(\vec{f})$$

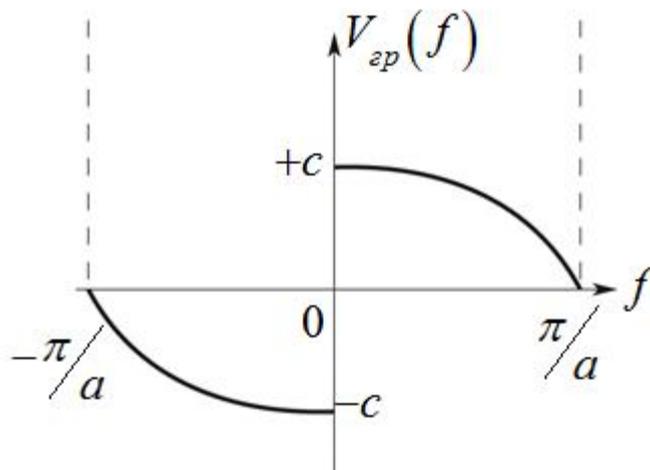
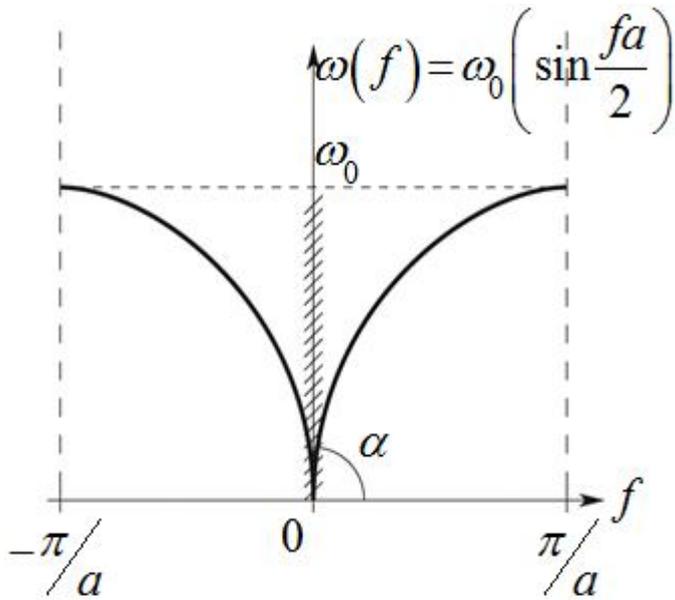
$$\left. \begin{array}{l} \alpha, \beta = 1, \dots, d \\ j, j_1 = 1, \dots, g \end{array} \right\} dg$$



$$(\omega^2(f) - C(f))l(f) = 0$$

$$l(f) \neq 0 \sim \omega^2(f) = C(f) = \frac{1}{M} \sum_n A(an)e^{-ifan} \approx \frac{1}{M} \{2\gamma - \gamma e^{-ifa} - \gamma e^{ifa} + \dots\}, 2\gamma \sim \sum_n A(a, n) = 0$$

Таким образом мы получили $\omega^2(f) = \frac{4\gamma}{M} \sin^2\left(\frac{fa}{2}\right) > 0$, $-\frac{\pi}{a} < f \leq \frac{\pi}{a}$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}}$, $tg\alpha = C$



$V_{gp}(f) = \frac{\partial \omega(f)}{\partial f}$ - характеризует перенос максимума волны (\Rightarrow энергия).

$V_{фаз}(f) = \frac{\omega(f)}{|f|}$ - скорость перемещения поверхности с фиксированной фазой.

$$V_{gp}(f) \approx \begin{cases} \frac{\partial}{\partial f} C|f| = \pm C, f \sim 0 \\ \frac{\partial}{\partial f} \omega_0 = 0, f \sim \pm \frac{\pi}{a} \end{cases}$$

$$f < 0$$

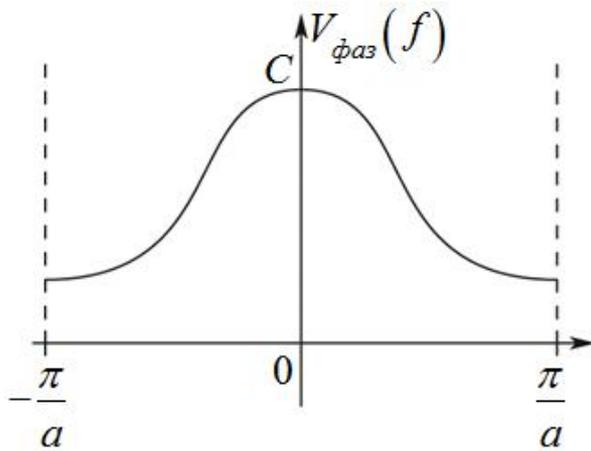
$$V < 0$$

f указывает направление распространения волны.

Если $V_{gp} = 0$, то передачи энергии нет \Rightarrow стоячая волна.

$$V_{фаз}(f) = \begin{cases} \frac{C|f|}{|f|} = C, f \sim 0 \\ \frac{\omega_0}{\left|\pm \frac{\pi}{a}\right|}, f \sim \pm \frac{\pi}{a} \end{cases}$$

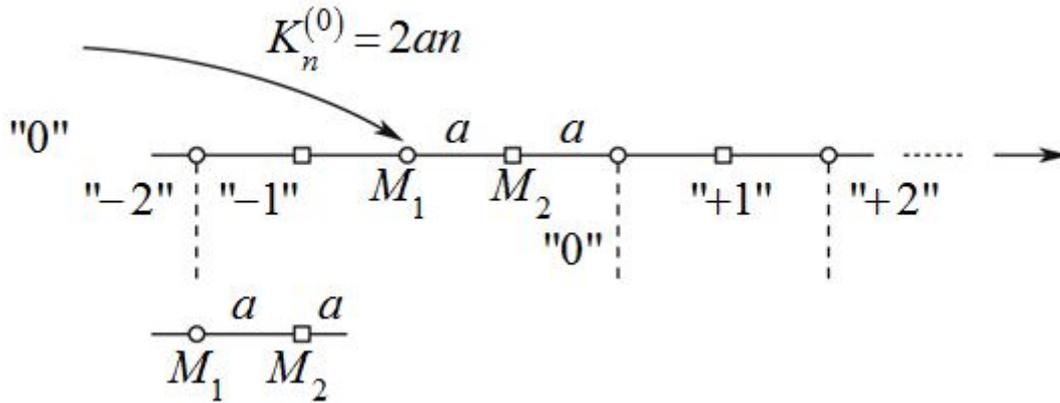
Для длинных волн:



За счет того, что волна очень длинная, на любом конечном интервале ее можно заменить на прямую, и поэтому фазовая скорость совпадает с групповой.

Лекция 5.

Спектр колебаний двухатомного одномерного кристалла (двухатомной линейной цепочки). Акустические и оптические частоты. Скорости распространения и относительные смещения атомов.



$$\left. \begin{array}{l} \alpha, \beta = 1 \\ j, j_1 = 1, 2 \end{array} \right\} \{\alpha\} \cdot \{j\} = 2$$

$$j = 1 \rightarrow \omega^2 l_1 = C_{11} l_1 + C_{12} l_2$$

$$j = 2 \rightarrow \omega^2 l_2 = C_{21} l_1 + C_{22} l_2$$

Перепишем в стандартной форме :

$$\begin{cases} (\omega^2 - C_{11})l_1 + (-C_{12})l_2 = 0 \\ (-C_{21})l_1 + (\omega^2 - C_{22})l_2 = 0 \end{cases}$$

Условие существования ненулевых решений : детерминант

$$\begin{vmatrix} (\omega^2 - C_{11}) & (-C_{12}) \\ (-C_{21}) & (\omega^2 - C_{22}) \end{vmatrix} = 0 \rightarrow (\omega^2)^2 - \omega^2(C_{11} + C_{22}) + (C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21}) = 0$$

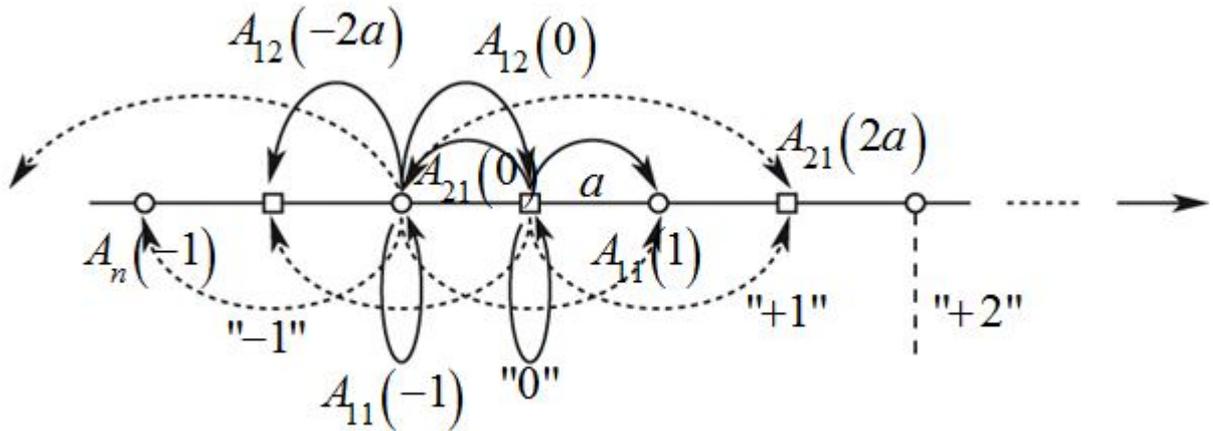
$$\omega_{1,2}^2 = \frac{C_{11} + C_{22}}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{C_{11} + C_{22}}{2}\right)^2 - C_{11}C_{22} + C_{12}C_{21}}$$

Таким образом, $\omega_{1,2}^2 = \frac{C_{11} + C_{22}}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{C_{11} + C_{22}}{4}\right)^2 + C_{12}C_{21}}$ - получено без всяких

приближений.

$$C_{j_i}(f) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_i}}} \sum_n A_{j_i}(2an) e^{-if 2an}$$

$$C_{11}(f) = \frac{1}{M_1} \sum_n A_{11}(2an) e^{-if 2an} = \frac{1}{M_1} \{A_{11}(0) \cdot 1 + A_{11}(+2a \cdot 1) e^{-if 2a1} + \dots\}$$



$A_{11}(-1), A_{11}(1)$ можно отбросить по сравнению с $A_{11}(0)$ -ближайшим (также как и “-2”, ”2”, и т.д.). Таким образом $C_{11} \approx \frac{A_{11}(0)}{M_1}; C_{22} \approx \frac{A_{22}(0)}{M_2}$

$$C_{12} = \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} \sum_n A_{12}(2an) e^{-ifa 2n} \approx \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} \{A_{12}(0) \cdot 1 + A_{21}(-2a) e^{-if(-2a)} + \dots\}$$

$$C_{21} = \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} \sum_n A_{21}(2an) e^{-ifa 2n} \approx \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} \{A_{21}(0) \cdot 1 + A_{21}(2a) e^{-if 2a} + \dots\}$$

$A_{12}(0) \equiv A_{21}(0) = A_{12}(-2a) = A_{21}(-2a) \equiv -\gamma$ одно и то же (взаимодействие атома (1) с атомом (2) на одинаковом расстоянии $-a$). Здесь γ уже другое (раньше оно обозначало взаимодействие двух одинаковых атомов).

$$A_{11}(0) \text{ и } A_{22}(0) \text{ найдем из условия } \sum_{n_{j_i}} A_{j_i}(2an) \equiv 0.$$

$$j = 1 \rightarrow \sum_n A_{11}(2an) + \sum_n A_{12}(2an) \equiv 0$$

$$j = 2 \rightarrow \sum_n A_{21}(2an) + \sum_n A_{22}(2an) \equiv 0$$

$$j = 1 \rightarrow A_{11}(0) + A_{12}(0) + A_{12}(-2a) \approx 0$$

$$j = 2 \rightarrow A_{21}(0) + A_{21}(+2a) + A_{22}(0) \approx 0$$

Учли только самодействие, возникающее из-за

связи с ближайшими соседями.

Получаем:

$$A_{11}(0) = -A_{12}(0) - A_{12}(-2a) = +2\gamma > 0$$

$$A_{22}(0) = -A_{21}(0) - A_{21}(+2a) = +2\gamma > 0$$

Вторая производная в точке

абсолютного минимума. Таким образом, $C_{11} \approx \frac{2\gamma}{M_1}$, $C_{22} \approx \frac{2\gamma}{M_2}$

$$C_{12} \approx \frac{-\gamma}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{+if2a})$$

В этом приближении получилось $C_{12} = C_{21}^*$.

$$C_{21} \approx \frac{-\gamma}{\sqrt{M_2 M_1}} (1 + e^{-if2a})$$

$$\omega_{1,2}^2(f) \approx \gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \mp \sqrt{\gamma^2 \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 + \frac{\gamma^2}{M_1 M_2} |1 + e^{ifa}|^2}$$

$$|1 + e^{if2a}|^2 = (1 + \cos 2fa)^2 + (\sin 2fa)^2 = 1 + 2\cos 2fa + 1 = 4\cos^2 fa = 4(1 - \sin^2 fa)$$

$$\omega_{1,2}^2(f) = \begin{cases} \gamma \left\{ \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \mp \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 + \frac{4\cos^2 fa}{M_1 M_2}} \right\} \\ \gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \left\{ 1 \mp \sqrt{1 - \frac{4\sin^2 fa}{M_1 M_2 \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2}} \right\} \end{cases}$$

Эти выражения идентичны

$$\omega_{1,2}^2\left(f + \frac{2\pi}{2a}k\right) \equiv \omega_{1,2}^2(f) \quad k \in Z$$

$-\frac{\pi}{2a} < f \leq \frac{\pi}{2a}$ - область однозначности f , $2a$ - размер ячейки.

1) $f \rightarrow 0 \sim af \ll 1 \rightarrow \frac{a}{\lambda} \ll 1$ (длинная волна)

$$\sin fa \Big|_{fa \ll 1} \approx fa + \dots$$

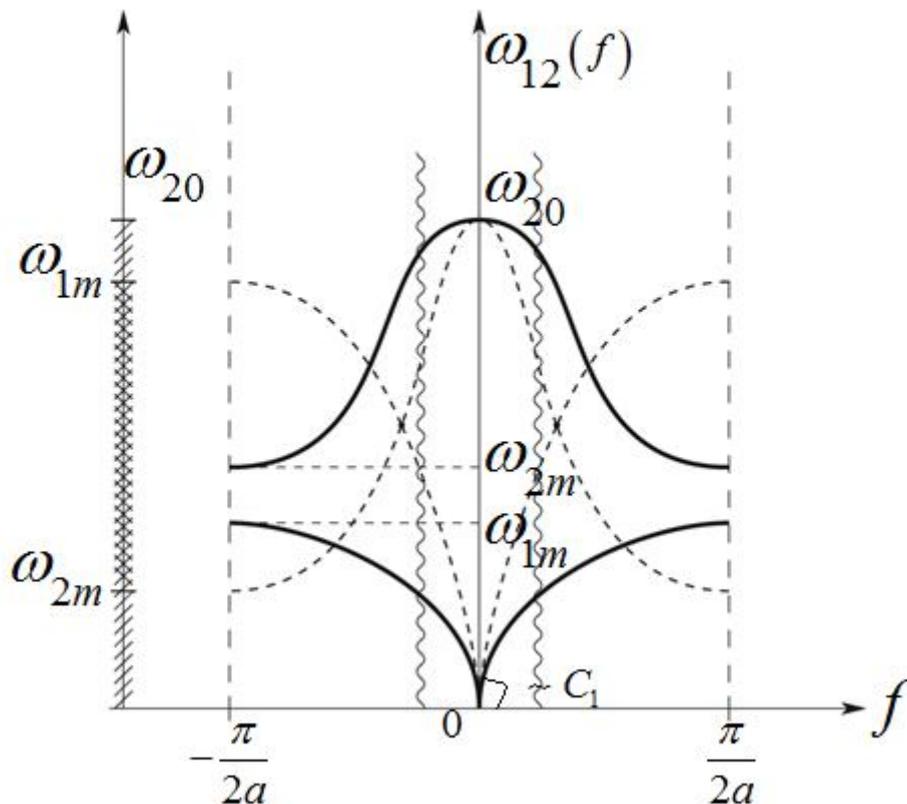
$$\omega_{1,2}^2(f \rightarrow 0) \approx \gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \left\{ 1 \mp \sqrt{1 - \frac{4a^2}{M_1 M_2 \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2} f^2} \right\} ;$$

$$\sqrt{1-x} \Big|_{x \ll 1} \approx 1 - \frac{1}{2}x + \dots$$

$$\Rightarrow \omega_{1,2}^2(f \rightarrow 0) \approx \gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \left\{ 1 - \frac{2a^2}{M_1 M_2 \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2} f^2 \right\}$$

Тогда :

$$\omega_{1,2}^2(f \rightarrow 0) \approx \gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \left\{ 0 \mp \frac{2a^2}{M_1 M_2 \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2} f^2 \right\} = \frac{2\gamma a^2}{M_1 + M_2} f^2 \equiv C_1^2 f^2$$



Эти точки для обоих корней являются точками экстремума, т.к. произв. $\cos \cdot \sin = 0$ при

$$f = \pm \pi / 2a.$$

$$\omega_1(f \rightarrow 0) \approx C_1 |f|$$

$$\omega_2^2(f \rightarrow 0) \approx \gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \{2 - 0(f^2)\}$$

$$\omega_2(f \rightarrow 0) \approx \omega_{20} - 0(f^2)$$

$$\omega_{20} \equiv \sqrt{2\gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)}$$

$$2) f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a}$$

$$\cos\left(\pm \frac{\pi}{2a}\right) = 0$$

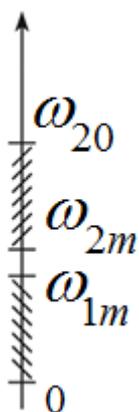
$$\omega_{1,2}^2\left(f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a}\right) \approx \gamma \left\{ \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \mp \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} - \frac{1}{M_2} \right)^2} \right\} =$$

$$= \gamma \left\{ \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \mp \left| \frac{1}{M_1} - \frac{1}{M_2} \right| \right\}_{M_1 > M_2} = \gamma \left\{ \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \mp \left(\frac{1}{M_1} - \frac{1}{M_2} \right) \right\}$$

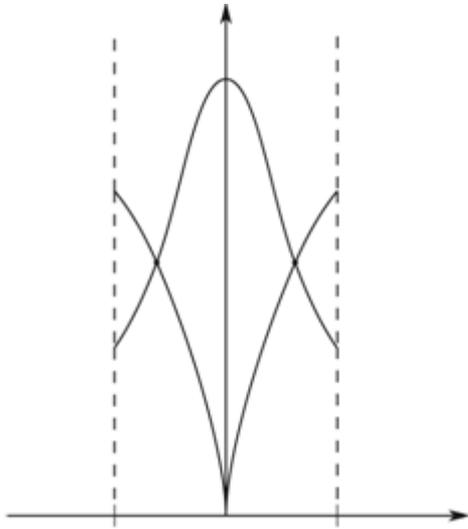
$$\omega_1^2\left(f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a}\right) \approx \frac{2\gamma}{M_1} \equiv \omega_{1m}^2$$

$$\omega_2^2\left(f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a}\right) \approx \frac{2\gamma}{M_2} \equiv \omega_{2m}^2$$

$$\omega_{1m} < \omega_{2m} (M_1 > M_2)$$



Область расширенных частот состоит из двух неперекрывающихся частей: спектр имеет полосатую структуру. Разрешенные частоты вызывают резонанс и возбуждают колебания, частоты, не попадающие в разрешенный интервал или попадающие в щель, вызывают полное внутреннее отражение.

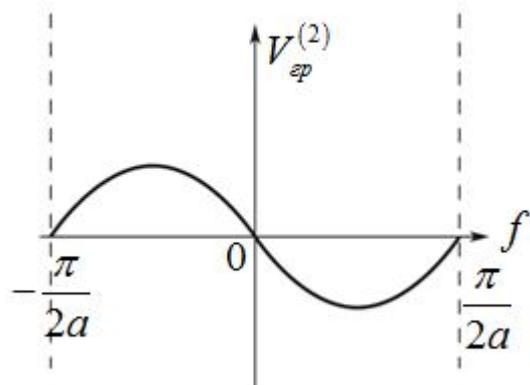
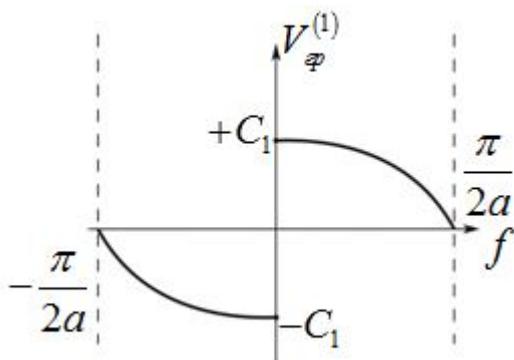


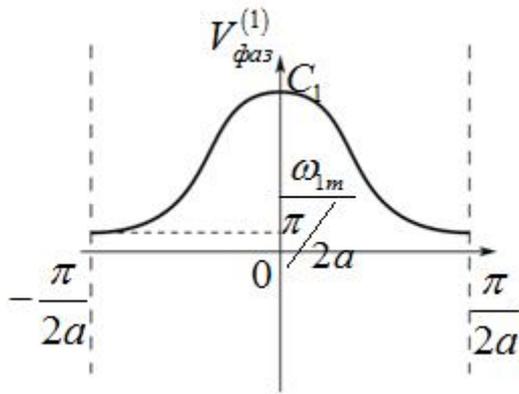
В принципе, такое может быть при учете взаимодействия с более далекими соседями.

Рассмотрим поведение групповой и фазовой скорости.

$$V_{gp}^{(1)} = \frac{\partial \omega_1}{\partial f} \approx \begin{cases} \frac{\partial}{\partial f} C_1 |f| = \pm C_1, f \rightarrow 0 \\ \frac{\partial}{\partial f} \omega_{1m} = 0, f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a} \end{cases}$$

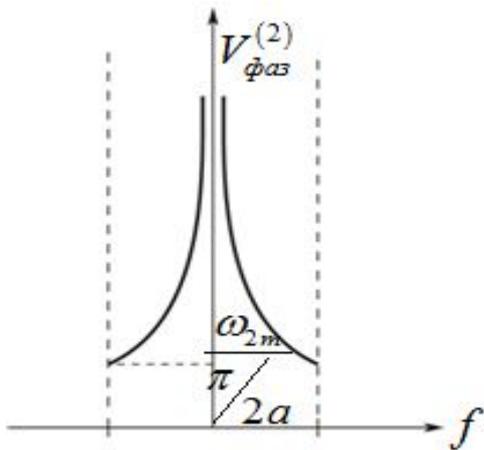
$$V_{gp}^{(2)} = \frac{\partial \omega_2}{\partial f} \approx \begin{cases} \frac{\partial}{\partial f} \omega_{20} = 0, f \rightarrow 0 \\ \frac{\partial}{\partial f} \omega_{2m} = 0, f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a} \end{cases}$$



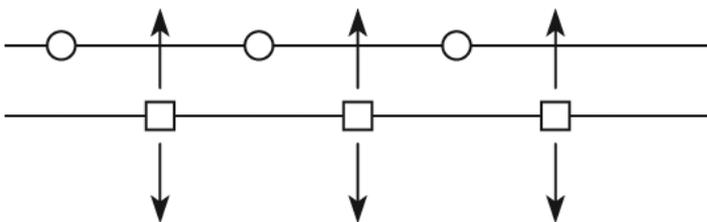


$$V_{\phi_{az}}^{(2)} = \frac{\omega_1}{|f|} \approx \begin{cases} \frac{C_1|f|}{|f|} = C_1, f \rightarrow 0 \\ \frac{\omega_{1m}}{\pi/2a}, f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a} \end{cases}$$

$$V_{\phi_{az}}^{(2)} = \begin{cases} \frac{\omega_{20}}{|f|} \rightarrow \infty, f \rightarrow 0 \\ \frac{\omega_{2m}}{|\pm \pi/2a|}, f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a} \end{cases}$$



Бесконечная $V_{\phi_{az}}$ говорит о том, что фаза всех атомов одинакова (один подкристалл колеблется относительно другого как целое).



Отношение смещений атомов в ячейке с номером n в зависимости от того, в каких колебаниях они участвуют:

$$\frac{U_{1,n}^{(s)}}{U_{2,n}^{(s)}} = \frac{\frac{l_1^{(s)}}{\sqrt{M_1}} e^{if 2an - i\omega_s t}}{\frac{l_2^{(s)}}{\sqrt{M_2}} e^{if 2an - i\omega_s t}} = \frac{l_1^{(s)}}{l_2^{(s)}} \sqrt{\frac{M_2}{M_1}}$$

$$(\omega_s^2 - C_{11})l_1^{(s)} = C_{12}l_2^{(s)}$$

$$\frac{l_1^{(s)}}{l_2^{(s)}} = \frac{C_{12}}{\omega_s^2 - C_{11}} \approx \frac{\frac{-\gamma}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{if 2a})}{\omega_s^2 - \frac{2\gamma}{M_1}}$$

$$\frac{U_{1,n}^{(1)}}{U_{2,n}^{(1)}} = \frac{l_1^{(1)}}{l_2^{(1)}} \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} = \frac{\frac{-\gamma}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{if 2a})}{\omega_1(f) - \frac{2\gamma}{M_1}} \sqrt{\frac{M_2}{M_1}} \Big|_{f \rightarrow 0} \approx \frac{\frac{+\gamma}{\sqrt{M_1 M_2}} 2}{C_1^2 f^2 + \frac{2\gamma}{M_1}} \sqrt{\frac{M_2}{M_1}} \Big|_{f \rightarrow 0} = 1$$

Соседние атомы в ячейке при колеблются с частотой ω_1 смещаются практически

одинаково \Rightarrow ячейка смещается как целое \Rightarrow звуковая волна. ω_1 - акустическая частота (в области длинных волн).

$$\frac{u_{1,n}^{(2)}}{u_{2,n}^{(2)}} \Big|_{f \rightarrow 0} = \frac{l_1^{(2)}}{l_2^{(2)}} \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} \Big|_{f \rightarrow 0} \approx \frac{\frac{-2\gamma}{\sqrt{M_1 M_2}}}{2\gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) - \frac{2\gamma}{M_1}} \sqrt{\frac{M_2}{M_1}} \Big|_{f \rightarrow 0} \approx -\frac{M_2}{M_1}$$

Т.е. при колебаниях с частотой ω_2 в различных ячейках колеблются в противофазе : (в

области длинных волн) $\frac{u_{1,n}^{(s)}}{u_{2,n}^{(s)}} \cdot M_1 u_{1,n}^{(2)}(f \rightarrow 0) + u_2 u_{2,n}^{(2)}(f \rightarrow 0) = 0$ ~ это соотношение

фиксирует центр масс, \Rightarrow ячейку \Rightarrow весь кристалл. ω_2 - оптическая частота ($\sim 10^{15} c^{-1}$ -

инфракрасная область спектра). В области $f \rightarrow \pm \frac{\pi}{2a}$ найти $\frac{u_{1,n}^{(s)}}{u_{2,n}^{(s)}}$ самостоятельно!

Четкое разделение на оптическую и акустическую ветви (даже при перекрытии) возможно только в области малых f .

Лекция 6-я.

Периодическая зависимость собственных частот и векторов смещения от квазиволнового вектора. Обратная решётка и её базис. Длинноволновое приближение для частот и амплитуд смещения атомов в произвольном кристалле. Числа акустических и оптических частот.

Анализ поведения в общем случае:

$$\omega^2(\vec{f})l_j^\alpha(\vec{f}) = \sum_{j_1} C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f})l_{j_1}^\beta(\vec{f}) \quad (*)$$

$$C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}} \sum_{\vec{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) e^{-i\vec{f}(\vec{n} - \vec{n}_1)}$$

$$1) \quad C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}} \sum_{\vec{n}_1} \underbrace{A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1)}_{A_{j_1 j}^{\beta\alpha}(\vec{n}_1 - \vec{n}) e^{-i\vec{f}(\vec{n}_1 - \vec{n})}} = C_{j_1 j}^{\beta\alpha}(\vec{f})$$

$$A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial R_{j\vec{n}}^\alpha \partial R_{j_1 \vec{n}_1}^\beta} \right)_0 \equiv A_{j_1 j}^{\beta\alpha}(\vec{n}_1 - \vec{n})$$

$\omega^2 \hat{l} = \hat{C} \hat{l}$ - задача Штурма-Лиувилля; \hat{C} - эрмитов оператор (у матрицы $C^* = C^T \rightarrow$ собственные значения вещественны, а собственные функции образуют полную ортонормированную систему функций)

$$2) \quad C_{jj_1}^{*\alpha\beta}(-\vec{f}) = C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) \quad (\text{т.к. при сопряжении меняется только знак в } \exp)$$

$$(1) \quad \omega^2(-\vec{f})l_j^{*\alpha}(-\vec{f}) = \sum_{j_1} C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f})l_{j_1}^{*\beta}(-\vec{f}) \quad \text{в } (*) \text{ взяли комплексное сопряжение}$$

и заменили $\vec{f} \rightarrow -\vec{f}$.

