

А.С. Мельников, А.В. Самохвалов

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ РАЗДЕЛЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА
(Электронное методическое пособие)

Нижний Новгород

2011

ОГЛАВЛЕНИЕ

- I. Основные сведения из введения в ФТТ. Адиабатическое приближение.**
- II. Электронная подсистема. Взаимодействующие электроны.**
§1. Вариационный подход. §2. Метод пробных функций. §3. Уравнения Хартри-Фока. §4. Уравнения Хартри-Фока для свободных электронов. §5. Эффект экранировки. §6. Электронная подсистема в металле. Элементы теории Ферми - жидкости.
- III. Фононы в кристалле. Теплоемкость твердых тел.**
§1. Классическая теория гармонического кристалла. Закон Дюлонга-Пти. §2. Квантовая теория гармонического кристалла. §3. Интерполяционные формулы Дебая и Эйнштейна.
- IV. Электрон-фононное взаимодействие в металлах.**
§1. Диэлектрическая проницаемость металла. Качественная теория. §2. Акустические колебания. Ионный звук в плазме. Соотношение Бома-Ставера. §3. Вклад фононов в электрон-электронное взаимодействие. Переэкранировка. §4. Перенормировка скорости Ферми, вызванная электрон-фононным взаимодействием. §5 Влияние электрон-фононного рассеяния на сопротивление металлов.
- V. Квантовые эффекты в проводимости.**
§1. Квантовый транспорт. Теория Ландауэра. §2. Слабая локализация.
- VI. Фазовые переходы. Теория Ландау.**
§1. Введение в флуктуационную теорию фазовых переходов.

I. Введение.

Основные сведения из введения в ФТТ.

Адиабатическое приближение.

Контрольные вопросы на проверку знания курса "Введение в ФТТ": Теорема Блоха. Зонная теория. Кинетическое уравнение. Закон Видемана–Франца. Механизмы рассеяния. Модель Друде. Фононные спектры.

§1. Уравнение Шредингера для многочастичных систем.

Для количественного рассмотрения свойств твердого исходным пунктом является уравнение Шредингера для кристалла. Гамильтониан всей системы электронов и ионов складывается из кинетической энергии всех частиц, заключенных в кристалле, и их взаимодействия. Полагая взаимодействие между частицами кулоновским, запишем гамильтониан в виде:

$$\hat{H} = - \sum_l \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{u}_l^2} - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{lj} \frac{Ze^2}{|\mathbf{u}_l - \mathbf{r}_j|} + \sum_{ll'} \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_{l'}|} \quad (1)$$

где Ze - заряд иона, \mathbf{u}_l - положение l -ого иона, \mathbf{r}_i - положение i -ого электрона, $e = -|e|$.

Полная квантовомеханическая задача описания движения электронов и ионов в твердом теле очень сложна, и поэтому точное решение поставленной задачи невозможно. Поэтому крайне важным является упрощение теории, основанное на малости массы электрона m по сравнению с массой иона M ($m/M \sim 10^{-4} - 10^{-5}$): ионы будут медленно реагировать на изменение электронной конфигурации, тогда как электроны будут адиабатически перестраиваться при изменении положения ионов. Соответствующее приближение носит название (теорема Борна–Оппенгеймера) и дает возможность осуществить разделение квантовомеханических задач, описывающих движение электронов и ионов. В рамках адиабатического приближения собственные функции уравнения Шредингера

$$\hat{H}\Psi = E\Psi ; \quad (2)$$

ищутся в виде произведения

$$\Psi = '(\{\mathbf{r}\}; \{\mathbf{u}\}) \Phi(\{\mathbf{u}\}) ; \quad (3)$$

где $\{\mathbf{r}\}$ и $\{\mathbf{u}\}$ - это совокупности координат всех электронов и ионов, соответственно, а функция $'$ является решением квантовомеханической задачи об электронах, движущихся в поле "замороженной" конфигурации ионов

$$\hat{H}_{el} ' = "(\{\mathbf{u}\}) ' ; \quad (4)$$

$$\hat{H}_{el}(\{\mathbf{u}\}) = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{li} \frac{Ze^2}{|\mathbf{u}_l - \mathbf{r}_i|} ; \quad (5)$$

Подставляя решение (3) в уравнение Шредингера с гамильтонианом (1) получим

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi = ' \left[- \sum_l \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{u}_l^2} + \sum_{l'l''} \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_{l''}|} + "(\{\mathbf{u}\}) \right] \Phi \\ - \sum_l \frac{\hbar^2}{2M} \left(2 \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}_l} \frac{\partial '}{\partial \mathbf{u}_l} + \Phi \frac{\partial^2 '}{\partial \mathbf{u}_l^2} \right) ; \end{aligned} \quad (6)$$

Последняя сумма в выражении (6) связывает электронную и ионную подсистемы - это неадиабатические члены, которые ответственны за электрон - фононное взаимодействие. Можно показать, что электрон - фононное взаимодействие вносит лишь малую добавку к полной энергии системы в состоянии Ψ . Это не означает, однако, что влияние последнего члена можно учесть с помощью теории возмущений. Для оценки вклада неадиабатических членов умножим уравнение Шредингера $\hat{H}\Psi = E\Psi$ на $'^*$ и проинтегрируем по всему пространству. Тогда получим:

$$\int ' ^* \frac{\partial '}{\partial \mathbf{u}_l} d\{\mathbf{r}\} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_l} \int ' ^2 d\{\mathbf{r}\} = 0 ;$$

$$\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 '}{\partial \mathbf{u}_l^2} \sim \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 '}{\partial \mathbf{r}_l^2} \sim \frac{m}{M} E_{kin} ;$$

где E_{kin} - это кинетическая энергия электронов, а функция $'$ взята в предположении, что электроны жестко связаны с ионами ($' = '(\{\mathbf{r} - \mathbf{u}\})$).

Пренебрегая в (6) неадиабатическими членами, мы получим уравнение, описывающее квантовую механику колебаний кристаллической решетки:

$$\left[- \sum_l \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{u}_l^2} + \sum_{l'l''} \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_{l''}|} + "(\{\mathbf{u}\}) \right] \Phi = E\Phi ; \quad (7)$$

где энергия электронов " $\{\mathbf{u}\}$ " зависит от положения ионов, т.е. вносит добавку к потенциальной энергии ионов за счет электронов. Конечно, предложенный вид решения верен лишь приближенно, и точное решение должно быть записано в виде суперпозиции – разложения по полному набору собственных функций электронной задачи:

$$\Psi = \sum_i ' _i(\{\mathbf{r}\}; \{\mathbf{u}\}) \Phi_i(\{\mathbf{u}\}) : \quad (8)$$

Такой подход позволил бы нам в принципе описать все переходы в системе электронов, вызванные движением ионов, т.е. как раз учесть взаимодействие между обеими подсистемами.

Дополнительная литература: [1], Гл.1.; [3], Гл.4 (§1)

II. Электронная подсистема. Взаимодействующие электроны.

§1. Электронная задача. Вариационный подход.

Описание электронных свойств металла базируется на уравнении Шредингера для N -частичной волновой функции $\Psi(\mathbf{r}_1 s_1; \mathbf{r}_2 s_2; \dots; \mathbf{r}_N s_N)$ для всех N взаимодействующих электронов в поле "замороженных" ионов:

$$\hat{H}_{el} \Psi = \epsilon \Psi ; \quad (9)$$

где гамильтониан электронов \hat{H}_{el} определяется выражением (5). В качестве приближенного метода решения данной задачи рассмотрим подход, основанный на использовании пробных функций. С этой целью сформулируем сначала, эквивалентный уравнению Шредингера. Определим функционал

$$F = \sum_{s_1 \dots s_N} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Psi^* \hat{H}_{el} \Psi ; \quad (10)$$

где суммирование ведется по дискретным значениям проекции спина электронов на некоторую заданную ось, а интегрирование по координатам всех электронов. Функционал (10) определяет ожидаемое значение энергии состояния, описываемого многоэлектронной волновой функцией Ψ , зависящей как от координат всех электронов, так и от проекций их спинов. Из вариационного принципа следует, что волновой функцией основного состояния является такая функция Ψ , которая минимизирует энергию F (10). Для определения экстремума функционала F необходимо проварьировать выражение (10) по Ψ^* и выполнить условие нормировки:

$$\sum_{s_1 \dots s_N} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Psi^* \Psi = 1 ; \quad (11)$$

Для этого определим новый функционал

$$\tilde{F} = F - \lambda \left[\sum_{s_1 \dots s_N} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Psi^* \Psi - 1 \right] ; \quad (12)$$

учитывая условие нормировки (11) через неизвестные множители Лагранжа λ . Приравнявая вариацию этого функционала по Ψ^* нулю

$$\delta \tilde{F} = \sum_{s_1 \dots s_N} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \left[\hat{H}_{el} \Psi - \epsilon \Psi \right] \delta \Psi^* = 0 ; \quad (13)$$

легко получить уравнение Шредингера (9).

§2. Метод пробных функций.

Для решения вариационной задачи можно воспользоваться методом пробных функций. Если в гамильтониане (5) пренебречь кулоновским взаимодействием между электронами, то уравнение Шредингера (9) для N -частичной волновой функции Ψ распадается на N одночастичных уравнений

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}_i) \tilde{A}_i = \epsilon_i \tilde{A}_i; \quad \hat{H}_0(\mathbf{r}_i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + U_{ion}(\mathbf{r}_i); \quad U_{ion}(\mathbf{r}_i) = -\sum_l \frac{Ze^2}{|\mathbf{u}_l - \mathbf{r}_i|}; \quad (14)$$

а искомое N -частичное решение может быть представлено в виде произведения одноэлектронных функций $\tilde{A}_i(\mathfrak{r}_i)$:

$$\Psi \propto \tilde{A}_1(\mathfrak{r}_1) \tilde{A}_2(\mathfrak{r}_2) \dots \tilde{A}_N(\mathfrak{r}_N); \quad (15)$$

Здесь \mathfrak{r}_i - это совокупность координатных и спиновых переменных i -электрона. Некоторое усложнение вида решения, однако, связано с принципом тождественности частиц, который в случае электронов (фермионов) требует антисимметризации полной волновой функции относительно перестановок частиц (принцип Паули):

$$\Psi(\mathfrak{r}_1, \dots, \mathfrak{r}_i, \dots, \mathfrak{r}_j, \dots, \mathfrak{r}_N) = -\Psi(\mathfrak{r}_1, \dots, \mathfrak{r}_j, \dots, \mathfrak{r}_i, \dots, \mathfrak{r}_N)$$

Решение, учитывающее требование антисимметрии, представляет собой суперпозицию произведения (15) и всех других произведений, получаемых из (15) перестановкой аргументов \mathfrak{r}_i . Эти произведения берутся с весами $+1$ или -1 , чтобы соблюдалось требование принципа Паули. Это антисимметризованное произведение может быть записано более компактно в виде детерминанта матрицы $N \times N$ (

), составленного из одноэлектронных функций $\tilde{A}_i(\mathfrak{r}_i)$:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \tilde{A}_1(\mathfrak{r}_1) & \tilde{A}_1(\mathfrak{r}_2) & \dots & \tilde{A}_1(\mathfrak{r}_N) \\ \tilde{A}_2(\mathfrak{r}_1) & \tilde{A}_2(\mathfrak{r}_2) & \dots & \tilde{A}_2(\mathfrak{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \tilde{A}_N(\mathfrak{r}_1) & \tilde{A}_N(\mathfrak{r}_2) & \dots & \tilde{A}_N(\mathfrak{r}_N) \end{vmatrix}; \quad (16)$$

Можно пытаться найти решение задачи, учитывающее взаимодействие электронов, в виде бесконечной суперпозиции детерминантов Слэтера, построенных на функциях невзаимодействующих электронов. Весьма привлекательной, однако, представляется

попытка ограничиться единственным членом в этой сумме, но, в то же время, подобрать одноэлектронные функции из условия минимума функционала \tilde{F} . Такой подход может рассматриваться как метод пробных функций, а роль набора варьируемых параметров играет вид одноэлектронных ортонормированных функций \tilde{A}_i .

§3. Уравнения Хартри-Фока.

Вычислим функционал F на пробных функциях одноэлектронного приближения. Запишем гамильтониан в виде:

$$\hat{H} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + U_{ion}(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \sum_i \hat{H}_0(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} : \quad (17)$$

Начнем с вычисления вклада F_1 в функционал от части гамильтониана \hat{H}_0 :

$$\hat{H}_0 = \sum_i \hat{H}_0(\mathbf{r}_i) = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + U_{ion}(\mathbf{r}_i) \right)$$

Запишем определитель Слэтера в виде разложения детерминанта (разложения Лапласа) по одному из столбцов:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_j \tilde{A}_j(\mathfrak{y}_i) M_j ; \quad (18)$$

где M_j - соответствующие алгебраические дополнения. Выбирая в каждом члене суммы по i разложение детерминанта по соответствующему столбцу, получим:

$$F_1 = \frac{1}{N!} \sum_{s_1 \dots s_N} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \sum_{i=1}^N \sum_j \tilde{A}_j^*(\mathfrak{y}_i) M_j^* \hat{H}_0(\mathbf{r}_i) \sum_n \tilde{A}_n(\mathfrak{y}_i) M_n : \quad (19)$$

Поскольку в алгебраическом дополнении M_j отсутствует функция \tilde{A}_j , а в алгебраическом дополнении M_n отсутствует функция \tilde{A}_n , эти алгебраические дополнения оказываются ортогональными при $j \neq n$:

$$\begin{aligned} F_1 &= \frac{(N-1)!}{N!} \sum_{i=1}^N \sum_{s_i} \int d\mathbf{r}_i \sum_j \sum_n \tilde{A}_j^*(\mathfrak{y}_i) \hat{H}_0(\mathbf{r}_i) \tilde{A}_n(\mathfrak{y}_i) \delta_{jn} \\ &= \sum_j \sum_s \int d\mathbf{r} \tilde{A}_{sj}^*(\mathbf{r}) \hat{H}_0(\mathbf{r}) \tilde{A}_{sj}(\mathbf{r}) : \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь волновая функция j -го состояния $\tilde{A}_{sj}(\mathbf{r}) = \tilde{A}_j(\mathbf{r}) \hat{A}_j(s)$ описывает пространственное распределение амплитуды вероятности иметь проекцию S спина на

выбранную ось. Координатная и спиновая части волновой функции разделяются в силу отсутствия явной зависимости гамильтониана от спиновых операторов.

Рассмотрим теперь часть функционала, которая определяется кулоновским взаимодействием:

$$F_2 = \sum_{i \neq j} \sum_{s_1 \dots s_N} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Psi^* \frac{e^2}{2|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \Psi : \quad (21)$$

Воспользуемся разложением Лапласа по двум столбцам:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{m>n} (\tilde{A}_n(\mathfrak{y}_i) \tilde{A}_m(\mathfrak{y}_j) - \tilde{A}_n(\mathfrak{y}_j) \tilde{A}_m(\mathfrak{y}_i)) M_{nm} ; \quad (22)$$

где M_{nm} -соответствующие алгебраические дополнения. Подставив это разложение в функционал, получим:

$$F_2 = \frac{1}{N!} \sum_{i \neq j} \sum_{\substack{m>n \\ l>k}} \sum_{s_1 \dots s_N} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N (\tilde{A}_n^*(\mathfrak{y}_i) \tilde{A}_m^*(\mathfrak{y}_j) - \tilde{A}_n^*(\mathfrak{y}_j) \tilde{A}_m^*(\mathfrak{y}_i)) \\ \times \frac{e^2}{2|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} (\tilde{A}_k(\mathfrak{y}_i) \tilde{A}_l(\mathfrak{y}_j) - \tilde{A}_k(\mathfrak{y}_j) \tilde{A}_l(\mathfrak{y}_i)) M_{nm}^* M_{kl} : \quad (23)$$

Ортогональность алгебраических дополнений приводит к тому, что отличными от нуля являются лишь члены с $n = k$ и $m = l$:

$$F_2 = \sum_{m>n} \sum_{ss'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} (|\tilde{A}_{ns}(\mathbf{r})|^2 |\tilde{A}_{ms'}(\mathbf{r}')|^2 - \tilde{A}_{ns}^*(\mathbf{r}) \tilde{A}_{ms}(\mathbf{r}) \tilde{A}_{ms'}^*(\mathbf{r}') \tilde{A}_{ns'}(\mathbf{r}')) : \quad (24)$$

Заметим теперь, что волновые функции состояний с противоположными проекциями спина на выбранную ось заведомо ортогональны при суммировании по переменной s .

