

## Лекция 7.

Вклад электрон-ионного взаимодействия с учетом колебаний ионов . Гамильтониан Фрелиха. Возможные типы электрон- фононного взаимодействия. Изменение полной энергии системы электронов и фононов. Полная энергия электрон- ионной системы. Нулевая модель металла и проблема металлического водорода.

$$\hat{V}_{ei} \Big|_{\vec{q} \neq 0} \approx \hat{V}_{ei}^{(0)} + \hat{V}_{ei}^{(1)} + \dots$$

$$\hat{V}_{ei}^{(0)} = \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{n=1}^N V_{ei}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\vec{n}} \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{a}_{\vec{k}, \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma} = (*)$$

Взаимодействие электронов с жесткой колеблющейся решеткой.

Решеточная функция  $\sum_n e^{-i\vec{q}\vec{n}} = N \delta_{\vec{q}, \vec{G}}$

$(\vec{q} \neq 0)$  необходимо, чтобы  $\exp$  обращалась в 1.

$\vec{G}$  - вектора обратной решетки.

$$(*) = N \sum_{\vec{G} \neq 0} V_{ei}(\vec{G}) \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{G}}^{\sigma}$$

Электрон, двигаясь через жесткую решетку, не будет на ней рассеиваться, если его состояние является собственным для этой решетки: он не может обменяться вектором  $\vec{G}$  с решеткой.

$$\hat{V}_{ei}^{(1)} = \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{n=1}^N V_{ei}(\vec{q}) \left\{ -i\vec{q}\vec{u}_n e^{-i\vec{q}\vec{n}} \right\} \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^{\sigma}$$

Зависимость от  $n$  теперь входит еще в  $\vec{U}_n$ ;

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

$\vec{q}$  - электронный волновой вектор.

$\vec{q}$  - электронный волновой вектор.

$\vec{f}$  - фононный (решеточный) вектор.

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

$$\sum_n e^{i(-\vec{f}-\vec{q})n} = N\delta_{-\vec{f}-\vec{q},\vec{G}} = N\delta_{\vec{f},-\vec{q}-\vec{G}}$$

Проведем суммирование по  $\vec{f}$ ; получим:

$$\sum_{\xi} = \sum_{\vec{f}} \sum_s$$
$$= \sum_s \sqrt{\frac{\hbar N}{2M}} \left\{ \vec{l}_s(\vec{q}-\vec{G}) \frac{\hat{b}_s(\vec{q}+\vec{G})}{\sqrt{\omega_s(\vec{q}+\vec{G})}} + \vec{l}_s^*(-\vec{q}-\vec{G}) \frac{\hat{b}_s^+(-\vec{q}-\vec{G})}{\sqrt{\omega_s(-\vec{q}-\vec{G})}} \right\} = (*)$$

$\vec{f}$  как собственный фононный вектор принадлежит первой ячейке обратной решетки;

Если  $\vec{q} < \frac{\vec{G}}{2}$  и попадает внутрь первой ячейки, то найдется подходящее  $\vec{f}$ , и никакого

$\vec{G}$  не надо ( $\vec{G}=0$ ); если  $\vec{q}$  выпадает из первой ячейки, нужно подобрать такое

значение  $\vec{G}$ , которое его в эту ячейку вернет. Законы сохранения требуют, чтобы  $\vec{G}$  было одним и только одним.  $\vec{G}$  - период решетки, следовательно, его можно отбросить, однако если  $\vec{q}$  не лежит в первой ячейке обратной решетки, “вычитать” соответствующее  $\vec{G}$  необходимо.

(вспоминаем  $\vec{l}_s^*(-\vec{q}) = \vec{l}_s(\vec{q})$ );

$$(*) = \sum_s \sqrt{\frac{\hbar N}{2M}} \frac{\vec{l}_s(\vec{q})}{\sqrt{\omega_s(\vec{q})}} \left\{ \hat{b}_s(\vec{q}) + \hat{b}_s^+(-\vec{q}) \right\}$$

Подставим эту сумму в исходное выражение;

$$\hat{V}_{ei}^{(1)} = \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_s \sum_{\vec{k}} A_s(\vec{q}) \left\{ \hat{b}_s(\vec{q}) + \hat{b}_s^+(-\vec{q}) \right\} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}} \equiv \hat{H}_{e.ph},$$