Теперь условием разрешимости системы стало $\det \left\| \omega^2(-\vec{f})\delta^{\alpha\beta}\delta_{jj_1} - C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) \right\| = 0$

было : $\det \left\| \omega^2(\vec{f})\delta^{\alpha\beta}\delta_{jj_1} - C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) \right\| = 0$.

Таким образом $\boxed{\omega^2(\vec{f}) \equiv \omega^2(-\vec{f})}$.

В силу этого одновременно получаем
$$\begin{cases} l_j^{*\alpha}(-\vec{f}) \equiv l_j^\alpha(\vec{f}) \\ l_j^{*\alpha}(\vec{f}) \equiv l_j^\alpha(-\vec{f}) \end{cases}$$

Из условия на det получаем $\omega_s^2(\vec{f}), S = 1, \dots, d, \dots, dg$.

Получив набор характеристических корней, последовательно подставляем их в систему ;

$$\omega_{s_1}^2(\vec{f})l_{j s_1}^{*\alpha}(\vec{f}) = \sum_{j_1} C_{j j_1}^{*\alpha\beta}(\vec{f})l_{j_1 s_1}^{*\beta}(\vec{f}) \quad (\text{взяли комплексное сопряжение})$$

$$(2) \quad \parallel \quad \sum_{j_1} l_{j_1 s_1}^{*\beta}(\vec{f})C_{j j_1}^{*\alpha\beta}(\vec{f}) - \text{в силу эрмитовости.}$$

$$\omega_s^2(\vec{f} \rightarrow 0) \sum_j M_j W_{j s}^\alpha(\vec{f} \rightarrow 0) \cdot 1 \approx \sum_j \sum_{j_1} \sum_{\bar{n}_1} A_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) \bar{\times} W_{j_1 s}^\beta(\vec{f} \rightarrow 0) \cdot 1$$

$$\sum_j \sum_{\bar{n}_1} A_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) \equiv 0 \quad ;$$

получили

$$(1) \rightarrow \omega_s^2(\vec{f}) \sum_j l_{j s_1}^{*\alpha}(\vec{f})l_{j s}^\alpha(\vec{f}) = \sum_{j j_1} l_{j s_1}^{*\alpha}(\vec{f})C_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{f})l_{j_1 s}^\beta(\vec{f})$$

$$(2) \rightarrow \omega_{s_1}^2(\vec{f}) \sum_j l_{j s_1}^{*\alpha}(\vec{f})l_{j s}^\alpha(\vec{f}) = \sum_{j j_1} l_{j_1 s_1}^{*\beta}(\vec{f})C_{j j_1}^{\beta\alpha}(\vec{f})l_{j s}^\alpha(\vec{f})$$

$$\text{т.к. индексы "немые", то поменяем } \alpha \longleftrightarrow \beta, j \longleftrightarrow j_1 \Rightarrow \sum_{j j_1} l_{j s_1}^{*\alpha}(\vec{f})C_{j j_1}^{\alpha\beta}(\vec{f})l_{j_1 s}^\beta(\vec{f}),$$

и правые части идентичны.

$$\text{Вычитаем } \left[\omega_s^2(\vec{f}) - \omega_{s_1}^2(\vec{f}) \right] \sum_j l_{j s_1}^{*\alpha}(\vec{f})l_{j s}^\alpha(\vec{f}) \equiv 0$$

$$1) s \neq s_1 \rightarrow \sum_j l_{j s_1}^{*\alpha}(\vec{f})l_{j s}^\alpha(\vec{f}) = 0$$

$$2) s = s_1 \rightarrow \sum_j l_{j s_1}^{*\alpha}(\vec{f})l_{j s}^\alpha(\vec{f}) = \sum_j \left| \vec{l}_{j s}(\vec{f}) \right|^2 \not\rightarrow \infty!$$

$$\text{Положим } \sum_j \left| \vec{l}_{j s}(\vec{f}) \right|^2 = 1 \quad (\text{конечное})$$

$$\text{Объединяя 1), 2), получим } \boxed{\sum_j l_{j s}^{*\alpha}(\vec{f})l_{j s_1}^\alpha(\vec{f}) = \delta_{s s_1}} \rightarrow \text{ортонормированная система}$$

собственных векторов.

Умножим это соотношение на $e_{j_1 s}^\beta(\vec{f})$ (справа) и просуммируем по s .

$$\sum_j \left\{ \sum_s l_{js}^{*\alpha}(\vec{f}) l_{j_1 s}^\beta(\vec{f}) \right\} l_{j_1 s_1}^\alpha(\vec{f}) = \sum_s \delta_{ss_1} l_{j_1 s}^\beta(\vec{f}) = l_{j_1 s_1}^\beta(\vec{f}) , \text{ левая часть перейдет в}$$

правую, только если в нее входят $\delta^{\alpha\beta}, \delta_{jj_1}$.

$$\sum_s l_{js}^{*\alpha}(\vec{f}) l_{j_1 s}^\beta(\vec{f}) = \delta^{\alpha\beta} \delta_{jj_1}$$

$$f \rightarrow 0: \omega_s^2(\vec{f} \rightarrow 0) \sum_j M_j W_{js}^\alpha(\vec{f} \rightarrow 0) \cdot 1 \approx \sum_j \sum_{j_1} \sum_{\vec{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) \bar{\times} W_{j_1 s}^\beta(\vec{f} \rightarrow 0) \cdot 1$$

Зависимость от \vec{n} , сидевшая в экспоненте, исчезает: $\sum_j \sum_{\vec{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) \equiv 0$

$$1) \left\{ \begin{array}{l} \omega_s^2(\vec{f} \rightarrow 0) \simeq 0 \\ \sum_j M_j W_{js}^\alpha(\vec{f} \rightarrow 0) \not\approx 0 \end{array} \right. \quad 2) \left\{ \begin{array}{l} \omega_{s_1}^2(\vec{f} \rightarrow 0) \not\approx 0 \\ \sum_j M_j W_{j_1 s_1}^\alpha(\vec{f} \rightarrow 0) \simeq 0 \end{array} \right.$$

отвечает акустической ветви

такое поведение отвечает оптической ветви

$$u_{j\vec{n}_1 s}^\alpha(\vec{f} \rightarrow 0) \simeq \text{const}^\alpha \quad (\text{зависит от } \alpha)$$

$$\text{Получим } \omega_s^2(\vec{f} \rightarrow 0) \cdot \sum_j M_j \cdot \text{const}^\alpha \simeq \sum_j \underbrace{\sum_{j_1} \sum_{\vec{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1)}_{\equiv 0} \text{const}$$

$$\Rightarrow \omega_s^2(\vec{f} \rightarrow 0) \cdot \sum_j M_j \cdot \text{const}^\alpha \equiv 0$$

Сумма в ноль не обращается, т.к. $\text{const} \neq 0, M_j > 0$

$$\Rightarrow \boxed{\omega_s^2(\vec{f} \rightarrow 0) = 0 \sim W_{js}^\alpha(\vec{f} \rightarrow 0) \simeq \text{const}^\alpha}$$

$\alpha = 1, \dots, d \Rightarrow s = 1, \dots, d$ Т.е. акустических ветвей в произвольном кристалле может

быть столько, сколько независимых смещений у атомов кристалла (какова мерность

пространства). Акустические ветви : $\{s\} = d$;

остальные ветви $s_1 = d + 1, \dots, dg \rightarrow \{s_1\} = d(g - 1)$ - оптические ветви.

Иследуем, как ведет себя $\omega_s^2(\vec{f} \rightarrow 0)$ для акустики:

$$1) s = 1, \dots, d$$

$$\omega_s^2(\vec{f} \rightarrow 0) \simeq 0 +$$

$$\omega_s^2(-\vec{f}) \equiv \omega_s^2(\vec{f}) + \gamma_s^{\alpha\beta} f^\alpha f^\beta + \dots \simeq (\gamma_s^{\alpha\beta} n_f^\alpha n_f^\beta) f^2 \equiv C_s^2(\vec{n}_f) \cdot f^2$$

Так можно записать, так как все квадраты частот заведомо положительные величины.

$$\gamma_s^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \omega_s^2(\vec{f})}{\partial f^\alpha \partial f^\beta} \right)_0 \quad \gamma_s^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \omega_s^2(\vec{f})}{\partial f^\alpha \partial f^\beta} \right)_0, \quad \vec{n}_f = \frac{\vec{f}}{f}$$

$$\omega_s(\vec{f} \rightarrow 0) \approx C_s(\vec{n}_f) \cdot |\vec{f}|, \quad C_s(\vec{n}_f) = \sqrt{\gamma_s^{\alpha\beta} n_f^\alpha n_f^\beta}$$

$$\omega_s(\vec{f} \rightarrow 0) \approx C_s(\vec{n}_f) \cdot |\vec{f}|, \quad C_s(\vec{n}_f) = \sqrt{\gamma_s^{\alpha\beta} n_f^\alpha n_f^\beta}$$

Получили звук, скорость которого является анизотропной величиной. Продольный звук – за счет сжатия и разрежения; поперечный – за счет сдвиговой деформации (с запаздыванием: каждый деформирующийся слой зацепляет следующий и т.д.). Т.к. поперечный звук распространяется с запаздыванием, его скорость меньше.

$$2) s_1 = d + 1, \dots, dg$$

$$\omega_{s_1}^2(\vec{f} \rightarrow 0) \approx \omega_{s_1,0}^2 + \gamma_{s_1}^{\alpha\beta} f^\alpha f^\beta + \dots$$

$$\omega_{s_1}(\vec{f} \rightarrow 0) = \sqrt{\omega_{s_1,0}^2 + \gamma_{s_1}^{\alpha\beta} f^\alpha f^\beta} \approx \omega_{s_1,0} \sqrt{1 + \frac{\gamma_{s_1}^{\alpha\beta} n_f^\alpha n_f^\beta}{\omega_{s_1,0}^2} f^2}$$

$$\boxed{\omega_{s_1}(\vec{f} \rightarrow 0) = \omega_{s_1,0} + \frac{\gamma_{s_1}^{\alpha\beta} n_f^\alpha n_f^\beta}{2\omega_{s_1,0}^2} f^2} \quad \text{- коэффициент при } f^2 \text{ может быть разного знака.}$$

Таким образом, оптическая ветвь при $\vec{f} \rightarrow 0$ обращается в *const*, и «уходит» оттуда квадратичным образом.

$$\omega^2(\vec{f}) \text{ имеет период } \frac{2\pi}{\text{размер ячейки}};$$

$$\det \left\| \omega_s^2(\vec{f}) \delta^{\alpha\beta} \delta_{j_i} - C_{j_i}^{\alpha\beta}(\vec{f}) \right\| = 0$$

$$C_{j_i}^{\alpha\beta}(\vec{f}) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_i}}} \sum_{\vec{n}} A_{j_i}^{\alpha\beta}(\vec{n}) e^{-i\vec{f}\vec{n}}$$

$\omega_s^2(\vec{f})$ “привязано” к матрице *C* \Rightarrow зависимость от \vec{f} такая же.

$\hat{C}(\vec{f} + \vec{G}) = \hat{C}(\vec{f})$ если такой вектор \vec{G} существует, то он есть период этой функции.

$$C_{j_i}^{\alpha\beta}(\vec{f} + \vec{G}) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_i}}} \sum_{\vec{n}} A_{j_i}^{\alpha\beta}(\vec{n}) e^{-i\vec{f}\vec{n}} e^{-i\vec{G}\vec{n}}$$

Необходимо $e^{-i\vec{G}\vec{n}} \equiv 1$ при $\forall \vec{G}, \vec{n}$

$$\Rightarrow \vec{G}\vec{n} = 2\pi \cdot p; p \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{n} = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \vec{a}_{\alpha} \quad ; \quad \sum_{\alpha} n_{\alpha} \underbrace{(\vec{G}\vec{a}_{\alpha})}_{2\pi p_{\alpha}} = 2\pi \cdot p$$

Ищем вектор \vec{G} в виде :

$$\vec{G} = 2\pi \left(p_1 \vec{b}_1 + p_2 \vec{b}_2 + p_3 \vec{b}_3 \right) \quad ; \quad p_{\alpha} - \text{целые}$$

$$(\vec{b}_j, \vec{a}_i) = \delta_{ij}$$

$$(\vec{b}_1, \vec{a}_1) = 1$$

$$(\vec{b}_1, \vec{a}_{2,3}) = 0 \Rightarrow \vec{b}_1 = \text{const} [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]$$

$$1 = (\vec{a}_1, \vec{b}_1) = \text{const} \underbrace{(\vec{a}_1 [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3])}_{V_0 - \text{объем ячейки}} = \text{const} \cdot V_0$$

$$\vec{b}_1 = \frac{1}{V_0} [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]$$

$$\vec{b}_2 = \frac{1}{V_0} [\vec{a}_3 \times \vec{a}_1]$$

Аналогично (циклической перестановкой)

$$\vec{b}_3 = \frac{1}{V_0} [\vec{a}_1 \times \vec{a}_2]$$

$$\boxed{\omega_s^2(\vec{f} + \vec{G}) \equiv \omega_s^2(\vec{f})}$$

$$\Rightarrow \{s\} \cdot \{\vec{f}\} = dg \cdot N \quad -\frac{G_{\min}^{\alpha}}{2} < f_{\alpha} \leq \frac{G_{\min}^{\alpha}}{2}$$

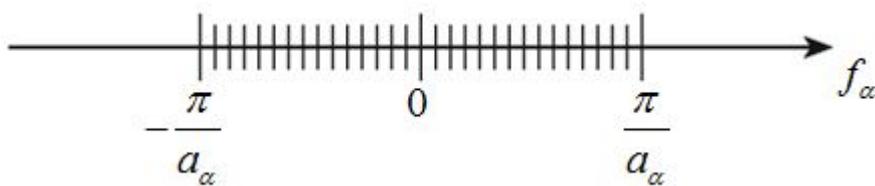
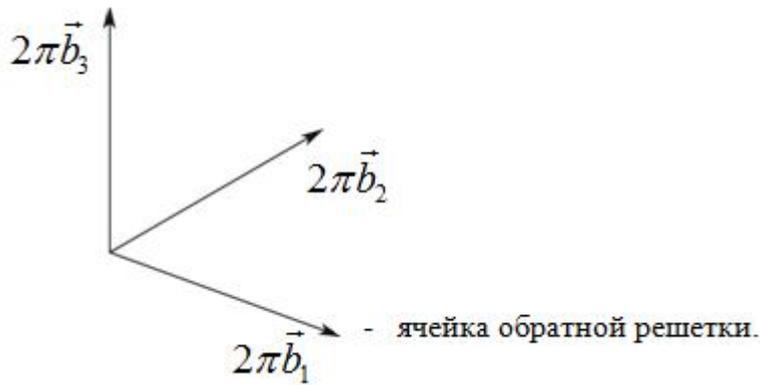
$$G_{\min}^{\alpha} = 2\pi b_{\alpha} \quad ; \quad -\pi b_{\alpha} < f_{\alpha} \leq \pi b_{\alpha}$$

$$b_1 = (\vec{b}_1, \vec{e}_1) = \frac{\cancel{\vec{e}_1} [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]}{a_1 (\cancel{\vec{e}_1} [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3])} = \frac{1}{a_1}$$

$$b_{\alpha} = \frac{1}{a_{\alpha}} \quad ; \quad \text{т.о.} \quad -\frac{\pi}{a_{\alpha}} < f_{\alpha} \leq \frac{\pi}{a_{\alpha}}$$

a_{α} - линейный размер ячейки вдоль α - той оси.

\vec{G} - вектора обратной решетки : все обратное пространство разбивается на блоки в виде ячеек с базисными векторами:

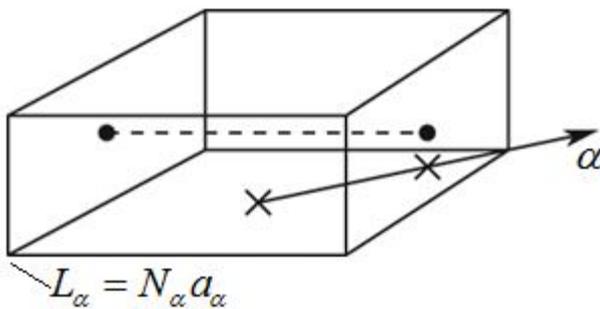


$$u_{j\vec{n}}^\alpha = \frac{l_j^\alpha}{\sqrt{M_j}} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_s(\vec{f})t}$$

$$\frac{1}{\sqrt{M_j}} l_j^\alpha e^{i(\vec{f}_\perp \vec{n}_\alpha + f_\alpha n_\alpha a_\alpha)} \cdot 1 - \text{слева}$$

$$\frac{l_j^\alpha}{\sqrt{M_j}} e^{i(\vec{f}_\perp \vec{n}_\alpha + f_\alpha (a_\alpha n_\alpha + a_\alpha N_\alpha))} \cdot 1 - \text{справа}$$

$$1 = e^{if_\alpha a_\alpha N_\alpha} = e^{if_\alpha L_\alpha}$$



предполагаем, что ячейка, следующая за

N_α , повторяет первую...

$$\begin{array}{l}
 f_\alpha L_\alpha = 2\pi m_\alpha \\
 \left. \begin{array}{l}
 -\frac{\pi}{a_\alpha} < f_\alpha = \frac{2\pi}{a_\alpha} \cdot \frac{m}{N_\alpha} \leq \frac{\pi}{a_\alpha} \\
 -\frac{N_\alpha}{2} < m_\alpha \leq \frac{N_\alpha}{2}
 \end{array} \right\} \{f_\alpha\} = \{m_\alpha\} = N_\alpha
 \end{array}$$

Из периодических граничных условий $\rightarrow f_\alpha$ принимает ровно столько разных значений, сколько ячеек (N_α).

Лекция 7.

Полнота и ортонормированность собственных векторов смещений атомов в произвольном кристалле. Представление смещения любого атома по собственным векторам. Преобразование полной энергии колеблющихся атомов к представлению собственных колебаний.

$$\{\vec{f}\} = \{\vec{f}_1\} \dots \{\vec{f}_d\} = N_1 \dots N_d = N - \text{полное число ячеек в объеме.}$$

Таким образом, если число ячеек разное, то и наборы векторов \vec{f} различны. При

фиксированном \vec{f} мы нашли $\omega_s^2(\vec{f}), s = 1, \dots, d, \dots, dg$; s – полное число степеней

свободы одной ячейки. $\{\vec{f}\} = N \Rightarrow \{s\} \cdot \{\vec{f}\} = dg \cdot N$ – полное число степеней свободы

всего кристалла. (В случае аморфной среды – это диктовалось разницей атомов; здесь же одинаковые атомы имеют различные смещения). Смещение произвольного атома по n -той ячейке вдоль оси α :

$$u_{jn}^\alpha(t) = \sum_{s|\vec{f}} Q \frac{l_{js}^\alpha(\vec{f})}{\sqrt{M_j}} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_s(\vec{f})t} - \text{комбинация всех разрешенных для этой системы}$$

колебаний.

$$\omega_s^2(\vec{f}) l_{js}^\alpha(\vec{f}) = \sum_{j_1} C_{jj_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) l_{j_1s}^\beta(\vec{f}) \rightarrow \omega_s^2(\vec{f}) = \omega_s^2(-\vec{f}) \rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_s(\vec{f} \rightarrow 0) \approx C_s(\vec{n}_f) |\vec{f}|, s = 1, \dots, d \\ \omega_{s_1}(\vec{f} \rightarrow 0) \approx \omega_{s_1 0} + 0(f^2), s_1 = d + 1, \dots, dg \end{array} \right.$$

↓

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_j l_{js}^\alpha(\vec{f}) l_{j s_1}^{*\alpha}(\vec{f}) = \delta_{s s_1} \\ \sum_s l_{js}^\alpha(\vec{f}) l_{j s_1}^{*\beta}(\vec{f}) = \delta^{\alpha\beta} \delta_{s s_1} \end{array} \right.$$

$$\{s\} = dg$$

$$\{\vec{f}\} = N$$

↓

$$u_{j\vec{n}}^\alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s, \vec{f}} \left\{ Q_s(\vec{f}) \frac{l_{js}^\alpha(\vec{f})}{\sqrt{M_j}} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_s(\vec{f})t} + Q_s^*(\vec{f}) \frac{l_{js}^{*\alpha}(\vec{f})}{\sqrt{M_j}} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_s(\vec{f})t} \right\}$$

↗

↖

Пока Q не определено, выделение
решения

это гарантирует действительность

множителя $1/\sqrt{N}$ всего лишь переопределяет его; выделяем этот множитель для

удобства.

Во втором слагаемом заменим $\vec{f} \rightarrow -\vec{f}$ (т.к. суммируем по всем \vec{f} , это можно сделать),

получим :
$$Q_s^*(-\vec{f}) \frac{l_{js}^{*\alpha}(-\vec{f})}{\sqrt{M_j}} e^{+i\vec{f}\vec{n} - i\omega_s(-\vec{f})t}$$
 ; выносим общий множитель.

$$l_{js}^{*\alpha}(-\vec{f}) = l_{js}^\alpha(\vec{f})$$

$$u_{j\vec{n}}^\alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{NM_j}} \sum_{s, \vec{f}} l_{js}^\alpha(\vec{f}) e^{i\vec{f}\vec{n}} \left\{ Q_s(\vec{f}) e^{-i\omega_s(\vec{f})t} + Q_s^*(-\vec{f}) e^{+i\omega_s(\vec{f})t} \right\}$$

Обозначим :

$$\alpha = 1, 2, 3.$$

$$\sum_{n_\alpha=0}^{(N_\alpha-1)} \left(e^{iF_\alpha a_\alpha} \right)^{n_\alpha} = \frac{1 - \left(e^{iF_\alpha a_\alpha} \right)^{N_\alpha}}{1 - e^{iF_\alpha a_\alpha}} = \frac{1 - e^{i \frac{2\pi}{a_\alpha N_\alpha} P_\alpha a_\alpha N_\alpha}}{1 - e^{i \frac{2\pi}{a_\alpha} a_\alpha \frac{P_\alpha}{N_\alpha}}} = \frac{1 - e^{i2\pi P_\alpha}}{1 - e^{i2\pi P_\alpha / N_\alpha}}$$

$$F_\alpha = \frac{2\pi}{a_\alpha} \cdot \frac{P_\alpha}{N_\alpha} \quad \xi \equiv s, \vec{f}; -\xi \equiv s, -\vec{f}$$

↓

$$-\frac{N_\alpha}{2} < P_\alpha \leq \frac{N_\alpha}{2}$$

$$u_{j\vec{n}}^\alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{NM_j}} \sum_{\xi} l_{j\xi}^\alpha e^{i\vec{f}\vec{n}} \{ q_\xi + q_{-\xi}^* \}, \quad \text{где } q_\xi \equiv Q_\xi e^{-i\omega_\xi t}, \quad q_{-\xi}^* \equiv Q_{-\xi}^* e^{i\omega_\xi t}.$$

Воспользуемся этим представлением ;

$$E = T + \Delta U = \sum_j \sum_{\vec{n}} \frac{M_j}{2} \dot{u}_{j\vec{n}}^\alpha(t) \dot{u}_{j\vec{n}}^\alpha(t) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{jj_1 \\ \vec{n}\vec{n}_1}} A_{j_1}^{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{n}_1) u_{j\vec{n}}^\alpha u_{j_1\vec{n}_1}^\beta, \quad \text{перейдем от сумм по}$$

атомам к сумме по состояниям (по ξ).

Кинетическая энергия :

$$T = \sum_j \sum_{\vec{n}} \frac{M_j}{2} \dot{u}_{j\vec{n}}^\alpha(t) \dot{u}_{j\vec{n}}^\alpha(t) = \sum_j \sum_{\vec{n}} \frac{M_j}{2} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{NM_j}} \sum_{\xi} l_{j\xi}^\alpha e^{i\vec{f}\vec{n}} (\dot{q}_\xi + \dot{q}_{-\xi})}}_{\dot{u}_{j\vec{n}}^\alpha} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{NM_j}} \sum_{\xi_1} l_{j\xi_1}^\alpha e^{i\vec{f}\vec{n}} (\dot{q}_{\xi_1} + \dot{q}_{-\xi_1})}}_{\dot{u}_{j\vec{n}}^\alpha}$$

$$\sum_n e^{i(\vec{f}+\vec{f}_1)\vec{n}} \equiv \sum_n e^{i\vec{F}\vec{n}} = \sum_{n_1} (e^{iF_1 n_1})^{n_1} \sum_{n_2} (e^{iF_2 n_2})^{n_2} \sum_{n_3} (e^{iF_3 n_3})^{n_3}, \quad \text{т.к. решеточная сумма}$$

$$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3; \vec{F} \vec{a}_\alpha = F_\alpha \vec{a}_\alpha.$$

$$\alpha = 1, 2, 3.$$

$$\sum_{n_\alpha=0}^{(N_\alpha-1)} (e^{iF_\alpha a_\alpha})^{n_\alpha} = \frac{1 - (e^{iF_\alpha a_\alpha})^{N_\alpha}}{1 - e^{iF_\alpha a_\alpha}} = \frac{1 - e^{i \frac{2\pi}{a_\alpha N_\alpha} P_\alpha a_\alpha N_\alpha}}{1 - e^{i \frac{2\pi}{a_\alpha} P_\alpha \frac{P_\alpha}{N_\alpha}}} = \frac{1 - e^{i2\pi P_\alpha}}{1 - e^{i2\pi P_\alpha / N_\alpha}} \quad (\text{сумма } N_\alpha \text{ членов})$$

геометрической прогрессии ; на \forall оси укладывается конечное число ячеек N_α).

$$F_\alpha = \frac{2\pi}{a_\alpha} \cdot \frac{P_\alpha}{N_\alpha}$$

↓

(Компонента квазиволнового вектора).

$$-\frac{N_\alpha}{2} < P_\alpha \leq \frac{N_\alpha}{2}$$

При $P_\alpha \neq 0$ в знаменателе ноль быть не может ;

$$\sum_{n_\alpha=0}^{(N_\alpha-1)} (e^{iF_\alpha a_\alpha})^{n_\alpha} = \begin{cases} 0, P_\alpha \neq 0 \\ \frac{-i2\pi}{-i2\pi} N_\alpha, P_\alpha = 0 \end{cases} = N_\alpha \delta_{P_\alpha, 0} \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (\text{по правилу Лопиталья})$$

$$\sum_{\vec{n}} e^{i\vec{F}\vec{n}} = N_1 \delta_{F_1, 0} \cdot N_2 \delta_{F_2, 0} \cdot N_3 \delta_{F_3, 0} = N \delta_{\vec{F}, 0}$$

$$F_\alpha = \frac{2\pi}{a_\alpha} \frac{P_\alpha}{N_\alpha}, \text{ поэтому в } \delta \text{- символах можно писать } F_\alpha.$$

$N_1 N_2 N_3 = N$ - полное число ячеек.

Таким образом, $\sum_{\vec{n}} e^{i(\vec{f}+\vec{f}_1)\vec{n}} = N \delta_{\vec{f}_1, -\vec{f}} \left| \begin{array}{l} \vec{F} = \vec{f} + \vec{f}_1 = 0 \\ \sim \vec{f}_1 = -\vec{f} \end{array} \right.$, тогда N сокращается (в T).

$$\delta_{\vec{f}_1, -\vec{f}} \text{ позволяет взять сумму по } \vec{f} \left(\sum_{\xi} = \sum_{s_1 f_1} \right).$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\xi} \sum_j \sum_{s_1} l_{j\xi}^{\alpha} (\dot{q}_{\xi} + \dot{q}_{-\xi}^*) \underbrace{l_{js_1}^{\alpha}(-\vec{f})}_{l_{js_1}^*(\vec{f})} (\dot{q}_{s_1, -\vec{f}} + \dot{q}_{s_1, \vec{f}}^*) = \frac{1}{2} \sum_{\xi} (\dot{q}_{\xi} + \dot{q}_{-\xi}^*) (\dot{q}_{-\xi} + \dot{q}_{\xi}^*) \quad (\text{т.к.}$$

$\sum_j l_{j\xi}^{\alpha} l_{js_1}^{*\alpha}(\vec{f}) = \delta_{ss_1}$ - условие ортонормированности и суммирование по s_1 теперь

проводится легко) - таким образом, кинетическая энергия выражается в виде линейной комбинации всех возможных состояний (ξ), и мера состояний есть q^2 . Т.е. показывает долю, которую вносит функция, коэффициентом перед которой стоит это q в разложении по состояниям.