С учетом этого обстоятельства имеем:

$$F_2 = \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \sum_{ss'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\tilde{A}_{ns}(\mathbf{r})|^2 |\tilde{A}_{ms'}(\mathbf{r}')|^2 \\ - \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \pm_{s_n s_m} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tilde{A}_n^*(\mathbf{r}) \tilde{A}_m(\mathbf{r}) \tilde{A}_m^*(\mathbf{r}') \tilde{A}_n(\mathbf{r}') : \quad (25)$$

Здесь $\pm_{s_n s_m}$ - символ Кронекера по проекциям спинов. Суммируя различные вклады в функционал, получим:

$$F = \sum_n \int d\mathbf{r} \tilde{A}_n^*(\mathbf{r}) \hat{H}_0(\mathbf{r}) \tilde{A}_n(\mathbf{r}) \\ + \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\tilde{A}_n(\mathbf{r})|^2 |\tilde{A}_m(\mathbf{r}')|^2 \\ - \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \pm_{s_n s_m} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tilde{A}_n^*(\mathbf{r}) \tilde{A}_m(\mathbf{r}) \tilde{A}_m^*(\mathbf{r}') \tilde{A}_n(\mathbf{r}') : \quad (26)$$

Здесь предполагается суммирование по всем состояниям с учетом спина. Варьируя получившееся выражение по \tilde{A}_n^* с учетом дополнительного условия ортонормированности

$$\int d\mathbf{r} \tilde{A}_n^*(\mathbf{r}) \tilde{A}_m(\mathbf{r}) = \delta_{nm} ; \quad (27)$$

получим уравнение вида:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{ion}(\mathbf{r}) \right) \tilde{A}_n(\mathbf{r}) + \sum_{m \neq n} \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\tilde{A}_m(\mathbf{r}')|^2 \tilde{A}_n(\mathbf{r}) \\ & - \sum_{m \neq n} \delta_{s_n s_m} \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tilde{A}_m^*(\mathbf{r}') \tilde{A}_m(\mathbf{r}) \tilde{A}_n(\mathbf{r}') = E_n \tilde{A}_n(\mathbf{r}) ; \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь E_n - неопределенный множитель Лагранжа, играющий роль собственного значения энергии одноэлектронного состояния. Заметим, что в суммы может быть включены и слагаемые с $m = n$, поскольку они взаимоуничтожаются в первом и втором кулоновских членах. Получившиеся уравнения для одноэлектронных волновых функций $\tilde{A}_n(\mathbf{r})$ носят название уравнений Хартри-Фока:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{ion}(\mathbf{r}) \right) \tilde{A}_n(\mathbf{r}) + \sum_m \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\tilde{A}_m(\mathbf{r}')|^2 \tilde{A}_n(\mathbf{r}) \\ & - \sum_m \delta_{s_n s_m} \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tilde{A}_m^*(\mathbf{r}') \tilde{A}_m(\mathbf{r}) \tilde{A}_n(\mathbf{r}') = E_n \tilde{A}_n(\mathbf{r}) ; \end{aligned} \quad (29)$$

Уравнения Хартри-Фока представляют собой систему N нелинейных одноэлектронных уравнений - по одному уравнению для каждого заполненного электронного уровня. Соответственно и суммы в (29) вычисляются только по заполненным состояниям.

Кулоновское взаимодействие появляется в уравнениях (29) в виде двух членов. Первый из них называется членом Хартри и описывает взаимодействие данного выбранного (пробного) заряда с распределенным зарядовым фоном всех остальных электронов. Плотность заряда фона имеет простой вид:

$$\rho(\mathbf{r}) = e \sum_m |\tilde{A}_m(\mathbf{r})|^2 ;$$

Этот вклад Хартри может быть получен и при выборе пробной функции в виде простого произведения одноэлектронных функций, без учета антисимметризации по перестановкам частиц. Второй кулоновский член является существенно нелокальным потенциалом и называется фоковским членом. Этот вклад по сути описывает обменное взаимодействие электронов и может быть записан в виде

$$e^2 \sum_m \delta_{s_n s_m} \int d\mathbf{r}' \frac{\tilde{A}_m^*(\mathbf{r}') \tilde{A}_n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tilde{A}_m(\mathbf{r}) = e \int d\mathbf{r}' \frac{\mathcal{J}_n^{HF}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tilde{A}_n(\mathbf{r})$$

через обменную плотность заряда

$$\mathcal{U}_n^{HF}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = e \sum_m \pm_{s_n s_m} \frac{\tilde{A}_m^*(\mathbf{r}') \tilde{A}_n(\mathbf{r}') \tilde{A}_n^*(\mathbf{r}) \tilde{A}_m(\mathbf{r})}{\tilde{A}_n^*(\mathbf{r}) \tilde{A}_n(\mathbf{r})} ;$$

Обменная плотность заряда \mathcal{U}^{HF} зависит от положения наблюдаемого электрона \mathbf{r} , поскольку движение электронов с одинаковыми спинами коррелируется принципом Паули.

§4. Уравнения Хартри-Фока для свободных электронов.

Полученные выше уравнения Хартри-Фока допускают простое точное решение в приближении свободных электронов, когда одноэлектронная волновая функция имеет вид плоских волн:

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}_n \mathbf{r}} \hat{A}_n ; \quad (30)$$

где \hat{A}_n - спиновая функция. Это приближение основано на предположении о локальной электронейтральности, то есть полной взаимной компенсации члена Хартри (потенциала наведенного всеми электронами) и потенциала, действующего со стороны ионов. Такое приближение полностью не учитывает зонных эффектов и может быть адекватно лишь в случае металлов если квазиимпульс электронов находится далеко от края зоны Бриллюэна.

Предположим, что каждое состояние в импульсном пространстве при $|\mathbf{k}| < k_F$ заполнено дважды частицами с противоположным направлением проекции спина. Если плоские волны (30) являются решением уравнений (29), то электронная плотность заряда, определяющая величину потенциала U_{el} , наведенного всеми электронами, имеет постоянную величину. В модели свободных электронов ионы описываются как постоянный фон положительного заряда, плотность которого равна плотности электронного заряда. Поэтому потенциал ионов U_{ion} в точности сокращается потенциалом электронов: $U_{ion} + U_{el} = 0$. В результате в (29) остается лишь обменный член, а уравнения принимают вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \tilde{A}_n(\mathbf{r}) - \sum_m \pm_{s_n s_m} \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tilde{A}_m^*(\mathbf{r}') \tilde{A}_m(\mathbf{r}) \tilde{A}_n(\mathbf{r}') = E_n \tilde{A}_n(\mathbf{r}) ; \quad (31)$$

В этом случае, подстановка решения в уравнение дает:

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}'| < k_F} \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}' + i\mathbf{k}'\mathbf{r}} = E(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} ; \quad (32)$$

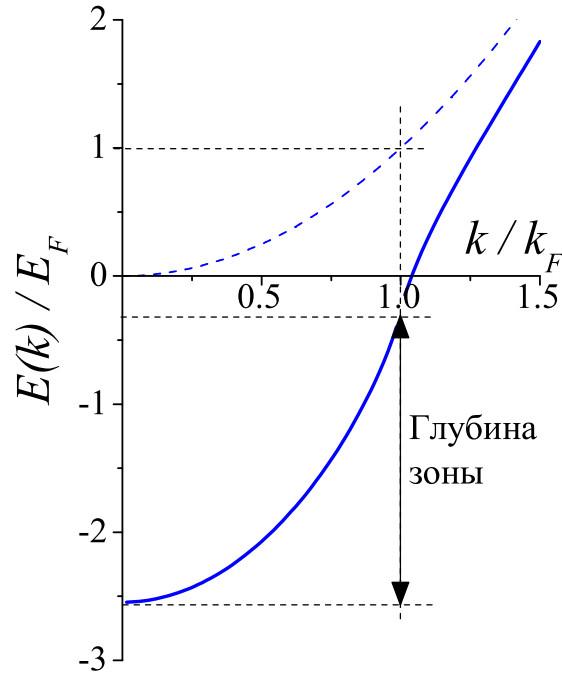


Рис. 1: Энергия Хартри–Фока для $1/k_F a_0 = 2$.

Переходя от суммирования по импульсу к интегрированию, получим:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}'| < k_F} \int d\mathbf{r}' d\mathbf{k}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} ; \quad (33)$$

Вычисляя интеграл по координате, получим:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \frac{e^2}{2\pi^2} \int_{|\mathbf{k}'| < k_F} \frac{d\mathbf{k}'}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} ; \quad (34)$$

Дальнейшее вычисление интеграла по импульсу дает:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{\pi} \left(1 + \frac{1}{2\chi} (1 - \chi^2) \ln \left| \frac{1 + \chi}{1 - \chi} \right| \right) ; \quad (35)$$

где $\chi = k/k_F$.

Спектр (35) в модели свободных электронов изображен на Рис. 1.

Обсудим некоторые свойства энергии (35). 1. Одноэлектронные уровни Хартри–Фока являются плоскими волнами $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, и для них справедливо соотношение $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. При этом, однако, энергия и импульс электрона Хартри–Фока не связаны классическим соотношением $E = p^2/2m$. Энергия электрона на уровне \mathbf{k} увеличивается из-за

обменной энергии, что приводит также к увеличению глубины зоны.

2. Групповая скорость электронов $\frac{\partial E}{\partial k}$ логарифмически расходится на поверхности Ферми, что означает подавление плотности состояний на уровне Ферми. Это обстоятельство есть следствие того, что кулоновское взаимодействие без учета экранировки потенциала заряда в металле спадает слишком медленно.

3. Рассчитаем полную энергию N -электронной системы. Для этого необходимо просуммировать энергию (35) по всем состояниям $k = |\mathbf{k}| < k_F$, принимая во внимание вырождение по спину:

$$E_{\Sigma} = 2 \sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{4} \sum_{k < k_F} \left(1 + \frac{k_F^2 - k^2}{2kk_F} \ln \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right) ; \quad (36)$$

Перейдем от суммирования к интегрированию и вычислим интеграл по углам в сферической системе координат в пространстве импульсов:

$$E_{\Sigma} = \frac{\hbar^2 V k_F^5}{2^{1/2} m} \int_0^1 x^4 dx - \frac{e^2 k_F^4 V}{2^{1/2} g} ; \quad (37)$$

где

$$g = \int_0^1 dx x^2 \left(1 + \frac{1 - x^2}{2x} \ln \left| \frac{1 + x}{1 - x} \right| \right) \simeq 0.5 ;$$

Вычислим полное число частиц внутри заполненной Ферми сферы:

$$N = 2 \frac{V}{(2^{1/2})^3} \frac{4^{1/2}}{3} k_F^3 = \frac{V k_F^3}{3^{1/2}} ;$$

С учетом этого определения полная энергия в расчете на одну частицу имеет вид:

$$\frac{E_{\Sigma}}{N} = \frac{3}{5} E_F - \frac{3e^2 k_F}{2^{1/2}} g ; \quad (38)$$

где $E_F = \hbar^2 k_F^2/2$. Введем теперь определение борковского радиуса:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0.525A ;$$

Энергия на 1 частицу может представлена как разложение по степеням параметра $k_F a_0$:

$$\frac{E_{\Sigma}}{N} = E_F \left(\frac{3}{5} - \frac{3g}{4k_F a_0} \right) = \frac{e^2}{2a_0} \left[\frac{3}{5} (k_F a_0)^2 - \frac{3g}{4} (k_F a_0) \right] ; \quad (39)$$

На Рис. 2 изображена зависимость этой энергии как функции $a = 1/k_F$, то есть по сути межатомного расстояния в металле. Мы видим, что при малых

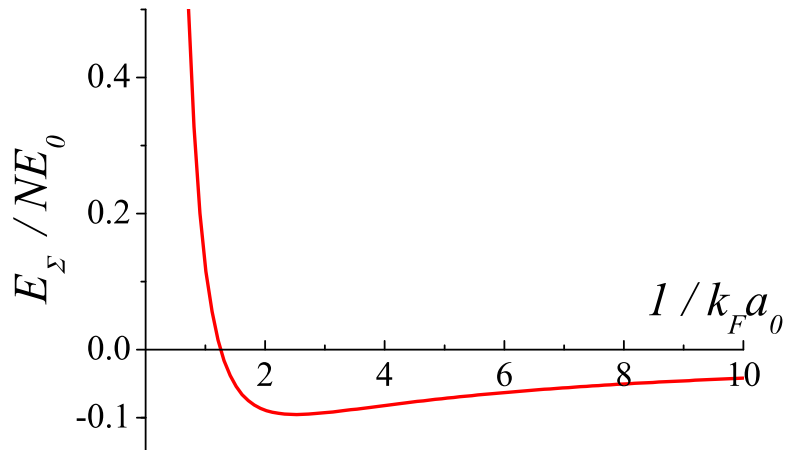


Рис. 2: Энергия в расчете на одну частицу в зависимости от межатомного расстояния в металле ($E_0 = e^2/2a_0 = 13.6 \text{ eV} = 1$ ридберг).

межатомных расстояниях полная энергия растет за счет роста кинетической энергии электронов, заполняющих сферу Ферми. Этот рост существенно обусловлен принципом запрета Паули, который тем самым является причиной отталкивания атомов на малых расстояниях. При больших межатомных расстояниях энергия растет за счет обменного вклада, который, таким образом, приводит к притяжению атомов. В результате мы имеем минимум энергии как функции межатомного расстояния и этот минимум достигается при $k_F a_0 \sim 1$. Заметим, что в рамках использованных приближений оптимальное межатомное расстояние не зависит от радиуса ионов в металле, что, естественно, неверно. Такая зависимость может быть восстановлена при учете отклонений от локальной электронейтральности, и соответствующий электростатический вклад в энергию приводит к дополнительному притяжению того же порядка, что и обменный вклад. Более точные расчеты электронной энергии в металлах, учитывающие электрон-электронное взаимодействие, дают поправки к результату Хартри-Фока (39), которые принято называть корреляционной энергией.

Задачи к разделу: Уравнение Хартри-Фока

3.1. Запишем гамильтониан \hat{H} системы N взаимодействующих электронов в виде

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - U^{ion}(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|};$$

$$U^{ion}(\mathbf{r}_i) = - \sum_{\mathbf{R}} \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|}$$

где Z — заряд ионов, \mathbf{R} — координаты неподвижных ионов, \mathbf{r}_i — координаты электронов. Будем искать решение стационарного уравнения Шредингера $\hat{H}\Psi = \mathcal{E}\Psi$ в виде:

$$\Psi(\mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \tilde{A}_i(\mathbf{r}_i); \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{A}_i|^2 d\mathbf{r} = 1:$$

Используя вариационный принцип и условие нормировки волновых функций, получите систему уравнений Хартри

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \tilde{A}_i + U^{ion} \tilde{A}_i + \left(e^2 \sum_j \int \frac{|\tilde{A}_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right) \tilde{A}_i = \mathcal{E}_i \tilde{A}_i:$$

3.2. Используя гамильтониан \hat{H} из задачи 1 и предполагая, что волновая функция системы является антисимметричной комбинацией одноэлектронных функций $\tilde{A}_i(\mathbf{r}_i; s_i)$ (детерминант Слетера) где s_i - спиновая переменная. Используя вариационный принцип и условие нормировки одноэлектронных волновых функций \tilde{A}_i , получить систему уравнений Хартри-Фока

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \tilde{A}_i + U^{ion} \tilde{A}_i + U^{el} \tilde{A}_i - \sum_j \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tilde{A}_j^*(\mathbf{r}') \tilde{A}_i(\mathbf{r}') \tilde{A}_j(\mathbf{r}) \pm_{s_i s_j} = \mathcal{E}_i \tilde{A}_i;$$

$$U^{el} = -e \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{A}_i(\mathbf{r}'; s_i)|^2 \frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|};$$

где \pm_{ij} — символ Кронекера.

Указание: Задача рассмотрена в [2] т.1, стр.331-333

3.3. Покажите, что линейная комбинация плоских волн вида $\tilde{A}_i(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_i \mathbf{r})$ является решением уравнений Хартри-Фока (см. задачу 2, при этом энергия электрона $\mathcal{E}(k)$ определяется следующим выражением

$$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2e^2}{\mu} k_F \left(\frac{1}{2} + \frac{1 - x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right); \quad x = k/k_F:$$

Указание: Задача рассмотрена в [2] т.1, стр.333-334

3.4. Используя решение задачи 3 вычислите энергию системы свободных взаимодействующих электронов:

$$\mathcal{E} = 2 \sum_{|k| < k_F} = N \left(\frac{3}{5} E_F - \frac{3}{4} \frac{e^2 k_F}{\mu} \right);$$

где N — число электронов, $E_F = \epsilon(T=0)$ — энергия Ферми.

Указание: Задача рассмотрена в [2] т.1, стр.334

§5. Эффект экранировки.