$\sigma \quad \sigma$

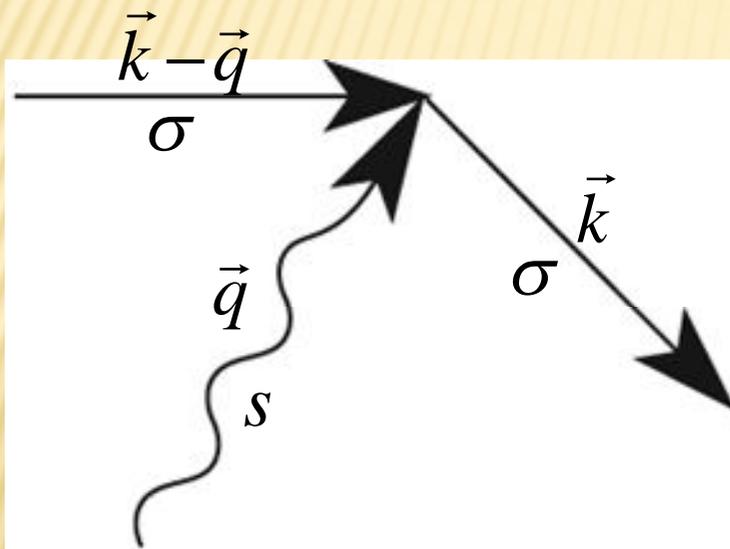
где  $A_s(\vec{q}) \equiv V_{ei}(\vec{q}) \sqrt{\frac{\hbar N}{2M\omega_s(\vec{q})}} \left( -i\vec{q} \vec{l}_s(\vec{q}) \right)$  - вершина электрон-фононного

взаимодействия.

Полученный результат называется гамильтонианом Фрелиха, или оператором электрон – фононного взаимодействия.

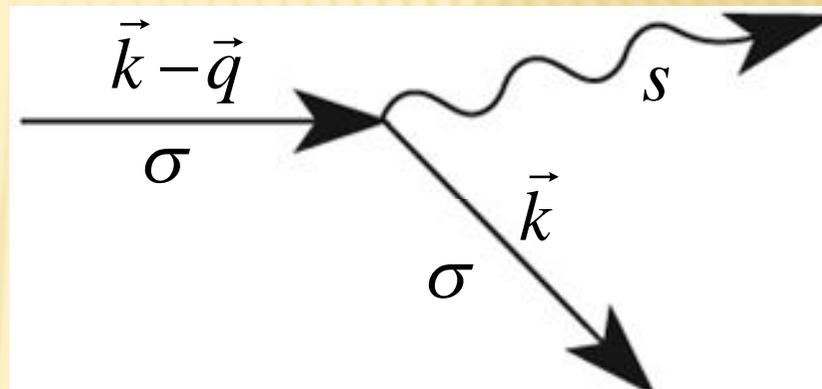
$$\hat{b}_s(\vec{q}) \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^+$$

$\sigma \quad \sigma$



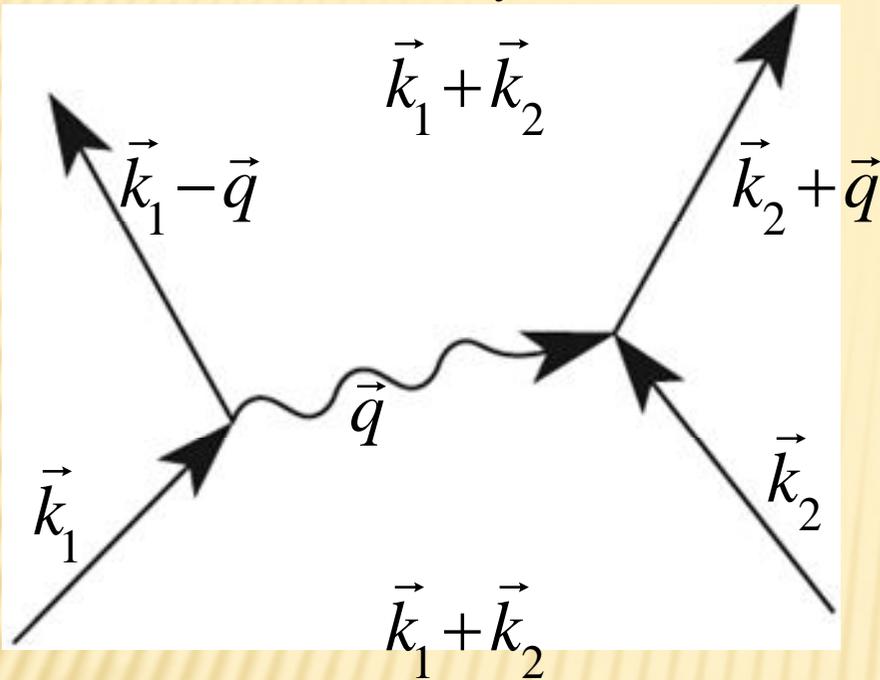
$$\hat{b}_s^+(-\vec{q}) \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^+$$

$\sigma \quad \sigma$



Первоначальное направление  $\vec{k} - \vec{q}$  за счет “зацепления” за решетку всегда меняется, то есть электрон – фононное взаимодействие приводит к сопротивлению.

При  $T = 0$  равновесных фононов нет, поэтому первый процесс (с поглощением фонона) невозможен; однако испускание всегда возможно.



Если фонон, испущенный одним электроном, подхватывается другим, то его как такового в решетке нет, то есть такой фонон - виртуальный;

Суммарный импульс пары электронов при определенных обстоятельствах не меняется при «зацеплении» за решетку, что и является причиной возможной сверхпроводимости.

Но для этого нужно, чтобы каждый электрон нашел себе пару.