Вклад потенциальной энергии, связанный со смещением атомов :

$$\Delta U = \frac{1}{2} \sum_{\substack{jj_1 \\ \bar{n}\bar{n}_1}} A_{jj_1}^{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{n}_1) u_{j\bar{n}}^{\alpha} u_{j_1\bar{n}_1}^{\beta} = -\frac{1}{2} \sum_{j\bar{n}} M_j \ddot{u}_{j\bar{n}}^{\alpha} u_{j\bar{n}}^{\alpha} = \{\text{сравнение с видом } T, \text{ те же}$$

$$\text{выкладки}\} \dots = -\frac{1}{2} \sum_{\xi} (\ddot{q}_{\xi} + \ddot{q}_{-\xi}^*) (q_{\xi} + q_{+\xi}^*) \quad (\text{т.к. } M \ddot{u}_{j\bar{n}}^{\alpha} = -\sum_{j_1\bar{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{n}_1) u_{j_1\bar{n}_1}^{\beta}$$

$$\boxed{M \ddot{u}_{j\bar{n}}^{\alpha} = -\sum_{j_1\bar{n}_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{n}_1) u_{j_1\bar{n}_1}^{\beta}} \quad \text{- уравнение движения).$$

Объединим полученные выражения ; тогда получим полную энергию.

$$q_{\pm\xi} = Q_{\pm\xi} e^{-i\omega_{\xi}t} \quad ; \quad q_{\pm\xi}^* = Q_{\pm\xi}^* e^{-i\omega_{\xi}t}$$

$$\dot{q}_{\pm\xi} = (-i\omega_{\xi}) q_{\pm\xi} \quad ; \quad \dot{q}_{\pm\xi}^* = i\omega_{\xi} q_{\pm\xi}^*$$

$$\ddot{q}_{\pm\xi} = -\omega_{\xi}^2 q_{\pm\xi} \quad ; \quad \ddot{q}_{\pm\xi}^* = -\omega_{\xi}^2 q_{\pm\xi}^*$$

$$E = T + \Delta U = \frac{1}{2} \sum_{\xi} \{ (-i\omega_{\xi} q_{-\xi} + i\omega_{\xi} q_{-\xi}^*) (-i\omega_{\xi} q_{-\xi} + i\omega_{\xi} q_{+\xi}^*) - (-\omega_{\xi}^2 q_{\xi} - \omega_{\xi}^2 q_{-\xi}^*) (q_{-\xi} + q_{\xi}^*) \} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\xi} \omega_{\xi}^2 \{ (q_{\xi} - q_{-\xi}^*) (-q_{-\xi} + q_{\xi}^*) + (q_{\xi} + q_{-\xi}^*) (q_{-\xi} + q_{\xi}^*) \} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\xi} \omega_{\xi}^2 \{ \cancel{-q_{\xi} q_{-\xi}} + q_{-\xi}^* q_{-\xi} + q_{\xi} q_{\xi}^* \cancel{-q_{-\xi}^* q_{\xi}^*} + \cancel{q_{\xi} q_{-\xi}} + q_{-\xi}^* q_{-\xi} + q_{\xi} q_{\xi}^* + \cancel{q_{-\xi}^* q_{\xi}^*} \} =$$

$$\sum_{\xi} \omega_{\xi}^2 (q_{\xi} q_{\xi}^* + q_{-\xi}^* q_{-\xi}) = \sum_{\xi} \omega_{\xi}^2 (q_{\xi} q_{\xi}^* + q_{\xi}^* q_{\xi}) = \sum_{\xi} \omega_{\xi}^2 (Q_{\xi} Q_{\xi}^* + Q_{\xi}^* Q_{\xi})$$

(Здесь в сумме по $\xi \rightarrow s, \vec{f}$ заменим \vec{f} на $-\vec{f} \sim \vec{\xi} \rightarrow -\xi$). Экспоненты дают 1, т.к. отличаются знаком показателя.

Таким образом, полная энергия колеблющихся атомов есть совокупность энергий осцилляторов с собственными частотами колебаний, представленность которых определяется величиной Q^2 . Мы получили выражение для энергии, не зависящее от законов коммутации операторов Q (в будущем мы введем необходимые законы). С классической точки зрения мы получили сугубо положительную величину.

Заменим

$$\left. \begin{aligned} Q_\xi &= \frac{1}{2} \left(x_\xi - \frac{p_\xi}{i\omega_\xi} \right) \\ Q_\xi^* &= \frac{1}{2} \left(x_\xi + \frac{p_\xi}{i\omega_\xi} \right) \end{aligned} \right\} |Q_\xi|^2 = \frac{1}{4} \left(x_\xi^2 + \frac{p_\xi^2}{\omega_\xi^2} \right); \quad x_\xi, p_\xi \text{ предположим}$$

вещественными.

Теперь запишем энергию через операторы x_ξ и p_ξ

$$E = \sum_\xi \omega_\xi^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \left(x_\xi^2 + \frac{p_\xi^2}{\omega_\xi^2} \right) = \sum_\xi \left(\underbrace{\frac{p_\xi^2}{2 \cdot 1} + \frac{1 \cdot \omega_\xi^2}{2}}_{\varepsilon_\xi} x_\xi^2 \right) = \sum_\xi \varepsilon_\xi, \quad (\text{где } \varepsilon_\xi - \text{энергия}$$

классического гармонического осциллятора с массой 1). Таким образом, энергия произвольного кристалла представляет совокупность энергий независимых классических гармонических осцилляторов (общее свойство).

$$\{\xi\} = \{s\} \{f\} = dg \cdot N$$

“Индивидуальность” кристалла заключается в наборе частот:

$$(\text{где } C_{j_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) \text{ содержит массы и силовые взаимодействия}).$$

Число осцилляторов есть полное число степеней свободы.

$$\varepsilon_\xi = \frac{p_\xi^2}{2} + \frac{\omega_\xi^2}{2} x_\xi^2 \rightarrow \begin{cases} \dot{x}_\xi = p_\xi \\ \dot{p}_\xi = -\omega_\xi^2 x_\xi \end{cases} \rightarrow \ddot{x}_\xi = -\omega_\xi^2 x_\xi \quad (\text{уравнение Гамильтона; } x, p -$$

канонически – сопряженные переменные).

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

$$p_\xi, x_\xi \rightarrow \left(\begin{array}{l} \widehat{p}_\xi = -i\hbar \frac{d}{dx_\xi} \\ \widehat{x}_\xi = x_\xi \end{array} \right) \quad \left[\widehat{p}_\xi \widehat{x}_\xi \right] = -i\hbar$$

$$E \rightarrow \widehat{H} = \sum_\xi \widehat{H}_\xi$$

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

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

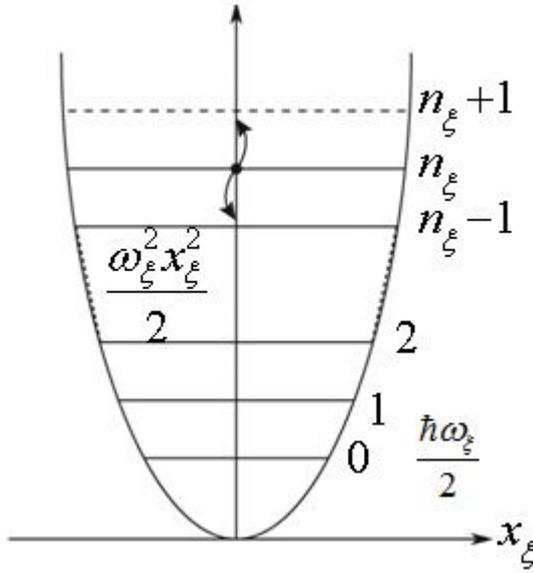
где $x_{0\xi} = \sqrt{\frac{\pi}{\omega_\xi}}$.

Вычислим матричные элементы операторов координат и импульса:

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

$$\left(\widehat{p}_\xi \right)_{s_\xi n_\xi} = \frac{-i\hbar}{x_{0\xi}} \left(\sqrt{\frac{n_\xi}{2}} \delta_{s_\xi, n_\xi-1} - \sqrt{\frac{n_\xi+1}{2}} \delta_{s_\xi, n_\xi+1} \right) \quad \text{эти операторы - околodiагональные.}$$

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

$$\hat{b}_\xi |n_\xi\rangle = \sqrt{n_\xi} |n_\xi + 1\rangle \quad (\text{поглощение (уничтожение) одного кванта})$$

$$\hat{b}_\xi^+ |n_\xi\rangle = \sqrt{n_\xi + 1} |n_\xi + 1\rangle \quad (\text{рождение кванта}).$$

Энергия может меняться только в меру одного кванта)

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

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

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

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

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

Мы проквантовали классическую систему и перевели описание

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

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

Под действием \widehat{b}_ξ^+ на $\widehat{b}_\xi |n_\xi\rangle = \sqrt{n_\xi} |n_\xi - 1\rangle$

$$\begin{aligned}n_\xi = 0, 1, \dots, \infty \quad \widehat{b}_\xi^+ \widehat{b}_\xi |n_\xi\rangle &= \sqrt{n_\xi} (\widehat{b}_\xi^+ |n_\xi - 1\rangle) = \sqrt{n_\xi} (\sqrt{n_\xi} |n_\xi\rangle) \\ \widehat{b}_\xi^+ \widehat{b}_\xi |n_\xi\rangle &= n_\xi |n_\xi\rangle\end{aligned}$$

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

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

Аналогично, действуя оператором \widehat{b}_ξ на состояние, определенное оператором \widehat{b}_ξ^+ , получаем :

$$\widehat{b}_\xi \widehat{b}_\xi^+ |n_\xi\rangle = \sqrt{n_\xi + 1} (\sqrt{n_\xi + 1} |n_\xi + 1 - 1\rangle) = (n_\xi + 1) |n_\xi\rangle$$

Вычтем отсюда предыдущий результат ;

$$[\widehat{b}_\xi \widehat{b}_\xi^+] = \widehat{b}_\xi \widehat{b}_\xi^+ - \widehat{b}_\xi^+ \widehat{b}_\xi = 1$$

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

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

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

\widehat{H}_ξ - гамильтониан квантовых колебаний кристалла ;

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

Это коллективные колебания ($j, \vec{n} \rightarrow \xi$). 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.

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

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

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

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

↑ ξ, ξ_1 пробегает один и тот же ряд значений.

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

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

вполне уместно.

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

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

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

Получим явный вид операторов \widehat{Q} .

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

кристалле. Теперь получим явное выражение для оператора смещения

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

Пусть начальное и конечное состояния совпадают;

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

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

$\{n\}^\xi$ 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;

$$\begin{aligned}
\overline{u_{j\bar{n}}^2} &\equiv \overline{u_{j\bar{n}}^\alpha u_{j\bar{n}}^\alpha} = \left\langle \{n\}, \left| \widehat{u_{j\bar{n}}^\alpha} \widehat{u_{j\bar{n}}^\alpha} \right| \{n\} \right\rangle = \\
&= \sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM_j \omega_{\xi}} 1 \left\langle n_{\xi} \left| \left(l_{j\xi}^{\alpha} e^{i\bar{n}-i\omega_{\xi}t} \widehat{b}_{\xi} + l_{j\xi}^{*\alpha} e^{-i\bar{n}+i\omega_{\xi}t} \widehat{b}_{\xi}^+ \right) \overline{\otimes} \left(l_{j\xi}^{\alpha} e^{i\bar{n}-i\omega_{\xi}t} \widehat{b}_{\xi} + l_{j\xi}^{*\alpha} e^{-i\bar{n}+i\omega_{\xi}t} \widehat{b}_{\xi}^+ \right) \right| n_{\xi} \right\rangle = \\
&= \sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM_j \omega_{\xi}} \left\{ l_{j\xi}^{\alpha} l_{j\xi}^{\alpha} e^{2(i\bar{n}-i\omega_{\xi}t)} \underbrace{\left\langle n_{\xi} \left| \widehat{b}_{\xi} \widehat{b}_{\xi} \right| n_{\xi} \right\rangle}_{\equiv 0 \langle n_{\xi} | n_{\xi} - 2 \rangle} + l_{j\xi}^{*\alpha} l_{j\xi}^{\alpha} \underbrace{e^{-i\bar{n}+i\omega_{\xi}t} e^{i\bar{n}-i\omega_{\xi}t}}_1 \underbrace{\left\langle n_{\xi} \left| \widehat{b}_{\xi}^+ \widehat{b}_{\xi} \right| n_{\xi} \right\rangle}_{n_{\xi}} \right\} + \\
&+ l_{j\xi}^{\alpha} l_{j\xi}^{*\alpha} \underbrace{e^{-i\bar{n}+i\omega_{\xi}t} e^{i\bar{n}-i\omega_{\xi}t}}_1 \underbrace{\left\langle n_{\xi} \left| \widehat{b}_{\xi} \widehat{b}_{\xi}^+ \right| n_{\xi} \right\rangle}_{(n_{\xi}+1)} + l_{j\xi}^{*\alpha} l_{j\xi}^{*\alpha} e^{2(-i\bar{n}+i\omega_{\xi}t)} \underbrace{\left\langle n_{\xi} \left| \widehat{b}_{\xi}^+ \widehat{b}_{\xi}^+ \right| n_{\xi} \right\rangle}_{\equiv 0 \langle n_{\xi} | n_{\xi} + 2 \rangle} \right\} = \\
&= \boxed{\sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM_j \omega_{\xi}} \left| \vec{l}_{j\xi} \right|^2 (2n_{\xi} + 1)}
\end{aligned}$$

$$n_{\xi} = 0, 1, \dots, \infty$$

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 (на это прямо указывает множитель \hbar). Средний квадрат смещения не может быть меньше значения, определяемого нулевыми колебаниями.

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

Лекция 9.

Термодинамика колеблющегося кристалла. Тепловая энергия и теплоёмкость. Температурное поведение теплоёмкости. Дебаевское приближение. Уравнение состояния.

В твердых телах атомы обычно колеблются вблизи их положения равновесия. В кристаллических телах наблюдается дальний порядок в расположении атомов в соответствии с симметрией кристаллической решетки, а в аморфных – только ближний порядок. В жидкостях тоже имеется ближний порядок в расположении атомов, но положение атомов не фиксировано (они относительно легко могут переходить с места на место).

Таким образом, характерными свойствами конденсированных тел являются сильное взаимодействие составляющих их частиц и небольшие смещения частиц от некоторых равновесных положений, обусловленные тепловым воздействием. Подчеркнем, что именно этими двумя качествами конденсированные среды отличаются от газов. В газах взаимодействие частиц мало по сравнению с энергией теплового кинетического движения. Кроме того, частицы свободно перемещаются в пространстве не задерживаясь ни в каких положениях.

Для начала будем рассматривать аморфные, точнее, изотропные тела. То есть такое вещества, в которых нет выделенных направлений. В этом смысле поликристаллическое вещество также можно считать изотропным, если рассматриваются процессы, для которых характерные размеры больше размеров отдельного кристаллита. Так как большинство естественных и искусственных сред являются поликристаллическими, то получаемые ниже результаты могут иметь достаточно широкие применения.

Случай низких температур

Для аморфных или поликристаллических тел можно написать

$$F = N\varepsilon_0 + T \sum_{\alpha} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega_{\alpha}}{T}} \right),$$

где суммирование производится по всем $3Nv$ степеням свободы.

Рассмотрим случай низких температур. Характерная энергия тепловых колебаний атомов $\hbar\omega \sim T$. Низким температурам соответствуют такие колебания, при которых длина волны $\lambda \sim c/\omega$, где c – скорость звука, существенно превосходит характерное расстояние между атомами или период решетки a : $\lambda \sim c/\omega \gg a$, или $\omega \ll c/a$, или $T \sim \hbar\omega \ll \hbar c/a$.

Объем фазового пространства

$$Vg \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Для фононов $p = \hbar\omega/c_t$ или $p = \hbar\omega/c_l$. Здесь индекс l соответствует продольным волнам или продольным фононам, а индекс t – поперечным. То есть вместо суммирования по всем состояниям можно осуществлять интегрирование, например, по переменной ω , соответствующей частоте фононов. При этом для поперечной поляризации имеется два фонона, а для продольной – один. Можно ввести некоторую среднюю скорость

$$\frac{3}{\bar{c}} = \frac{2}{c_t} + \frac{1}{c_l}.$$

Тогда с помощью перехода

$$V \frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 \bar{c}^3}.$$

вместо суммирования осуществим интегрирование по ω

$$F = N\varepsilon_0 + T \frac{3V}{2\pi^2 \bar{c}^3} \int_0^\infty \ln(1 - e^{-\hbar\omega/T}) \cdot \omega^2 d\omega.$$

Здесь из-за быстрой сходимости интеграла предел интегрирования расширен до $\omega \rightarrow \infty$.

Это выражение имеет такой же вид, как для системы равновесных фотонов. Отличие заключается в множителе $3/2$ и в замене скорости света на некую среднюю скорость звука. Как и ранее интеграл можно взять по частям, вводя $x = \hbar\omega/T$,

$$F = N\varepsilon_0 - V \frac{T^4}{2\pi^2 \hbar^3 \bar{c}^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = N\varepsilon_0 - \frac{\pi^2}{30(\hbar\bar{c})^3} VT^4.$$

Здесь учтено, что приведенный интеграл равен $\pi^4/15$. Энтродпия находится как

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = \frac{2\pi^2}{15(\hbar\bar{c})^3} VT^3,$$

а внутренняя энергия

$$E = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = N\varepsilon_0 + V \frac{\pi^2 T^4}{10(\hbar\bar{c})^3}.$$

Отсюда теплоемкость

$$C = V \frac{2\pi^2 T^3}{5(\hbar\bar{c})^3}$$

Эти результаты были получены Дебаем в 1912 г. Подчеркнем, что для твердых тел $C_p \approx C_V \equiv C$.

Случай высоких температур

Рассмотрим другой предельный случай, когда $T \gg \hbar c/a$. При этом в выражении для F можно воспользоваться разложением экспоненты и взять ее первый член

$e^{-\hbar\omega_\alpha/T} \approx 1 - \hbar\omega_\alpha/T$, что приводит к выражению

$$F = N\varepsilon_0 + T \sum_{\alpha} \ln \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{T}.$$

Здесь суммирование производится по всем степеням свободы, которых в системе $3Ng$, где g – число атомов в ячейке.

Введем некоторую среднюю частоту

$$\ln \bar{\omega} = \frac{1}{3Ng} \sum_{\alpha} \ln \omega_{\alpha},$$

которая является функцией удельного объема $\bar{\omega} = \bar{\omega}(V/N)$. Тогда

$$F = N\varepsilon_0 - 3NgT \ln T + 3NgT \ln \hbar\bar{\omega},$$

внутренняя энергия

$$E = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = N\varepsilon_0 + 3NgT,$$

а теплоемкость

$$C = Nc = 3Ng,$$

то есть теплоемкость твердых тел постоянна $c = 3g$, что представляет собою закон

Дюлонга и Пти. Это позволяет записать через теплоемкость выражения для F , E и S

$$F = N\varepsilon_0 - NcT \ln T + NcT \ln \hbar\bar{\omega},$$

$$E = N\varepsilon_0 + NcT,$$

$$S = Nc \ln T - NcT \ln \hbar\bar{\omega}/e.$$

Интерполяционная модель Дебая

Реальные спектры колебаний в твердых телах очень сложны. Получение их представляет собою весьма непростую задачу теории твердых тел. Поэтому широкое применение

получила простая интерполяционная модель, предложенная Дебаем в 1912 г. Будем считать, что частотный спектр имеет такой же вид, как при низких частотах, но продолжается до некоторой максимальной частоты, которая определяется условием равенства полного числа колебаний числу степеней свободы

$$\frac{3V}{2\pi^2c^3} \int_0^{\omega_m} \omega^2 d\omega = \frac{3V\omega_m^3}{3 \cdot 2\pi^2c^3} = 3Ng,$$

откуда

$$\omega_m = c \left(\frac{6\pi^2 Ng}{V} \right)^{1/3}.$$

А распределение частот

$$9Ng \frac{\omega^2}{\omega_m^3} d\omega.$$

Тогда

$$F = N\varepsilon_0 + T \frac{9Ng}{\omega_m^3} \int_0^{\omega_m} \omega^2 \ln(1 - e^{-\hbar\omega/T}) d\omega.$$

Введем температуру Дебая $\theta = \hbar\omega_m$. Тогда

$$F = N\varepsilon_0 + 9NgT \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{\theta/T} z^2 \ln(1 - e^{-z}) dz.$$

При обращении к таким интегралам удобно провести интегрирование по частям. Тогда получаем

$$F = N\varepsilon_0 + NgT \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \left[3 \left(\frac{\theta}{T} \right)^3 \ln(1 - e^{-\theta/T}) - 3 \int_0^{\theta/T} \frac{z^3 dz}{e^z - 1} \right].$$

Для работы с рассматриваемой моделью удобно ввести функция Дебая

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{z^3 dz}{e^z - 1},$$

тогда

$$F = N\varepsilon_0 + NgT \left[3 \ln(1 - e^{-\theta/T}) - D(\theta/T) \right].$$

При этом выражение для энтропии, например, принимает вид

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = -Ng \left[3 \ln(1 - e^{-\theta/T}) - D(\theta/T) \right] + Ng \frac{3\theta/T}{e^{\theta/T} - 1} - Ng \frac{\theta}{T} D'(\theta/T) =$$

$$= -3Ng \ln(1 - e^{-\theta/T}) + 4NgD(\theta/T).$$

Заметим, что $D'(x) = -3D/x + 3/(e^x - 1)$. Тогда внутренняя энергия будет

$$E = F + TS = N\varepsilon_0 + 3NgTD(\theta/T).$$

Откуда видно, что внутренняя энергия состоит из «холодной» и «тепловой» составляющих, причем в тепловой части зависимость от параметров задачи входит только через функцию Дебая.

Теплоемкость определяется соотношением

$$C = 3Ng \left[D\left(\frac{\theta}{T}\right) - \frac{\theta}{T} D'\left(\frac{\theta}{T}\right) \right].$$

Пользуясь свойствами функции Дебая, можно показать, что при низких температурах, когда $T \ll \theta$, то есть $x \gg 1$, функция она принимает вид $D(x) \approx \pi^4/5x^3$. Тогда получаем, что внутренняя энергия

$$E = N\varepsilon_0 + 3NgT \frac{\pi^4}{5} \left(\frac{\theta}{T}\right)^3 = N\varepsilon_0 + \frac{\pi^2 VT^4}{10(\hbar c)^3},$$

а теплоемкость

$$C \approx \frac{12Ng\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta}\right)^4 = \frac{2\pi^2 VT^3}{5(\hbar c)^3}.$$

Как и следовало ожидать, эти выражения совпадают с ранее полученными соотношениями, полученными непосредственно из статистического рассмотрения низкотемпературных систем.

Определенный интерес представляет выражение для давления, так как оно непосредственно необходимо для теоретического описания динамических процессов. Получим его, обращаясь к свободной энергии F , как термодинамическому потенциалу в переменных T, V :

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -N \frac{d\varepsilon_0}{dV} + NgT \frac{3}{e^{\theta/T} - 1} \frac{1}{T} \frac{d\theta}{dV} - NgTD' \frac{1}{T} \frac{d\theta}{dV}.$$

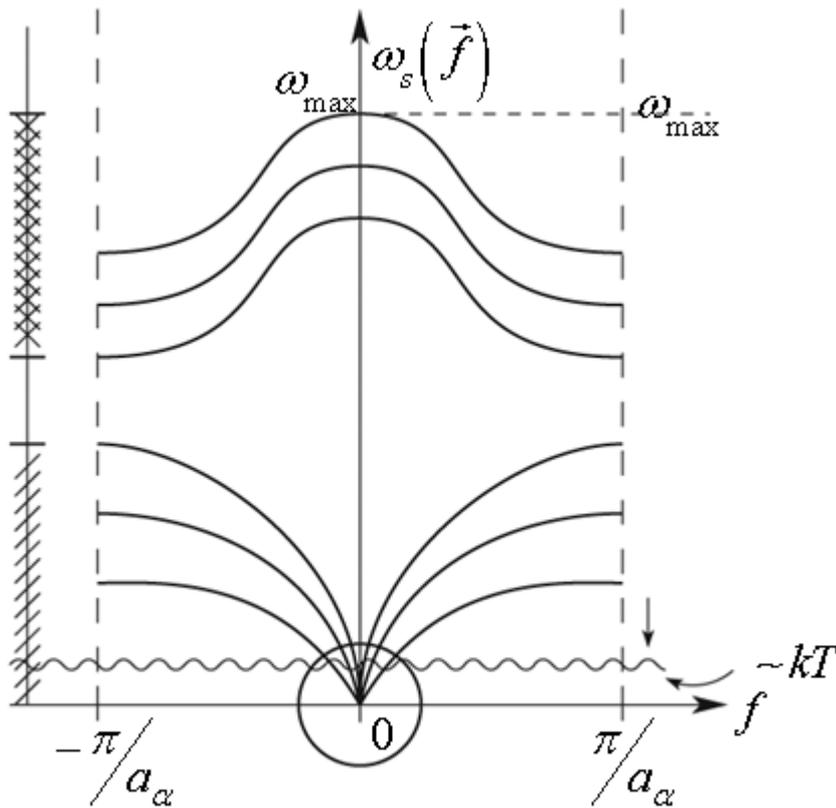
Пользуясь ранее полученным выражением для производной функции Дебая, получаем

$$P = -N \frac{d\varepsilon_0}{dV} + 3NgT \frac{D(\theta/T)}{V} \frac{d \ln \theta}{d \ln V} = P_x(V) + \varepsilon_T \rho \frac{d \ln \theta}{d \ln V}.$$

При дифференцировании функций ε_0 и θ мы пользовались прямыми производными, имея ввиду, что эти функции зависят только от V . Уравнения состояния, представленное в таком виде, часто называют уравнением состояния Ми-Грюнаизена, а величину

$$\Gamma = \frac{d \ln \theta}{d \ln V},$$

называют коэффициентом Грюнаизена. Его часто используют для интерполяции экспериментальных данных. В частности, для ряда веществ при $T \geq \theta$ можно считать коэффициент Γ постоянным. В некоторых случаях можно применять степенную зависимость коэффициента Γ от объема, типа $\Gamma = \Gamma_0 (V/V_0)^\alpha$.



Рассмотрим дебаевское приближение для систем различной размерности. Для начала определим функцию плотности фононных частот $g^{(d)}(\omega)$.

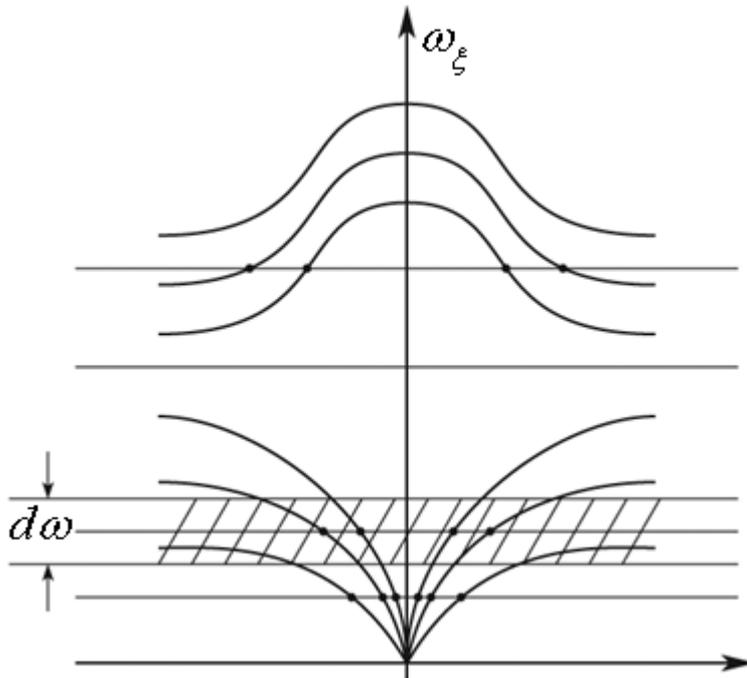
$$E_T = \sum_{\xi} \frac{\hbar \omega_{\xi}}{e^{\frac{\hbar \omega_{\xi}}{kT}} - 1} = dgN \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \frac{1}{dgN} \sum_{\xi} \delta(\omega - \omega_{\xi}) \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}$$

Из-за δ -функции вклад в интеграл дадут только пересечения с ветвями.

Введем функцию $g^{(d)}(\omega) = \frac{1}{dgN} \sum_{\xi} \delta(\omega - \omega_{\xi})$.

$$\int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega) = \frac{1}{dgN} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \sum_{\xi} \delta(\omega - \omega_{\xi}) = \frac{1}{dgN} \cdot dgN = 1$$

Т.о. мы получили нормировочный интеграл и можем обоснованно называть $g^{(d)}(\omega)$ функцией плотности. $g^{(d)}(\omega)$ показывает, сколько разрешенных частот попадает в промежуток $d\omega$ (для конкретного кристалла).