1. Общие формулы

Рассмотрим положительный заряд, помещенный в электронную систему. Заряд притягивает электроны, что приводит к уменьшению поля заряда (экранировке). Полный электростатический потенциал определяется уравнением Пуассона:

$$-\Delta \varphi = 4\pi(\varphi^{ext} + \varphi^{ind}) ;$$

где φ^{ext} - это сторонний заряд, внесенный в среду, а φ^{ind} - это заряд, индуцированный в среде. В зависимости от того, какой заряд фигурирует в правой части уравнения электростатики, мы можем определить разные типы электростатических потенциалов. В частности, можно ввести φ^{ext} , который определяется уравнением:

$$-\Delta \varphi^{ext} = 4\pi\varphi^{ext} ;$$

Потенциалы φ и φ^{ext} позволяют определить поля $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$ и $\mathbf{D} = -\nabla \varphi^{ext}$ (при этом $\nabla \mathbf{D} = 4\pi\varphi^{ext}$), соответственно. Для линейного отклика среды в пространственно-однородном случае связь введенных здесь потенциалов имеет вид:

$$\varphi^{ext}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rho(\mathbf{r}') ;$$

Введем Фурье преобразование потенциалов и зарядов:

$$\varphi_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \varphi(\mathbf{r}) ;$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \rho_{\mathbf{q}} ;$$

Для Фурье-компонент получим:

$$\varphi_{\mathbf{q}}^{ext} = \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q})} \rho_{\mathbf{q}} ; \quad \mathbf{D} = \epsilon(\mathbf{q}) \mathbf{E}$$

$$\varphi^{ind}(\mathbf{q}) = \hat{A}(\mathbf{q}) \rho_{\mathbf{q}} ;$$

$$q^2 \varphi_{\mathbf{q}}^{ext} = 4\pi\varphi^{ext}(\mathbf{q}) ; \quad q^2 \rho_{\mathbf{q}} = 4\pi\rho(\mathbf{q}) ;$$

$$q^2(\rho_{\mathbf{q}} - \rho_{\mathbf{q}}^{ext}) = 4\pi\varphi^{ind}(\mathbf{q}) = \hat{A}(\mathbf{q}) \rho_{\mathbf{q}} ;$$

$$\rho_{\mathbf{q}} = \frac{\rho_{\mathbf{q}}^{ext}}{1 - 4\pi\hat{A}(\mathbf{q})/q^2} ;$$

$$n(\mathbf{q}) = 1 - 4\frac{1}{2}\hat{A}(\mathbf{q})=q^2 :$$

Для полного определения задачи нам необходимо указать способ вычисления индуцированного заряда:

$$\rho^{ind}(\mathbf{r}) = e \sum_k f_k |\tilde{A}_k(\mathbf{r})|^2 - \rho_0 ; \quad (40)$$

где

$$f_k = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_k - \mu}{T}\right) + 1} \quad (41)$$

- функция распределения Ферми-Дирака, волновые функции \tilde{A}_k и энергии E_k - это собственные функции и собственные значения одноэлектронного уравнения Хартри (получающегося из уравнения Хартри - Фока при пренебрежении обменным взаимодействием)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\tilde{A}_k + e' \tilde{A}_k = E_k\tilde{A}_k ; \quad (42)$$

а ρ_0 - плотность заряда электронов в среде в отсутствие потенциала ϕ .

2. Теория экранировки Томаса-Ферми.

В качестве простейшего приближения для вычисления индуцированного заряда мы можем воспользоваться подходом Томаса-Ферми, основанном на предположении о медленности изменения потенциала ϕ в пространстве. При этом считается что масштаб изменения потенциала существенно больше характерной длины волны электрона и волновые функции и энергии могут быть взяты в полуклассическом приближении:

$$|\tilde{A}_k(\mathbf{r})|^2 = const ;$$

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \phi(\mathbf{r}) ;$$

В результате для индуцированного заряда мы получаем:

$$\rho^{ind}(\mathbf{r}) = e(n(\phi - \mu) - n(\mu)) ; \quad (43)$$

где

$$n(\mu) = 2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar^2 k^2 - 2m\mu}{T}\right) + 1} ;$$

Очевидное преимущество подхода Томаса–Ферми - это возможность учесть нелинейную экранировку.

Полагая потенциал ϕ малым, можно ограничиться первым членом разложения (43) ряд по ϕ . Тогда для линейного отклика соотношение (43) принимает вид:

$$\psi^{ind}(\mathbf{r}) = -e^2 \frac{\partial n}{\partial \phi} \phi(\mathbf{r}) : \quad (44)$$

Поскольку $\partial n / \partial \phi$ не зависит от координаты \mathbf{r} , величина поляризуемости

$$\hat{A}(\mathbf{q}) = \psi^{ind}(\mathbf{q}) / \phi(\mathbf{q}) \quad (45)$$

оказывается постоянной

$$\hat{A} = -e^2 \frac{\partial n}{\partial \phi} ; \quad (46)$$

а диэлектрическая проницаемость

$$\epsilon = 1 + \frac{k_0^2}{q^2} ; \quad (47)$$

определяется волновым вектором Томаса–Ферми

$$k_0^2 = 4\pi e^2 \frac{\partial n}{\partial \phi} :$$

Важно отметить, что полученное выше выражение описывает лишь продольную часть диэлектрической проницаемости без учета временной дисперсии. Величина k_0^{-1} называется длиной экранирования Томаса–Ферми и в реальных металлах оказывается порядка межатомного расстояния (что может поставить под вопрос применение полуклассического приближения). Для $T \ll E_F$:

$$\frac{\partial n}{\partial \phi} \simeq \frac{mk_F}{\hbar^2 \pi^2} :$$

Чтобы понять смысл величины k_0 , рассмотрим простейшую задачу о потенциале точечного заряда Q в трехмерной среде с экранировкой:

$$\phi_{ext} = \frac{Q}{r} ; \quad \phi_{ext}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi Q}{q^2} :$$

Тогда полный потенциал

$$\phi(\mathbf{q}) = \frac{4\pi Q}{q^2 + k_0^2}$$

содержит экспоненциально спадающий с расстоянием r множитель

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{Q}{r} e^{-k_0 r} :$$

и пренебрежимо мал на расстояниях больших k_0^{-1} (экранированный кулоновский потенциал).

3. Теория экранировки Линдхарда.

Для того, чтобы рассматривать быстро меняющиеся потенциалы нам необходимо определить решение уравнения Шредингера (42) не используя полуклассическое приближение. Однако с самого начала будем искать значение индуцированной плотности заряда $\rho^{ind}(\mathbf{r})$ (40) только в линейном порядке по полному потенциалу ϕ . Для этого естественно воспользоваться теорией возмущений по потенциалу ϕ . В первом порядке теории возмущений можно получить следующее выражение для волновой функции:

$$\tilde{A}_k = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{2me}{\hbar^2 V \sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{k^2 - k'^2} \phi_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} ; \quad (48)$$

где

$$\phi_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} \phi(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} ;$$

Поправка первого порядка к энергии представляет собой исчезающую в пределе $V \rightarrow \infty$ константу вида

$$\frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \phi(\mathbf{r}) ;$$

которая может быть учтена перенормировкой химического потенциала μ . В линейном приближении по потенциалу индуцированный заряд определяется следующим выражением (с учетом 2-х проекций спина):

$$\rho^{ind}(\mathbf{r}) = \frac{4me^2}{\hbar^2 V^2} \sum_{\mathbf{k}} f_k \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} + e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}}{k^2 - k'^2} ; \quad (49)$$

где f_k - равновесная фермиевская функция для свободных электронов (41) с энергией $E_k = \hbar^2 k^2 = 2m$.

Введем разностный и суммарный импульсы

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} ; \quad \mathbf{K} = \frac{\mathbf{k}' + \mathbf{k}}{2}$$

и перепишем выражение для заряда в виде:

$$\rho^{ind}(\mathbf{r}) = -\frac{2me^2}{\hbar^2 V^2} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{K}-\mathbf{q}/2} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{q}} + e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \phi_{-\mathbf{q}}}{\mathbf{q} \cdot \mathbf{K}} ; \quad (50)$$

Поскольку потенциал $\phi(\mathbf{r})$ - действительная функция, то его Фурье-компоненты $\phi_{\mathbf{q}}$ удовлетворяют условию: $\phi_{-\mathbf{q}}^* = \phi_{\mathbf{q}}$. Поэтому получаем следующее выражение для индуцированного заряда:

$$\rho^{ind}(\mathbf{r}) = -\frac{2me^2}{\hbar^2 V^2} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{\mathbf{q}} (f_{\mathbf{K}-\mathbf{q}/2} - f_{\mathbf{K}+\mathbf{q}/2}) \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{\mathbf{q} \cdot \mathbf{K}} \phi_{\mathbf{q}} ; \quad (51)$$

а Фурье-компонента распределения заряда может быть записана в виде:

$$\chi^{ind}(\mathbf{q}) = -\frac{2me^2}{\hbar^2(2\mu)^3} \int d\mathbf{k} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}}, \quad (52)$$

Рассмотрим два предельных случая:

(i) - *предел медленных потенциалов*: $q \ll k_F$

Для функции распределения получим:

$$f_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}/2} \simeq f_{\mathbf{k}} \mp \frac{\hbar^2 \mathbf{q} \mathbf{k}}{2m} \cdot \nabla f_{\mathbf{k}} + \dots$$

Выражение для поляризуемости электронного газа $\hat{A}(\mathbf{q})$ в этом случае принимает вид (46). Следовательно, для плавных на масштабе $1=k_F$ возмущений потенциала $\phi(\mathbf{r})$ теория экранировки Линдхарда сводится к теории Томаса–Ферми.

(ii) - *предел низких температур*: $T \rightarrow 0$

В этом пределе интегралы в (52) могут быть вычислены аналитически, и выражение для поляризуемости электронного газа (46) принимает вид:

$$\hat{A}(\mathbf{q}) = -\frac{e^2 m k_F}{\mu^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right); \quad (53)$$

где $x = q/2k_F$. Заметим, что при $q = 2k_F$ диэлектрическая проницаемость

$$\epsilon(\mathbf{q}) = 1 - 4\mu \hat{A}(\mathbf{q})/q^2 = 1 + \frac{4e^2 m k_F}{\mu \hbar^2 q^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right) \quad (54)$$

оказывается неаналитической функцией q (). Благодаря этому, в пределе $T \rightarrow 0$ потенциал точечного заряда на больших расстояниях имеет асимптотику:

$$\phi(r) \rightarrow \frac{1}{r^3} \cos(2k_F r); \quad (55)$$

т.е. в нем появляется медленно спадающий осциллирующий член. Такие осцилляции называются *Ритчердовскими осцилляциями*.

Чтобы показать это, рассмотрим интеграл вида:

$$\chi(r) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\mu)^3} \phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{1}{2\mu^2 r} \text{Im} \int_0^\infty dk k' \phi_{\mathbf{k}} e^{ikr}; \quad (56)$$

Экранированный потенциал точечного заряда в Фурье представлении имеет вид:

$$\phi_{\mathbf{k}} = \frac{4\mu Q}{k^2 \epsilon(k)};$$

где диэлектрическая проницаемость $\epsilon(k)$ определяется выражением (54). При вычислении асимптотики потенциала на больших расстояниях основной вклад в интеграл дается импульсами близкими к $2k_F$ (вблизи особенности). В этой области импульсов имеем:

$$\epsilon(\mathbf{k}) \simeq 1 + \frac{e^2 m}{2\frac{1}{4}k_F \hbar^2} \left(1 - \frac{1}{2} \ln \left| \frac{1}{\frac{1}{2}} \right| \right) = 1 - \frac{Q}{2} \frac{1}{\frac{1}{2}} ; \quad (57)$$

$$\epsilon'(\mathbf{k}) \simeq \frac{1}{2} \frac{Q}{k_F^2} \left(1 + \frac{Q}{2} \frac{1}{\frac{1}{2}} \ln \left| \frac{1}{\frac{1}{2}} \right| \right) ; \quad (58)$$

где $\frac{1}{2} = x - 1$, $\frac{Q}{2} = \frac{e^2 m}{2\frac{1}{4}k_F \hbar^2}$, $\frac{1}{2} = 1 + \frac{Q}{2}$. В реальном пространстве получаем:

$$\epsilon'(r) \simeq \frac{2Q}{\frac{1}{4} r^2} \text{Im} \left(e^{2ik_F r} J \right) ; \quad (59)$$

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} d\frac{1}{2} \frac{1}{\frac{1}{2}} e^{2ir k_F \xi} ; \quad (60)$$

Развернув путь интегрирования до совпадения его с верхней частью мнимой оси $\frac{1}{2} = iy$, получим:

$$J = \int_0^{\infty} dy y \left(\ln \frac{1}{-iy} - \ln \frac{1}{iy} \right) e^{-2rk_F y} = \frac{i\frac{1}{4}}{(2k_F r)^2} ; \quad (61)$$

$$\epsilon' \rightarrow \frac{Q}{2} \frac{1}{k_F^2 r^3} \cos(2k_F r) ; \quad (62)$$

Для малых, но конечных температур, эта асимптотика справедлива пока $r < \hbar v_F = T$.

4. Нестационарная теория Лундхарда. Диэлектрическая проницаемость.

Задача на конечной частоте может быть решена с помощью нестационарной теории возмущений. В результате диэлектрическая проницаемость принимает вид:

$$\epsilon(\mathbf{q}; \omega) = 1 + \frac{e^2}{\frac{1}{4} \omega^2} \int d\mathbf{k} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{\hbar^2 (\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}) - m + \hbar \omega} ; \quad (63)$$

Ограничиваясь случаем медленных потенциалов ($q \ll k_F$) для диэлектрической проницаемости получим:

$$\epsilon(\mathbf{q}; \omega) \simeq 1 + \frac{e^2}{\frac{1}{4} \omega^2} \int d\mathbf{k} \frac{\hbar^2 \mathbf{q} \cdot \mathbf{k} = m}{\hbar^2 \mathbf{q} \cdot \mathbf{k} = m + \hbar \omega} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \omega} ; \quad (64)$$

Вычисляя интеграл и переходя к пределу $q \rightarrow 0$, имеем:

$$\epsilon(\mathbf{q}; \omega) \rightarrow 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} ; \quad (65)$$

где $\omega_p^2 = 4\frac{1}{4} n e^2 = m$ - плазменная частота, определяемая концентрацией электронов n .

Плазменная частота (порог прозрачности металлов) составляет $\sim 10^{16} \text{ Hz}$.

3.1. Используя формулу первого порядка стационарной теории возмущений

$$\tilde{A}_k = \tilde{A}_k^0 + \sum_{k' \neq k} \frac{(\tilde{A}_{k'}^0; \hat{V} \tilde{A}_k^0)}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'}} \tilde{A}_{k'}^0.$$

и учитывая, что

$$\psi(\mathbf{r}) = -e \sum_k f_k |\tilde{A}_k|^2;$$

где $f_k = f_0(\mathcal{E}_k)$ - функция распределения Ферми-Дирака, покажите, что в первом приближении по возмущающему потенциалу $\tilde{\psi}$ фурье-образ индуцированного заряда есть

$$\psi^{\text{ind}}(\mathbf{q}) = e^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \cdot \frac{f_{k+q} - f_k}{\mathcal{E}_{k+q}^0 - \mathcal{E}_k^0} \tilde{\psi}(\mathbf{q});$$

3.2. Используя решение предыдущей задачи, покажите, что статическая продольная диэлектрическая проницаемость свободного электронного газа описывается следующим выражением

$$\epsilon(\mathbf{q}) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \cdot \frac{f_{k+q} - f_k}{\mathcal{E}_{k+q}^0 - \mathcal{E}_k^0}$$

(экранировка Линдхарда).

3.3. Пусть приложенное переменное гармоническое поле (частоты ω) вызывает возмущение плотности газа свободных электронов. Ограничиваясь членами первого порядка по возмущению, показать, что реакция электронного газа на такое возмущение описывается диэлектрической проницаемостью, равной

$$\epsilon(\mathbf{q}; \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \cdot \frac{f_{k+q} - f_k}{\mathcal{E}_{k+q}^0 - \mathcal{E}_k^0 - \hbar\omega}$$

Указание: Задача рассмотрена в [12], стр. 286–287; [13], стр. 827–830.

3.4. Пользуясь результатом задачи II, показать, что в пределе $\omega \rightarrow 0$ и $|\mathbf{q}| \ll k_F$ статическая диэлектрическая проницаемость описывается следующим выражением

$$\epsilon(\mathbf{q}; 0) \rightarrow 1 + \frac{K_0^2}{q^2};$$

где $K_0^2 = 4\pi e^2 g(\mathcal{E}_F)$, где $g(\mathcal{E}_F)$ — плотность состояний на поверхности Ферми. Этот результат известен как приближение Томаса–Ферми.

Указание: Задача рассмотрена в [12], стр. 286–287; [13], стр. 830–831.

3.5. В приближении Томаса–Ферми ($|q| \ll k_F$) исследовать пространственное распределение электрического поля, создаваемого точечным зарядом в газе свободных свободных электронов.

Указание: Задача рассмотрена в [12], стр. 287–288; [13], стр. 830–831; [2], т. 1, стр. 340–342.