Эти пары называются куперовскими.

Это низкотемпературная сверхпроводимость (теория БКШ).

Итак, гамильтониан простого металла имеет следующий вид

$$\hat{H} \approx \hat{T}_e + \left( \hat{V}_{ee} + V_{ii} + \hat{V}_{ei} \right) \Big|_{\vec{q} \neq 0} + \frac{b}{\Omega_0} ZN ,$$

где

$$\hat{T}_e \rightarrow E_e^{(0)} \approx + \frac{2,21}{r_s^2} ZNRy$$

$$\hat{V}_{ee} \rightarrow - \frac{0,916}{r_s} ZNRy + \underbrace{\varepsilon_{corr}}_{E^{(2)} + \dots}$$

$$V_{ii} \rightarrow - \frac{1,8}{r_s} z^{5/3} NRy$$

$$\hat{V}_{ei} \rightarrow 0 + E_{ei}^{(2)} + \dots$$

Полная энергия простого металла в ридбергах

$$E_{tot}^{(0)} \simeq \frac{2,21}{r_s^2} ZN - \frac{1,8}{r_s} Z^{5/3} N - \frac{0,916}{r_s} ZN + \frac{b}{\Omega_0} ZN + O(\varepsilon^{(2)} \dots)$$

Если выкинуть все поправки более высоких порядков

$$E_{tot}^{(0)} \simeq \left( \frac{2,21}{r_s^2} Z - \frac{1,8}{r_s} Z^{5/3} - \frac{0,92}{r_s} Z \right) N + \frac{b}{\Omega_0} ZN$$

Для веществ с  $Z=1$ , (основное состояние простого металла) и  $b=0$  (возможно ли устойчивое состояние атомарного водорода)? имеем

$$E_{tot}^{(0)} \simeq \left( \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{2,72}{r_s} \right) N - \text{функция только } r_s, \text{ то есть электронной плотности.}$$

$$E = E(T, \Omega)$$

Рассмотрим случай  $T=0$

$$E = E(\Omega)$$

Полная энергия

$$0 = \frac{\partial E_H^{(0)}}{\partial \Omega} = \frac{\partial E_H^{(0)}}{N \partial \Omega_0} = \frac{\partial E_H^{(0)}}{N 4\pi a_0^3 r_s^2 \partial r_s} = \frac{1}{N 4\pi a_0^3 r_s^2} \left( \frac{-2 \cdot 2,21}{r_s^3} + \frac{2,72}{r_s^2} \right) = 0$$

$$\Omega_0 = \frac{4\pi}{3} r_e^3 = \frac{4\pi}{3} a_0^3 r_s^3$$

$$\boxed{r_s^{(0)} = \frac{2 \cdot 2,21}{2,72} \approx 1,63}$$

Таким образом, существует точка экстремума, расположенная на расстоянии  $1,63a_{\bar{0}}$ , которая соответствует экстремуму энергии. Убедимся в том, что это минимум:

$$\frac{\partial^2 E_H^{(0)}}{\partial \Omega^2} = \frac{1}{N^2 (4\pi a_{\bar{0}}^3)^2 r_s^2} \frac{\partial}{\partial r_s} \frac{1}{r_s^2} \left( -\frac{2 \cdot 2,21}{r_s^3} + \frac{2,72}{r_s^2} \right) \Bigg|_{r_s = r_s^{(0)}} = (*)$$

Считаем производную только от скобки (при подстановке  $r_s^{(0)}$  скобка дает

$$0 \rightarrow \frac{1}{r_s^2} \text{ можно не дифференцировать).}$$

$$(*) = \frac{1}{N^2 (4\pi a_{\bar{0}}^3)^2 \left( (r_s^{(0)})^2 \right)^2} \left( +\frac{6 \cdot 2,21}{(r_s^{(0)})^4} - \frac{2 \cdot 2,72}{(r_s^{(0)})^3} \right)$$

$$\frac{1}{(r_s^{(0)})^4} \left[ 6 \cdot 2,21 - 2 \cdot 2,72 \cdot (r_s^{(0)}) \right]$$

$$6 \cdot 2,21 - \cancel{2,72} \cdot 2 \cdot \frac{2 \cdot 2,21}{\cancel{2,72}} = 2 \cdot 2,21 > 0$$

$$\frac{\partial^2 E_H^{(0)}}{\partial \Omega^2} > 0 \quad ! \quad \text{То есть это действительно - минимум.}$$

Значит, существует метастабильное состояние, поэтому до сих пор идет исследование металлического водорода (ищут!).

Если бы он существовал, он был бы сверхпроводником при комнатной температуре (такая фононная структура) и, возможно, лучшим экологически чистым топливом.

Время жизни этого метастабильного состояния неизвестно, так как неизвестны все каналы развала метастабильной фазы.

Известно, что **3,5** Мегабар – необходимое давление для образования металлического водорода.

Для изучения свойств простых металлов с  $b \neq 0$ , величину  $b$  можно оценить по макроскопическим параметрам системы (из равновесной плотности электронов).