В то же время $g^{(d)}(\omega)$ есть вероятность обнаружить в спектре частот частоту данной величины.

$$E_T = dgN \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

т.е. для вычисления интеграла не нужно

знать дисперсию, а достаточно $g^{(d)}(\omega)$

Рассмотрим для определенности одноатомный кристалл. (то есть будем считать $g = 1$??). В дебаевском приближении точная функция фоновых частот перейдет в более простое выражение:

$$g_{AK}^{(d)}(\omega) = \frac{1}{dN} \sum_{s=1}^d \sum_{\vec{f}} \delta(\omega - \omega_s(\vec{f}))$$

↓

$$g_D^{(d)}(\omega) = \frac{1}{dN} \sum_{s=1}^d \sum_{\vec{f}} \delta(\omega - c_s f)$$

$$g_D^{(d)}(\omega) = \frac{1}{dN} \sum_{s=1}^d \underbrace{\frac{V_d \Omega_d}{(2\pi)^d} \int_0^{f_{\max}} d\vec{f} f^{d-1}}_{\sum_{\vec{f}}} \delta(\omega - c_s f) =$$

$$= \frac{1}{dN} \sum_{s=1}^d \frac{V_d \Omega_d}{(2\pi)^d} \frac{1}{C_s^d} \underbrace{\int_0^{\omega_D} dx x^{d-1} \delta(\omega - x)}_{\omega^{d-1}}$$

$$k = C_s f$$

$$f = \frac{k}{C_s}$$

т.о.

$$\boxed{g_D^{(d)}(\omega) = \frac{1}{N} \frac{V_d \Omega_d}{(2\pi)^d} \sum_{s=1}^d \frac{1}{C_s^d} \omega^{d-1}} \equiv \underline{A_d \omega^{d-1}} .$$

Функция плотности должна удовлетворять условию нормировки

$$\int_0^{\omega_D} d\omega g_D^{(d)}(\omega) = 1$$

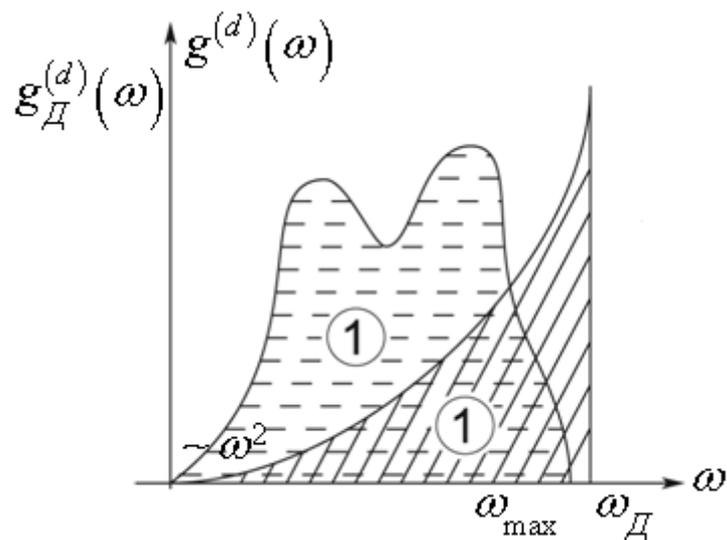
$$A_d \underbrace{\int_0^{\omega_D} d\omega \omega^{d-1}}_{\omega_D^{(d)} \frac{1}{d}} = 1 \rightarrow \boxed{A_d \equiv \frac{d}{\omega_D^d}}$$

↓ подставляем в $g_D^{(d)}(\omega)$ и находим ω_D через параметры кристалла (проделать самостоятельно)

$$\boxed{g_D^{(d)} = \frac{d\omega^{d-1}}{\omega_D^d}} \text{ или } g_D^{(d)}(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{\omega_D}, d = 1 \\ \frac{2\omega}{\omega_D^2}, d = 2 \\ \frac{3\omega^2}{\omega_D^3}, d = 3 \end{cases}$$

$$E_T \rightarrow E_T^D = dN \int_0^{\omega_D} d\omega g_D^{(d)}(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{kT} - 1}$$

Видим, что точное E_T и приближенное E_T^D выражения отличаются только явным видом функции плотности (и верхним пределом интегрирования)



возьмем ванадий - одноатомный кубический кристалл.

 - точная функция (измеренная в эксперименте)
 - дебаевская функция плотности

$$\overline{u_{jn}^2} = \sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM_j \omega_{\xi}} |e_{j\xi}|^2 (2n_{\xi} + 1) \quad \downarrow$$

$n_{\xi} = 0, 1, 2, \dots$ номер уровня в осцилляторе

Лекция 10.

Температурное поведение среднего квадрата смещения любого атома в кристалле. Неустойчивость 1- и 2-х мерных кристаллов.

Рассмотрим теперь величину среднего квадрата смещения атома.

$$\overline{u_{jn}^2} = \langle \{n\} | u_{jn}^2 | \{n\} \rangle$$

$$\langle u_{jn}^2 \rangle \equiv \overline{u_{jn}^2} = \sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM_{j\omega_{\xi}}} |\vec{l}_{j\xi}|^2 (2\bar{n}_{\xi} + 1)$$

$$\sum_j l_{jS}^{\alpha}(f) l_{jS_1}^{\alpha} = \delta_{SS_1} \rightarrow \sum_j |\vec{l}_{j\xi}|^2 = 1$$

Может оказаться, что для некоторых частот $l \rightarrow 0$ (т.е. данная частота присутствует в спектре, но атомы с ней практически не колеблются)

$$j=1 \quad \langle u_{jn}^2 \rangle = \sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}} (2\bar{n}_{\xi} + 1) = \frac{d\hbar}{2M} \int_0^{\omega_{\max}} \underbrace{\left[\frac{1}{dN} \sum_{\xi} \delta(\omega - \omega_{\xi}) \right]}_{g^{(d)}(\omega)} \frac{2\bar{n}(\omega) + 1}{\omega}$$

т.е.

$$\langle u_n^2 \rangle = \frac{\hbar d}{2M} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega) \frac{2\bar{n}(\omega) + 1}{\omega} \quad \text{все атомы колеблются в среднем}$$

одинаково.

1)

$$T=0 \rightarrow \bar{n}(\omega, T=0) = 0$$

$$\langle u_n^2 \rangle_{T=0} = \frac{\hbar d}{2M} \underbrace{\int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega)}_{\langle \frac{1}{\omega} \rangle^{(d)}} \frac{1}{\omega} = \frac{\hbar d}{2M} \left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle^{(d)}$$

Для вычисления $\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle^{(d)}$ воспользуемся дебаевским приближением

$$\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle^{(d)} \rightarrow$$

$$\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle_D^{(d)} \equiv \int_0^{\omega_D} d\omega g_D^{(d)}(\omega) \frac{1}{\omega} = \int_0^{\omega_D} d\omega \underbrace{\frac{d}{\omega_D^d} \omega^{d-1}}_{g^{(d)}(\omega)} \frac{1}{\omega} = \frac{d}{\omega_D^d} \int_0^{\omega_D} d\omega \omega^{d-2} = \frac{1}{\omega_D} \frac{d}{d-1}$$

при $d=1$ получим ∞ ? Рассмотрим аккуратнее:

$$\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle^{(1)} = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \frac{g^{(1)}(\omega)}{\omega} = \int_0^{\omega'} d\omega \frac{g^{(1)}(\omega \sim 0)}{\omega} + \int_{\omega'}^{\omega_{\max}} d\omega \frac{g^{(1)}(\omega)}{\omega} \sim \underline{\ln L}$$

вклад малых ω аномально велик,

$$\int_0^{\omega'} d\omega \frac{g^{(1)}(\omega \sim 0)}{\omega} \approx \int_0^{\omega'} d\omega \frac{const}{\omega} \cong const \cdot \ln |\omega| \Big|_0^{\omega'} = const \cdot \lim_{\omega \rightarrow 0} \left| \frac{\omega'}{\omega} \right| \approx$$

$$\begin{aligned} & \uparrow \\ & g^{(d)}(\omega \sim 0) \sim g^{(d)}(c_s |f|) \sim \omega^{d-1} \sim const \\ & d = 1 \end{aligned}$$

Вклад точки $\omega = 0$ непонятен, т.к. по сути $\omega = 0$ - это не колебания, поэтому

$$\approx const \cdot \ln \left| \frac{\omega'}{\omega_{\min}} \right| \sim \ln L ; \quad \omega_{\min} = c_{зв} f_{\min} = c_{зв} \frac{2\pi}{L}.$$

Т.о. макроскопическая величина L при $d=1$ связана с аномальным вкладом длинных волн ($\omega \rightarrow 0$) \rightarrow истинно одномерный кристалл является неустойчивым.

Для понимания характера такой неустойчивости рассмотрим

$$\begin{aligned} \langle (u_{n+1} - u_n)^2 \rangle &= \left\langle \left(\sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}} \left[(l_{\xi} e^{ifa(n+1)-i\omega_{\xi}t} \hat{b}_{\xi} + l_{\xi}^* e^{-ifa(n+1)+i\omega_{\xi}t} \hat{b}_{\xi}^+) - (l_{\xi} e^{ifan-i\omega_{\xi}t} \hat{b}_{\xi} + l_{\xi}^* e^{-ifa+i\omega_{\xi}t} \hat{b}_{\xi}^+) \right] \right)^2 \right\rangle = \\ &= \left\langle \left(\sum_{\xi} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}}} (l_{\xi} e^{ifan} (e^{ifa} - 1) e^{-i\omega_{\xi}t} \hat{b}_{\xi} + \text{эпм.сопр.}) \right)^2 \right\rangle = \frac{\hbar 1}{2M} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega d^{(1)} \omega \left| e^{ifa} - 1 \right|_{f=f(\omega)}^2 \frac{2\bar{n}(\omega) + 1}{\omega} \\ \left| e^{ifa} - 1 \right|^2 &= (\cos fa - 1)^2 + (\sin fa)^2 = \cos^2 fa + \sin^2 fa - 2\cos fa + 1 = \\ 2(1 - \cos fa) &= 4\sin^2 \frac{fa}{2} = \left(\frac{\omega_{\xi}}{\omega_0} \right)^2 \end{aligned}$$

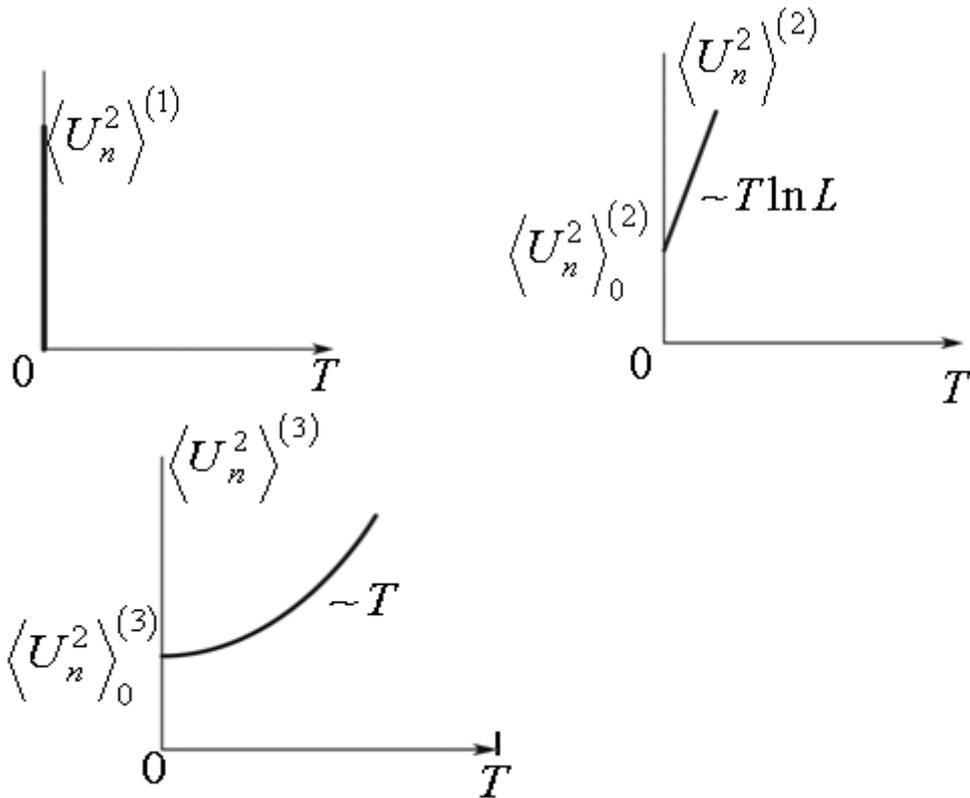
Здесь $\omega_0^2 = \frac{4\gamma}{M}$. В результате получаем

$$\boxed{\left\langle (u_{n+1} - u_n)^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{2M\omega_0^2} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(1)}(\omega) \omega^2 \frac{2\bar{n}(\omega) + 1}{\omega} \xrightarrow{T=0} \frac{\hbar}{2M\omega_0^2} \underbrace{\int_0^{\omega_{\max}} d\omega \omega g^{(1)}(\omega)}_{\langle \omega \rangle \neq \infty}}$$

для $d=1$ $\langle \omega \rangle = 2\omega_0$

Т.о. разность смещений двух любых соседних атомов остается всегда конечной, а квадрат смещения каждого атома аномально велик.

Неустойчивость одномерного кристалла – это его стремление начать совершать макроскопическое движение, оставляя при этом примерно постоянным расстояние между соседними атомами.



Рассмотрим случай малых, но конечных температур.

$$\langle u_n^2 \rangle_{T \sim 0}^{(d=1,2,3)} = \frac{\hbar d}{2M} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega) \frac{1}{\omega} \left(2 \frac{kT}{\hbar \omega} \right) \approx \frac{\hbar d}{2M} \frac{2kT}{\hbar} \underbrace{\int_0^{\omega_{\max}} d\omega g^{(d)}(\omega) \frac{1}{\omega^2}}_{\langle \frac{1}{\omega^2} \rangle^{(d=2,3)}}$$

$$2\bar{n}(\omega, T \sim 0) + 1 \Big|_{\hbar\omega < kT} \approx 2 \frac{kT}{\hbar\omega}$$

$$\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle_D^{(d=2,3)} = \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{d\omega^{d-1}}{\omega_D^d} \frac{1}{\omega^2} = \frac{d}{\omega_D^d} \underbrace{\int_0^{\omega_D} d\omega \omega^{d-3}}_{\frac{\omega_D^{d-2}}{d-2}} = \frac{d}{\omega_D^d} \omega_D^{d-2} \frac{1}{d-2}$$

$$\boxed{\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle_D^{(d=2,3)} = \frac{d}{d-2} \frac{1}{\omega_D^2}}$$

← теперь для $d = 2$ возникает anomalно большое значение

$$\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle^{(2)} \approx \int_0^{\omega'} d\omega \underbrace{g^{(2)}(\omega \sim 0)}_{const \cdot \omega} \frac{1}{\omega^2} \approx \int_0^{\omega'} d\omega \frac{const}{\omega} \sim const \cdot \ln \left| \frac{\omega'}{\omega_{\min}} \right| \sim \underline{\ln L}$$

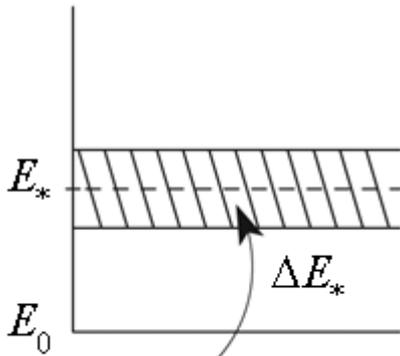
$$\left\langle u_n^2 \right\rangle_{T \rightarrow 0}^{(d=2,3)} \sim \begin{cases} T \ln L, & d = 2 \\ \sim T(\dots), & d = 3 \end{cases}$$

Следовательно, при конечных температурах в двумерном кристалле также возникает аномально большое слагаемое, и только для трехмерного случая все устойчиво.

Лекция 11.

Эффект Мёссбауэра. Вероятность эффекта и его температурное поведение. Восстановление характеристик кристаллов по анализу вероятности эффекта в ранних системах.

Эффект Мессбауэра



$E_* \rightarrow \tau_* \rightarrow \delta E_* = \frac{\hbar}{\tau_*}$ конечная ширина, т.е. обязательно сообщить точно ΔE_* , а

необходима энергия, попадающая в интервал шириной δE_* .

$$\Delta E_* = \hbar \omega_* \quad (\text{это в основном } \gamma\text{-квант})$$

$\begin{cases} E_* \sim 10^8 \text{ eV} \\ \tau_* \sim 10^{-20} \text{ сек} \end{cases}$ - обычные ядерные реакции, τ_* - время, необходимое чтобы

электрон пролетел через ядро

Существуют ядра, которые называются *изомерами* (это изотопы определенных химических элементов, у которых существуют долгоживущие возбужденные состояния),

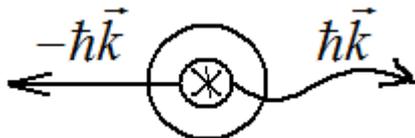
такие что $\begin{cases} E_*^{(i)} \sim 10^5 \text{ eV} \\ \tau_*^{(i)} \sim 10^{-8} \text{ сек} \end{cases}$

↓

гигантское уменьшение ширины уровня δE_* .

→ т.е. нужно подбирать ΔE_* на несколько порядков точнее.

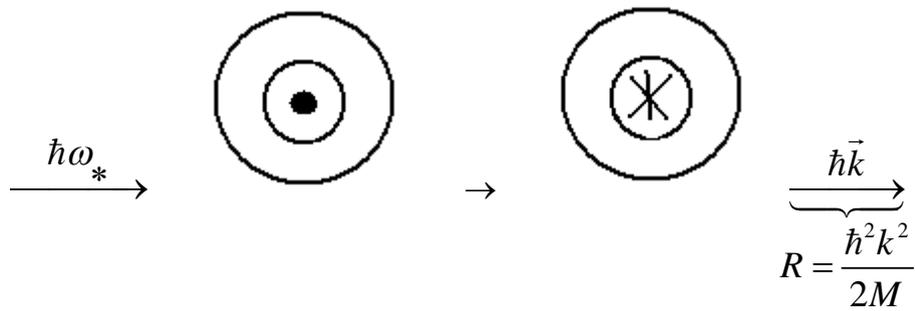
Пусть имеется возбужденное ядро (покоящееся)



импульс отдачи испускание гамма-кванта

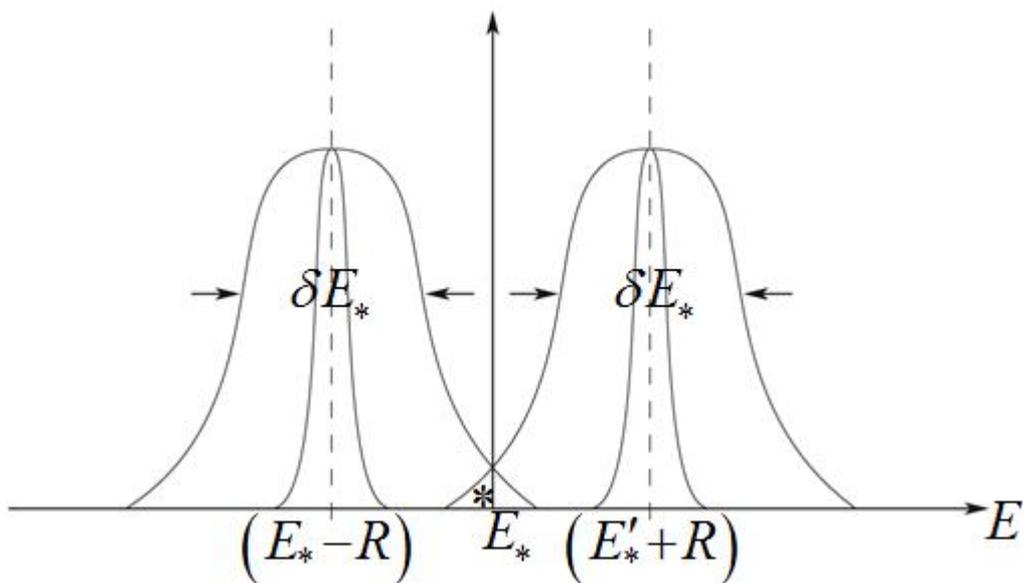
$(\hbar \omega_* - R)$ - энергия кванта (!)

Энергия отдачи: $R = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$



Покоящееся ядро в основном состоянии.

Т.о. квант с энергией $(\hbar\omega_* - R)$ не может быть поглощен ядром.



Интенсивность заведомо поглощаемых квантов.

Только в этой области(*) квант, испущенный одним ядром, может быть поглощен другим.

Для изомеров

$$\delta E_* \sim \frac{\hbar}{\tau_*} \sim \frac{10^{-27}}{10^{-8}} \sim 10^{-19} \text{ эрг} / 1,6 \cdot 10^{-12} \frac{\text{эрг}}{\text{eV}} \sim 10^{-7} \text{ eV}$$

$$R = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = \frac{(\hbar k c)^2}{2M c^2} = \frac{(E_*)^2}{2M c^2}$$

$$R \sim \frac{(10^4 \text{ eV})^2 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}}{10^{-27} \cdot 10^3 \cdot 10^2 \cdot 10 \cdot 10^{20}} \sim \frac{10^8}{10^{11}} \sim 10^{-3} \text{ eV}$$

нуклонов в ядре;
обозначим \overline{H}_{ya} (отвечает за поглощение

или испускание ядром кванта).

Считаем, что ядро испускает (поглощает) кванты; сейчас же исследуем зависимость гамильтониана от пространственного положения ядра, покоится ли, движется ли и т.п.)

$$\sum_f \left| \langle f | e^{i\vec{k}\vec{R}_n} | i \rangle \right|^2 = \sum_f \int \{d\vec{R}\} \Phi_f^* (\{\vec{R}\}) e^{i\vec{k}\vec{R}} \Phi_f (\{\vec{R}\}) \int \{d\vec{R}\} \Phi_i^* (\{\vec{R}_1\}) =$$

↓

волновая функция
всего кристалла (всего
набора ядер)

$$\sum_f \Phi_f^* (\{\vec{R}\}) \Phi_f (\{\vec{R}\}) = \left\{ \delta(\vec{R} - \vec{R}_1) \right\} - \text{условие полноты по всем координатам}$$

$$= \int \{d\vec{R}\} e^{i\vec{k}\vec{R}} \Phi_i (\{\vec{R}\}) \int \{d\vec{R}_1\} \left\{ \delta(\vec{R} - \vec{R}_1) \right\} e^{i\vec{k}\vec{R}_1} \Phi_i^* (\{\vec{R}_1\}) =$$

каждое слагаемое в этой

$$\int \{d\vec{R}\} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \Phi_i^* (\{\vec{R}\}) = \int \{d\vec{R}\} \left| \Phi_i (\{\vec{R}\}) \right|^2 = 1 \Rightarrow$$

сумме есть вероятность перехода $i \rightarrow f$ под воздействием экспоненты.

$$\text{В общем случае вероятность перехода равна } W_{i \rightarrow f} = \left| \langle f | e^{i\vec{k}\vec{R}_n} | i \rangle \right|^2.$$

Вероятность реализации чисто ядерного процесса (фотон испускается ядром, а с кристаллом ничего не происходит, то есть кристалл реагирует на изменение импульса (на $\pm \hbar \vec{K}$) как целое)

$$W_0(\vec{k}) \equiv \omega_{i \rightarrow i} = \left| \langle i | e^{i\vec{k}\vec{R}_n} | i \rangle \right|^2; \widehat{R}_n = \vec{n} + \widehat{U}_n$$

$$\left\langle i \left| e^{i\vec{k}(\vec{n} + \widehat{U}_n)} \right| i \right\rangle \equiv \left\langle \{n\} \left| e^{i\vec{k}\vec{n}} e^{i\vec{k}\widehat{U}_n} \right| \{n\} \right\rangle = e^{i\vec{k}\vec{n}} \left\langle \{n\} \left| e^{i\vec{k} \sum_{\xi} \widehat{u}_{n\xi}} \right| \{n\} \right\rangle ==$$

$$\widehat{u}_n = \sum_{\xi} \widehat{u}_{n\xi}$$

$$\widehat{u}_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}}} \left(\vec{l}_{\xi} e^{i\vec{f}\vec{n} - i\omega_{\xi}t} \widehat{b}_{\xi} + \widehat{b}_{\xi} e^{-i\vec{f}\vec{n} + i\omega_{\xi}t} \vec{l}_{\xi}^* \right)$$

$$\left(\begin{array}{l} e^{\widehat{A}} \cdot e^{\widehat{B}}, \text{ если } [\widehat{A}\widehat{B}] = 0 \\ e^{\widehat{A} + \widehat{B}} = \begin{cases} e^{\widehat{A}} \cdot e^{\widehat{B}} \cdot e^{\frac{1}{2}[\widehat{A}\widehat{B}]} , \text{ если } [\widehat{A}\widehat{B}] = C(\text{число}) \\ \text{беск. ряд} \dots, \text{ если } [\widehat{A}\widehat{B}] = \widehat{C}(\text{оператор}) \end{cases} \end{array} \right)$$

Убедимся в том, что $\left[\widehat{u}_{n\xi}, \widehat{u}_{n\xi_1} \right]_{\xi \neq \xi_1} = 0$ (самостоятельно)

$$W_0(\vec{k}) \equiv w_{i \rightarrow i} = \left| \left\langle i \left| e^{i\vec{k}\widehat{R}_n} \right| i \right\rangle \right|^2 \approx e^{-Z(E)}$$

$$Z(\vec{k}) = \frac{1}{3} k^2 \sum_{\xi} \overline{u_{n\xi}^2} = \frac{1}{3} k^2 \sum_{\xi} \frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}} \cdot 1 \cdot (2\overline{n_{\xi}} + 1) = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2M} \right) \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \left[\underbrace{\frac{1}{3N} \sum_{\xi} \delta(\omega - \omega_{\xi})}_{g(\omega)} \right] \frac{2\overline{n(\omega)} + 1}{\hbar\omega}$$

для одноатомного
кристалла

функция плотности,
она нормируется на 1

Получили новую величину

$$Z(\vec{k}) = R \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g(\omega) \frac{2\overline{n(\omega)} + 1}{\hbar\omega} - \text{ фактор Дебая-Уоллера (Валлера).}$$

Рассмотрим разные случаи:

$$1) T = 0 \Rightarrow \overline{n(\omega, 0)} = 0$$

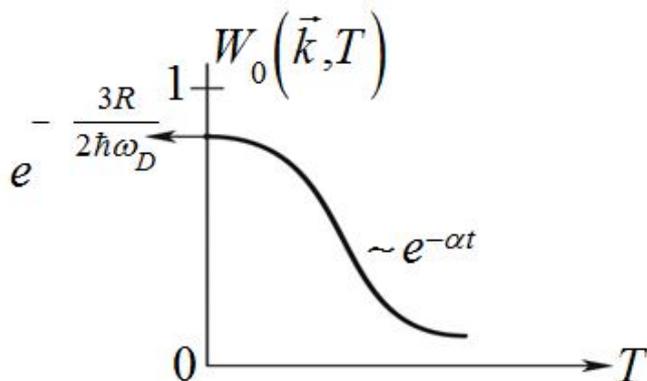
$$Z(\vec{k}, T = 0) = R \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g(\omega) \frac{0+1}{\hbar\omega} = R \frac{1}{\hbar} \left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle$$

для трехмерного случая.

$$\left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g(\omega) \frac{1}{\omega} \rightarrow \left\langle \frac{1}{\omega} \right\rangle_D = \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{3\omega^2}{\omega_D^3} \cdot \frac{1}{\omega} = \frac{3}{2} \frac{1}{\omega_D}$$

Таким образом,

$$Z(\vec{k}, T = 0) \approx \frac{3R}{2\hbar\omega_D} = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 k^2}{M\hbar\omega_D} = \frac{3}{4} \frac{E_k}{\hbar\omega_D M c^2}$$



$$1 = \sum_f w_{i \rightarrow f}$$

$$w_{i \rightarrow i} \equiv W_0 = 1 - \sum_{f \neq i} w_{i \rightarrow f} < 1$$

$$\Rightarrow \sum_{f \neq i} w_{i \rightarrow f} \neq 0 !$$

Единственная возможность – если ядро будучи «стукнутым» импульсом $\hbar \vec{k}$, родит фонон. Тогда произойдет неупругий процесс в кристалле: начальное и конечное состояния не будут совпадать ($f \neq i$)

$$W_{исп} \sim N + 1$$

$$W_{пол} \sim N$$

в роли N выступают «фононные» кванты, у нас

$T=0 \Rightarrow N=0$, остается только возможность испускания.