3.6. В приближении Томаса–Ферми ($|q| \ll k_F$) исследовать пространственное распределение электрического поля, создаваемого равномерно заряженной прямолинейной нитью в газе свободных свободных электронов.

3.7. Пользуясь результатом задачи II, показать, что при $I = 0$ и $T = 0$ статическая диэлектрическая проницаемость описывается следующим выражением

$$\epsilon(\mathbf{q}; 0) = 1 + \frac{4^{1/2} e^2}{q^2} \cdot \frac{m^* k_F}{\hbar^2 4^{1/2}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1 - x^2}{4x} \ln \left| \frac{1 + x}{1 - x} \right| \right); \quad x = q = 2k_F.$$

3.8. Пользуясь результатом задачи VII, показать, что вдали от точечного заряда электрический потенциал спадает по следующему закону

$$\phi(r) \propto \frac{Q}{r^3} \cos(2k_F r).$$

Этот результат известен как осцилляции Фриделя.

Указание: Подобная задача рассмотрена в [4], т.10, стр. 204–206.

3.9. Пользуясь результатом задачи III, показать, что при $I \gg \epsilon_{k+q}^0 - \epsilon_k^0$ диэлектрическая проницаемость описывается следующим выражением

$$\epsilon(\mathbf{q}; I) \rightarrow 1 - \frac{I^2}{I_p^2};$$

где $I_p^2 = 4^{1/2} e^2 N = m^*$ — плазменная частота.

Указание: Задача рассмотрена в [13], стр. 832.

§6. Электронная подсистема в металле. Элементы теории Ферми–жидкости.

1. Концепция квазичастиц

Поведение реальной системы взаимодействующих электронов (электронной жидкости) может быть понято на основе общей концепции Ландау об энергетических спектрах конденсированных квантовых систем и теории ферми–жидкости. Согласно идее Ландау, любая однородная система, состоящая из большого числа частиц, имеет низколежащие возбуждения того же типа что и колеблющаяся решетка атомов, где роль элементарных возбуждений играют фононы. Всякое слабовозбужденное состояние макротела можно рассматривать как совокупность отдельных элементарных возбуждений. Эти возбуждения ведут себя как некие квазичастицы, движущиеся в занимаемом телом объеме и обладающие определенными импульсом \mathbf{p} и энергией $\epsilon(\mathbf{p})$. Квазичастицы могут иметь целый или полуцелый спин, а их статистика не связана однозначно со статистикой частиц, составляющих систему.

2. Элементарные возбуждения в изотропной квантовой ферми–жидкости

В основе теории слабо возбужденных состояний квантовой жидкости ферми–типа лежит предположение о том, что энергетический спектр возбуждений ферми–жидкости аналогичен спектру идеального ферми–газа. Основное состояние идеального ферми–газа соответствует заполнению частицами всех состояний внутри сферы Ферми с радиусом p_F , таким что

$$\frac{N}{V} = 2 \frac{4/3 \pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3} \quad (66)$$

Любое возбужденное состояние может быть построено из основного путем последовательного перевода частиц из внутренней области ферми–сферы наружу. Получающееся при этом состояние отличается от исходного наличием частицы в состоянии с $p > p_F$ и античастицы с $p < p_F$. Эти частицы и античастицы играют роль элементарных возбуждений ферми–газа, обладают импульсом в окрестности p_F и спином $1/2$ и могут возникать и исчезать парами.

Принципиальные различия между возбуждениями ферми–жидкости и идеального

ферми-газа происходят из-за того, что возбуждения в жидкости взаимодействуют между собой. При этом, исходным для построения спектра возбуждений ферми-жидкости является предположение о неизменности классификации уровней при постепенном включении взаимодействия. Таким образом, слабовозбужденное состояние ферми-жидкости может быть описано совокупностью элементарных возбуждений со спином $1=2$ и импульсами $\rho \sim \rho_F$, причем величина ρ_F связана с плотностью частиц жидкости соотношением (66). Возбуждения в жидкости также бывают двух типов: квазичастицы с $\rho > \rho_F$ и античастицы с $\rho < \rho_F$, которые могут появляться и исчезать только парами.

Остановимся теперь на предположении, что каждой квазичастице может быть приписан определенный импульс \mathbf{p} . Оно справедливо при условии достаточной малости квантовой неопределенности импульса и энергии, связанной со столкновениями. Рассмотрим возбуждение, которое характеризуется некоторым значением $\pm\rho = \rho - \rho_F$. В силу принципа запрета Паули и закона сохранения энергии, такое возбуждение может рассеиваться в состояния, расположенные в $\pm\rho$ -окрестности ρ_F . При этом рассеянные квазичастицы могут переходить лишь в свободные состояния из области $\pm\rho$. В результате, вероятность столкновения, а следовательно, и неопределенность импульса и энергии, определяются величиной $\pm\rho^2$:

$$\frac{\hbar}{\dot{\iota}} \sim \pm\rho^2 :$$

Поскольку возбуждения подчиняются статистике Ферми, характерная величина $\pm\rho$ для термодинамически равновесного распределения определяется шириной его размытости: $\pm\rho \sim T$. Если взаимодействие не является слабым, то остальные характерные энергетические параметры оказываются порядка энергии Ферми, и из соображений размерности неопределенность энергии принимает вид:

$$\frac{\hbar}{\dot{\iota}} \sim \frac{T^2}{\mu_F} :$$

Условие существования хорошо определенных квазичастиц, таким образом, дает ограничение на температуру:

$$\frac{\hbar}{\dot{\iota}} \sim \frac{T^2}{\mu_F} \ll T :$$

Это условие легко выполнимо в реальных металлах поскольку $\mu_F \sim 1 - 10\text{eV} \sim 10^4 - 10^5 \text{K}$. При низких температурах вблизи поверхности Ферми энергия квазичастиц

может быть разложена в ряд по $\pm\rho$:

$$\epsilon = \epsilon_F \simeq v_F^*(\rho - \rho_F) ;$$

где $v_F^* = \rho_F m^*$ - скорость на Ферми поверхности, которая может существенно отличаться от скорости Ферми невзаимодействующих частиц. Ненаблюдаемая заполненная сфера Ферми может быть устранена путем введения элементарных возбуждений, которые появляются лишь при ненулевой температуре, и представляют собой квазичастицы вне ферми-сферы ($\rho > \rho_F$) и античастицы (дырки) внутри нее ($\rho < \rho_F$). Энергия таких возбуждений (квазичастиц) обязательно положительна:

$$\epsilon = v_F^* |\rho - \rho_F| : \quad (67)$$

Отметим, что взаимодействие между возбуждениями приводит к тому, что описание ферми-жидкости с помощью квазичастиц имеет смысл только вблизи граничного импульса ρ_F , когда неопределенность энергии и связанное с этим затухание возбуждений малы, по сравнению с самой энергией.

Кроме сделанных выше предположений о свойствах элементарных возбуждений в теории ферми-жидкости предполагается, что взаимодействие квазичастиц может быть описано с помощью самосогласованного поля, действующего на квазичастицу со стороны остальных квазичастиц. В этом случае, полная энергия системы E не сводится к сумме энергий квазичастиц:

$$E = V \neq 2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \epsilon(\mathbf{p}) n(\mathbf{p}) ;$$

а становится теперь функционалом, зависящим от функции распределения квазичастиц $n(\mathbf{p})$ по импульсу, где

$$2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} n(\mathbf{p}) = N = V$$

– это число квазичастиц в единице объема. Для определения энергии отдельной квазичастицы необходимо вычислить вариационную производную полной энергии системы по функции распределения:

$$\pm E = V = 2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \epsilon(\mathbf{p}) \pm n(\mathbf{p}) : \quad (68)$$

Действительно, из последней формулы видно, что $\epsilon(\mathbf{p})$ – это изменение энергии системы при добавлении еще одной квазичастицы с импульсом \mathbf{p} .

В свою очередь, энергия квазичастиц $\epsilon(\mathbf{p})$ также является функционалом, зависящим от функции распределения $n(\mathbf{p})$:

$$\epsilon(\mathbf{p}) = 2 \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{p}; \mathbf{p}') \epsilon n(\mathbf{p}') :$$

Определенная таким образом функция $f(\mathbf{p}; \mathbf{p}')$ является второй вариационной производной от полной энергии по ϵn , а следовательно, симметрична относительно перестановки переменных \mathbf{p} и \mathbf{p}' :

$$f(\mathbf{p}; \mathbf{p}') = f(\mathbf{p}'; \mathbf{p}) :$$

Функция $f(\mathbf{p}; \mathbf{p}')$ характеризует взаимодействие квазичастиц и связана с амплитудой рассеяния двух квазичастиц.

Определение энергии квазичастиц (68) приводит к тому, что равновесная функция распределения совпадает по виду с распределением Ферми. Для доказательства этого, воспользуемся выражением для энтропии идеального газа:

$$S = -2 \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} [n \ln(n) + (1 - n) \ln(1 - n)] ;$$

которая справедлива и в случае ферми-жидкости, если предположить неизменность классификации уровней энергии при учете взаимодействия между частицами. Из условия максимума энтропии и сохранения числа частиц и энергии,

$$\delta N = 0; \quad \delta E = 0;$$

можно, варьируя по ϵn , найти функцию распределения:

$$n(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/T} + 1} ; \quad (69)$$

в котором энергия ϵ является функционалом от n . Заметим, однако что распределение квазичастиц (69) только формально аналогично распределению Ферми - Дирака и в действительности представляет собой сложное неявное определение $n(\epsilon)$.

3. Учет спина возбуждений в изотропной квантовой ферми-жидкости

С учетом спина квазичастиц функция распределения становится матрицей по спиновым переменным: $n_{\alpha\beta}(\mathbf{p})$. Приведенные выше соотношения примут вид:

$$\delta E = 2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} n_{\alpha\beta}(\mathbf{p}) \delta n_{\beta\alpha}(\mathbf{p}) = \text{Sp} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \epsilon(\mathbf{p}) \delta \hat{n}(\mathbf{p})$$

$$\pm n_{\alpha\beta}(\mathbf{p}) = \pm n(\mathbf{p}) = \text{Sp}' \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \hat{f}(\mathbf{p}; \mathbf{p}') \pm \hat{n}(\mathbf{p}') = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} f_{\alpha\gamma, \beta\delta}(\mathbf{p}; \mathbf{p}') \pm n_{\delta\gamma}(\mathbf{p}') ;$$

$$N=V = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} n_{\alpha\alpha}(\mathbf{p})$$

(след берется по паре спиновых индексов, отвечающих импульсу \mathbf{p}' , по повторяющимся индексам подразумевается суммирование). Соотношение симметрии для функции взаимодействия f принимает вид:

$$f_{\alpha\gamma, \beta\delta}(\mathbf{p}; \mathbf{p}') = f_{\gamma\alpha, \delta\beta}(\mathbf{p}'; \mathbf{p}) :$$

Энергия квазичастиц вблизи ферми поверхности дается выражением:

$$\epsilon - \epsilon_F = v_F(\rho - \rho_F) + \text{Sp}' \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \hat{f}(\mathbf{p}; \mathbf{p}') \pm \hat{n}(\mathbf{p}') : \quad (70)$$

Второй член в (70) описывает зависимость энергии квазичастицы от температуры. Отклонение $\pm \hat{n}$ заметно отлично от нуля только в узком слое значений \mathbf{p}' вблизи поверхности ферми-сферы. В таком же слое находятся и импульсы \mathbf{p} реальных квазичастиц. Поэтому можно положить $\rho = \rho' = \rho_F$, а функция $\hat{f}(\mathbf{p}; \mathbf{p}')$ будет зависеть только от направлений векторов \mathbf{p} и \mathbf{p}' .

Если спиновая зависимость энергии и функции распределения отсутствуют (не ферромагнитный металл в отсутствие магнитного поля), то мы получаем:

$$n_{\alpha\beta} = n_{\pm\alpha\beta} ; \quad n_{\alpha\beta} = n_{\pm\alpha\beta} :$$

4. Магнитная восприимчивость ферми-жидкости

Квазичастицы, обладающие спином, имеют не равный нулю магнитный момент. Собственный магнитный момент электрона (магнетон Бора) дается выражением:

$$\mu_B = |e|\hbar/2mc = 0.927 \times 10^{-20} \text{ эрг/ Гс} .$$

Оператор магнитного момента электрона записывается в виде:

$$\tau = -\mu_B \mathcal{M} ;$$

где

$$\mathcal{M} = (\mathcal{M}_x; \mathcal{M}_y; \mathcal{M}_z)$$

- вектор матриц Паули

$$\mathcal{H}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathcal{H}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathcal{H}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} ;$$

Отношение собственного магнитного момента к собственному механическому (для спина $\hbar=2$) определяется постоянной $e=mc$. В гамильтониане электрона, движущегося в магнитном поле \mathbf{H} , появляется член, связанный со спином:

$$- \gamma \mathbf{H} = \gamma_B \mathcal{H} \mathbf{H} ;$$

Для ферми-газа именно этот член в энергии приводит к парамагнитному вкладу в восприимчивость (парамагнетизм Паули): $\mathbf{M} = \hat{A} \mathbf{H}$. Действительно, для магнитного момента имеем:

$$\mathbf{M} = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{H}} \right)_{T, V, \mu} ;$$

где Ω – термодинамический потенциал. Дополнительная спиновая энергия в магнитном поле есть $\pm \gamma_B H$. Поскольку энергия входит в распределение Гиббса как “ – ”, то изменение энергии описывается эквивалентным изменением химического потенциала $\mu \rightarrow \mu \mp \gamma_B H$. Таким образом, для термодинамического потенциала всей системы имеем:

$$\Omega = \frac{1}{2} \Omega_0 (\mu + \gamma_B H) + \frac{1}{2} \Omega_0 (\mu - \gamma_B H) ;$$

где Ω_0 – термодинамический потенциал в отсутствие поля. Раскладывая это выражение в ряд Тейлора в предположении $\gamma_B H \ll T$ и используя

$$\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} = -N ;$$

где N – число частиц, получаем:

$$\Omega \simeq \Omega_0 + \frac{1}{2} \gamma_B^2 H^2 \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2} ;$$

$$\hat{A} = - \frac{\gamma_B^2}{V} \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2} = \frac{\gamma_B^2}{V} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T, V} ;$$

Считая электронный газ полностью вырожденным, имеем:

$$N = V \frac{(2m\mu)^{3/2}}{3^{1/2} \hbar^3} ; \quad \hat{A} = \frac{\gamma_B^2 \rho_F m}{4^2 \hbar^3} ;$$

Однако в ферми-жидкости, необходимо учесть, что изменение энергии в магнитном поле происходит еще и за счет изменения функции распределения:

$$\mu \pm \mu' = \gamma_B \mathcal{H} \mathbf{H} + \text{Sp}' \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \hat{f}_{\pm} \hat{f}' ;$$

Тогда в линейном порядке по изменению энергии получим:

$$\pm \hat{n} = \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \pm \epsilon ;$$

$$\pm \epsilon = \epsilon_B \mathcal{H} + \text{Sp}' \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \hat{f}(\mathbf{p}; \mathbf{p}') \frac{\partial n'}{\partial \epsilon} \pm \epsilon'(\mathbf{p}') ;$$

Предполагая функцию распределения ступенчатой

$$\frac{\partial n'}{\partial \epsilon} = -\pm(\epsilon' - \epsilon_F) ;$$

будем искать решение на поверхности ферми-сферы в виде

$$\pm \epsilon = \frac{\epsilon_B}{2} g \mathcal{H} ;$$

Функция $\hat{f}(\mathbf{p}; \mathbf{p}')$ в данном случае зависит только от направлений векторов \mathbf{p} и \mathbf{p}' . Если спиновая зависимость функции \hat{f} вызвана обменным взаимодействием, то функция \hat{f} на ферми-поверхности может быть представлена в виде:

$$\hat{f}(\mathbf{p}; \mathbf{p}') = \frac{\pi^2 \hbar^3}{m^* \rho_F} [F(\mu) + \mathcal{H} \mathcal{H}' G(\mu)] ;$$

где F и G – две функции угла μ между импульсами \mathbf{p} и \mathbf{p}' . Поскольку

$$\text{Sp} \mathcal{H} = 0 ; \quad \text{Sp}' (\mathcal{H} \mathcal{H}') \mathcal{H}' = \frac{1}{3} \mathcal{H} \text{Sp}' (\mathcal{H}' \mathcal{H}') = 2\mathcal{H}$$

и получим $g = 2 - g\overline{G}$, или

$$g = \frac{2}{1 + \overline{G}} ;$$

где

$$\overline{G} = \frac{1}{4\pi} \int G(\mu) \sin \mu d' \mu$$

есть результат усреднения по углам. Для магнитного момента единицы объема жидкости получаем выражение:

$$\hat{A}\mathbf{H} = -\epsilon_B \text{Sp} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \mathcal{H} \pm \hat{n} = -\epsilon_B \text{Sp} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \mathcal{H} \pm \epsilon' \frac{\partial n'}{\partial \epsilon} = \epsilon_B \frac{m^* \rho_F}{2\pi^2 \hbar^3} \text{Sp} \mathcal{H} \pm \epsilon'(\epsilon_F) ;$$

Учитывая, что

$$\text{Sp} (\mathcal{H}\mathbf{H})\mathcal{H} = 2\mathbf{H} ;$$

запишем восприимчивость:

$$\hat{A} = \frac{\epsilon_B^2 m^* \rho_F}{\pi^2 \hbar^3 (1 + \overline{G})} ;$$

Заметим, что выражение $\epsilon_B^2 m^* \rho_F / \pi^2 \hbar^3$ – это восприимчивость вырожденного ферми-газа из частиц с магнитным моментом ϵ_B . Множитель $(1 + \overline{G})^{-1}$ отражает взаимодействие между частицами, характерное для ферми-жидкости.