Чтобы упростить наблюдение, необходимо $W_0 \rightarrow 1$, т.е.

$$\frac{3R}{2\hbar\omega_D} \rightarrow 0 \Rightarrow \begin{cases} 1) E_\gamma \rightarrow 0 \\ 2) M \rightarrow \infty \\ 3) \omega_D \rightarrow \infty \end{cases} \quad \text{-- жесткие кристаллы.}$$

$$2) T \sim 0 \text{ (мало, но } \neq 0)$$

$$2\bar{n}(\omega, T \sim 0) + 1 \approx 2 \frac{kT}{\hbar\omega}$$

$$Z(\vec{k}, T \sim 0) \approx R \frac{2kT}{\hbar^2} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g(\omega) \frac{1}{\omega^2} = R \frac{2kT}{\hbar^2} \left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle$$

$$\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle \rightarrow \left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle_D = \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{3\omega^2}{\omega_D^3} \frac{1}{\omega^2} = \frac{3}{\omega_D^3}$$

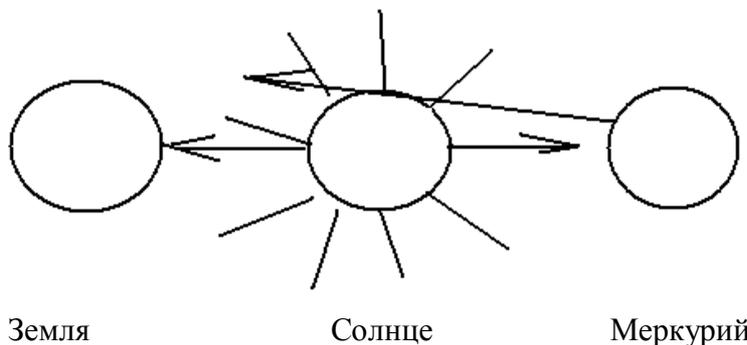
$$Z(\vec{k}, T \sim 0) \sim \frac{2kTR}{\hbar^2 \omega_D^2} \cdot 3 \equiv \alpha T$$

(\uparrow обозначили).

$T \neq 0 \rightarrow N \neq 0$ - «упругая» вероятность уменьшается.

$$W_0 = 1 - \sum_{i \neq f} w_{i \rightarrow f}$$

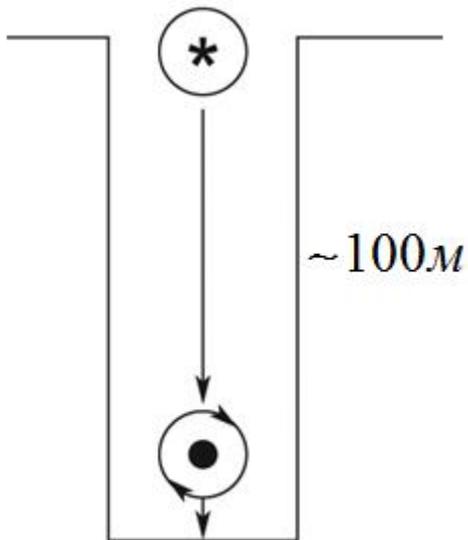
Красное смещение частоты фотонов в неоднородном гравитационном поле



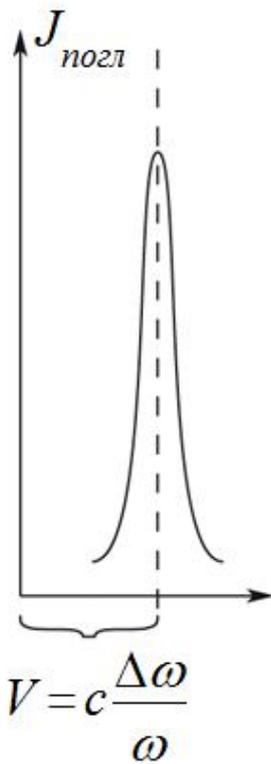
Отраженный фотон, попавший на Землю, пролетает через гравитационное поле Солнца.

Опыт

Авторы опыта Паунд, Репка



кристалл:
ядра в основном состоянии



$$V = c \frac{\Delta\omega}{\omega}$$

$$v = c \frac{\Delta\omega}{\omega} \text{ - неизвестно}$$

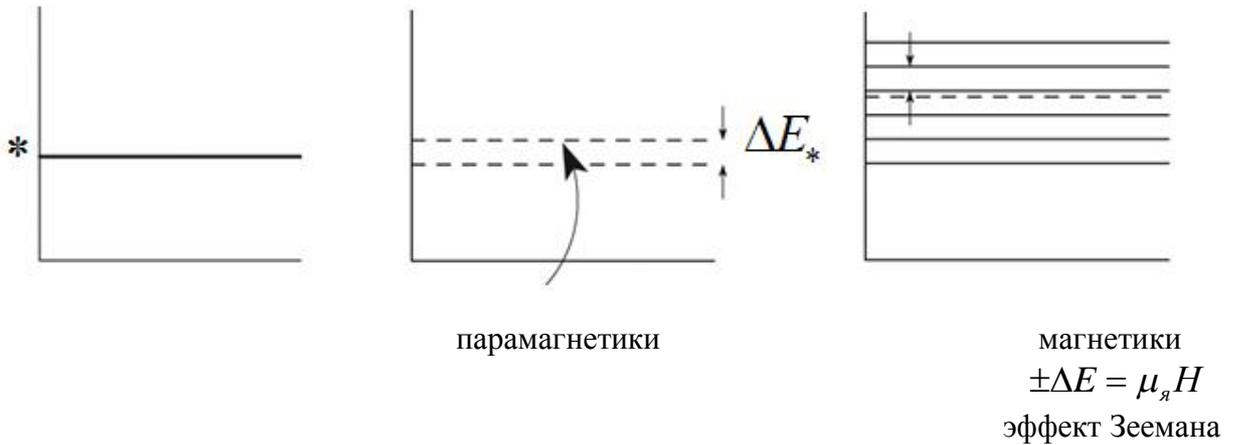
Совпадение результата с результатом общей теории относительности ~ 99,9%

Если фотон при «падении» изменит свою частоту, он уже не поглотится. Этого можно добиться сдвигая кристалл-поглотитель.

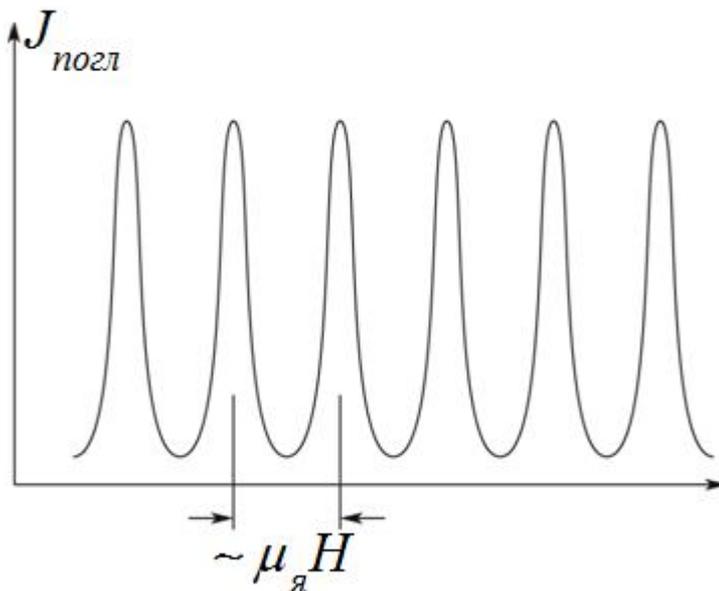
Волновая функция электронов в центрально-симметричном поле при $r \rightarrow 0 \sim r^l$, l - азимутальное квантовое число. Таким образом, у электронов с $l \neq 0$ вероятность попасть на ядро ничтожна. Только у s -электронов волновая функция в нуле остается конечной.
 \Rightarrow наблюдается зависимость от «окружения» ядра: если ядро в металле, то роль s -электрона может сыграть электрон проводимости (распределение Ферми), тогда ядро изменит свою частоту (химический сдвиг)

$$Fe^{57} \rightarrow I = \frac{5}{2}$$

Ферромагнитные свойства



Остается неизвестным только H - напряженность магнитного поля на ядре
 $H \sim 10^8$ Гаусс (эрстед)

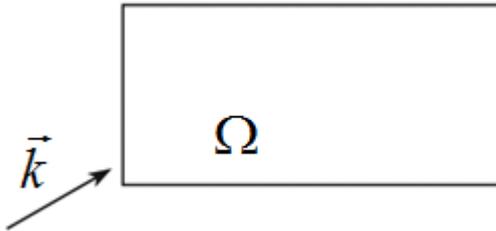


При нагревании такая структура \rightarrow теряется и эффект Мессбауэра появляется, как обычно, в «размазанной» области.

Лекция 12-я .

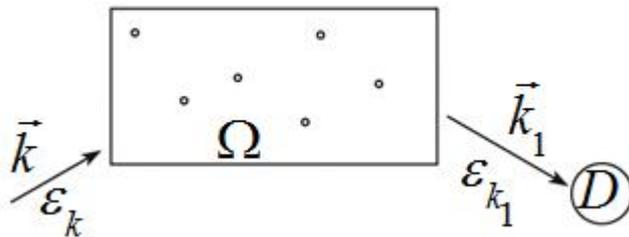
Рассеяние внешнего излучения на колеблющемся кристалле. Вероятность рассеяния в приближении тонкого кристалла.

Рассеяние тепловых нейтронов на кристалле



Нейтронная волна, влетевшая внутрь кристалла будет взаимодействовать только с ядрами (e^- - слишком легкие).

Размер атома $\sim 10^8$ см, размер ядра $\sim 10^{-13}$ см, таким образом, вероятность рассеяться очень мала, а основное пространство для нейтрона – вакуум.



Считаем, что рассеяние однократно (всегда). Для этого необходимо $\frac{I'}{I} \ll 1$

приближение тонкого кристалла

I' - интенсивность рассеянных нейтронов (по сути броуновское приближение)
 I - интенсивность налетающих нейтронов

Золотое правило квантовой механики (Ферми)

$$W_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| M_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}} \right|^2 \delta(E_i + \epsilon_k - E_f - \epsilon_{k_1})$$

i, f - начальное и конечное состояния кристалла как целого

$$M_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}} = \left\langle f \left| \int d\vec{r} \Psi_{\vec{k}_1}^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \right| i \right\rangle =$$

нейтрон взаимодействует со всеми ядрами

$$U(\vec{r}) = \sum_n U_n(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Если ядра тождественны, то вся разница между ядрами только в их пространственном положении (т.е. зависимость от n только в \vec{R}_n). В природе изотопы! К тому же ядра обладают спинами \Rightarrow взаимодействуют между собой.

Два фактора: изотопический состав + магнитное взаимодействие.

В разных узлах ядра могут по-разному воздействовать \Rightarrow зависимость от n не только в \vec{R}_n , но и в амплитуде.

$$= \left\langle f \left| \int d\vec{r} \frac{e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \sum_n U_n(\vec{r} - \vec{R}_n) \frac{e^{-i\vec{k} \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \right| i \right\rangle$$

пусть

$$\Psi_{\vec{k}} = \frac{e^{i\vec{k} \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}}; \Psi_{\vec{k}_1} = \frac{e^{i\vec{k}_1 \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}}; \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_1$$

$$M_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}} = \left\langle f \left| \sum_n e^{i\vec{q} \vec{R}_n} \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r}_1 e^{i\vec{q} \vec{r}_1} U_n(\vec{r}_1) \right| i \right\rangle \quad \left\{ \begin{array}{l} \Phi(\vec{r}) = \sum_q \Phi(\vec{q}) e^{i\vec{q} \vec{r}} \\ \Phi(\vec{q}) = \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} e^{-i\vec{q} \vec{r}} \Phi(\vec{r}) \end{array} \right.$$

$$M_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}} = \left\langle f \left| \sum_n U_n(-\vec{q}) e^{i\vec{q} \vec{R}_n} \right| i \right\rangle$$

$$W_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left\langle f \left| \sum_n u_n(-\vec{q}) e^{i\vec{q} \widehat{R}_n} \right| i \right\rangle \left\langle i \left| \sum_{n_1} U_{n_1}(-\vec{q}) e^{i\vec{q} \widehat{R}_{n_1}} \right| f \right\rangle \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_i + \varepsilon_k - E_f - \varepsilon_{k_1})t}$$

$$W_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_n \sum_{n_1} U_n(-\vec{q}) U_{n_1}(\vec{q}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} e^{\frac{i}{\hbar} E_f t} \left\langle i \left| e^{-i\vec{q} \widehat{R}_{n_1}} \right| f \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_f t} \left\langle f \left| e^{i\vec{q} \widehat{R}_n} \right| i \right\rangle$$

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_1$$

$$\hbar\omega = \varepsilon_k - \varepsilon_{k_1}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} E_f t} \langle i | = \left\langle i \left| e^{\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t}; e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t} \right| f \right\rangle = \left| f \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_f t}$$

E_i - собственное значение \widehat{H} в состоянии $|i\rangle$, E_f - в состоянии $|f\rangle$

таким образом получим:

$$\left\langle i \left| \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t} e^{-i\vec{q} \widehat{R}_{n_1}} e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t}}_{e^{-i\vec{q} \widehat{R}_{n_1}(t)}} \right| f \right\rangle \left\langle f \left| e^{i\vec{q} \widehat{R}_n} \right| i \right\rangle$$

$\exp\{\text{оператор}\} = \text{беск. ряд} \rightarrow$

\uparrow «собрали обратно» \nwarrow получили гайзенберговское представление оператора

оператор в гайзенберговском представлении $\widehat{R}_{n_1}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t} \widehat{R}_{n_1} e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t}$, тогда $e^{i\vec{q} \widehat{R}_n} = \widehat{R}_n(0)$

Вероятность рассеяния волны

$$W_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{n_0} \sum_{n_1} U_{n_0}(-\vec{q}) U_{n_1}(\vec{q}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \sum_f \left\langle i \left| e^{-i\vec{q} \widehat{R}_{n_1}(t)} \right| f \right\rangle \left\langle f \left| e^{i\vec{q} \widehat{R}_n(0)} \right| i \right\rangle$$

$W_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}}$ просуммируем по всем возможным конечным состояниям, однако, тогда и i -ое

состояние «теряется»; усредним по начальным состояниям:

$$\sum_i w_i \sum_f W_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_n \sum_{n_1} U_n(-\vec{q}) U_{n_1}(\vec{q}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sum_i w_i \sum_f \left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\widehat{R}_n(t)} \right| f \right\rangle \left\langle f \left| e^{i\vec{q}\widehat{R}_n(0)} \right| i \right\rangle$$

$$w_i = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_i}{kT}} \quad - \text{распределение Гиббса}$$

$$W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1} = \sum_i w_i \sum_f W_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}}$$

Учтем, что $\sum_f \widehat{A}_{if} \widehat{B}_{fi} = (\widehat{A}\widehat{B})_{ii}$ (это доказывается «вставлением» между A_{if} и B_{fi}

$$1 = \sum_n |n\rangle \langle n|$$

(«полный набор»)

$$\sum_f \left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\widehat{R}_n(t)} \right| f \right\rangle \left\langle f \left| e^{i\vec{q}\widehat{R}_n(0)} \right| i \right\rangle = \left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\widehat{R}_n(t)} e^{i\vec{q}\widehat{R}_n(0)} \right| i \right\rangle$$

$$\frac{1}{Z} e^{-\frac{E_i}{kT}} \langle i | \dots | i \rangle = \left\langle i \left| \underbrace{e^{-\frac{\widehat{H}}{kT}}}_{\widehat{\rho}} \dots \right| i \right\rangle$$

матрица плотности

$$\underbrace{\sum_i \left\langle i \left| \widehat{\rho} e^{-i\vec{q}\widehat{R}_n(t)} e^{i\vec{q}\widehat{R}_n(0)} \right| i \right\rangle}_{Sp(\widehat{\rho} \dots)} = \left\langle \left\langle e^{-i\vec{q}\widehat{R}_n(t)} e^{i\vec{q}\widehat{R}_n(0)} \right\rangle \right\rangle$$

корреляционная функция ядер

$$\overline{W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1}} = \sum_i w_i \sum_f \overline{W_{\substack{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1 \\ i \rightarrow f}}} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_n \sum_{n_1} \overline{U_n(-\vec{q}) U_{n_1}(\vec{q})} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \dots \rangle$$

$$U_n = \overline{U} + (\Delta U_n)$$

$$\overline{U_n} = \overline{U}$$

$$\text{т.к. } \overline{(\Delta U_n)} = 0$$

$$\begin{aligned} \overline{U_n(-\vec{q}) U_{n_1}(\vec{q})} &= \overline{(\overline{U}(\vec{q}) + (\Delta U_{n_1}(\vec{q}))) (\overline{U}(-\vec{q}) + (\Delta U_n(-\vec{q})))} = \\ &= \overline{|\overline{U}(\vec{q})|^2} + 0 + 0 + \overline{(\Delta U_{n_1}(\vec{q})) (\Delta U_n(-\vec{q}))} \end{aligned}$$

если $n \neq n_1$, то среднее от произведения равно произведению средних и равно 0, т.е. остается только $n = n_1$

$$\overline{U_{n_1}(\vec{q})U_n(-\vec{q})} = \overline{U(\vec{q})}^2 + \delta_{nn_1} \overline{|\Delta U_n(\vec{q})|^2} - \text{среднеквадратичная флуктуация} \neq 0$$

$$W(\vec{q}, \omega) \equiv \overline{W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1}} = \sum_i w_i \sum_f \overline{W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1}} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{n, n_1} \left[\overline{U(\vec{q})}^2 + \delta_{nn_1} \overline{|\Delta U_n(\vec{q})|^2} \right] *$$

$$* \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \left\langle \left\langle e^{-i\vec{q}\widehat{R}_{n_1}(t)} e^{i\vec{q}\widehat{R}_n(0)} \right\rangle \right\rangle$$

диагональный матричный элемент

$$\left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\widehat{R}_{n_1}(t)} e^{i\vec{q}\widehat{R}_n(0)} \right| i \right\rangle = e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)} \left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\widehat{u}_{n_1}(t)} e^{i\vec{q}\widehat{u}_n(0)} \right| i \right\rangle =$$

$$\vec{R}_n = \vec{n} + \widehat{u}_n \quad (\text{ниже будем считать для простоты, что кристалл одноатомный})$$

↑
содержит \sqrt{N} в знаменателе

$$= e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)} \left\langle i \left| \prod_{\xi_1} e^{-i\vec{q}\widehat{u}_{n_1\xi_1}(t)} \prod_{\xi} e^{i\vec{q}\widehat{u}_{n\xi}(0)} \right| i \right\rangle \approx \quad \text{в каждой экспоненте показатель является}$$

макроскопически малым, поэтому можно
разложить в ряд:

$$\approx e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)} \prod_{\xi_1} \prod_{\xi} \left\langle i \left| \left(1 - i\vec{q}\widehat{u}_{n_1\xi_1}(t) - \frac{1}{2}(\vec{q}\widehat{u}_{n_1\xi_1}(t))^2 + \dots \right) \left(1 + i\vec{q}\widehat{u}_{n\xi}(0) - \frac{1}{2}(\vec{q}\widehat{u}_{n\xi}(0))^2 + \dots \right) \right| i \right\rangle \approx$$

$$\approx e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)} \prod_{\xi_1} \prod_{\xi} \left\{ 1 - iq^\alpha \left\langle i \left| \widehat{u}_{n_1\xi_1}^\alpha(t) \right| i \right\rangle + iq^\alpha \left\langle i \left| \widehat{u}_{n\xi}^\alpha(0) \right| i \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle i \left| (\widehat{qu}_{n_1\xi_1}^\alpha(t))^2 \right| i \right\rangle - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2} \left\langle i \left| (\widehat{qu}_{n\xi}^\alpha(0))^2 \right| i \right\rangle + \underbrace{\left\langle i \left| (\widehat{qu}_{n_1\xi_1}(t)) (\widehat{qu}_{n\xi}(0)) \right| i \right\rangle}_{D_{n_1\xi_1, n\xi}(t)} + \dots \right\} =$$

слагаемые выше второй степени по \vec{u} не учитываем

$$\left\langle i \left| (\widehat{qu}_{n\xi}^\alpha(0))^2 \right| i \right\rangle = q^\alpha q^\beta \left\langle i \left| \widehat{u}_{n\xi}^\alpha(0) \widehat{u}_{n\xi}^\beta(0) \right| i \right\rangle = q^\alpha q^\beta \delta^{\alpha\beta} \underbrace{\left\langle i \left| (\widehat{u}_{n\xi}^\alpha(0))^2 \right| i \right\rangle}_{\parallel} = \frac{1}{3} q^2 \underbrace{\left\langle \widehat{u}_{n\xi}^2(0) \right\rangle}_{Z_\xi(\vec{q})}$$

$$\frac{1}{3} \left\langle i \left| \widehat{u}_{n\xi}^2(0) \right| i \right\rangle = \frac{1}{3} \left\langle \widehat{u}_{n\xi}^2(0) \right\rangle$$

предполагаем, что кристалл кубический

$$\left\langle i \left| \left(\widehat{q} \widehat{u}_{n_1 \xi_1}(t) \right)^2 \right| i \right\rangle = q^\alpha q^\beta \left\langle i \left| \widehat{u}_{n_1 \xi_1}^\alpha(t) \widehat{u}_{n_1 \xi_1}^\beta(t) \right| i \right\rangle \equiv \frac{q^2}{3} \left\langle \widehat{u}_{n_1 \xi_1}^2(0) \right\rangle = z_{\xi_1}(\vec{q})$$

$$\begin{aligned} \left\langle i \left| \widehat{A}(t) \widehat{B}(t) \right| i \right\rangle &\equiv \left\langle i \left| \widehat{A}(0) \widehat{B}(0) \right| i \right\rangle \\ &= e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} \prod_{\xi_1} \prod_{\xi} \left\{ 1 - \frac{z_{\xi_1}(\vec{q})}{2} - \frac{z_{\xi}(\vec{q})}{2} + D_{n_1 \xi_1, n \xi}(t) + \dots \right\} \approx \\ &\approx e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} \left\{ 1 - \frac{1}{2} z_{\xi}(\vec{q}) - \frac{1}{2} \sum_{\xi_1} z_{\xi_1}(\vec{q}) + \sum_{\xi_1} \sum_{\xi} D_{n_1 \xi_1, n \xi}(t) + \dots \right\} = \\ &= e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} \left\{ 1 - Z(\vec{q}) + D_{n_1 n}(t) + \dots \right\} \approx e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} \underbrace{\left(1 - Z(\vec{q}) \right)}_{e^{-Z(\vec{q})}} \left(1 + D_{n_1 n}(t) \right) \approx \\ &\approx e^{-Z(\vec{q})} e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} \left(1 + D_{n_1 n}(t) \right) \end{aligned}$$

Таким образом, вероятность приобретает вид:

$$W(\vec{q}, \omega) \equiv \frac{1}{\hbar^2} \sum_{m_1} \left[\left| \overline{U}(\vec{q}) \right|^2 + \delta_{m_1} \left| \overline{\Delta U}_n(\vec{q}) \right|^2 \right] \cdot e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} e^{-Z(\vec{q})} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} (1 + D_{n_1 n}(t))}_{\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \cdot 1 + \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} D_{n_1 n}(t)}$$

$\parallel \qquad \parallel$
 $2\pi\delta(\omega) \quad D_{n_1 n}(\omega)$ - это

Фурье-образы.

$$\boxed{W(\vec{q}, \omega) \approx \frac{1}{\hbar^2} \sum_{m_1} \left[\left| \overline{U}(\vec{q}) \right|^2 + \delta_{m_1} \left| \overline{\Delta U}_n(\vec{q}) \right|^2 \right] \cdot e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} \left[2\pi\delta(\omega) + D_{n_1 n}(\omega) \right]}$$

Наличие $\delta(\omega)$ означает, что ω дает вклад только, если $\hbar\omega = \varepsilon_k - \varepsilon_{k_1} = 0 \Rightarrow \varepsilon_k = \varepsilon_{k_1}$ (состояние не изменилось) \Rightarrow слагаемое $2\pi\delta(\omega)$ отвечает упругому рассеянию.

$$W_{\text{упр}}(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k_1}) \left| \overline{U}(\vec{q}) \right|^2 e^{-Z(\vec{q})} \sum_{n, n_1} e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} + \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k_1}) e^{-Z(\vec{q})} \cdot$$

$$\cdot \sum_n \left| \overline{\Delta U}_n(\vec{q}) \right|^2 \cdot 1$$

$$\sum_{n, n_1} e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} = \sum_n \underbrace{1 \left(\sum_{\bar{n}'} e^{i\vec{q}\bar{n}'} \right)}_N = N^2 \delta_{\vec{q}, \vec{0}}$$

$$\vec{n} - \vec{n}_1 \equiv \vec{n}'$$

при больших \vec{q} экспонента сильно осциллирует и сумма $\rightarrow 0$;

экспонента

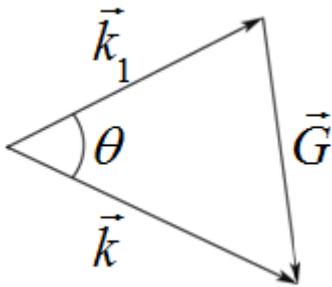
не успевает много раз проосциллировать при $\vec{q} = 0$ (но это нам не интересно: $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_1 = 0 \rightarrow \vec{k} = \vec{k}_1$ ничего не случилось), либо при $\vec{q} = \vec{G}$ (вектор обратной решетки)

$$W_{\text{впр}}^k(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k_1}) \underbrace{|N\bar{U}(\vec{q})|^2}_{\text{значение, отнесенное к одной элементарной ячейке}} e^{-Z(\vec{q})} \delta_{\vec{q}, \vec{G}} - \text{слагаемое отвечает когерентному}$$

рассеянию

значение, отнесенное к одной элементарной ячейке

$$\begin{cases} \varepsilon_k = \varepsilon_{k_1} \rightarrow k^2 = k_1^2 \\ \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_1 = \vec{G} \end{cases}$$



$$\left. \begin{aligned} \frac{G/2}{k} &= \sin \frac{\Theta}{2} \\ G &= \frac{2\pi}{a} \cdot m \\ k &= \frac{2\pi}{\lambda} \end{aligned} \right\}$$

(рассеяние Брегга-Вульфа)

$$\frac{(\pi/a) \cdot m}{\lambda} = \sin \frac{\Theta}{2}$$

$$\boxed{\frac{(\lambda/2)}{a} \cdot m = \sin \frac{\Theta}{2}}$$

получили условие интерференции на дифракционной решетке периода a

Лекция 13.

Упругое и неупругое когерентное рассеяние. Восстановление фононного спектра кристаллов по результатам неупругого однофононного рассеяния нейтронов. Времена жизни фононов.

Когерентное рассеяние:

В каждом акте рассеяния на атоме нейтронная волна рассеивается в одну и ту же фазу (решетка рассеивает как целое)

$\vec{k}'_1 = \vec{k} - \vec{G}$ возведем в квадрат :

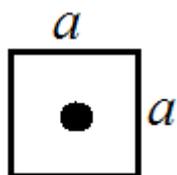
$$k'^2_1 = k^2 - 2(\vec{k}\vec{G}) + G^2$$

$$\vec{G}(\vec{k} - \frac{\vec{G}}{2}) = 0 \quad \text{эквивалентное условие}$$

(Условие рассеяния Брэгга-Вульфа)

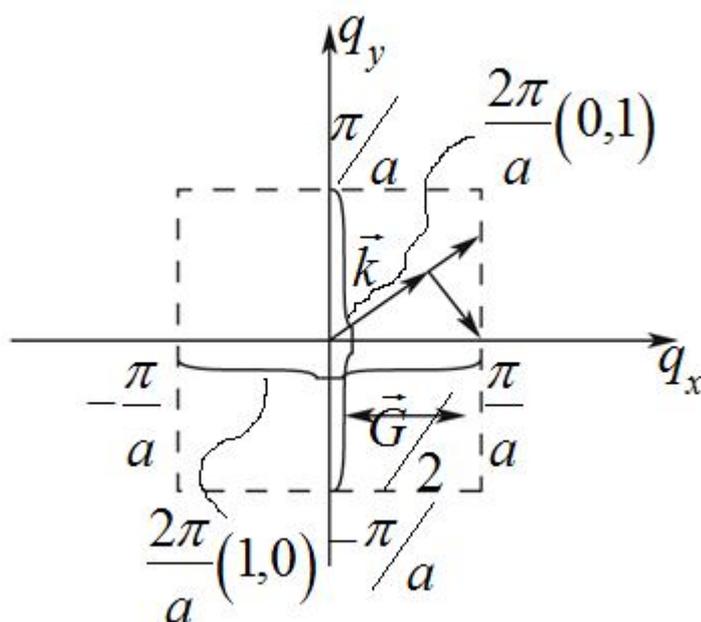
$$\vec{G} = 2\pi(\vec{b}_1 m_1 + \vec{b}_2 m_2 + \vec{b}_3 m_3) \quad , \text{ где } \vec{b}_i - \text{ базисные вектора обратной решетки}$$

(обозначения связаны с \vec{a}_i), m_i - целые числа

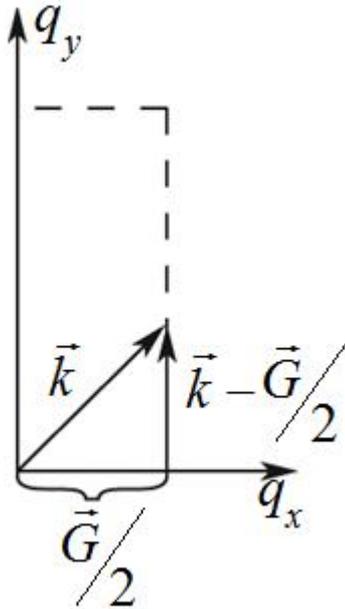


$$\vec{G} = 2\pi(\frac{m_1}{a}; \frac{m_2}{a})$$

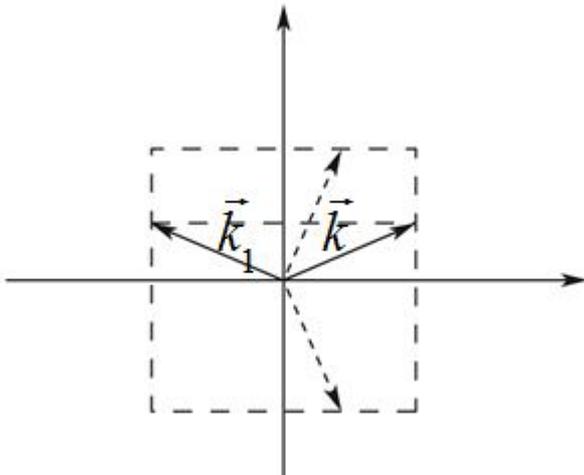
Чтобы $(\vec{k} - \frac{\vec{G}}{2})$ был $\perp \vec{G}$, нужно, чтобы \vec{k} точно попадал в сторону квадрата.



При вращении решетки вектор \vec{k} «уходит» в сторону, рассеяние «исчезает». При повороте на 2π вектор \vec{k} попадает на «стенку» 8 раз.



Когерентное рассеяние имеет пиковый характер; по измерению углов пиков рассеяния находят \vec{G} и, тем самым появляется возможность восстановить структуру решетки.



Это справедливо и для рассеяния рентгеновских квантов.

$$W_{\text{упр}}^{k_2}(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k_1}) \sum_n \left| \overline{\Delta U_n(\vec{q})} \right|^2 e^{-Z(\vec{q})}$$

Вклад в некогерентное рассеяние дают все \vec{q} ; каждое ядро дает свой вклад независимо в меру своего отличия от среднего $(\Delta U_n(\vec{q}))$

Это фон; на этом фоне возникают пики упругого когерентного рассеяния.

$$W_{\text{неупр}}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{n, n_1} \left[\left| \overline{U(\vec{q})} \right|^2 + \delta_{nn_1} \left| \Delta U_n(\vec{q}) \right|^2 \right] e^{-Z(\vec{q})} e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)} D_{nn_1}(\omega)$$

↓

когерентное
слагаемое

↓

дает вклад только
в меру отличия n_1 от n
(некогерентная часть)

$$W_{\text{hy}}^{\kappa_2}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar^2} |\overline{U}(\vec{q})|^2 e^{-Z(\vec{q})} \sum_{n, n_1} e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{n}_1)} D_{n_1 n}(\omega)$$

$$D_{n_1 n}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} D_{n_1 n}(t)$$

$$D_{n_1 n}(t) \equiv \left\langle \left\langle \left(\widehat{q\vec{u}}_{n_1}(t) \right) \left(\widehat{q\vec{u}}_n(0) \right) \right\rangle \right\rangle = q^\alpha q^\beta \left\langle \left\langle \widehat{u}_{n_1}^\alpha(t) \widehat{u}_n^\beta(0) \right\rangle \right\rangle =$$

$$= q^\alpha q^\beta \left\langle \left\langle \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\xi_1} (l_{\xi_1}^\alpha e^{i\bar{f}_1 \bar{n}_1 - i\omega_{\xi_1} t} \hat{b}_{\xi_1} + l_{\xi_1}^{*\alpha} e^{-i\bar{f}_1 \bar{n}_1 + i\omega_{\xi_1} t} \hat{b}_{\xi_1}^+) \frac{1}{\sqrt{\omega_{\xi_1}}} \times \right. \right.$$

$$\left. \times \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\xi} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\xi}}} (l_{\xi}^\beta e^{i\bar{f} \bar{n}} \cdot 1 \cdot \hat{b}_{\xi} + l_{\xi}^{*\beta} e^{-i\bar{f} \bar{n}} \cdot 1 \cdot \hat{b}_{\xi}^+) \right\rangle \right\rangle$$

$$D_{n_1 n}(t) = q^\alpha q^\beta \left\{ l_{\xi_1}^{*\alpha} l_{\xi}^\beta e^{i(-\bar{f}_1 \bar{n}_1 + \bar{f} \bar{n})} e^{i\omega_{\xi_1} t} \left\langle \left\langle \hat{b}_{\xi_1}^+ \hat{b}_{\xi} \right\rangle \right\rangle + \right.$$

при раскрытии скобок возникает 4 слагаемых; при усреднении $b_{\xi_1} b_{\xi}$ и $b_{\xi_1}^+ b_{\xi}^+$ дают ноль, остаются только перекрестные слагаемые

$$+ l_{\xi_1}^\alpha l_{\xi}^{*\beta} e^{i(\bar{f}_1 \bar{n}_1 - \bar{f} \bar{n})} e^{-i\omega_{\xi_1} t} \left\langle \left\langle \hat{b}_{\xi_1} \hat{b}_{\xi}^+ \right\rangle \right\rangle \left. \right\}$$

Если индексы разные, то среднее от произведения есть произведение средних, тогда это ноль.

Т.е. вклад дают только $\xi = \xi_1$

$$\left\langle \left\langle \hat{b}_{\xi_1} \hat{b}_{\xi}^+ \right\rangle \right\rangle = \delta_{\xi_1 \xi} (\bar{n}_{\xi} + 1)$$

$$\left\langle \left\langle \hat{b}_{\xi_1}^+ \hat{b}_{\xi} \right\rangle \right\rangle = \delta_{\xi_1 \xi} \bar{n}_{\xi}$$

$$D_{n_1 n}(t) = q^\alpha q^\beta \sum_{\xi} \left\{ l_{\xi_1}^{*\alpha} l_{\xi}^\beta e^{i(-\bar{n}_1 + \bar{n})\bar{f}} e^{i\omega_{\xi} t} \bar{n}_{\xi} + l_{\xi}^\alpha l_{\xi_1}^{*\beta} e^{i(\bar{n}_1 - \bar{n})\bar{f}} e^{-i\omega_{\xi} t} (\bar{n}_{\xi} + 1) \right\} \frac{\hbar}{2NM \omega_{\xi}}$$

$$D_{n_1 n}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} D_{n_1 n}(t) = \sum_{\xi} |\vec{q} l_{\xi}|^2 \frac{\hbar}{2NM \omega_{\xi}} \times$$

$$\times \left\{ e^{i\bar{f}(-\bar{n}_1 + \bar{n})} \bar{n}_{\xi} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{dt e^{i(\omega + \omega_{\xi})t}}_{2\pi\delta(\omega + \omega_{\xi})} + e^{i\bar{f}(\bar{n}_1 - \bar{n})} (\bar{n}_{\xi} + 1) \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{dt e^{i(\omega - \omega_{\xi})t}}_{2\pi\delta(\omega - \omega_{\xi})} \right\}$$

Таким образом,

$$W_{\text{нy}}^{\kappa_2}(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\bar{U}(\vec{q})|^2 e^{-Z(\vec{q})} \sum_{\xi} |\vec{q}l_{\xi}|^2 \frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}} \left\{ \bar{n}_{\xi} \delta(\omega + \omega_{\xi}) \left[\sum_{n, n_1} e^{i(\vec{q}+\vec{f})(\bar{n}-\bar{m})} \right] + \right. \\ \left. + (\bar{n}_{\xi} + 1) \delta(\omega - \omega_{\xi}) \left[\sum_{n, n_1} e^{i(\vec{q}-\vec{f})(\bar{n}-\bar{m})} \right] \right\}$$

$$\vec{n} - \vec{n}_1 \equiv \vec{n}'$$

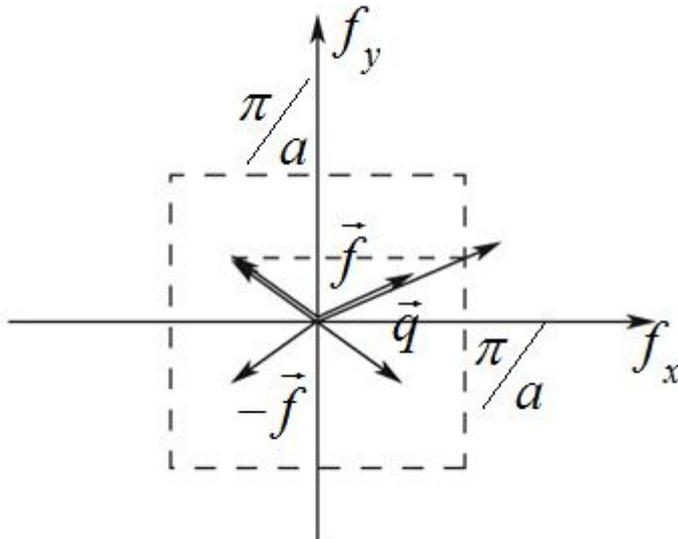
$$\sum_{\vec{n}, \vec{n}_1} e^{i(\vec{q}+\vec{f})\vec{n}'} = N^2 \delta_{\vec{q}+\vec{f}, \vec{G}} = N^2 \delta_{\vec{f}, \vec{G}-\vec{q}}$$

$$\sum_{\vec{n}, \vec{n}_1} e^{i(\vec{q}-\vec{f})\vec{n}'} = N^2 \delta_{\vec{q}-\vec{f}, \vec{G}} = N^2 \delta_{\vec{f}, \vec{q}-\vec{G}}$$

$$W_{\text{нy}}^{\kappa_2}(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\bar{U}(\vec{q})|^2 e^{-Z(\vec{q})} \sum_s \frac{\hbar N^2}{2NM} \left\{ \frac{\bar{n}(\omega_s(\vec{G}-\vec{q}))}{\omega_s(\vec{G}-\vec{q})} |\vec{q}l_s(\vec{G}-\vec{q})|^2 \delta(\omega + \omega_s(\vec{G}-\vec{q})) + \right. \\ \left. + \frac{\bar{n}(\omega_s(\vec{q}-\vec{G})) + 1}{\omega_s(\vec{q}-\vec{G})} |\vec{q}l_s(\vec{q}-\vec{G})|^2 \delta(\omega - \omega_s(\vec{q}-\vec{G})) \right\}$$

$\vec{q} - \vec{G}$ и $\vec{G} - \vec{q}$ будут равняться \vec{f} только в случае, когда они оказываются в первой ячейке обратной решетки (область однозначности \vec{f} ограничено одной ячейкой)

вектор \vec{q} - это тот импульс, который нейтрон передал кристаллу. Если \vec{q} «вылезает» за пределы одной ячейки, то нужно из него вычесть \vec{G} , чтобы «вернуть» \vec{q} внутрь; тогда уже приравнять $\vec{f} = \vec{q}$ (или $\vec{f} = -\vec{q}$). Если \vec{q} попадает в первую ячейку, $\vec{G} = 0 \Rightarrow$ в полученной формуле используется не произвольное \vec{G} , а они строго определяются вектором \vec{q} .



С другой стороны, все фотонные функции, зависящие от векторов периодические, и период можно «отбросить» (т.е. выкинуть \vec{G}).

Но тогда мы не получим значений функций от \vec{q} , не попавшего в ячейку (т.к. мы его не «вернули»).

$$\omega(\vec{G} - \vec{q}) \rightarrow \omega(-\vec{q}) = \omega(\vec{q}) \text{ в силу «четности»};$$

$$\vec{l}_s(\vec{G} - \vec{q}) \rightarrow \vec{l}_s(-\vec{q}) = \vec{l}_s^*(\vec{q}), \text{ но это уже не важно, т.к. у нас только квадрат модуля.}$$

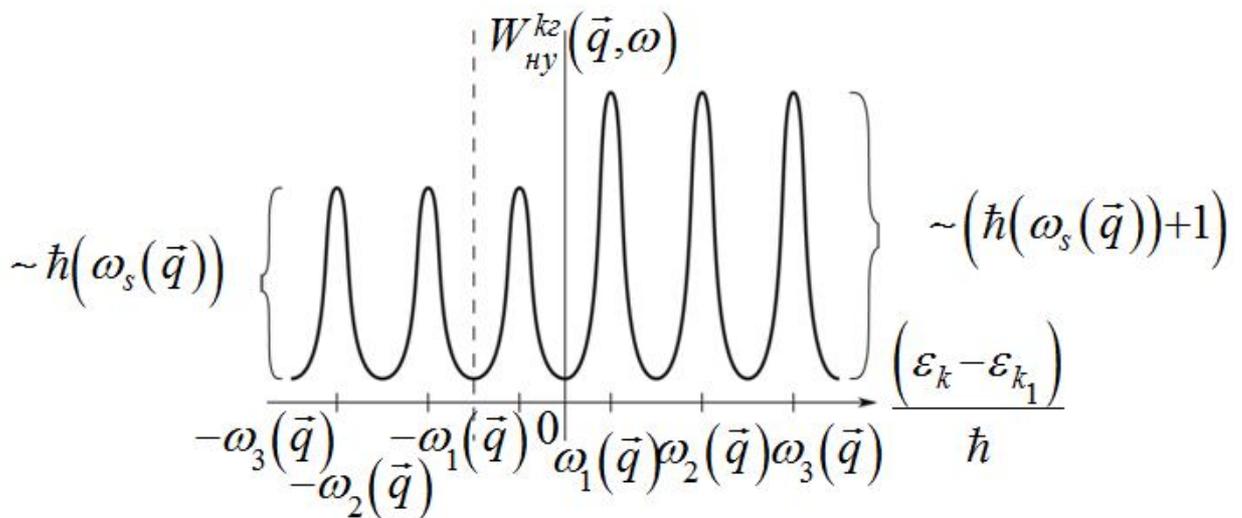
Получим:

$$W_{\text{нy}}^{kz}(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\overline{U}(\vec{q})|^2 e^{-Z(\vec{q})} \sum_s \frac{N}{2M\omega_s(\vec{q})} |\vec{q}\vec{l}_s(\vec{q})| \times$$

$$\times \left\{ \underbrace{\bar{n}(\omega_s(\vec{q})) \delta\left(\omega + \omega_s(\vec{q})\right)}_{\omega = \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_{k_1}}{\hbar} = -\omega_s(\vec{q})} + \underbrace{(\bar{n}(\omega_s(\vec{q})) + 1) \delta\left(\omega - \omega_s(\vec{q})\right)}_{\omega = \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_{k_1}}{\hbar} = \omega_s(\vec{q})} \right\}$$

$$\boxed{\varepsilon_k = \varepsilon_{k_1} - \hbar\omega_s(\vec{q})}$$

$$\boxed{\varepsilon_k = \varepsilon_{k_1} + \hbar\omega_s(\vec{q})}$$



Лекция 14.

Упругое и неупругое некогерентное рассеяние нейтронов. Восстановление функции плотности фононных частот. Уравнение состояния колеблющегося кристалла. Гамильтониан системы взаимодействующих магнитных моментов атомов в ферромагнетике. Преобразование гамильтониана к представлению с выделенной магнитным полем осью.

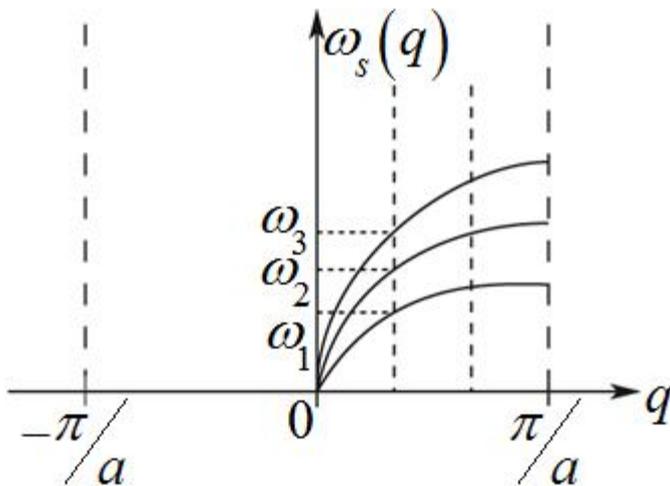
Рассматриваются только акустические ветви, в трехмерном кристалле их три.

$\varepsilon_k = \varepsilon_{k_1} + \hbar\omega_s(\vec{q})$ отвечает возбуждению (рождению фононов);

$\varepsilon_k = \varepsilon_{k_1} - \hbar\omega_s(\vec{q})$ - поглощению фонона

Если нейтрон и ядро встречаются в фазе, фонон рождается, если в противофазе – поглощается.

\bar{n} - планковское распределение; при $T = 0; n = 0$ левые пики исчезают; тогда возможно только рождение фонона (однофононные процессы).



Таким образом, изменяя \vec{q} поворотом детектора (при повороте меняется \vec{k}_1) можно получить фононный спектр. Мы заменили δ -функции лоренцевскими пиками (добавили к \downarrow мнимую добавку):

$$e^{-i\omega_\xi t} \xrightarrow{\omega_\xi + i\Delta\omega_\xi} e^{-i\omega_\xi t} e^{\Delta\omega_\xi t} \quad \Delta\omega_\xi = -|\Delta\omega_\xi|$$

видно, что фононы живут конечное время $\sim \frac{1}{|\Delta\omega_\xi|}$ (наблюдается затухание в меру $\Delta\omega_\xi$,

т.е. в меру ширины пиков)

Нейтроны должны быть тепловыми, энергия $n \sim kT \sim \hbar\omega \Rightarrow$ изменение энергии нейтрона при рождении фонона существенно (ощутимо). Для рентгеновских квантов можно было бы получить такое же упругое рассеяние, но для кванта

$\hbar\omega_k \sim 10 \text{кэВ}; \hbar\omega_\xi \sim 10^{-2} \text{эВ}$, и изменение его энергии отследить невозможно.

Таким образом, нужны тепловые нейтроны (с невысокой энергией).

Если $|k| < \left| \frac{G}{2} \right|$, то рассеяние не произойдет, т.к. \vec{k} никогда не попадет на «стенку». То есть

энергия нейтронов не должна быть слишком малой, холодные нейтроны нам не подходят; их отсеивают, пропуская пучок через поликристалл.

$$W_{\text{ну}}^{\text{HKZ}}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_n \overline{|\Delta U_n(\vec{q})|^2} e^{-Z(\vec{q})} \cdot 1 \cdot D_m(\omega);$$

$$D_m(\omega) = q^\alpha q^\beta \sum_\xi \frac{\hbar}{2NM\omega_\xi} \underbrace{(l_\xi^\alpha l_\xi^{*\beta} \cdot 1 \cdot 2\pi\delta(\omega + \omega_\xi) \bar{n}_\xi + l_\xi^{*\alpha} l_\xi^\beta \cdot 1 \cdot 2\pi\delta(\omega - \omega_\xi) (\bar{n}_\xi + 1))}_{\gamma^{\alpha\beta/3}} =$$

в кубическом кристалле

$$\frac{q^2}{3} 2\pi \sum_\xi \frac{\hbar}{2NM\omega_\xi} \left[\bar{n}_\xi \delta(\omega + \omega_\xi) + (\bar{n}_\xi + 1) \delta(\omega - \omega_\xi) \right] =$$

$$= 2\pi q^2 \frac{\hbar}{2M} \int_0^{\omega_{\text{max}}} d\omega_1 \left[\underbrace{\frac{1}{3N} \sum_\xi \delta(\omega_1 - \omega_\xi)}_{\text{функция плотности}} \right] \frac{1}{\omega_1} \left[\bar{n}(\omega_1) \delta(\omega + \omega_1) + (\bar{n}(\omega_1) + 1) \delta(\omega - \omega_1) \right]$$

функция плотности
фононных колебаний $g(\omega)$

$$D_m(\omega) = 2\pi q^2 \frac{\hbar}{2M} \left\{ \frac{\bar{n}(-\omega)}{(-\omega)} g(\omega) + \frac{\bar{n}(-\omega) + 1}{\omega} g(\omega) \right\} = \quad g(-\omega) = g(\omega) \text{ из-}$$

за

четности функции

$$= 2\pi q^2 \frac{\hbar}{2M} \frac{g(\omega)}{\omega} \left\{ -\bar{n}(\omega) + \bar{n}(\omega) + 1 \right\}$$

$$-\bar{n}(-\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = \frac{+e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{-1 + e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}} = 1 + \bar{n}(\omega)$$

$$D_m(\omega) = 2\pi \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2M} \right) \frac{1}{\hbar\omega} 2(\bar{n}(\omega) + 1) g(\omega)$$

$$W_{\text{ну}}^{\text{HKZ}}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_n \overline{|\Delta U_n(\vec{q})|^2} e^{-Z(\vec{q})} \cdot 1 \cdot D_m(\omega) \sim g(\omega)!!!$$

таким образом, мы прямо в эксперименте получаем функцию плотности $g(\omega)$.

Уравнение состояния колеблющегося кристалла

Функциональная связь между объемом, давлением и температурой системы:

$$\Phi(V, p, T) = 0$$

учет u_0 принципиален, т.к. u_0 зависит от объема.

Для описания системы с заданным давлением необходима свободная энергия – функция объема и температуры.

$$F = \sum_\xi F_\xi \quad \xi - \text{полный перебор всех } (dgN) \text{ колебаний кристалла}$$

$$F_\xi = \varepsilon_\xi - TS_\xi$$

↓

средняя термодинамическая энергия одного осциллятора : $\bar{\varepsilon}_\xi = \hbar\omega_\xi \left(\bar{n}_\xi + \frac{1}{2} \right)$

$$S_\xi = -k \overline{\ln \omega_\xi} \quad , \quad \omega_\xi = \frac{1}{z_\xi} e^{\frac{\varepsilon_\xi}{kT}}$$

$$S_\xi = -k \left\{ \overline{\frac{\varepsilon_\xi}{kT} - \ln z_\xi} \right\} = \frac{\bar{\varepsilon}_\xi}{T} + k \overline{\ln z_\xi}$$

тогда $F_\xi = \bar{\varepsilon}_\xi - T \left\{ \frac{\bar{\varepsilon}_\xi}{T} + k \overline{\ln z_\xi} \right\} = -kT \overline{\ln z_\xi}$

$$z_\xi = \frac{e^{\frac{\hbar\omega_\xi}{2kT}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}}}$$

↓ среднее можно не писать, т.к. это есть константа.
(z_ξ не зависит от n_ξ - квантового числа, по которому производится усреднение)

$$F_\xi = \frac{\hbar\omega_\xi}{2} + kT \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}} \right)$$

↓ энергия нулевых колебаний

Парциальное давление, создаваемое ξ -м осциллятором

$$p_\xi = - \left. \frac{\partial F_\xi}{\partial V} \right|_T = \frac{\partial F_\xi}{\partial \omega_\xi} \left. \left(- \frac{\partial \omega_\xi}{\partial V} \right) \right|_T$$

зависимость от V «сидит» в ω_ξ

∇
0 с учетом минуса

$$\gamma_\xi = - \frac{V}{\omega_\xi} \frac{\partial \omega_\xi}{\partial V} = - \frac{\partial \ln \omega_\xi}{\partial \ln V} > 0!$$

$$p_\xi = \gamma_\xi \frac{\omega_\xi}{V} \frac{\partial F_\xi}{\partial \omega_\xi} = \frac{1}{V} \gamma_\xi \omega_\xi \left\{ \frac{\hbar}{2} + kT \frac{1}{\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}} \right)} \left(+ e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}} \right) \left(+ \frac{\hbar\omega_\xi}{kT} \right) \right\} =$$

$$= \frac{1}{V} \gamma_{\xi} \left\{ \frac{\hbar \omega_{\xi}}{2} + \hbar \omega_{\xi} \frac{e^{-\frac{\hbar \omega_{\xi}}{kT}}}{1 - e^{-\frac{\hbar \omega_{\xi}}{kT}}} \right\}$$

$$\frac{1}{\frac{\hbar \omega_{\xi}}{e^{kT} - 1}} = \bar{n}_{\xi}$$

$p_{\xi} = \frac{\gamma_{\xi}}{V} \bar{\varepsilon}_{\xi}$ суммируя по всем ξ найдем полное давление, создаваемое в кристалле за счет его колебаний

$$p_{\text{кол}} = \sum_{\xi} p_{\xi} = \frac{1}{V} \sum_{\xi} \gamma_{\xi} \bar{\varepsilon}_{\xi} \approx \frac{\gamma}{V} \sum_{\xi} \bar{\varepsilon}_{\xi} = \frac{\gamma}{V} \bar{E}$$

$\gamma_{\xi} \equiv \gamma$ приближение Грюнайзена

$$\boxed{p_{\text{кол}} V \approx \gamma \bar{E}}$$

$$\alpha_T = \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_p \equiv \frac{\partial(V, p)}{\partial(T, p)} = \frac{\left\| \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_p \quad \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_p \right\|}{\left\| \frac{\partial V}{\partial p} \Big|_T \quad \frac{\partial p}{\partial p} \Big|_T \right\|} = \frac{\partial(V, p) \partial(V, T)}{\partial(V, T) \partial(T, p)} = \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \frac{1}{\frac{\partial(T, p)}{\partial(V, T)}} = \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \frac{1}{-\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T}$$

$$\boxed{\alpha_T = \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V}{-\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T}}$$

коэффициент объемного расширения (через производные от давления)

$$p = p_0 + p_{\text{кол}}$$

$$p_0 = -\frac{\partial U_0}{\partial V}$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_T = 0 + \left(\frac{\partial p_{\text{кол}}}{\partial T} \right)_V \cong \frac{\partial}{\partial T} \Big|_V \frac{\gamma}{V} \bar{E} = \frac{\gamma}{V} \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \Big|_V = \frac{\gamma}{V} C_V$$

$$-\frac{\partial p}{\partial V} \Big|_T \approx -\frac{\partial p_0}{\partial V} + \bar{0}(\text{кол}) > 0!$$

обратная

$$\text{сжимаемость } \frac{1}{\chi_0}$$

$$\alpha_T \approx \frac{\frac{\gamma}{V} C_V}{1/\chi_0} \rightarrow \boxed{\frac{\alpha_T}{C_V} = \frac{\chi_0 \gamma}{V} = const} \quad \text{закон Грюнайзена}$$

(поведение коэффициента теплового расширения и теплоемкости одинаковое)

Здесь существенным является приближение Грюнайзена

Спиновые волны в ферромагнетиках

За счет чего у атома в кристаллической решетке появляется магнитный момент?

Спин незаполненной оболочки не полностью скомпенсирован. Однако, это неприменимо к валентным оболочкам, т.к. электроны валентных оболочек в кристалле обобществлены (размазаны по объему), распределены по состояниям, и у них все моменты скомпенсированы. Нам же необходим локальный магнитный момент, строго привязанный к конкретному атому. Нужны внутренние незаполненные оболочки.