5. Нулевой звук в ферми-жидкости

Неравновесная функция распределения квазичастиц $\hat{n}(\mathbf{p}; \mathbf{r}; t)$ подчиняется кинетическому уравнению:

$$\frac{d\hat{n}}{dt} = St\hat{n};$$

где $St\hat{n}$ – интеграл столкновений, характерная величина которого определяется частотой столкновений $1=\zeta$. Рассмотрим распределения, которые слабо отличаются от равновесных:

$$\hat{n}(\mathbf{p}; \mathbf{r}; t) = n_0(\mathbf{p}) + \pm\hat{n}(\mathbf{p}; \mathbf{r}; t);$$

В этом случае энергия квазичастицы имеет вид:

$$" = " _0 + \pm " ;$$

$$\pm " = Sp' \int \hat{f}(\mathbf{p}; \mathbf{p}') \pm \hat{n}(\mathbf{p}') \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3};$$

$$\frac{\partial "}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial \pm "}{\partial \mathbf{r}} = Sp' \int \hat{f}(\mathbf{p}; \mathbf{p}') \frac{\partial \pm \hat{n}(\mathbf{p}')}{\partial \mathbf{r}} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3};$$

Учитывая уравнения Гамильтона

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{\partial "}{\partial \mathbf{p}}; \quad \hat{\mathbf{p}} = -\frac{\partial "}{\partial \mathbf{r}};$$

с точностью до членов первого порядка получаем:

$$\frac{d\hat{n}}{dt} = \frac{\partial \pm \hat{n}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{n}}{\partial \mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} + \frac{\partial \hat{n}}{\partial \mathbf{p}} \hat{\mathbf{p}} = \frac{\partial \pm \hat{n}}{\partial t} + \frac{\partial \pm \hat{n}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial " _0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \pm "}{\partial \mathbf{r}};$$

Изменение во времени \hat{n} как оператора по спиновым переменным дается коммутатором $[i"; \hat{n}] = \hbar$ который не дает вклада в члены первого порядка по возмущению при не зависящих от спина n_0 и $" _0$. Применим кинетическое уравнение к исследованию колебательных движений ферми-жидкости. Тип волн существенно определяется параметром $! \zeta$, где $!$ – частота волны. При низких температурах $\zeta \propto T^{-2}$. Если $! \zeta \ll 1$, то столкновения успевают установить термодинамическое равновесие в каждом, малом по сравнению с длиной волны, элементе объема и мы получаем гидродинамические звуковые волны. Если $! \zeta \sim 1$, эти волны оказываются сильно затухающими. В пределе $! \zeta \gg 1$ возникает другой тип колебаний, при которых столкновения квазичастиц практически не играют роли, и в кинетическом уравнении можно опустить интеграл

столкновений. Процесс можно рассматривать как происходящий при абсолютном нуле температуры $T = 0$. Эти волны называются...

Для ступенчатой функции распределения имеем:

$$\frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = -\mathbf{v} \pm (\dots - \dots_F) = -\mathbf{n} \pm (\rho - \rho_F) ;$$

где $\mathbf{v} = \partial n_0 / \partial \mathbf{p} = v_F \mathbf{n}$. Будем искать решение кинетического уравнения при $l \zeta \gg 1$ в виде волны:

$$\pm \hat{n} = \pm (\dots - \dots_F) \circ(\mathbf{n}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t} ;$$

$$(! - v_F \mathbf{n} \mathbf{k}) \circ(\mathbf{n}) = \mathbf{n} \mathbf{k} \frac{\rho_F^2}{(2\frac{1}{4}\hbar)^3} S \rho' \int \sin \mu' d' \mu' d\mu' \hat{f}(\mathbf{n}; \mathbf{n}') \circ(\mathbf{n}') :$$

Для колебаний, не затрагивающих спиновых переменных, возмущение функции распределения от них не зависит и динамика системы сводится к деформации ферми-поверхности, что есть существенно неравновесный эффект (в отличие от обычных звуковых колебаний когда меняется только радиус ферми-поверхности, смещенной как целое на величину, определяющуюся скоростью жидкости в волне $\circ = \pm \rho_F + const \cos \mu$).

В результате получаем:

$$(! - \mathbf{v} \mathbf{k}) \circ(\mathbf{n}) = \mathbf{v} \mathbf{k} \int \frac{\sin \mu' d' \mu' d\mu'}{4\frac{1}{4}} F(\widehat{\mathbf{n}\mathbf{n}'}) \circ(\mathbf{n}') :$$

Отметим, что для незатухающих колебаний скорость распространения волны $u_0 = ! = k$ должна превышать скорость Ферми v_F . Пусть $F = F_0$ не зависит от угла. Выберем ось сферической системы координат вдоль \mathbf{k} : $\mathbf{v} \mathbf{k} = v_F k \cos \mu$. Решение уравнения имеет вид:

$$\circ = const \frac{\cos \mu}{s - \cos \mu} ;$$

где $s = u_0 = v_F$. Подставив его в уравнение, получим

$$2\frac{1}{4} F_0 \int_0^\pi \frac{\cos \mu}{s - \cos \mu} \frac{\sin \mu d\mu}{4\frac{1}{4}} = 1 ;$$

$$\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 = \frac{1}{F_0} ;$$

Решение существует при $F_0 > 0$. Асимптотика $F_0 \rightarrow 0$ имеет вид:

$$s - 1 \simeq 2e^{-2} e^{-2/F_0} ;$$

Заметим, что рассмотренный тип нулевого звука характеризуется не равным нулю средним изменением плотности: ρ . В результате в заряженной ферми-жидкости в металле, где изменение электронной плотности приводит к возникновению электрических полей, существование такого звука становится проблематичным. Однако, даже в этом случае возможно существование звуковых волн с возмущением поверхности Ферми, содержащем азимутальные гармоники $\rho \propto e^{im\varphi}$, поскольку для нулевого звука с $m \neq 0$ колебания происходят без изменения плотности жидкости.

б. Спиновые волны в ферми-жидкости

Кинетическое уравнение допускает также решения, зависящие от спина:

$$\rho = \frac{1}{2} \chi(\mathbf{n}) :$$

Уравнение для вектора χ принимает вид:

$$(S - \cos \mu) \chi(\mathbf{n}) = \cos \mu \int \frac{\sin \mu' d\mu'}{4^{1/4}} G(\widehat{\mathbf{nn}'}) \chi(\mathbf{n}') :$$

В результате проведенные выше вычисления справедливы при замене $F \rightarrow G$. Спиновые волны могут возбуждаться под действием магнитного поля в электромагнитной волне, к ним может быть чувствителен, таким образом, импеданс. Экспериментально обнаружен специальный тип спиновых волн – волны, распространяющиеся в присутствии магнитного поля.

Дополнительная литература: [1], Гл.1; [2], Гл.17; [3], Гл.4 (§2)

III. Фононы в кристалле. Теплоемкость твердых тел.

Электронная часть теплоемкости (c_v) в металлах зависит от температуры как T , а в диэлектриках этот вклад вообще экспоненциально мал в силу наличия запрещенной зоны: $c_v \propto e^{-E_g/T}$. В результате поведение теплоемкости как функции температуры в принципе не может быть объяснено без учета колебаний кристаллической решетки. Простейшее приближение здесь – это классическая теория гармонического кристалла.

§1. Классическая теория гармонического кристалла. Закон Дюлонга-Пти.

При классическом рассмотрении средняя энергия колебаний решетки (на единицу объема) может быть вычислена с использованием распределения Гиббса следующим образом:

$$\bar{E} = \frac{1}{V} \frac{\int d\Gamma H e^{-\beta H}}{\int d\Gamma e^{-\beta H}}; \quad \beta = 1/T; \quad (71)$$

в котором $d\Gamma$ – это элемент фазового пространства кристалла:

$$d\Gamma = \prod_{\mathbf{R}} d\mathbf{u}(\mathbf{R}) d\mathbf{P}(\mathbf{R}) = \prod_{\mathbf{R},i} du_i(\mathbf{R}) dp_i(\mathbf{R});$$

Здесь $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ – поле смещений ионов от положения равновесия, $\mathbf{P}(\mathbf{R})$ – импульс иона с равновесным положением \mathbf{R} , а гамильтониан H определяется выражением:

$$H = \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{P}^2(\mathbf{R})/2M + U;$$

В гармоническом приближении потенциальную энергию U принято записывать в виде:

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', i, k} u_i(\mathbf{R}) \Lambda_{i,k}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') u_k(\mathbf{R}'); \quad (72)$$

где U_0 – равновесная энергия при нулевых смещениях. Вводя статистическую сумму Z :

$$Z = \int d\Gamma e^{-\beta H}; \quad (73)$$

можно записать выражение для энергии (71) следующим образом:

$$\bar{E} = -\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z;$$

Производя в (73) замену переменных

$$\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}}\sqrt{V} ; \mathbf{P} = \tilde{\mathbf{P}}\sqrt{V} ;$$

в гармоническом приближении (72) получим:

$$Z = \text{const} \times e^{-\beta U_0 - 3N} ;$$

где N – число атомов в кристалле. Тепловая энергия \bar{E} , таким образом, имеет вид:

$$\bar{E} = \frac{U_0}{V} + \frac{3N}{V} T ;$$

а для удельной теплоемкости получаем закон Дюлонга–Пти:

$$c_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{3N}{V} ;$$

§2. Квантовая теория гармонического кристалла.

Полученный ответ для теплоемкости оказывается верным лишь для достаточно высоких температур. При низких температурах теплоемкость стремится к нулю и для описания этого поведения необходимо учесть квантование колебаний кристаллической решетки. Рассмотрим случай, когда в элементарной ячейке находится \circ атомов. Гамильтониан колеблющихся атомов в гармоническом приближении может быть записан в виде:

$$H = \sum_{s\mathbf{R}} \frac{M_s \dot{\mathbf{u}}_s^2(\mathbf{R})}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i\ s\ \mathbf{R} \\ k\ s'\ \mathbf{R}'}} \Lambda_{ik}^{ss'}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') u_{is}(\mathbf{R}) u_{ks'}(\mathbf{R}') ; \quad (74)$$

где $\mathbf{u}_s(\mathbf{R})$ - вектор смещения S -ого атома в элементарной ячейке с радиус-вектором \mathbf{R} , $S = 1::\circ$ – номер атома с массой M_s в ячейке. Коэффициенты Λ обладают свойством симметрии

$$\Lambda_{ik}^{ss'}(\mathbf{R}) = \Lambda_{ki}^{s's}(-\mathbf{R}) ;$$

очевидным из вида гамильтониана (74) и связаны определенными соотношениями, отражающими инвариантность решетки относительно параллельного смещения или поворота. Соответствующие гамильтониану (74) уравнения движения Ньютона имеют вид:

$$M_s \ddot{u}_{si} = - \sum_{k\ s'\ \mathbf{R}'} \Lambda_{ik}^{ss'}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') u_{ks'}(\mathbf{R}') ; \quad (75)$$

Подставляя решение в виде плоской волны

$$\mathbf{u}_s(\mathbf{R}) = \mathbf{e}_s(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R} - i\omega t)$$

в уравнения (75) получим систему из 3° однородных алгебраических уравнений относительно комплексных величин $\mathbf{e}_s(\mathbf{k})$, которые зависят только от индекса s и определяют амплитуду и поляризацию колебаний:

$$\sum_{s'=1}^{\nu} \Lambda_{ik}^{ss'}(\mathbf{k}) e_{s'k} - \omega^2 M_s e_{si} = 0; \quad (76)$$

где введено обозначение

$$\Lambda_{ik}^{ss'}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} \Lambda_{ik}^{ss'}(\mathbf{R}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R});$$

Система уравнений (76) относительно e_{si} имеет ненулевое решение при выполнении условия совместности

$$\det \left| \Lambda_{ik}^{ss'}(\mathbf{k}) - \omega^2 M_s \delta_{ik} \delta_{ss'} \right| = 0; \quad (77)$$

Каждое из 3° решений дисперсионного уравнения (77) определяет закон дисперсии $\omega = \omega_\alpha(\mathbf{k})$ в моде колебаний α . Среди 3° ветвей спектра колебаний $\omega = \omega_\alpha(\mathbf{k})$ существуют три акустические ветви у которых при низких частотах спектр колебаний линеен по волновому вектору, а решетка колеблется в целом как сплошная среда. В сложных решетках, содержащих более одного атома в элементарной ячейке, существует еще $3(\nu - 1)$ типа волн, у которых частота не обращается в нуль при $k = 0$, а стремится при $k \rightarrow 0$ к постоянному пределу. Эти колебания решетки называют оптическими. Отметим несколько общих свойств дисперсионных соотношений:

1. Поскольку величины $\Lambda_{ik}^{ss'}(\mathbf{R})$ составляют эрмитову матрицу, то собственные вектора e_{si} такой матрицы, отвечающие различным собственным значениям, взаимно ортогональны:

$$\sum_{s=1}^{\nu} M_s \mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k}) \mathbf{e}_s^{*(\alpha')}(\mathbf{k}) = \delta_{\alpha\alpha'};$$

Это условие отражает свойство ортогональности поляризаций в различных ветвях спектра.

2. Симметрия относительно изменения знака времени означает, что функция $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ должна быть четной:

$$\omega_\alpha(-\mathbf{k}) = \omega_\alpha(\mathbf{k});$$

3. Волновой вектор \mathbf{k} определен с точностью до вектора обратной решетки \mathbf{K} : значения \mathbf{k} отличающиеся на \mathbf{K} физически эквивалентны, а функция $!(\mathbf{k})$ периодична в пространстве обратной решетки:

$$!_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = !_{\alpha}(\mathbf{k}) ;$$

что позволяет ограничиться значениями \mathbf{k} из первой зоны Бриллюэна.

Произвольное колебательное движение кристаллической решетки может быть представлено в виде суперпозиции бегущих плоских волн. Общее выражение для смещения атомов $\mathbf{u}_s(t; \mathbf{R})$ имеет вид:

$$\mathbf{u}_s(t; \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}\alpha} \mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} + c.c. \right) ; \quad (78)$$

Здесь N - число элементарных ячеек в кристалле, $\mathbf{e}_s^{(\alpha)}$ - вектор поляризации в моде колебаний α , суммирование по \mathbf{k} ведется по зоне Бриллюэна. Векторы поляризации удовлетворяют уравнению (76) и предполагаются нормированными согласно условию:

$$\sum_{s=1}^{\nu} \frac{M_s}{M} \mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k}) \mathbf{e}_s^{*(\alpha')}(\mathbf{k}) = \delta_{\alpha\alpha'} ;$$

где $M = \sum_{s=1}^{\nu} M_s$ - суммарная масса атомов в одной ячейке. Произвол в выборе векторов $\mathbf{e}_s^{(\alpha)}$ можно устранить наложением дополнительного условия

$$\mathbf{e}_s^{(\alpha)}(-\mathbf{k}) = \mathbf{e}_s^{*(\alpha)}(\mathbf{k}) ;$$

следующего из эрмитовости матрицы $\Lambda_{ik}^{ss'}(\mathbf{R})$. Коэффициенты $a_{\mathbf{k}\alpha}$ есть функции времени и удовлетворяют уравнению осциллятора:

$$\ddot{a}_{\mathbf{k}\alpha} + !_{\alpha}^2(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\alpha} = 0 ;$$

Полагая

$$a_{\mathbf{k}\alpha} \sim e^{-i\omega_{\alpha}(\mathbf{k})t} ;$$

легко видеть, что каждое слагаемое в разложении (78) представляет собой бегущую плоскую волну. Подставляя выражение для смещений (78) в исходный гамильтониан (74), мы получим следующее выражение для колебательной энергии решетки через амплитуду $a_{\mathbf{k}\alpha}$ колебаний в моде α :

$$E = 2M \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} !_{\alpha}^2(\mathbf{k}) |a_{\mathbf{k}\alpha}|^2 ; \quad (79)$$

(его проверка- это задача на экзамене) Таким образом, полная энергия колебаний решетки представляет собой сумму энергий отдельных бегущих плоских волн.

Выполним преобразование, в результате которого уравнения движения решетки примут вид канонических уравнений механики. Для этого перейдем к каноническим переменным, которые аналогичны координате и импульсу обычного осциллятора:

$$Q_{\mathbf{k}\alpha} = \sqrt{M}(a_{\mathbf{k}\alpha} + a_{\mathbf{k}\alpha}^*) ;$$

$$P_{\mathbf{k}\alpha} = -i\hbar \alpha(\mathbf{k})\sqrt{M}(a_{\mathbf{k}\alpha} - a_{\mathbf{k}\alpha}^*) = \dot{Q}_{\mathbf{k}\alpha} ;$$

При этом гамильтониан (79) и уравнения движения принимают стандартный вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \left(P_{\mathbf{k}\alpha}^2 + \hbar^2 \alpha^2(\mathbf{k}) Q_{\mathbf{k}\alpha}^2 \right) ; \quad (80)$$

$$\dot{Q}_{\mathbf{k}\alpha} = \partial H / \partial P_{\mathbf{k}\alpha} ; \quad \dot{P}_{\mathbf{k}\alpha} = -\partial H / \partial Q_{\mathbf{k}\alpha} ; \quad \ddot{Q}_{\mathbf{k}\alpha} + \hbar^2 \alpha^2(\mathbf{k}) Q_{\mathbf{k}\alpha} = 0 ;$$

Стандартное правило перехода к квантовой теории в рассматриваемом случае сводится к замене переменных $Q_{\mathbf{k}\alpha}$ и $P_{\mathbf{k}\alpha}$ на операторы с коммутационными соотношениями вида:

$$[\hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha}, \hat{P}_{\mathbf{k}\alpha}] = i\hbar ;$$

Можно показать что такой способ квантования эквивалентен учету квантовой механики для исходной системы взаимодействующих осцилляторов. Функция Гамильтона (80) заменяется аналогичным оператором, собственные значения которого хорошо известны. Спектр энергий полученной задачи имеет вид суммы энергий осцилляторов:

$$E = \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \hbar \alpha(\mathbf{k}) (n_{\mathbf{k}\alpha} + 1/2) ;$$

где $n_{\mathbf{k}\alpha} = 0; 1; 2; \dots$ – целые числа заполнения различных мод колебаний.

Таким образом, возбужденное состояние решетки можно рассматривать как совокупность элементарных возбуждений (квазичастиц), каждое из которых имеет энергию $\hbar \hbar \alpha(\mathbf{k})$. Квантовые числа $n_{\mathbf{k}\alpha}$ становятся при этом числами заполнения различных состояний квазичастиц.

Общее выражение для внутренней энергии с учетом квантовой механики принимает вид:

$$\bar{E} = \frac{1}{V} \frac{\sum_n E_n e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} = -\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z ;$$

Здесь

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

– это статистическая сумма, а n – это многомерный индекс, нумерующий квантовомеханические состояния. В нашем конкретном случае состояние с некоторым индексом n задается всей совокупностью чисел заполнения $n_{\mathbf{k}\alpha}$. Прямое вычисление статистической суммы приводит нас к выражению:

$$Z = \prod_{\mathbf{k}\alpha} \sum_{n_{\mathbf{k}\alpha}=0}^{\infty} e^{-\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})(n_{\mathbf{k}\alpha} + 1/2)} = \prod_{\mathbf{k}\alpha} \frac{e^{-\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})/2}}{1 - e^{-\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})}}.$$

В результате для средней энергии получаем:

$$\bar{E} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})(n_{\mathbf{k}\alpha} + 1/2);$$

где

$$n_{\mathbf{k}\alpha} = \frac{1}{e^{\hbar\beta\omega_{\alpha}(\mathbf{k})} - 1}$$

– это распределение Бозе–Эйнштейна с нулевым химическим потенциалом. При высоких температурах $T \gg \hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})$ это выражение для средней энергии дает закон Дюлонга–Пти.

Рассмотрим противоположный предел низких температур. Очевидно, что вклад всех мод колебаний, для которых $\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k}) > T$, оказывается экспоненциально мал. Таким образом, вклады от оптических ветвей фононного спектра становятся несущественными при достаточно малых температурах. Напротив, акустические ветви спектра обеспечивают в данном пределе доминирующий вклад в среднюю энергию и теплоемкость. Действительно, при низких частотах колебаний спектр линеен по волновому вектору и для любой сколь угодно малой температуры найдутся моды с частотами меньшими температуры. В этом режиме мы вполне можем выбрать следующую аппроксимацию фононного спектра и плотности фононных мод:

$$\hbar\omega_{\ell} = u_{\ell}k; \quad \hbar\omega_t = u_tk;$$

$$\frac{V}{(2\pi)^3} d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi (\hbar\omega)^2 d\omega \left(\frac{1}{u_{\ell}^3} + \frac{2}{u_t^3} \right) = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi (\hbar\omega)^2 d\omega \frac{1}{\bar{u}^3};$$

где u_{ℓ} и u_t – скорости продольного и поперечного звуков, соответственно. В итоге для температурно – зависящей части средней энергии имеем:

$$\pm \bar{E} = \int_0^{\infty} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\beta\omega} - 1} \cdot \frac{(\hbar\omega)^2}{2\pi^2} d\omega \frac{1}{\bar{u}^3} = \frac{3T^4}{2\pi^2 \hbar^3 \bar{u}^3} \int_0^{\infty} \frac{z^3 dz}{e^z - 1} = \frac{3T^4}{2\pi^2 \hbar^3 \bar{u}^3} \cdot \frac{\pi^4}{15};$$

Соответственно, выражение для теплоемкости принимает вид:

$$c_v = \frac{12 T^3}{2 \sqrt[4]{2} \hbar^3 \sqrt[3]{V}} \cdot \frac{\sqrt[4]{4}}{15} ;$$

Полученная формула справедлива лишь при достаточно низких температурах, значительно ниже комнатной температуры. На практике для описания поведения теплоемкости в широком интервале температур используют интерполяционные формулы.

§3. Интерполяционные формулы Дебая и Эйнштейна.

Рассмотрим здесь две основные интерполяционные формулы. Первая из них (формула Дебая) основана на следующем предположении. Будем считать, что на всем протяжении спектра частотная зависимость плотности состояний совпадает с той, которая имеет место на низких частотах, а спектр обрывается на некоторой частоте ω_m . Эта частота обрезания спектра (дебаевская частота) находится из условия нормировки числа колебаний на правильное число:

$$\frac{3V}{2 \sqrt[4]{2} \sqrt[3]{V}} \int_0^{\omega_m} \omega^2 d\omega = \frac{V \omega_m^3}{2 \sqrt[4]{2} \sqrt[3]{V}} = 3N^o ;$$

где N – это полное число элементарных ячеек в кристалле, а o – число атомов в элементарной ячейке. В итоге выражение для температурно – зависящей части средней энергии принимает вид:

$$\bar{E} = \int_0^{\omega_m} \frac{\hbar \omega^3 3N^o}{(e^{\hbar \beta \omega} - 1) V \omega_m^3} d\omega = \frac{3N^o}{V} \cdot T \cdot D\left(\frac{\mu}{T}\right) ;$$

где

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

– это функция Дебая. Для удельной теплоемкости получаем (см. рис.3):

$$c_v = \frac{3N^o}{V} \left(D\left(\frac{\mu}{T}\right) - \frac{\mu}{T} D'\left(\frac{\mu}{T}\right) \right) ;$$

Интересным следствием рассматриваемой интерполяции является существование соответственных состояний: для двух кристаллов с разной температурой Дебая μ можно подобрать температуры измерения теплоемкости так, что значения теплоемкости

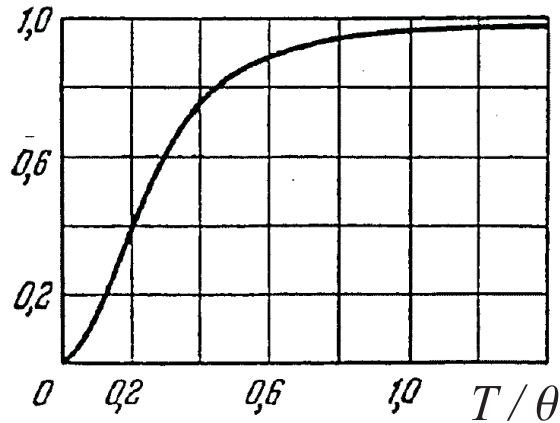


Рис. 3: Удельная теплоемкость $c_v V / 3N \nu$ в приближении Дебая

будут одинаковы. Безусловно интерполяция Дебая хороша лишь для кристаллов с простыми решетками, для малого числа оптических мод спектра. Для описания вклада в теплоемкость оптических фононов более адекватной является модель Эйнштейна, в которой частота оптического фонона ω_E предполагается независимой от волнового вектора во всей зоне Бриллюэна. Соответствующий вклад в среднюю энергию имеет вид:

$$\frac{N \hbar \omega_E}{e^{\hbar \beta \omega_E} - 1} ;$$

Задачи к разделу: Фононы в кристалле

3.1. Получите закон дисперсии фононов в одномерной цепочке атомов со взаимодействием между m - ближайшими соседями.

$$U = \sum_n \sum_{m>0} \frac{1}{2} C_m (u_n - u_{n+m}) ;$$

где u_n смещение n -го атома в решетке.

3.2. Вычислить фононную теплоемкость кристалла.

Указание: Задача рассмотрена в [2] т.2 стр.81-91

3.3. Вычислить теплопроводность изолятора (фононную часть теплопроводности кристалла).

Указание: Задача рассмотрена в [2] т.2 стр.127-133

3.4. Какой тип колебаний в кристалле может возбуждаться при поглощении электромагнитного излучения?

3.5. Для фононов в металлах вывести соотношение Бома–Ставера, связывающее скорость Ферми v_F и скорость звука в металле c :

$$c^2 = \frac{Zm}{3M} v_F^2,$$

где Z — заряд иона, M — масса иона, m — масса электрона.

Указание: Задача рассмотрена в [2] т.2 стр.138-141

Дополнительная литература: [1], Гл.22, 23.

IV. Ангармонизм колебаний решетки и тепловое расширение твердых тел.

В данном разделе мы обсудим физическую природу теплового расширения твердых тел. Задача эта является примером, иллюстрирующим существенную роль отклонений от теории гармонического кристалла. Ангармонические эффекты, рассматриваемые ниже – суть эффекты фонон-фононного взаимодействия. Ангармонические члены дают вклад в свободную энергию кристалла, минимум которой теперь не соответствует нулевым смещениям атомов. При этом весь кристалл расширяется или сжимается до тех пор пока не будет достигнут объем, при котором свободная энергия минимальна. Часто простейшее рассмотрение таких эффектов основано на подходе, в котором частоты фононного спектра рассматриваются как функции объема кристалла.

Общее выражение для коэффициента теплового расширения может быть записано следующим образом:

$$\alpha = \frac{1}{3V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p ;$$

Используя уравнение состояния, получим:

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

и коэффициент теплового расширения принимает вид:

$$\alpha = \frac{1}{3B} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V ;$$

Здесь

$$B = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T$$

– это модуль всестороннего сжатия.

Для дальнейших вычислений используем соотношения:

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T ;$$

$$F = E - TS ; \quad T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V ;$$

$$p = -T \frac{\partial}{\partial V} \left(E - T \int_0^T \frac{dT'}{T'} \frac{\partial}{\partial T'} E(T'; V) \right) ;$$

Здесь E – внутренняя энергия, F – свободная энергия, S – энтропия. В гармоническом приближении выражение для внутренней энергии было получено выше:

$$E = E^{eq} + \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{k}) (n_{\mathbf{k}\alpha} + 1/2) ;$$

где E^{eq} – равновесная энергия кристалла. Подставляя это выражение в приведенные выше соотношения, получим:

$$p = - \frac{\partial}{\partial V} \left(E^{eq} + \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{k}) \right) + \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \left(- \frac{\partial \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{k})}{\partial V} \right) \frac{1}{e^{\hbar \beta \omega_{\alpha}(\mathbf{k})} - 1} ;$$

Если потенциальная энергия имеет строго гармоническую форму, то частоты спектра не могут зависеть от объема кристалла, давление не зависит от температуры и коэффициент теплового расширения обращается в нуль. При учете же ангармонических вкладов имеем:

$$\beta p = \frac{1}{3B} \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \left(- \frac{\partial \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{k})}{\partial V} \right) \frac{\partial n_{\mathbf{k}\alpha}}{\partial T} ;$$

Сравнивая с формулой для удельной теплоемкости

$$c_v = \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} c_{v\alpha}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{k})}{V} \frac{\partial n_{\mathbf{k}\alpha}}{\partial T}$$

и определяя величины

$$\begin{aligned} \beta p_{\mathbf{k}\alpha} &= - \frac{\partial \ln \omega_{\alpha}(\mathbf{k})}{\ln V} ; \\ \beta c_v &= \frac{\sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \beta p_{\mathbf{k}\alpha} c_{v\alpha}(\mathbf{k})}{\sum_{\alpha=1}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} c_{v\alpha}(\mathbf{k})} ; \end{aligned}$$

(параметр Грюнайзена), получим соотношение:

$$\beta p = \frac{\beta c_v}{3B} ;$$

В простейших моделях величины $\beta p_{\mathbf{k}\alpha}$ одинаковы для всех мод. В модели Дебая, например, все частоты линейно зависят от дебаевской частоты ω_m , и, следовательно, получаем:

$$\beta p = - \frac{\partial \ln \omega_m}{\ln V} ;$$

Модуль B слабо зависит от температуры, и коэффициент теплового расширения имеет ту же температурную зависимость, что и удельная теплоемкость.

Дополнительная литература: [1], Гл.25.

V. Электрон-фононное взаимодействие в металлах.

§1. Диэлектрическая проницаемость металла. Качественная теория.

Полная диэлектрическая проницаемость металла $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ по определению связывает потенциалы ϕ и ϕ^{ext} :

$$\epsilon \phi = \phi^{ext} ; \quad (81)$$

Аналогично можно ввести диэлектрическую проницаемость, связанную с чисто электронным вкладом

$$\epsilon^{el} \phi = \phi^{ext} + \phi^{ion} ; \quad (82)$$

где

$$-\Delta(\phi^{ext} + \phi^{ion}) = 4\pi(\rho^{ext} + \rho^{ion}) ;$$

либо диэлектрическую проницаемость, связанную с чисто ионным вкладом (голых ионов)

$$\epsilon_0^{ion} \phi = \phi^{ext} + \phi^{el} ; \quad (83)$$

где

$$-\Delta(\phi^{ext} + \phi^{el}) = 4\pi(\rho^{ext} + \rho^{el}) ;$$

Складывая теперь уравнения (82) и (83) и вычитая (81) получим:

$$(\epsilon^{el} + \epsilon_0^{ion} - \epsilon) \phi = \phi^{ext} + \phi^{el} + \phi^{ion} = \phi ;$$

что дает нам следующее выражение для полной диэлектрической проницаемости:

$$\epsilon = \epsilon^{el} + \epsilon_0^{ion} - 1 ;$$

Запишем теперь отдельные вклады в диэлектрическую проницаемость. При этом для электронной части ϵ^{el} пренебрежем временной дисперсией, предположив, что $\omega \ll qV_F$:

$$\epsilon^{el} = 1 + \frac{k_0^2}{q^2} ;$$

Для ионной части воспользуемся противоположным предельным случаем $\omega \gg qV$ (где V - характерная скорость движения ионов, которую мы можем оценить из соотношения $MV^2 \sim T$):

$$\epsilon_0^{ion} = 1 - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2} ;$$

Оба неравенства совместны друг с другом, поскольку $v \ll V_F$. В результате имеем:

$$\epsilon = 1 + \frac{k_0^2}{q^2} - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2} ;$$

Здесь мы ввели обозначение Ω_p для плазменной частоты колебаний ионов:

$$\Omega_p^2 = \frac{4\pi n_i Z^2 e^2}{M} = \frac{Zm}{M} \omega_p^2 ;$$

где ω_p - плазменная частота колебаний электронов, $n_i = n_e = Z$.

§2. Акустические колебания. Ионный звук в плазме. Соотношение Бома–Ставера.

Полученная выше диэлектрическая проницаемость может быть использована для определения спектра продольных плазменных мод, известных также как ионный звук.