Группа железа (Fe, Ni, Co) – 3d не заполнена

Редкоземельные металлы (Ru, Rh, Pd) – 4f

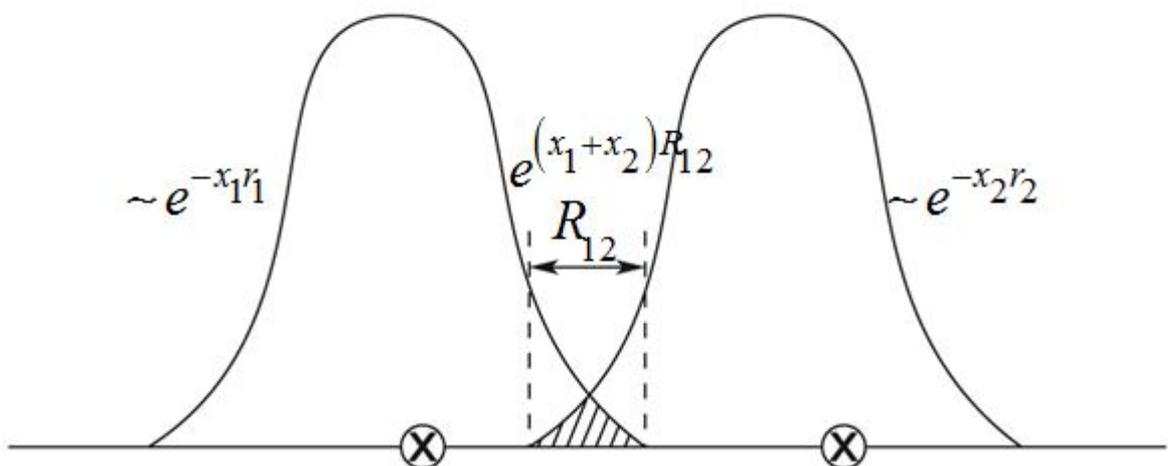
Что заставляет все моменты выстроиться || ?

$$U_{d-d} \sim \frac{M_d^2}{r^3}, \mu_a \sim \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \sim 10^{-20} \text{ эрг}\cdot\text{с}$$

$$r \sim 10^{-8} \text{ см}$$

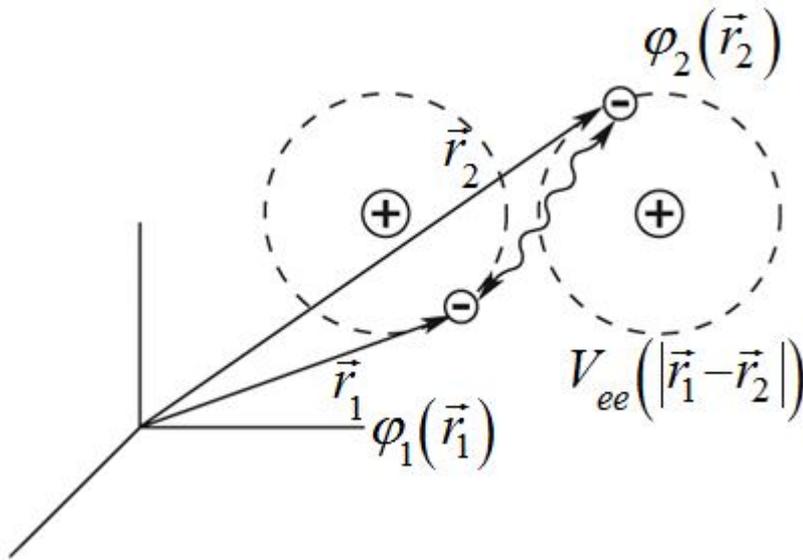
$$U_{d-d} \sim \frac{10^{-40}}{10^{-24}} \sim 10^{-16} \text{ эрг} \frac{1}{1,6 \cdot 10^{-12} \frac{\text{эрг}}{\text{eV}}} \sim 10^{-4} \text{ eV} \sim 1^\circ \text{ K}$$

$T_c \sim 10^3 \text{ K}$ не может иметь отношение к этому взаимодействию



Здесь электроны разных атомов знают друг о друге

Т.к. e^- – фермионы, то их волновые функции $\Psi_{1,2} = \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(s_1, s_2)$



Их спины $|\vec{s}_1 + \vec{s}_2| = \begin{cases} 0, (\uparrow\downarrow)(\downarrow\uparrow) \\ 1, (\uparrow\uparrow)(\downarrow\downarrow) \end{cases} = |\vec{S}|$

$\chi_{(0)}(s_1, s_2) = -\chi_{(0)}(s_2, s_1)$ для синглетного состояния

$\chi_{(1)}(s_1, s_2) = +\chi_{(1)}(s_2, s_1)$ для триплетов

$\uparrow s = 1$

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \mp \varphi_1(\vec{r}_2) \varphi_2(\vec{r}_1) \}$$

$\downarrow s = 0$

$$\begin{aligned} \Delta E &= \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V_{ee}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \\ &= \frac{1}{2} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \{ \varphi_1^*(\vec{r}_1) \varphi_2^*(\vec{r}_2) V_{ee} \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \mp \varphi_2^*(\vec{r}_1) \varphi_1^*(\vec{r}_2) V_{ee} \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \mp \\ &\mp \varphi_1^*(\vec{r}_1) \varphi_2^*(\vec{r}_2) V_{ee} \varphi_2(\vec{r}_1) \varphi_1(\vec{r}_2) \mp \varphi_2^*(\vec{r}_1) \varphi_1^*(\vec{r}_2) V_{ee} \varphi_2(\vec{r}_1) \varphi_1(\vec{r}_2) \} \end{aligned}$$

если в 4-м слагаемом $r_1 \rightleftharpoons r_2$ оно удвоится с 1-м

$$\Delta E = \frac{1}{2} \cdot \mathcal{Z} \{ A \mp J \}$$

$$A = \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 (\varphi_1^*(\vec{r}_1) \varphi_1(\vec{r}_1)) V_{ee}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) |\varphi_2(\vec{r}_2)|^2$$

$$J = \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \underbrace{\varphi_1^*(\vec{r}_1) \varphi_2^*(\vec{r}_2) V_{ee}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}_{\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \sim 10eV} \varphi_1(\vec{r}_2) \varphi_2(\vec{r}_1) \sim 10^{-1} N$$

$$V_{exch} = \alpha + \beta(\hat{s}_1, \hat{s}_2)$$

$$\langle 0 | V_{exch} | 0 \rangle = +J$$

Дирак ввел: $\langle 1 | V_{exch} | 1 \rangle = -J$

$$+J = \alpha + \beta \langle 0 | \hat{s}_1 \hat{s}_2 | 0 \rangle$$

$$-J = \alpha + \beta \langle 1 | \hat{s}_1 \hat{s}_2 | 1 \rangle$$

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$$

$$\hat{S}^2 = s(s+1) = \overbrace{\hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2}^{\frac{3}{2}} + 2(\hat{s}_1 \hat{s}_2)$$

$\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) \quad \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)$

$$(\hat{s}_1 \hat{s}_2) = \frac{1}{2} \left[s(s+1) - \frac{3}{2} \right] = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[0 - \frac{3}{2} \right], s=0 \\ \frac{1}{2} \left[1(1+1) - \frac{3}{2} \right], s=1 \end{cases}$$

$$J = \alpha + \beta \langle 0 | -\frac{3}{4} | 0 \rangle = \alpha - \beta \frac{3}{4}$$

$$-J = \alpha + \beta \langle 1 | \frac{1}{4} | 1 \rangle = \alpha + \beta \frac{1}{4}$$

$$2J = -\beta$$

вычитая, получим :

$$\alpha = -J - \frac{1}{4}(-2J) = -\frac{J}{2}$$

$\beta = -2J$
$\alpha = -\frac{J}{2}$

$$V_{exch} = -\frac{J}{2} - \underbrace{2J}_{\uparrow} (\hat{s}_1 \hat{s}_2)$$

интенсивность этого взаимодействия диктуется обменным членом

$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} J(\vec{n} - \vec{m}) \hat{S}_n \hat{S}_m$

гамильтониан Гайзенберга

(отсчитан от $-\frac{J}{2}$; дает отрицательную добавку при $J < 0$)

Обменное взаимодействие выстраивает моменты вдоль фиксированного направления; однако, в силу равномерности всех направлений, при усреднении получится ноль.

Выделим одно направление: $\vec{H} = (0, 0, H)$ внешнее магнитное поле

$-\mu_B g \sum_n (\hat{S}_n \hat{H})$ - второе слагаемое в гамильтониане

$\vec{M} = g \mu_B \vec{s}_n$ - магнитный момент одного атома

$$\overbrace{-(\vec{M}_n \vec{H})} \nearrow J_{nm} = J(|\vec{n} - \vec{m}|) \equiv J_{mn}$$

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} J(\vec{n} - \vec{m}) (\widehat{s}_n \widehat{s}_m) - \mu_B g H \sum_n \widehat{s}_n^z$$

для всех узлов $\begin{cases} \widehat{s}^z \Psi_{s_z} = s_z \Psi_{s_z} \\ -s \leq s_z \leq s \end{cases}$ s - полный спин атома

Если все s_n^z равны +1 по оси z , то отрицательный вклад гамильтониана максимален и энергия будет минимальной \Rightarrow это основное состояние

$$\widehat{s}^z = \sum_n \widehat{s}_n^z \rightarrow [\widehat{H} \widehat{S}^z] = 0 \quad (\text{доказать самостоятельно})$$

\Rightarrow суммарная проекция магнитного момента никогда за счет внутренних изменений не поменяется.

Если за счет внешнего источника изменит суммарную проекцию (это значит, что один из s_z изменится на 1 (правило отбора), т.е. от s до $s-1$), то по кристаллу побежит волна отклонения проекции спина от максимального значения s . (Отклонившись, атом (в одном из узлов) спровоцирует отклонение в ближайшем соседнем узле, а сам вернется в исходное состояние в силу закона сохранения проекции спина.)

Это спиновая волна или магнон

Таким образом задача «привязалась» к оси Z ;

Лекция 15.

Основное состояние и возбуждение магнонов. Спиновые волны в ферромагнетиках

$$\widehat{s}_n \widehat{s}_m = \underbrace{\left(\widehat{s}_n^x \widehat{s}_m^x + \widehat{s}_n^y \widehat{s}_m^y \right)}_{?} + \widehat{s}_n^z \widehat{s}_m^z$$

$$\widehat{s}^{\pm} = \widehat{s}^x \pm i \widehat{s}^y \rightarrow \widehat{s}^+ \Psi_{s_z} = (\dots) \Psi_{s_z+1}$$

$$\widehat{s}^- \Psi_{s_z} = (\dots) \Psi_{s_z-1}$$

Оператор \widehat{s} описывает рождение спиновой волны

$$\left. \begin{aligned} \widehat{s}^+ \Psi_{s_z} &= 0 \\ \widehat{s}^- \Psi_{s_z} &\equiv 0 \end{aligned} \right\} \text{дополнительное ограничение, связанное со структурой спинового}$$

момента

$$\widehat{s}^x = \frac{1}{2} (\widehat{s}^+ + \widehat{s}^-)$$

$$\widehat{s}^y = \frac{1}{2} (\widehat{s}^+ - \widehat{s}^-)$$

$$\begin{aligned} \widehat{s}_n^x \widehat{s}_m^x + \widehat{s}_n^y \widehat{s}_m^y &= \frac{1}{4} \left\{ (\widehat{s}_n^+ + \widehat{s}_n^-) (\widehat{s}_m^+ + \widehat{s}_m^-) - (\widehat{s}_n^+ - \widehat{s}_n^-) (\widehat{s}_m^+ - \widehat{s}_m^-) \right\} = \\ &= \frac{1}{4} \left\{ \cancel{\widehat{s}_n^+ \widehat{s}_m^+} + \widehat{s}_n^- \widehat{s}_m^+ + \widehat{s}_n^+ \widehat{s}_m^- + \cancel{\widehat{s}_n^- \widehat{s}_m^-} - \cancel{\widehat{s}_n^+ \widehat{s}_m^-} + \widehat{s}_n^- \widehat{s}_m^+ + \widehat{s}_n^+ \widehat{s}_m^- - \cancel{\widehat{s}_n^- \widehat{s}_m^+} \right\} = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \widehat{s}_n^+ \widehat{s}_m^- + \widehat{s}_n^- \widehat{s}_m^+ \right\} \rightarrow \sum_{n \neq m} J \left(|\vec{n} - \vec{m}| \right) \widehat{s}_n^+ \widehat{s}_m^- =$$

подставим в исх.

$$n \rightleftharpoons m$$

гамильтониан

$$= \sum_{n \neq m} J \left(|\vec{m} - \vec{n}| \right) \widehat{s}_m^+ \widehat{s}_n^- = \sum_{n \neq m} J_{nm} \widehat{s}_n^- \widehat{s}_m^+$$

$$\sum_{n \neq m} J_{nm} (\widehat{s}_n^x \widehat{s}_m^x + \widehat{s}_n^y \widehat{s}_m^y) = \cancel{\not=} \cdot \frac{1}{\cancel{\not=}} \sum_{n \neq m} J_{nm} \widehat{s}_n^- \widehat{s}_m^+$$

в результате гамильтониан системы

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} J_{nm} (\widehat{s}_n^- \widehat{s}_m^+ + \widehat{s}_n^z \widehat{s}_m^z) - g \mu_B H \sum_n \widehat{s}_n^z$$

здесь все операторы действуют на волновую функцию

$$s^z = \sum_n \widehat{s}_n^z; \left[\widehat{H}, \widehat{s}_n^z \right] \equiv 0 \rightarrow s^z = const$$

изменить суммарную проекцию спина на OZ нельзя

Изменение можно внести только внешним воздействием.

$$\hat{s}_n^\pm = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hat{s}_q^\pm e^{\pm i q n}$$

$$\{n\} = N$$

$$\{\bar{q}\} = N$$

$$-\frac{\pi}{a\alpha} < q_\alpha < \frac{\pi}{a\alpha}; q_\alpha = \frac{2\pi}{a\alpha} \cdot \frac{P_\alpha}{N_\alpha} \rightarrow$$

$$\hat{s}_n^\pm = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hat{s}_q^\pm e^{\pm i q n}$$

$$\left[\hat{s}_q^-, \hat{s}_{q_1}^+ \right] = \frac{1}{N} \sum_n \sum_m e^{i q n} e^{i q_1 m} \left[\hat{s}_n^-, \hat{s}_m^+ \right]$$

$$\frac{N_\alpha}{2} < P_\alpha \leq \frac{N_\alpha}{2}$$

в виде сумм

$$\left[\left(\hat{s}_n^x - i \hat{s}_n^y \right), \left(\hat{s}_m^x + i \hat{s}_m^y \right) \right] = \left\{ \left[\hat{s}_n^x \hat{s}_m^x \right] - i \left[\hat{s}_n^y \hat{s}_m^y \right] + i \left[\hat{s}_n^x \hat{s}_m^y \right] - \left[\hat{s}_n^y \hat{s}_m^x \right] \right\} =$$

↓ 0

↓ 0

$$-i \delta_{nm} \left[\hat{s}_n^y, \hat{s}_n^x \right] + \delta_{nm} i \left[\hat{s}_n^x, \hat{s}_n^y \right]$$

$$\varepsilon^{123} = \varepsilon^{231} = \varepsilon^{312} = +1$$

$$\varepsilon^{213} = \varepsilon^{132} = \varepsilon^{321} = -1$$

$$\left[\hat{s}^\alpha, \hat{s}^\beta \right] = i \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \hat{s}^\gamma$$

$$= -i \delta_{nm} \left\{ -i \underbrace{\varepsilon^{yxz}}_{-1} \hat{s}_n^z + i \underbrace{\varepsilon^{xyz}}_{+1} \hat{s}_n^z \right\} = -2 \delta_{nm} \hat{s}_n^z$$

$$\left[\hat{s}_q^-, \hat{s}_{q_1}^+ \right] = -\frac{1}{N} \sum_n \sum_m e^{i q n} e^{-i q_1 m} \delta_{nm} 2 \hat{s}_n^z =$$

$$= \frac{-2}{N} \sum_n e^{i(\bar{q}-q_1)n} \hat{s}_n^z \approx \frac{2s}{N} \sum_n e^{i(\bar{q}-q_1)n} + \left(\sim \frac{\Delta N}{N} \right) \approx -2s \delta_{q, q_1}^- \rightarrow$$

если все $\hat{s}_n^z \equiv +s$

предполагаем, что ΔN узлов $\rightarrow \hat{s}_n^z = (s-1)$

$\frac{\Delta N}{N} \ll 1$ отклонение системы от основного состояния ничтожно

$$\sum_n e^{i(\bar{q}-q_1)n} = N \delta_{q, q_1}^-$$

$\rightarrow \hat{s}_q^- = \hat{a}_q^+$ т.е. \hat{s}^- является оператором рождения, \hat{s}^+ - оператором уничтожения

$$\left[\hat{a}_q^+, \hat{a}_{q_1}^- \right] \approx -\delta_{qq_1}^-$$

$$\left[\frac{\hat{s}_{q_1}^+}{\sqrt{2s}}, \frac{\hat{s}_q^-}{\sqrt{2s}} \right] = \delta_{qq_1}^- \infty \left[\hat{a}_{q_1}, \hat{a}_q^+ \right] = \delta_{qq_1}^-$$

первый «кусоч» гамильтониана:

$$\begin{aligned} & \sum_{n \neq m} I(|\vec{n} - \vec{m}|) \underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hat{s}_q^- e^{-i\vec{q}\vec{n}} \right)}_{\hat{s}_n^-} \underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q_1} \hat{s}_{q_1}^+ e^{-i\vec{q}_1\vec{m}} \right)}_{\hat{s}_m^+} = \\ & \hat{s}_q^- = \sqrt{2s} \hat{a}_q^+ \quad \hat{s}_{q_1}^+ = \sqrt{2s} \hat{a}_{q_1}^- \\ & = \frac{1}{N} \sum_q \sum_{q_1} \left(\sum_{n \neq m} I(|\vec{n} - \vec{m}|) e^{-i\vec{q}\vec{n} + i\vec{q}_1\vec{m}} \right) 2s \hat{a}_q^+ \hat{a}_{q_1}^- = \sum_{n \neq m} I_{nm} \hat{s}_n^- \hat{s}_m^+ \end{aligned}$$

,

добавили и вычли

$$= \left(\sum_{l \neq 0} I(|\vec{l}|) e^{-i\vec{q}\vec{l}} \right) \underbrace{\left(\sum_m e^{i(\vec{q}_1 - \vec{q})\vec{m}} \right)}_{N_{\delta_{q_1\vec{q}}^-}}$$

заменяли индекс суммирования $\vec{n} - \vec{m} = \vec{l}$ суммой двойной и по \vec{n} и по \vec{m}

$$\vec{n} - \vec{m} = \vec{l}$$

$$1) \sum_{n \neq m} I_{nm} \hat{s}_n^- \hat{s}_m^+ = \frac{2s}{N} \sum_q \left(\sum_{l \neq 0} I(l) e^{-i\vec{q}\vec{l}} \right) \underbrace{\hat{a}_q^+ \hat{a}_q^-}_{\hat{N}_q}$$

следующие слагаемые в \hat{H} зависят от \hat{s}_n^z, \hat{s}_m^z

$$\hat{s}_n^2 = s(s+1) = \left(\hat{s}_n^x \right)^2 + \left(\hat{s}_n^y \right)^2 + \left(\hat{s}_n^z \right)^2 =$$

все спины на всех узлах одинаковы по величине

$$= \underbrace{\left(\frac{1}{2} \left(\hat{s}_n^+ + \hat{s}_n^- \right) \right)^2 + \left(\frac{1}{2i} \left(\hat{s}_n^+ - \hat{s}_n^- \right) \right)^2}_{\quad} + \left(\hat{s}_n^z \right)^2$$

$$\begin{aligned}
(\hat{s}_n^x)^2 + (\hat{s}_n^y)^2 &= \frac{1}{4} \left\{ \cancel{(\hat{s}_n^+)^2} + \hat{s}_n^+ \hat{s}_n^- + \hat{s}_n^- \hat{s}_n^+ + \cancel{(\hat{s}_n^-)^2} - \cancel{(\hat{s}_n^+)^2} + \hat{s}_n^+ \hat{s}_n^- + \hat{s}_n^- \hat{s}_n^+ - \cancel{(\hat{s}_n^-)^2} \right\} = \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \hat{s}_n^+ \hat{s}_n^- + \hat{s}_n^- \hat{s}_n^+ \right\} = \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}_1} e^{i\vec{q}\vec{n} - i\vec{q}_1\vec{n}} \cancel{S} \left\{ \underbrace{\hat{a}_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+}_{\delta_{\vec{q}\vec{q}_1}} + \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} \right\} = \\
&= \frac{S}{N} \left\{ \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}_1} e^{i\vec{q}\vec{n} - i\vec{q}_1\vec{n}} \delta_{\vec{q}\vec{q}_1} + 2 \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}_1} e^{i\vec{q}\vec{n} - i\vec{q}_1\vec{n}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} \right\} = \\
&= \frac{S}{N} \left\{ \underbrace{\sum_{\vec{q}} 1}_{\frac{q}{N}} + 2 \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}_1} e^{i(\vec{q} - i\vec{q}_1)\vec{n}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} \right\} = S + \frac{2S}{N} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}_1} e^{i(\vec{q} - i\vec{q}_1)\vec{n}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} \\
(\hat{s}_n^z)^2 &= s(s+1) - (\hat{s}_n^x)^2 - (\hat{s}_n^y)^2 = s^2 + \cancel{s} - \cancel{s} - \frac{2S}{N} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}_1} e^{i(\vec{q} - i\vec{q}_1)\vec{n}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} \\
\hat{s}_n^z &= \sqrt{(\hat{s}_n^z)^2} = s \sqrt{1 - \underbrace{\frac{2S}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{q}_1} e^{i(\vec{q} - i\vec{q}_1)\vec{n}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}}}_{\sim \Delta N}} \approx
\end{aligned}$$

т.к. суммируются операторы $\hat{a}^+ \hat{a}$
(мера наличия волн)

таким образом, второе слагаемое $\sim \frac{\Delta N}{N}$; $\sqrt{1-x} = 1 - \frac{x}{2}$
 $x \ll 1$

$$\approx \boxed{s - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{q}_1} e^{i(\vec{q} - i\vec{q}_1)\vec{n}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} \approx \hat{s}_n^z} \quad \text{т.е. проекция } \hat{s}_n^z \text{ на } \nabla \text{ узле отличается от}$$

макс значения S на долю собственных волн

2)

$$\begin{aligned}
\sum_n \hat{s}_n^z &= \left(\sum_n S \right) - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{q}_1} \underbrace{\left(\sum_n e^{i(\vec{q} - i\vec{q}_1)\vec{n}} \right)}_{N \delta_{\vec{q}\vec{q}_1}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} = \\
&= NS - \sum_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} = NS - \sum_{\vec{q}} \hat{N}_{\vec{q}}
\end{aligned}$$

максимальный спин равен NS и он уменьшен на количество спиновых волн

3)

$$\sum_{n \neq m} I(|\vec{n} - \vec{m}|) \hat{s}_n^z \hat{s}_m^z = \sum_{n \neq m} I(|\vec{n} - \vec{m}|) \left\{ S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{q}_1} e^{i(\vec{q} - i\vec{q}_1)\vec{n}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} \right\} \left\{ S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{q}_1} e^{i(\vec{q} - i\vec{q}_1)\vec{m}} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} \right\} \approx$$

при раскрытии скобок оставляем только первые не исчезающие члены $\sim \frac{\Delta N}{N}$

$$\approx S^2 \underbrace{\left(\sum_{n \neq m} I \left(\overbrace{|\vec{n} - \vec{m}|}^{\vec{l}} \right) \right)}_{\substack{\sum \sum_{n \neq m} I(l) \\ = N \sum_{l \neq 0} I(l)}} - \frac{S}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{q}_1} \left\{ \sum_{n \neq m} I \left(|\vec{n} - \vec{m}| \right) \left[e^{i(\vec{q} - \vec{q}_1)\vec{n}} + e^{i(\vec{q} - \vec{q}_1)\vec{m}} \right] \right\} \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} + 0 \left(\left(\frac{\Delta N}{N} \right)^2 \right) =$$

$$= S^2 N \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) - \frac{S}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{q}_1} 2 \mathcal{N} \delta_{\vec{q}, \vec{q}_1} \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) \hat{a}_{\vec{q}_1}^+ \hat{a}_{\vec{q}} =$$

$$\sum_{n \neq m} I \left(|\vec{n} - \vec{m}| \right) e^{i(\vec{q} - \vec{q}_1)\vec{n}} e^{-i(\vec{q} - \vec{q}_1)\vec{m} + i(\vec{q} - \vec{q}_1)\vec{m}} = \left(\sum_{l \neq 0} I(l) e^{i(\vec{q} - \vec{q}_1)l} \right) \underbrace{\left(\sum_m e^{i(\vec{q} - \vec{q}_1)\vec{m}} \right)}_{N \delta_{\vec{q}, \vec{q}_1}} = N \delta_{\vec{q}, \vec{q}_1} \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \cdot 1 \right)$$

второе слагаемое [...] дает то же самое;

$$= S^2 N \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) - 2S \sum_{\vec{q}} \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) \hat{a}_{\vec{q}}^+ \hat{a}_{\vec{q}} = S^2 N \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) - 2S \sum_{\vec{q}} \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) \hat{N}_{\vec{q}}$$

В результате получаем гамильтониан:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} I \left(|\vec{n} - \vec{m}| \right) \left(\hat{s}_n^- \hat{s}_m^+ + \hat{s}_n^z \hat{s}_m^z \right) - g \mu_B H \sum_n \hat{s}_n^z \approx \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} S \sum_{l \neq 0} \left(\sum_{l \neq 0} I(l) e^{-i\vec{q}l} \right) \hat{N}_{\vec{q}} - \frac{S^2 N}{2} \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) + \frac{2S}{2} \sum_{\vec{q}} \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) \hat{N}_{\vec{q}} - g \mu_B H S N + g \mu_B H \sum_{\vec{q}} \hat{N}_{\vec{q}} \\ \hat{H} &\approx \left\{ -\frac{S^2 N}{2} \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) - g \mu_B H S N \right\} + \sum_{\vec{q}} \left\{ \left(S \sum_{l \neq 0} I(l) \right) \left(1 - e^{-i\vec{q}l} \right) + g \mu_B H \right\} \hat{N}_{\vec{q}} \end{aligned}$$

Утверждение $\hat{H} \equiv E_0 + \Delta E$ может быть записано так, где

$$\boxed{E_0 \equiv -\frac{S^2 N}{2} \left(\sum_{l \neq 0} I(l) \right) - g \mu_B H S N} \quad \text{энергия основного состояния, все спины } \uparrow \uparrow$$

$$E_0 \equiv \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle \quad \boxed{\Delta E \equiv \sum_{\vec{q}} \varepsilon(\vec{q}) \hat{N}_{\vec{q}}} \quad \text{результат появления}$$

СПИНОВЫХ ВОЛН

↓ ↓

$$S_n^z = \pm S \quad (!)$$

$$\varepsilon(\vec{q}) = S \sum_{l \neq 0} I(l) \left(1 - e^{-i\vec{q}l} \right) + g \mu_B H$$

Каждый магنون несет энергию $\varepsilon(\vec{q})$; фактически мы получили закон дисперсии.

Длинноволновое приближение:

$$\varepsilon(\vec{q} \sim 0) \approx S \sum_{l \neq 0} I(l) \left(\chi - \chi + i\vec{q}\vec{l} + \frac{1}{2}(\vec{q}\vec{l})^2 + \dots \right) + g\mu_B H \approx Si\vec{q} \underbrace{\left(\sum_{l \neq 0} I(l)\vec{l} \right)}_0 + \frac{S}{2} \sum_{l \neq 0} I(l) (\vec{q}\vec{l})^2 - \dots + g\mu_B H$$

т.к. сумма по всем \vec{l} , и
всегда на каждое \vec{l} найдется $-\vec{l}$

$$\varepsilon(\vec{q} \sim 0) \approx \frac{S}{2} q^\alpha q^\beta \underbrace{\left(\sum_l I(l) l^\alpha l^\beta \right)}_{I\delta^{\alpha\beta}} + g\mu_B H$$

свертка

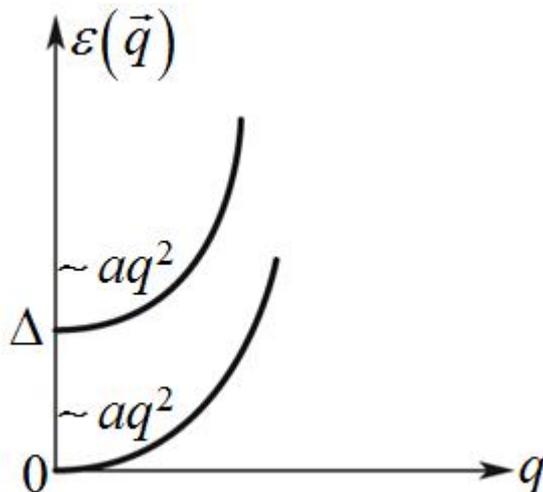
$$I \cdot 3 = \sum_l I(l) \cdot l^2; (\alpha = \beta)$$

$$I = \frac{1}{3} \cdot \sum_l I(l) \cdot l^2$$

$$\varepsilon(\vec{q} \sim 0) = \frac{S}{6} \underbrace{\left(\sum_l I(l) l^2 \right)}_a q^2 + \underbrace{g\mu_B H}_\Delta$$

длинноволновое приближение для энергии

отдельного магнона



$\Delta = 0$, если магнитное поле не включено; $\varepsilon(\vec{q} \sim 0) = aq^2 + \Delta$ при наличии поля.

Ни одного отклика на воздействие энергией $< \Delta$ система не даст, зато начиная с Δ будут появляться спиновые волны.

Лекция 16.

Термодинамика ферромагнетика. Температурное поведение теплоёмкости и макроскопического магнитного момента. Ферромагнетизм как пример фазового перехода 2-го рода.

$$\Delta E(T) \equiv \langle \langle \Delta \hat{E} \rangle \rangle = \sum_i w_i \sum_q \varepsilon(q) \underbrace{\langle i | \hat{N} | i \rangle}_{n_q} = \sum_q \varepsilon(q) \bar{n}_q \quad n_q \text{ - число «отклонений» от}$$

максимальной проекции в системе:
 $n_q = 0, 1, 2, \dots$ 0- ни один

не повернут, 1- один повернут.

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(q)}{kT}} - 1} \quad \text{распределение Планка (фиксированных состояний нет} \Rightarrow \text{хим. потенциал}=0)$$

(число квантов не фиксировано)

$$\Delta E(T) = \underbrace{\frac{\Omega}{(2\pi)^3}}_{\sum_q} \int d\vec{q} \frac{\varepsilon(\vec{q})}{e^{\frac{\varepsilon(\vec{q})}{kT}} - 1} \cong \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \frac{aq^2 + \Delta}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1} =$$

$T \sim 0$; наличие exp выделяет малые \vec{q} , т.е. вклад дают $\varepsilon(\vec{q}) \leq kT$, остальные «зарезаются»

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{q'} 4\pi q^2 dq \frac{aq^2 + \Delta}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1} \xrightarrow{H=0 \Rightarrow \Delta=0} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{q'} dq \frac{aq^2 + \Delta}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1} =$$

q' определяется неравенством $\varepsilon(q) \leq kT$; при этом выполняется длинноволновое приближение.

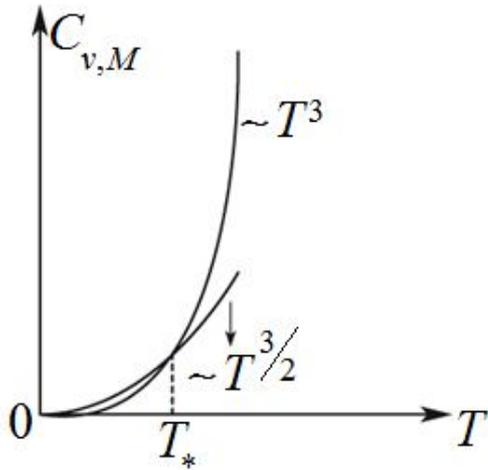
$$z = \frac{aq^2}{kT}; q^2 = \frac{kT}{a} z; q = \sqrt{\frac{kT}{a}} \sqrt{z}; dq = \sqrt{\frac{kT}{a}} \frac{dz}{2\sqrt{z}}$$

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{\frac{aq'^2}{kT} \ll 1} \left(\frac{kT}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{dz}{2\sqrt{z}} \cdot \frac{a \left(\frac{kT}{a}\right)^2 z^2}{e^z - 1} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{kT}{a}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{a}{2} \int_0^{\frac{aq'^2}{kT} \ll 1} dz \frac{z^{\frac{3}{2}}}{e^z - 1} = \gamma \cdot \left(\frac{kT}{a}\right)^{\frac{5}{2}}$$

таким образом,

$$E(T \sim 0, H \sim 0) \approx \gamma (kT)^{\frac{5}{2}}$$

$$C_V(T \sim 0, H = 0) \sim T^{\frac{3}{2}}$$



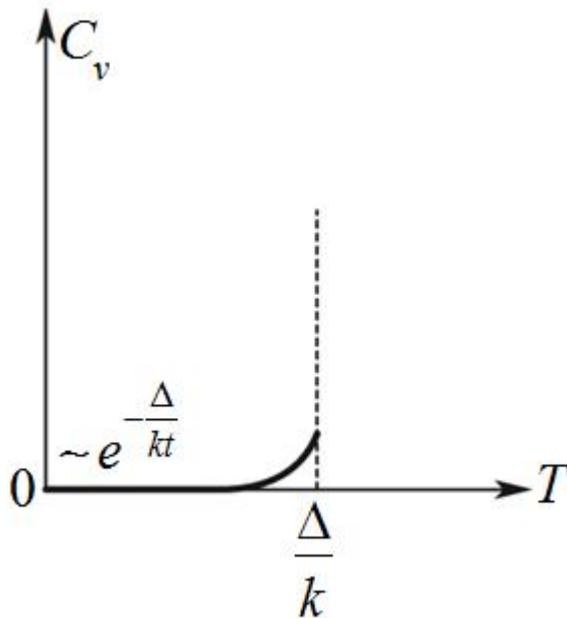
Легче родить фонон при таком законе дисперсии ($aq^2 \dots$), чем при линейном. Подводимое тепло в основном расходуется на рождение магнонов.

$e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}}$ велико даже при $q = 0 \rightarrow (e^{\frac{\Delta}{kT}})$

и \forall добавка aq^2 только усугубит это настроение

$$\frac{H \neq 0, kT < 0}{2} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{q'} 4\pi q^2 dq \frac{aq^2 + \Delta}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1} \approx \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \Delta e^{-\frac{\Delta}{kT}} \int_0^q dq \cdot q^2 \equiv \gamma_1 \cdot e^{-\frac{\Delta}{kT}}$$

$$C_v(T \sim 0, H) \sim e^{-\frac{\Delta}{kT}}$$



Возбуждения родиться не могут.

Еще одна термодинамическая величина – магнитный момент:

$$\widehat{M}^z = \sum_n g \mu_B \widehat{S}_n^z \approx g \mu_B \sum_n \left\{ S - \frac{1}{N} \sum_{q, q_1} \widehat{a}_{q_1}^+ \widehat{a}_q^- \exp(i(\vec{q}_1 - \vec{q}_0) \vec{n}) \right\} =$$

$$= \underbrace{g\mu_B SN}_{M_0^z} - \underbrace{g\mu_B \frac{1}{N} \sum_{q,q_1} \hat{a}_{q_1}^+ \hat{a}_{\bar{q}}^- \sum_n e^{i(\bar{q}_1 - \bar{q})n}}_{N\delta_{q_1 \bar{q}}} = M_0^z - \Delta \hat{M}^z,$$

магнитный
момент в
отсутствии
отклонений

поправка за счет
бегающих спиновых
волн

Причем $\Delta \hat{M}^z = g\mu_B \sum_{\bar{q}} \hat{a}_{\bar{q}}^+ \hat{a}_{\bar{q}}^- = g\mu_B \sum_{\bar{q}} \hat{N}_{\bar{q}}$

Таким образом, момент уменьшается в меру наличия спиновых волн

$$\hat{M}^z = M_0^z - \Delta \hat{M}^z$$

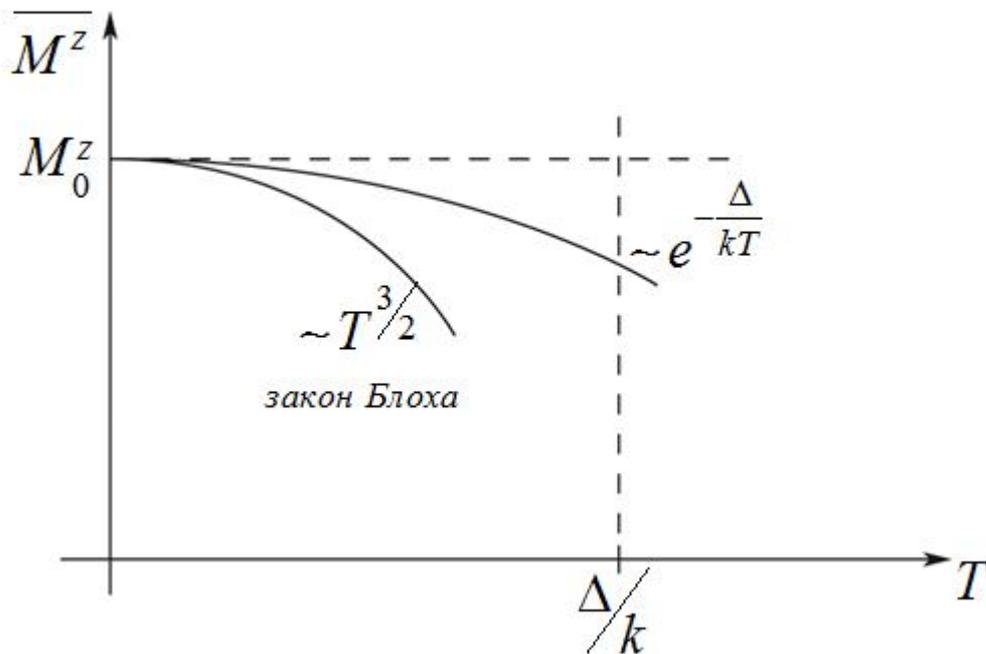
$$\overline{M}^z = M_0^z - \overline{\Delta M}^z = M_0^z - g\mu_B \sum_{\bar{q}} \overline{n}_{\bar{q}}$$

отсюда $\overline{\Delta M}^z = g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int dq \cdot q^2 \cdot 4\pi \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(q)}{kT}} - 1} = g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{q'} dq \frac{q^2}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1}$

$\Delta = 0$ (без поля)

$$= g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{q'} dq \frac{q^2}{e^{\frac{aq^2}{kT}} - 1} \approx g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{kT}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{2} \int_0^{\frac{aq'^2}{kT} \rightarrow \infty} dz \frac{\sqrt{z}}{e^z - 1} \approx \gamma (kT)^{\frac{3}{2}}$$

Температура вызывает “разбалтывание” магнитных моментов.



$\Delta \neq 0$

$$\approx g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{q'} dq \frac{q^2}{e^{\frac{\Delta}{kT}} - 1} \approx g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{q'^3}{3} e^{-\frac{\Delta}{kT}}$$

Магнитное поле, таким образом, стабилизирует магнитный момент. Рассмотрим двумерный кристалл (XY) в магнитном поле (Z). M_0^z не зависит от мерности кристалла, это просто полное число магнитных моментов атомов;

$$\overline{\Delta M^z} = g\mu_B \sum_q \bar{n}_q = g\mu_B \frac{S}{(2\pi)^2} \int dq \cdot q \cdot 2\pi \frac{1}{e^{\frac{aq^2}{kT}} - 1} \quad \square$$

$$\Delta = 0$$

$$\square g\mu_B \frac{S}{(2\pi)^2} \cdot 2\pi \int_0^{q'} dq \frac{q}{e^{\frac{aq^2}{kT}} - 1} \sim g\mu_B \frac{S}{2\pi} \int_0^{q'} dq \frac{q}{\chi + \frac{aq^2}{kT} + \dots - \chi} \simeq$$

основной конечный вклад дают $aq^2 \leq kT \sim 0$ можно разложить экспоненту

$$\simeq g\mu_B \frac{S}{2\pi} \frac{kT}{a} \int_0^{q'} \frac{dq}{q} \sim g\mu_B \frac{S}{2\pi} \frac{kT}{a} \ln|q'| \Big|_0^{q'} \sim T \ln L \rightarrow \infty$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \ln \frac{q'}{q} = \ln \frac{q'}{q_{\min}}, q_{\min} = \frac{2\pi}{L}$$

при малейшем увеличении температуры двумерный ферромагнетик оказывается неустойчивым (ферромагнетизм исчезает).

Таким образом, главную роль в поведении такой системы играют флуктуации – длинноволновые флуктуации с малыми q .

$$H \neq 0 \rightarrow \Delta \neq 0$$

$$kT < \Delta$$

$$\square g\mu_B \frac{S}{(2\pi)^2} \cdot 2\pi e^{-\frac{\Delta}{kT}} \int_0^{q'} dq \cdot q \sim e^{-\frac{\Delta}{kT}} \quad \text{пока } T < \frac{\Delta}{k}, \text{ магнитное поле замораживает}$$

магнитный момент.

$$kT \sim 0 \infty \frac{\Delta N}{N} \ll 1$$

С ростом температуры число основных спиновых волн растет, они начинают взаимодействовать, спины отклоняются более, чем на 1. Возникает некое усредненное состояние, созданное магнитным полем и спиновыми волнами.

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} I_{nm} (\widehat{S}_n \widehat{S}_m) - g\mu_B H \sum_n \widehat{S}_n^z = -\sum_n \left(\sum_m I_{nm} \widehat{S}_m^z + g\mu_B H \right) \widehat{S}_n^z = -g\mu_B \sum_n H_n \widehat{S}_n^z$$

с учетом взаимодействия

$$H_n = \frac{1}{g\mu_B} \sum_m I_{nm} \widehat{S}_m^z + H$$

Заменим истинное мгновенное значение на каждом узле на некое усредненное значение поля:

$$H_n \rightarrow \langle H \rangle \equiv \frac{1}{g\mu_B} \left(\sum_m I_{nm} \right) \langle \widehat{S}^z \rangle + H, \quad \text{где } \langle \widehat{S}^z \rangle - \text{усредненная по всем значениям}$$

проекция спина на узле

$$\langle \hat{S}^z \rangle \equiv \frac{\langle H \rangle - H}{\left(\frac{I}{g\mu_B} \right)}$$

Среднее значение определяется распределением Гиббса:

$$w(S^z) = \frac{1}{z} e^{\frac{-M_z \langle H \rangle}{kT}}, M^z = g\mu_B S^z, -S \leq S^z \leq +S$$

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= \sum_{S^z=-S}^{+S} S^z w(S^z) = \frac{1}{z} \sum_{S^z=-S}^{+S} S^z e^{\frac{g\mu_B \langle H \rangle}{kT} S^z} = \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial a} \sum_{S^z=-S}^S e^{aS^z} = \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial a} \frac{(1 - e^{a(2S+1)})}{1 - e^a} = \\ &= \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial a} \left[\frac{e^{-a\left(S+\frac{1}{2}\right)} - e^{a\left(S+\frac{1}{2}\right)}}{2} \right] \frac{1}{\frac{1}{2} \left[e^{-\frac{a}{2}} - e^{\frac{a}{2}} \right]} = \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial a} \frac{sh\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right)}{sh\frac{a}{2}} = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{z} \left\{ \frac{1}{sh\frac{a}{2}} \left(S + \frac{1}{2} \right) ch\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right) - sh\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right) \frac{ch\frac{1}{2}}{2sh^2\frac{a}{2}} \right\}$$

$$z = \sum_{S^z=-S}^S e^{aS^z} = \frac{e^{-aS} (1 - e^{a(2S+1)})}{1 - e^a} = \frac{sh\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right)}{sh\frac{a}{2}}$$

таким образом,

$$\langle S^z \rangle = \frac{sh\frac{a}{2}}{sh\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right)} \left\{ \frac{S+\frac{1}{2}}{sh\frac{a}{2}} ch\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right) - \frac{1}{2} sh\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right) \frac{ch\frac{a}{2}}{sh^2\frac{a}{2}} \right\} = \left(S + \frac{1}{2} \right) cth\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right) - \frac{1}{2} cth\frac{a}{2}$$

$$\frac{\langle S^z \rangle}{s} = \left(1 + \frac{1}{2s} \right) cth\left(as\left(1 + \frac{1}{2s}\right)\right) - \frac{1}{2s} cth\left(\frac{1}{2s} as\right) = \frac{g\mu_B}{IS} \{ \langle H \rangle - H \} \square$$

$$as = \frac{g\mu_B \langle H \rangle}{kT} s \equiv y \rightarrow \text{трансцендентное уравнение}$$

$$\square \frac{g\mu_B \langle H \rangle}{IS} - \frac{g\mu_B H}{IS} = \frac{kT}{IS^2} y - \frac{g\mu_B H}{IS} = \left(1 + \frac{1}{2s} \right) cth\left(y\left(1 + \frac{1}{2s}\right)\right) - \frac{1}{2s} cth\frac{y}{2s}$$

$$\gamma(T) \equiv \frac{kT}{IS^2}; \alpha \equiv \frac{g\mu_B H}{IS}$$

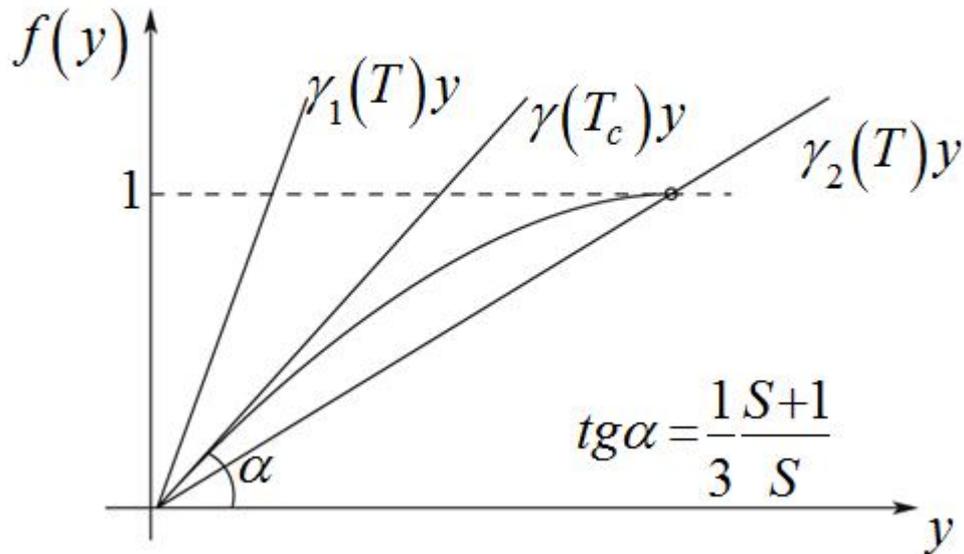
$$\gamma(T)y - \alpha H = \left(1 + \frac{1}{2s} \right) cth\left(y\left(1 + \frac{1}{2s}\right)\right) - \frac{1}{2s} cth\frac{y}{2s} \equiv f(y) \quad \text{функция Ланжевена}$$

$$y \rightarrow \infty, cth \rightarrow 1$$

$$1) f(y \rightarrow \infty) = 1 + \frac{1}{2s} - \frac{1}{2s} = 1$$

$$y \rightarrow 0$$

$$2) cthx|_{x \rightarrow 0} \approx \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + \frac{x^3}{45}$$



$$f(y \sim 0) \approx \left(1 + \frac{1}{2s}\right) \left\{ \frac{1}{y \left(1 + \frac{1}{2s}\right)} + \frac{1}{3} y \left(1 + \frac{1}{2s}\right) - \frac{1}{45} y^3 \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^3 + \dots \right\} -$$

$$- \frac{1}{2s} \left\{ \frac{2s}{y} + \frac{1}{3} \frac{y}{2s} - \frac{1}{45} y^3 \left(\frac{1}{2s}\right)^3 + \dots \right\} \approx$$

$$\approx \frac{1}{y} + \frac{y}{3} \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^2 - \frac{1}{45} y^3 \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^4 + \dots - \frac{1}{y} - \frac{y}{3} \left(\frac{1}{2s}\right)^2 + \frac{1}{45} y^3 \left(\frac{1}{2s}\right)^4 + \dots \approx$$

$$\approx \frac{y}{3} \left[\left(1 + \frac{1}{2s}\right)^3 - \left(\frac{1}{2s}\right)^2 \right] - \frac{y^3}{45} \left[\left(1 + \frac{1}{2s}\right)^4 - \left(\frac{1}{2s}\right)^4 \right] + \dots =$$

$$= \frac{y}{3} \left(1 + \frac{1}{3}\right) - \frac{y^3}{45} \left[\left(1 + \frac{1}{2s}\right)^2 - \left(\frac{1}{2s}\right)^2 \right] \left(1 + \frac{1}{s}\right) \approx \frac{y}{3} \frac{s+1}{s} - gy^3$$

$$g \equiv \frac{1}{45} \frac{s+1}{s} \left[\left(1 + \frac{1}{2s}\right)^2 + \left(\frac{1}{2s}\right)^2 \right] > 0$$

$$\boxed{a) H=0} \quad \gamma(T) \cdot y \quad \gamma_1(T) > \gamma(T_c) > \gamma_2(T) \Rightarrow T_1 > T_c > T_2$$

- 1) если $T > T_c$, то единственное решение - $y = 0$;
- 2) если $T = T_c \rightarrow \gamma(T_c) y = \frac{y}{3} \frac{s+1}{s}$; $\frac{kT_c}{IS^2} = \frac{1}{3} \frac{s+1}{s}$.

Тогда $kT_c = \frac{Is(s+1)}{s}$, в точке $T = T_c$ впервые возникает ненулевая средняя намагниченность .

$T_c \sim 10^3 K$ - температура Кюри.

$\frac{S(S+1)}{3} = \frac{\bar{S}^2}{3}$ - средний квадрат спина, приходящийся на одну из осей;

3) $T < T_c$: есть точное решение, которое можно найти, раскладывая $f(y)$ дальше.

$$\frac{kT}{IS^2} y = \frac{\langle S^z \rangle}{S} \approx \frac{1}{3} \frac{S+1}{S} y - gy^3 \quad g > 0!$$

Введем $\tilde{g} = g \left(\frac{IS^2}{kT} \right)^3$.

Имеем: $\frac{\langle S^z \rangle}{S} \approx \frac{T_c}{T} \frac{\langle S^z \rangle}{S} - \tilde{g} \left[\frac{\langle S^z \rangle}{S} \right]^3$

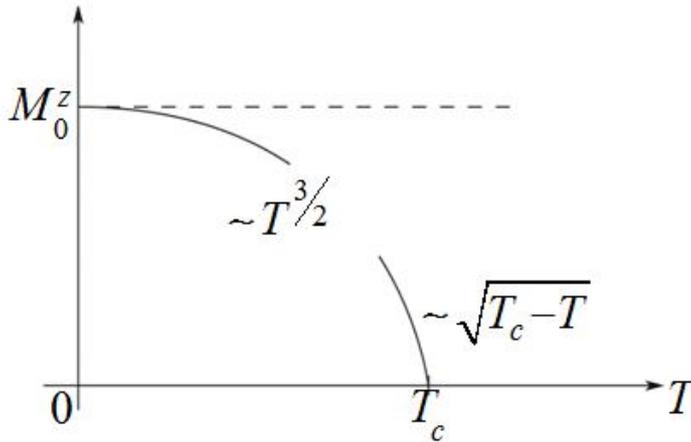
$$\boxed{\frac{\langle S^z \rangle}{S} \left(1 - \frac{T_c}{T} \right) \approx -\tilde{g} \left[\frac{\langle S^z \rangle}{S} \right]^3}$$

1) если $T > T_c$, то $\left(1 - \frac{T_c}{T} \right) > 0$, а в правой части – отрицательная величина, равенство возможно только при $\langle S^z \rangle = 0$.

2) если $T < T_c \rightarrow \left(\frac{\langle S^z \rangle}{S} \right)^2 \cong \frac{T_c - T}{\tilde{g} T_c}$, вблизи точки перехода заменяем T на T_c .

Получаем: $\left. \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right|_{T \leq T_c} \approx \sqrt{\frac{T_c - T}{\tilde{g} T_c}}$.

$M^z \cong g \mu_A N S \left. \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right|_{T \leq T_c} \sim \sqrt{T_c - T} (!!!)$



Т.е. левее T_c вещество имеет средний момент, отличный от нуля, и является ферромагнетиком. Правее – парамагнетиком.

Фазовые переходы, при которых исчезает параметр упорядочения, называются фазовыми переходами второго рода.

Термодинамический потенциал Гиббса

$$\Phi(p, T; \vec{M}) \Big|_{T \sim T_c} \approx \Phi_0(p, T) + \underbrace{\frac{A}{2} M^2 + \frac{B}{4} M^4 + \dots}_{\Delta\Phi} \quad \text{истинный скаляр;}$$

Разлагаем по вектору \Rightarrow входят только четные степени.

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial M} = 0 \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial M^2} \geq 0 \end{cases} \quad \text{для равновесного состояния (уравнение экстремума).}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial M} = AM + BM^3 = M(A + BM^2) = 0 \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial M^2} = A + 3BM^2 > 0 \end{cases} \Rightarrow$$

1) $M = 0 \sim A > 0 (!) \rightarrow T > T_c$ отсутствие упорядочения

$$A + 3B \left(-\frac{A}{B} \right) = -2A > 0 \rightarrow A < 0$$

2) $M^2 = -\frac{A}{B} (\sim A < 0, B > 0) \rightarrow T < T_c$

При переходе через T_c A меняет знак, предположим $A \approx a(T - T_c)$, $a > 0$

$T < T_c$ $M^2 = \frac{a(T_c - T)}{B}$, $M \sim \sqrt{T_c - T}$ - получили тот же закон, который получался

из приближения среднего поля.

Таким образом, переход ферромагнетик \rightarrow парамагнетик действительно является фазовым переходом второго рода.

$$S = -\frac{\partial \Phi}{\partial T} = -\frac{\partial \Phi_0}{\partial T} - \frac{\partial \Delta \Phi}{\partial T} = S_0 + \Delta S$$

$$-\frac{\partial \Delta \Phi}{\partial T} = \begin{cases} 0, T > T_c & (M = 0!!) \\ -\frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{1}{2} \underbrace{a(T-T_c)}_A \underbrace{\frac{a(T-T_c)}{B}}_{M^2} + \frac{B}{4} \underbrace{\frac{(a(T-T_c))^2}{B^2}}_{M^4} \right\}, T < T_c \end{cases}$$

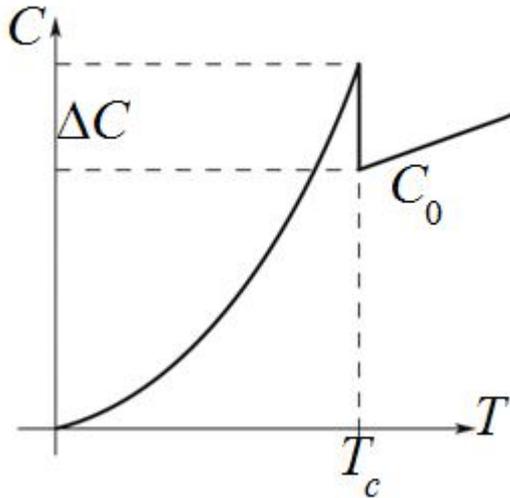
$$\Delta S = -\frac{\partial \Delta \Phi}{\partial T} = \left\{ \frac{a^2}{2B} \left[\frac{\partial}{\partial T} (T-T_c)^2 \right] + \frac{a^2}{4B} \left[-\frac{\partial}{\partial T} (T-T_c)^2 \right] \right\} =$$

$$= \frac{a^2}{2B} \cdot 2(T-T_c) - \frac{a^2}{4B} \cdot 2(T-T_c) = -\frac{a^2}{2B} (T-T_c) < 0!!$$

$\Delta S < 0$ состояние при $T < T_c$ более упорядочено.

$$\text{Теплоемкость } C = T \frac{\partial S}{\partial T} = C_0 + \Delta C,$$

$$\Delta C = T \frac{\partial \Delta S}{\partial T} = T \left(-\frac{a^2}{2B} (-1) \right) \approx \frac{a^2}{2B} T_c$$



λ - точка (точка перехода, где происходит фазовый переход второго рода).

Дополнительная теплоемкость уходит на оставшуюся часть выстроенных магнитных моментов (их разбалтывание).

$$\boxed{a) H \neq 0}$$

$$\frac{\langle S^z \rangle}{S} - \alpha H \approx \frac{\langle S^z \rangle}{S} \cdot \frac{T_c}{T} - \tilde{g} \left(\frac{\langle S^z \rangle}{S} \right)^3$$

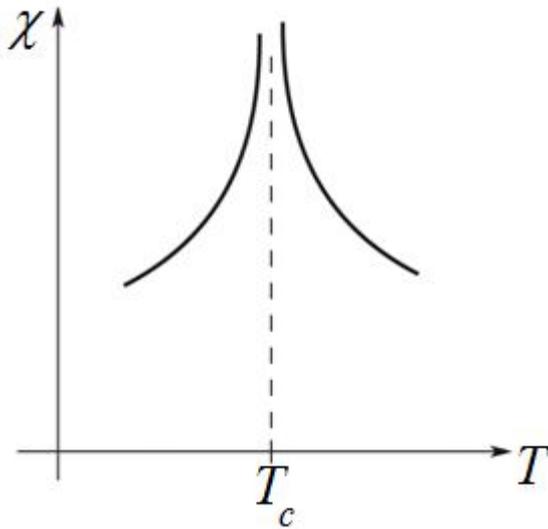
$$\frac{\langle S^z \rangle}{S} \left(1 - \frac{T_c}{T} \right) + \tilde{g} \left(\frac{\langle S^z \rangle}{S} \right)^3 \approx \alpha H \rightarrow \frac{\langle S^z \rangle}{S} \neq 0$$

Никакого перехода второго рода в точке T_c нет. Магнитное поле “замораживает” систему с ненулевым моментом.

В магнитном поле переход будет фазовым переходом первого рода (как только мы нагреем систему настолько, что ей выгоднее будет перейти в немагнитное состояние (перескочить создаваемую полем щель)).

$$\chi = \frac{\alpha}{\left(1 - \frac{T_c}{T}\right) + 3\tilde{g}\left(\frac{\langle S^z \rangle}{S}\right)^2} = \begin{cases} \frac{\alpha T_c}{T - T_c}, T > T_c \sim \langle S^z \rangle = 0 \\ \frac{\alpha}{\frac{T - T_c}{T_c} + 3\tilde{g}\frac{T_c - T}{3\tilde{g}(T_c - T)}} = \frac{\alpha T_c}{2(T_c - T)}, T < T_c \end{cases}$$

↙ восприимчивость



Разрывность есть следствие того, что мы применяли теорию среднего поля.

Флуктуации магнитного момента в окрестности точки фазового перехода огромны и охватывают почти все вещество, если бы их мы учли (учли бы градиент момента в разложении), то расходимости бы не было.

Возникает аномальный вклад длинноволновых флуктуаций (вблизи точки перехода).

Трудность выполнения законов сохранения энергии и волнового вектора для распада длинноволновых возбуждений приводит к тому, что длинноволновые возбуждения долго живут (по сравнению с остальными) \Rightarrow большой вклад.