Уравнение собственных колебаний дается условием $\epsilon = 0$:

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \frac{\Omega_p^2}{1 + \frac{k_0^2}{q^2}} ;$$

При малых импульсах q получаем закон дисперсии звука:

$$\omega(\mathbf{q}) = uq ;$$

где для скорости звука имеем так называемое соотношение Бома–Ставера

$$u = V_F \sqrt{\frac{Zm}{3M}} ;$$

Взяв $m/M \sim 10^{-4} - 10^{-5}$, получаем $u \sim 10^6 cm = c$. Отношение скоростей может быть выражено через отношение характерных температур Ферми ($T_F \sim 10^4 K$) и Дебая ($\mu_D \sim 300 K$):

$$\frac{u}{V_F} \simeq \frac{\mu_D}{T_F} ;$$

§3. Вклад фононов в электрон-электронное взаимодействие. Переэкранировка.

Взаимодействие зарядов в среде определяется величиной обратной ϵ :

$$\frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{1 + \frac{k_0^2}{q^2}} \left[\frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega^2(\mathbf{q})} \right] ;$$

где $I(\mathbf{q})$ - это фононный спектр. Зависимость этой величины от частоты отражает запаздывающий характер взаимодействия. Вообще факт взаимодействия электронов именно с продольными колебаниями представляется вполне естественным, если учесть, что электрон должен взаимодействовать с индуцированным зарядом, наведенным при движении ионов, а этот заряд в свою очередь определяется величиной $div\mathbf{P}$, где поляризация определяется полем смещений: $\mathbf{P} \propto \mathbf{u}$. Фурье-образ потенциала взаимодействия двух электронов может быть получен при замене $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, $I \rightarrow (E_k - E_{k'}) = \hbar$:

$$V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = \frac{4\pi e^2}{(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 + k_0^2} \left[\frac{(E_k - E_{k'})^2 = \hbar^2}{(E_k - E_{k'})^2 = \hbar^2 - I^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} \right] :$$

Таким образом, существует область волновых векторов электронов, в которой взаимодействие между ними становится притягивающим. Это явление называется переэкранировкой, поскольку связано с избыточным перераспределением индуцированного заряда. Получающееся притяжение играет важную роль в теории сверхпроводимости.

§4. Перенормировка скорости Ферми, вызванная электрон-фононным взаимодействием.

Для оценки влияния электрон-фононного взаимодействия на электронный спектр в металлах воспользуемся феноменологическим обобщением теории Хартри-Фока для свободных электронов. Обменная поправка к энергии электрона в пренебрежении экранировкой имеет вид:

$$\Delta E_{\mathbf{k}} = - \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} f(\mathbf{k}') ;$$

где $f(\mathbf{k}')$ - фермиевская функция распределения. Для учета экранировки мы можем феноменологически заменить матричный элемент кулоновского взаимодействия в этом выражении на $V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$, приведенный в предыдущем подразделе:

$$\Delta E_{\mathbf{k}} = - \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}') :$$

Полученное выражение есть интегральное уравнение на энергию $E_{\mathbf{k}}$. Используя, однако, условие $\hbar \omega_D \ll E_F$ мы можем получить следующие важные выводы: (а)

уровень Ферми и поверхность Ферми не изменяются с учетом ионной поправки к экранировке; (б) скорость Ферми уменьшается, а плотность состояний увеличивается на коэффициент $1 + \delta$, где $\delta \lesssim 1$ (см. рис. 4).

§5. Влияние электрон–фононного рассеяния на сопротивление металлов.

В пределе высоких температур $T \gg \hbar \omega_D$ температурная зависимость сопротивления в основном определяется изменением числа фононов согласно распределению Бозе–Эйнштейна:

$$n(\mathbf{q}) = \frac{1}{e^{\hbar\omega(\mathbf{q})/T} - 1} \simeq \frac{T}{\hbar\omega(\mathbf{q})} ;$$

В результате сопротивление металлов линейно зависит от температуры.

При низких температурах ситуация становится более сложной по следующим причинам.

1. Появляется температурный фактор T^2 , который вызван ограничением на энергии и импульсы фононов: $\hbar\omega(\mathbf{q}) = \hbar u q \lesssim T$. Принимая во внимание законы сохранения энергии и импульса при испускании (поглощении) фонона

$$\hbar\omega(\mathbf{q}) = \pm(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}}) ;$$

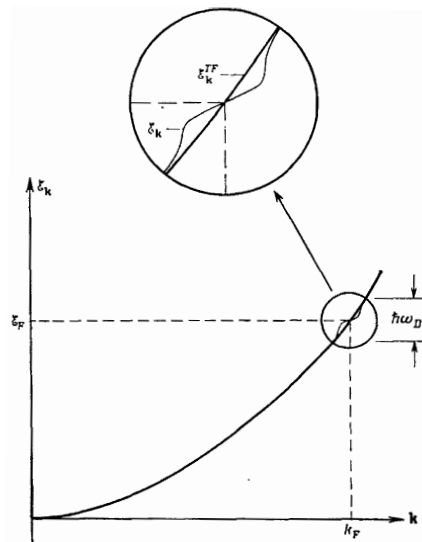


Рис. 4: Поправка к зависимости $E(\mathbf{k})$ для электронов, учитывающая экранировку ионами (электрон–фононная поправка).

можно сделать вывод, что в процессах рассеяния принимают участие лишь фононы с импульсами, лежащими в малом участке поверхности Ферми, который имеет площадь размером $\sim T^2$. Кроме того, константа электрон-фононной связи, определяющаяся величиной $divu$, пропорциональна \sqrt{q} , и, следовательно, ее квадрат, входящий в вероятность рассеяния, линейен по q . Это обстоятельство приводит к дополнительному фактору T и полная частота электрон-фононного рассеяния определяется выражением:

$$\frac{1}{\tau^{e-ph}} \sim T^3 :$$

2. В формулу для проводимости входит не просто величина τ^{e-ph} , а транспортное время свободного пробега, которое отличается появлением в интеграле по импульсам фактора $1 - \cos \mu$, где μ - угол рассеяния, пропорциональный в данном случае малой величине q . В результате появляется дополнительный фактор T^2 .

Получающаяся в итоге температурная зависимость сопротивления следует закону Блоха: $\propto T^5$.

Дополнительная литература: [1], Гл.26.

VI. Квантовые эффекты в проводимости.

Стандартная теория транспортных явлений в металлах и полупроводниках, основанная на кинетическом уравнении, является по сути полуклассической теорией, поскольку электронные волновые пакеты предполагаются хорошо локализованными, а координата и импульс электрона в функции распределения рассматриваются как одновременно определенные классические величины. Конечно, конкретный вид закона дисперсии квазичастиц, который определяет вид кинетического уравнения, отражает, в частности, зонный характер спектра, что есть следствие квантовой механики электрона в периодическом потенциале. Однако, это обстоятельство приводит лишь к изменению некоторых параметров задачи, таких как, например, эффективная масса и др., и транспортные характеристики не содержат эффектов собственно квантово-механической интерференции. Далее мы остановимся на двух задачах, которые позволяют проанализировать некоторые особенности таких квантово-механических эффектов: (а) задаче о транспорте в достаточно малых образцах и (б) задаче об интерференционных поправках к проводимости. Предварительно полезно остановиться на перечислении основных пространственных масштабов, которые определяют физику транспортных явлений. Первым важным масштабом является характерная длина волны электрона, в случае вырожденного электронного газа эта длина волны может быть определена своим значением на уровне Ферми (в металлах она составляет несколько ангстрем). Пространственным масштабом, характеризующим рассеяние, является длина свободного пробега. Для дальнейшего существенно различать длины свободного пробега относительно упругих и неупругих столкновений. Примером упругих столкновений является рассеяние на примесях, для нас важно, что такие процессы рассеяния могут быть описаны в рамках стандартной одноэлектронной квантовой механики путем введения в уравнение Шредингера некоторого потенциала. В качестве примеров неупругих процессов можно привести электрон-фононное и электрон-электронное рассеяние. Эти процессы, как говорят, приводят к сбою квантовомеханической фазы, в том смысле, что мы не можем описать их с помощью одноэлектронного уравнения Шредингера, записанного для волновой функции, обладающей определенной фазой. По сути это означает, что для одного электрона нам приходится иметь дело с матрицей плотности, что

естественно приводит к появлению эффектов интерференции, характерных для одночастичной квантовой механики. Будем обозначать длину свободного пробега относительно упругих столкновений как l , а длину пробега относительно неупругих процессов (ее еще называют длиной срыва фазы) как l_φ . Упругая длина пробега определяется концентрацией и типом дефектов в образце, мы будем предполагать, что эта длина существенно больше длины волны λ_F . При низких температурах неупругая длина пробега, как правило, существенно превосходит упругую длину, что связано с сильной температурной зависимостью частоты неупругих столкновений. Для электрон-электронных столкновений вероятность и, следовательно, частота $1=l_\varphi$ процессов рассеяния определяется произведением фазовых объемов, доступных двум электронам, рассеивающимся в соответствии с законами сохранения энергии и импульса. Вследствие принципа запрета Паули каждый из этих фазовых объемов представляет собой сферический слой толщины, пропорциональной температуре. В результате мы имеем: $l_\varphi = \sqrt{D} l \propto T^{-1}$. Здесь $D = v_F^2 \tau = 3$ – коэффициент диффузии, а $1=l$ – частота упругих столкновений. Времена, характеризующие электрон-фононное рассеяние, были рассмотрены выше: $\tau_\varphi \sim \hbar^3 / m^2 T^3$. При температурах, меньших 10K , длины дефазировки могут достигать величин порядка микрона.

§1. Квантовый транспорт. Теория Ландауэра.

В этом разделе мы рассмотрим особенности транспортных явлений в системах с размерами, меньшими длины срыва квантово-механической фазы. Такие системы принято называть мезоскопическими. Мезоскопическая система описывается квантовой механикой, которая задается уравнением Шредингера, которое в случае невзаимодействующих квазичастиц сводится к уравнению, описывающему задачу упругого рассеяния одного электрона в поле границ и случайных примесей. Основным следствием такой квантовой механики становится интерференция электронных волн, которая проявляется в частности в размерном квантовании спектра за счет формирования стоячих волн. На рис. 5 изображен элементарный пример квантовой ямы, дискретного спектра и волновых функций. Спектр как функция импульса k_{\parallel} вдоль отражающих границ, например границ провода, разбивается на серию парабол – минизон: $E_n(k_{\parallel}) = \epsilon_n + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m$. Для корректного определения транспортной

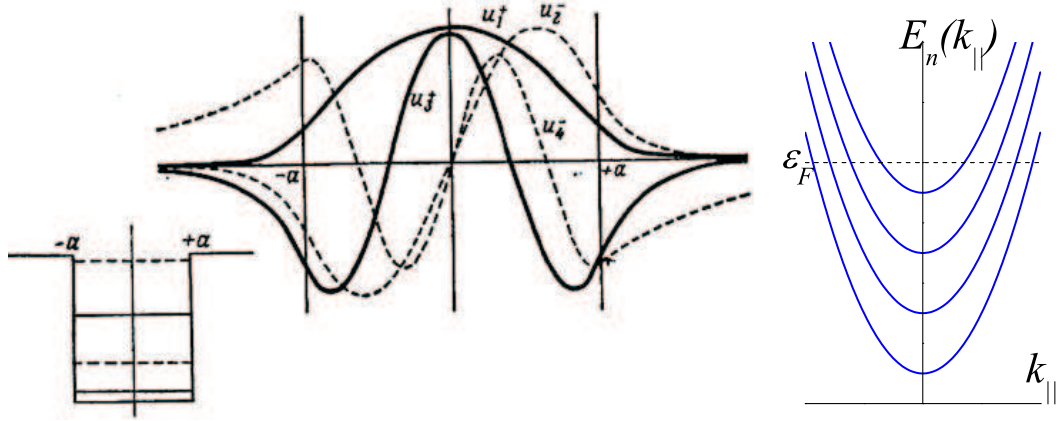


Рис. 5: Энергетические уровни и волновые функции квантовой ямы.

задачи необходимо привести мезоскопическую систему в контакт с массивными хорошо проводящими объектами с размерами, существенно превосходящими длину дефазировки (такие массивные объекты принято называть резервуарами). Наличие резервуаров крайне существенно, поскольку именно в них происходит диссипация энергии, определяемая сопротивлением системы. Нетривиальным здесь, однако, является тот факт, что сама величина омических потерь определяется сопротивлением именно мезоскопического объекта. В качестве примера рассмотрим проводимость обычного нормального провода, в котором электроны движутся, упруго отражаясь от границы с изолятором. Зададим разность химических потенциалов двух резервуаров: $\mu_1 - \mu_2 = eV$, где V – это приложенная разность потенциалов. Запишем ток, текущий из резервуара номер один в резервуар номер два:

$$I_{1 \rightarrow 2} = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dp_{\parallel} \sum_n f_1(E_n) \frac{\partial E_n}{\partial p_{\parallel}} :$$

Здесь $f_1(E)$ – это функция распределения Ферми резервуара номер один. Мы предполагаем при этом, что все отражения частиц на границах провода и резервуаров полностью отсутствуют. Аналогичным образом запишем ток, текущий из резервуара номер два в резервуар номер один:

$$I_{2 \rightarrow 1} = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dp_{\parallel} \sum_n f_2(E_n) \frac{\partial E_n}{\partial p_{\parallel}} :$$

По сути мы здесь задаем определенное модельное приближение для неравновесной функции распределения внутри мезоскопического провода, полагая что в зависимости

от направления групповой скорости частиц их функция распределения приносится либо из первого, либо из второго резервуаров. Полный ток через баллистический канал определяется разностью записанных выше выражений:

$$I = \frac{2e}{2\hbar} \int_0^\infty dp_{\parallel} \sum_n (f_1(E_n) - f_2(E_n)) \frac{\partial E_n}{\partial p_{\parallel}} :$$

В каждой из минизон с номером n мы можем перейти от интегрирования по импульсу p_{\parallel} к интегрированию по энергии. В результате выражение для тока может быть упрощено:

$$I = \frac{e}{\hbar} \sum_n \int_{\varepsilon_n}^\infty d^2(f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)) = \frac{e}{\hbar} \sum_n \int_{\varepsilon_n}^\infty d^2(f(\varepsilon - eV) - f(\varepsilon)) :$$

В линейном приближении по напряжению мы получаем формулу для кондактанса провода (формула Ландауэра):

$$I = GV ; \quad G = \frac{e^2}{\hbar} \sum_n f(\varepsilon_n) :$$

В пределе нулевой температуры получаем

$$G = \frac{e^2}{\hbar} N = \frac{N}{12.9k\Omega} ;$$

где N – число поперечных мод в проводе, спектр которых пересекает уровень Ферми. Для провода с поперечным сечением a^2 получаем кондактанс Шарвина

$$G \simeq \frac{e^2}{\hbar} (k_F a)^2 :$$

Аналогичный вывод можно повторить при наличии рассеяния в проводящем канале. Кондактанс провода дается обобщением формулы Ландауэра,

$$G = \frac{e^2}{\hbar} \sum_n T_n ;$$

где сумма коэффициентов (вероятностей) прохождения T_n берется по поперечным модам провода.

Рассмотренное выше квантование кондактанса было обнаружено экспериментально. Реализовано оно было на 2D электронном газе, причем ширина канала регулировалась потенциалами затворов. Ступеньки кондактанса показаны на рисунке. Упомянем теперь кратко случай существенного упругого рассеяния, когда упругая длина

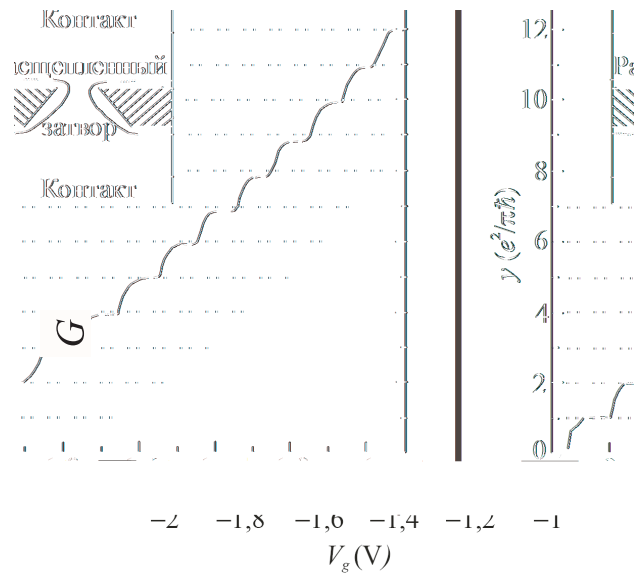


Рис. 6: Кондактанс $2D$ электронного газа.

свободного пробега становится меньше длины провода d . Здесь кондактанс уменьшается с уменьшением длины свободного пробега линейно:

$$G = \frac{e^2}{4h} N \frac{d}{l};$$

а при выполнении критерия Thouless'a ($N \frac{d}{l} < 1$) – экспоненциально

$$G \sim \frac{e^2}{4h} \exp\left(-\frac{d}{N \frac{d}{l}}\right)$$

– т.е. наступает локализация.

Полезно тут отметить, что речь все время идет о среднем кондактансе. На самом деле для мезоскопических образцов зависимость проводимости от конкретной реализации расположения дефектов в данном образце и соответствующие флуктуации проводимости при переходе от образца к образцу являются существенными. Здесь стоит отметить то, что кондактанс становится несосредняющейся величиной, а его флуктуации оказываются замечательным образом универсальными. При этом экспериментально флуктуации кондактанса удобнее наблюдать конечно не сравнивая разные образцы, а рассматривая 1 образец, в котором условия интерференции электронов перестраиваются скажем магнитным полем.

Вообще факт сильнеего влияния магнитного поля на интерференцию, а более точно влияние векторного потенциала, может быть весьма убедительно

продемонстрировано при рассмотрении так называемого эффекта Ааронова-Бома. Суть этого эффекта заключается в следующем. При рассеянии квантовомеханической частицы на тонком длинном соленоиде нам следует рассматривать интерференцию амплитуд вероятности пройти по разным путям, при этом разность фаз вдоль путей контролируется векторным потенциалом. Рассматривая пути проходящие по разные стороны от соленоида, мы видим что разность фаз между ними определяется потоком магнитного поля в соленоиде. В результате интерференция электронных волн, сечение рассеяния соленоида, а значит кондактанс - контролируются потоком. При этом разность фаз между интерферирующими путями при определенных потоках оказывается кратной 2π , при этом поле не влияет на проводимость, а значит кондактанс- периодическая функция магнитного потока. В зависимости от устройства интерферирующих путей, периодичность по потоку есть квант $A_0 = \frac{hc}{e} = 2\pi \hbar c/e$ или 2 кванта потока.

Магнитный поток через кольцо определяет таким образом изменение спектра электронов. Варьируя энергию такой системы по потоку- получаем оценку незатухающих токов, которые протекают в мезоскопических системах. Отметим, что это не сверхпроводящие токи и время их жизни все же конечно, но огромно по сравнению с микроскопическими временами.

§2. Слабая локализация

Упомянутый выше эффект локализации (экспоненциальная зависимость проводимости от длины образца) есть следствие резкого усиления вероятности обратного рассеяния электронной волны на поле случайных примесей вследствие интерференции. Этот эффект проявляется не только в случае квазиодномерных проводящих каналов. Локализация может наблюдаться и в двумерных и трехмерных системах. Принято различать режимы сильной и слабой локализации в зависимости от величины параметра $k_F l$. В режиме слабой локализации ($k_F l \gg 1$) интерференционные члены в проводимости являются малыми поправками к основному вкладу, следующему из стандартного классического рассмотрения в рамках кинетического уравнения. Тем не менее анализ этого режима представляется весьма полезным, в частности, с точки зрения углубления понимания физических причин усиления вероятности обратного

рассеяния для электронных волн.

Здесь мы рассмотрим некоторые простейшие рассуждения, позволяющие познакомиться с явлением слабой локализации на качественном уровне. Очевидной причиной слабости интерференционных эффектов при $k_F \ell \gg 1$ является тот факт, что при сложении комплексных амплитуд вероятности распространения по различным путям происходит усреднение интерференционных членов, поскольку малые отличия геометрических траекторий приводят к большим изменениям фазовых набегов (в силу малости длины волны). Однако, среди множества интерферирующих путей существуют две выделенные траектории, интерференция которых всегда существенна. Речь идет о траекториях с самопересечением, на которых замкнутый участок траектории может быть пройден в противоположных направлениях. Соответствующие квазиклассические набег фаз амплитуд распространения

$$\Delta' = \oint \mathbf{k}_F ds$$

вдоль замкнутых лучей оказываются одинаковыми, в результате чего возникает существенная интерференция таких траекторий. Очевидно, что указанная интерференция должна приводить к увеличению обратного рассеяния электронов, и, следовательно, к уменьшению проводимости \mathcal{A} . Относительный аномальный вклад в проводимость $\Delta\mathcal{A}$ должен быть пропорционален доле траекторий электронов с самопересечением. Полный объем, доступный диффундирующей частице из начала координат по истечении времени t (которое, естественно, превышает время упругих столкновений ℓ) дается выражением \sqrt{Dt} . Вероятность того, что за время dt произойдет самопересечение траектории, можно оценить как отношение объема пространства, в который должна попасть частица, чтобы обеспечить самопересечение, к полному объему, доступному при диффузии. Объем, отвечающий самопересечению траекторий, определяется как длина траектории за время dt , умноженная на ℓ_F^{d-1} , где d – размерность пространства, а ℓ_F выбрана как характерное расстояние между различными квазиклассическими траекториями. Полный объем есть $(Dt)^{d/2}$. В итоге получаем оценку:

$$\frac{\Delta\mathcal{A}}{\mathcal{A}} = - \int_{\tau}^{\tau_{\varphi}} \frac{\ell_F^{d-1} v_F dt}{(Dt)^{d/2}} = \ell_F^{d-1} \frac{v_F}{D} \begin{cases} 2(D\ell_{\varphi})^{-1/2} - 2(D\ell)^{-1/2} ; & d = 3 ; \\ - \ln \frac{\tau_{\varphi}}{\tau} ; & d = 2 ; \end{cases}$$

Здесь в качестве верхнего предела обрезания мы выбираем время дефазировки ℓ_{φ} ,

что представляется естественным, поскольку все наши рассуждения об интерференции ограничены применимостью одночастичной квантовой механики, а значит должны нарушаться на временах, больших ζ_φ . Используя выражение для проводимости по Друдэ $\mathcal{M} = ne^2\zeta = m$, получим:

$$\Delta\mathcal{M} \sim \frac{e^2}{\hbar} \begin{cases} (D\zeta_\varphi)^{-1/2} - (D\zeta)^{-1/2} ; & d = 3 ; \\ - \ln \frac{\tau_\varphi}{\tau} ; & d = 2 ; \end{cases}$$

Увеличение температуры ведет к уменьшению ζ_φ , а значит, к увеличению проводимости и уменьшению сопротивления.

Рассмотренные интерференционные поправки к проводимости очень чувствительны к магнитному полю, которое вносит дополнительные фазовые сдвиги в амплитуды распространения по траекториям, а, следовательно, расфазировывает интерферирующие пути. Для оценки характерных полей дефазировки можно сравнить набег фазы электрона в магнитном поле вдоль замкнутого пути с единицей:

$$\frac{e}{\hbar c} \oint \mathbf{A} ds = \frac{1/4\Phi}{A_0} \sim 1 ;$$

где Φ – это поток магнитного поля через замкнутый контур. Выбирая для площади контура оценку $D\zeta_\varphi$, получаем

$$H \sim \frac{A_0}{D\zeta_\varphi} ;$$

а для времени дефазировки, вызванной магнитным полем:

$$\zeta_H \sim \frac{A_0}{HD} ;$$

В силу расходимости времени ζ_φ при низких температурах величины полей, приводящих к подавлению слабой локализации, и, следовательно, к отрицательному магнитосопротивлению, оказываются существенно ниже квантовых полей.

Задачи к разделу: Квантовый транспорт.

- 3.1. Вычислить квантовую поправку к проводимости для 1D, 2D, 3D.
- 3.2. Вычислить квантовую поправку к проводимости в магнитном поле.
- 3.3. Вычислить кондактанс баллистического канала.

3.4. Вычислить кондуктанс канала с рассеянием на примесях.

Дополнительная литература: [11]

VII. Фазовые переходы. Теория Ландау.

Теория Ландау фазовых переходов второго рода - это важный раздел современной физики конденсированных сред, который широко используется при описании свойств сверхпроводящих (теория Гинзбурга-Ландау) и сверхтекучих фаз, ферромагнетиков, структурных переходов и т.д. Основой такого феноменологического описания является разложение термодинамического потенциала по степеням так называемого параметра порядка. Понятие параметра порядка в каждом конкретном случае требует отдельного определения: в сверхпроводимости это волновая функция куперовских пар, в магнетизме – магнитный момент. Общим для параметров порядка, вводимых в различных системах, является то, что их появление должно отражать нарушение определенной симметрии системы, которое является существенным признаком фазового перехода второго рода. Естественно, что корректное определение параметра порядка требует и понимания микроскопической природы данного фазового перехода. Общий вид разложения Ландау для термодинамического потенциала в системе со скалярным действительным параметром порядка ψ может быть записан следующим образом:

$$\Phi(\rho; T; \psi) = \int dV \left(\Phi_0 + h\psi + A\psi^2 + C\psi^3 + B\psi^4 + g(\nabla\psi)^2 \right) :$$

Коэффициенты в этом выражении есть функции ρ и T . Часть этих коэффициентов может обращаться в нуль вследствие симметрий системы. В точке фазового перехода второго рода значение $\psi = 0$ должно отвечать минимуму термодинамического потенциала, поэтому мы должны положить $h = 0$ и $C = 0$. Первое из этих условий означает отсутствие приложенного внешнего поля, а второе может выполняться либо тождественно в силу симметрии (и тогда мы имеем на плоскости давление–температура линию фазового перехода, задаваемую условием $A(\rho; T) = 0$), либо в некоторой изолированной точке непрерывного фазового перехода, которая задается двумя условиями $A(\rho; T) = 0$ и $C(\rho; T) = 0$. Вблизи критической температуры фазового перехода мы можем положить $A = a(\rho)(T - T_c)$. Параметр порядка определяется из условия равенства нулю вариационной производной функционала термодинамического потенциала. В однородной фазе эта процедура приводит к ответу: $\psi = 0$ для $T > T_c$ и $\psi^2 = -A/2B$ для $T < T_c$. Соответствующая энтропия и теплоемкость могут быть

рассчитаны по формулам:

$$S = - \frac{\partial \Phi}{\partial T} ; \quad c_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p ;$$

Формула для теплоемкости ниже температуры перехода принимает вид:

$$c_p = c_{p0} + \frac{a^2 T_c}{2B} ;$$

т.е. теплоемкость при переходе второго рода испытывает скачок на положительную величину $a^2 T_c = 2B$. Заметим, что коэффициент B является величиной положительной, что следует из требования устойчивости разложения термодинамического потенциала при увеличении значения параметра порядка. Положительным является, как правило и коэффициент g , что следует из условия устойчивости однородного состояния по отношению к пространственной модуляции параметра порядка. Учет градиентных членов в разложении Ландау, оказывается, однако, весьма существенным при рассмотрении границ раздела фаз или в неоднородных системах.

В качестве самостоятельного упражнения студентам предлагается вычислить в рамках теории Ландау отклик системы на внешнее поле h .

Рассматриваемая феноменологическая теория является по сути теорией среднего поля в том смысле, что она не учитывает флуктуаций, а величина $\langle \cdot \rangle$ имеет смысл среднего параметра порядка.

§1. Введение в флуктуационную теорию фазовых переходов

Учет флуктуаций параметра порядка на феноменологическом уровне может быть выполнен следующим образом. Естественно полагать, что вероятность флуктуации должна определяться распределением Гиббса:

$$W \propto e^{-H/T} ;$$

Задача феноменологической теории заключается в выборе правильной аппроксимации микроскопического гамильтониана H . В качестве такой аппроксимации выберем определенный выше функционал Ландау для термодинамического потенциала (за вычетом потенциала симметричной фазы Φ_0). Ограничимся здесь для простоты анализом ситуации выше точки фазового перехода, где среднее значение параметра

порядка равно нулю, а в функционале Ландау мы можем отбросить малые члены четвертого порядка по $\hat{\psi}$.

В качестве простейшей задачи, иллюстрирующей предлагаемый подход к описанию флуктуаций, выполним расчет корреляционной функции $G = \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}(\mathbf{r}_2) \rangle$, усредненной по распределению Гиббса. Перепишем эффективный гамильтониан в этом распределении и коррелятор в представлении Фурье:

$$\hat{\psi}(r) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} ; \quad \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^* = \hat{\psi}_{-\mathbf{k}} ; \quad H = V \sum_{\mathbf{k}} (gk^2 + at) |\hat{\psi}_{\mathbf{k}}|^2 ; \quad t = T - T_c ;$$

$$G = \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}(\mathbf{r}_2) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \langle |\hat{\psi}_{\mathbf{k}}|^2 \rangle ;$$

Введем действительную и мнимую части $\hat{\psi}_{\mathbf{k}} = \chi_{\mathbf{k}} + i\psi_{\mathbf{k}}$ и вычислим соответствующий гауссов интеграл:

$$\begin{aligned} \langle |\hat{\psi}_{\mathbf{k}}|^2 \rangle &= \frac{\int (\chi_{\mathbf{k}}^2 + \psi_{\mathbf{k}}^2) e^{-V \sum_{\mathbf{q}} (gq^2 + at)(x_{\mathbf{q}}^2 + y_{\mathbf{q}}^2)/T} \prod_{\mathbf{q}} dx_{\mathbf{q}} dy_{\mathbf{q}}}{\int e^{-V \sum_{\mathbf{q}} (gq^2 + at)(x_{\mathbf{q}}^2 + y_{\mathbf{q}}^2)/T} \prod_{\mathbf{q}} dx_{\mathbf{q}} dy_{\mathbf{q}}} = \frac{\int (\chi_{\mathbf{k}}^2 + \psi_{\mathbf{k}}^2) e^{-2V(gk^2 + at)(x_{\mathbf{k}}^2 + y_{\mathbf{k}}^2)/T} d\chi_{\mathbf{k}} d\psi_{\mathbf{k}}}{\int e^{-2V(gk^2 + at)(x_{\mathbf{k}}^2 + y_{\mathbf{k}}^2)/T} d\chi_{\mathbf{k}} d\psi_{\mathbf{k}}} = \\ &= \frac{T}{2V(gk^2 + at)} ; \end{aligned}$$

В координатном представлении вблизи критической температуры получаем:

$$G = \frac{T_c}{8\sqrt{g}r} e^{-r/\xi} ;$$

где $\xi = \sqrt{g=at}$ - это корреляционная длина. Вычислим теперь средний квадрат флуктуаций, усредненный по корреляционному объему:

$$\bar{G} \sim \frac{T_c}{g\xi} ;$$

Для оценки относительной величины флуктуаций сравним \bar{G} с характерной величиной среднего параметра порядка $\psi_0^2 = at = 2B$ ниже критической температуры на том же расстоянии от T_c :

$$\frac{\bar{G}}{\psi_0^2} \sim \frac{BT_c}{g\xi at} = \frac{BT_c}{g^{3/2}\sqrt{at}} ;$$

Малость данного отношения означает малость флуктуаций:

$$at \gg \frac{B^2 T_c^2}{g^3}$$

(критерий Леванюка–Гинзбурга). Обратное неравенство определяет так называемую область критических флуктуаций вблизи критической температуры. Сравнивая размер этой области с областью применимости теории Ландау ($t \ll T_c$), получаем, что теория Ландау (теория среднего поля) применима при условии:

$$\frac{B^2 T_c}{g^3 a} \ll 1 :$$

В широком классе наблюдаемых фазовых переходов второго рода (в частности, в сверхпроводниках) этот критерий хорошо выполняется.

Существенно отметить, что рассмотренная выше ситуация относится лишь к случаю флуктуаций в трехмерных системах. При понижении размерности системы роль флуктуационных вкладов возрастает и приводит в целом ряде случаев к качественным отклонениям картины фазового перехода от приведенной выше.

Задачи к разделу: Фазовые переходы. Теория Ландау.

- 3.1. Найти скачок теплоемкости при фазовом переходе II-ого рода в теории Ландау.
- 3.2. Проанализировать влияние внешнего поля на фазовый переход в теории Ландау.
Найти восприимчивость.
- 3.3. Вычислить средний квадрат параметра порядка выше критической температуры

Дополнительная литература: [5] т.5, Гл.14

ЛИТЕРАТУРА

1. О.Маделунг, Теория твердого тела, М.,Наука,1980.
2. М.Ашкрофт, Н.Мермин, Физика твердого тела, М., Мир,1979, 1 и 2 том.
3. А.И.Ансельм, Введение в теорию полупроводников, М., 1978.
4. А.А.Абрикосов, Основы теории металлов, М.,Наука,1987.
5. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, курс "Теоретическая физика т.3,5,9,10, М.,Наука, 1976.
6. Р.Уайт, Квантовая теория магнетизма, М., Мир, 1985.
7. Г.Липкин, Квантовая механика, М: Мир, 1977.
8. Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел,М.,Наука,1967.
9. Л.С.Левитов, А.В.Шитов, Функции Грина. Задачи и решения, М., Физматлит, 2002.
10. А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, М., Физматгиз, 1962
11. Демиховский, Вугальтер, Физика квантовых низкоразмерных структур.
12. Задачи по физике твердого тела, под ред. Г. Дж. Голдсмида, М.: – "Наука 1976 г.
13. В. Г. Левич, Ю. А. Вдовин, В. А. Мямлин, *Курс теоретической физики, т. 2*, М.: Наука, 1971.