

Фононы и электроны в металлах

Я.В. Фоминов

(Дата: 16 декабря 2018)

Это рабочие заметки к курсу лекций «Фононы и электроны в металлах» для студентов 4 курса МФТИ, организованного кафедрой «Проблемы теоретической физики» при ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН. Страница курса находится по адресу <http://chair.itp.ac.ru/index.php?sub=curriculum/ph-el>

Основной материал курса является классическим для этой области науки и поэтому изложен в ряде известных учебников и монографий. Перед началом каждой из двух частей даются указания о подходящих книгах.

Предупреждение. Хотя эти записи имеют вид связного текста и могут оказаться полезны (особенно при изучении указанного курса), они не являются полноценным методическим пособием. Некоторые необходимые подробности и пояснения, обсуждаемые на лекциях, в них не отражены. По мере внесения исправлений/дополнений версия заметок может обновляться на странице курса.

СОДЕРЖАНИЕ

Часть I: Фононы в кристаллах	4
I. Приближения	5
II. Спектр	5
III. Длинноволновый предел, $k \rightarrow 0$	6
IV. Сингулярности Ван Хова	8
V. Частотная зависимость диэлектрической проницаемости	9
VI. Теория упругости для акустических колебаний	12
VII. Ангармонизм и тепловое расширение	14
VIII. Квантование фононов	15
IX. Рассеяние звука на примеси	18
X. Кинетическое уравнение для фононного газа	19
XI. Взаимодействие фононов	22
XII. Время свободного пробега от взаимодействия фононов	27
XIII. Теплопроводность решётки при низких температурах ($T < T_D$)	30
XIV. Рассеяние на примесях	32
XV. Второй звук	34
XVI. Структурные свойства твёрдых тел (методы рассеяния)	36
XVII. Неупругое рассеяние нейтронов	37
Часть II: Электроны в металлах	42

	3
XVIII. Кинетическое уравнение для электронов в металле	43
XIX. Проводимость, обусловленная примесями	46
XX. Теплопроводность	47
XXI. Рассеяние на примесях	48
XXII. Электрон-электронное рассеяние	49
XXIII. Электрон-фононное рассеяние	51
XXIV. Температурная зависимость проводимости и теплопроводности	54
XXV. Кин.уравнение при наличии магнитного поля	55
XXVI. Эффект Холла и магнитосопротивление в слабом магнитном поле	59
XXVII. Эффект Холла в сильном магнитном поле	61
XXVIII. Термоэлектрические явления	65
XXIX. Термомагнитные явления в слабом магнитном поле	69
XXX. Термомагнитные явления в сильном магнитном поле	70
XXXI. Нормальный скин-эффект	73
XXXII. Аномальный скин-эффект	74
XXXIII. Аномальный скин-эффект. Решение кин.уравнения	76
XXXIV. Квантовые эффекты в магнитной восприимчивости электронной системы	82
XXXV. Эффект де Гааза–ван Альфена	84

ЧАСТЬ I: ФОНОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Первая часть курса в большой степени основана на источнике [1], который не является общедоступным. В то же время, обсуждаемые темы разобраны в монографиях [2,3] и известных книгах [4,5].

Литература по части I:

- [1] А.Ю. Китаев, лекции по курсу «Фононы» для 4 курса черноголовской теоргруппы (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН), осень 1996.
- [2] В.Л. Гуревич, «Кинетика фононных систем», М.: Наука, 1980.
- [3] А.М. Косевич, «Основы механики кристаллической решётки», М.: Наука, 1972.
- [4] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, «Физическая кинетика» («Теоретическая физика», том X), М.: Физматлит, 2007.
- [5] Ч. Киттель, «Квантовая теория твёрдых тел», М.: Наука, 1967.

I. ПРИБЛИЖЕНИЯ

Будем говорить о фононах (т.е. о колебаниях атомов) в кристаллах. (Понятие фонона введено И.Е. Таммом в 1932 г.)

Приближения:

1) Адиабатика: $m_{\text{электр}} \ll M_{\text{ядра}}$. После усреднения по быстрым (электронным) степеням свободы остаётся энергия взаимодействия атомов, зависящая от координат атомов: $U = U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Энергия связи имеет «атомный» масштаб, т.е. $E_{\text{св}} \sim 1 \text{ эВ}$.

2) Гармоническое приближение (выполняется хуже, позже мы будем обсуждать отклонения от этого приближения).

$u \ll a$ — малые отклонения атомов от положений равновесия \mathbf{r}_j . $\mathbf{u} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_j$.

$u = u_{\mathbf{a},j,\alpha}$, где \mathbf{a} — номер ячейки, j — номер атома в ячейке, $\alpha = x, y, z$ — компонента вектора отклонения. Для краткости будем обозначать набор индексов одной буквой: $\lambda = (\mathbf{a}, j, \alpha)$.

Гармоническое приближение (работает до точки плавления):

$$U = \frac{1}{2} D_{\lambda\lambda'} u_\lambda u_{\lambda'}, \quad D \sim \frac{E_{\text{св}}}{a^2}. \quad (1.1)$$

Коэффициенты $D_{\lambda\lambda'}$ — силовые постоянные. Симметрия: $D_{\lambda\lambda'} = D_{\lambda'\lambda}$.

II. СПЕКТР

$\omega(k)$ — спектр. Всего есть $3p$ ветвей спектра, где p — число атомов в элементарной ячейке.

Кинетическая энергия:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} m_j \dot{u}_\lambda^2. \quad (2.1)$$

Уравнение движения:

$$m_j \ddot{u}_\lambda = -D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda'}. \quad (2.2)$$

Для $u_\lambda(t) = e^{-i\omega t} u_\lambda$ получаем

$$m_j \omega^2 u_\lambda = D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda'}. \quad (2.3)$$

Для $u_{\mathbf{a},j,\alpha} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} v_{j,\alpha}$, обозначая $(j, \alpha) = \gamma$, получаем

$$m_j \omega^2 v_\gamma = \hat{D}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k}) v_{\gamma'}. \quad (2.4)$$

Трансляционная инвариантность:

$$D_{\mathbf{a},\gamma,\mathbf{a}',\gamma'} = D_{\gamma\gamma'}(\mathbf{a}' - \mathbf{a}). \quad (2.5)$$

Динамическая матрица:

$$\hat{D}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} D_{\gamma\gamma'}(\mathbf{a}). \quad (2.6)$$

Сделаем замену $x_\gamma = \sqrt{m_j}v_\gamma$, тогда уравнение движения принимает вид

$$\omega^2 x_\gamma = \frac{\hat{D}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k})}{\sqrt{m_j m_{j'}}} x_{\gamma'}. \quad (2.7)$$

Матрица в правой части имеет размер $3p \times 3p$, ω^2 — её собственные числа.

Дисперсионное уравнение:

$$\left| \omega^2 \delta_{\gamma\gamma'} - \frac{\hat{D}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k})}{\sqrt{m_j m_{j'}}} \right| = 0 \quad (2.8)$$

При заданном \mathbf{k} это алгебраическое уравнение степени $3p$ относительно ω^2 . Разные решения — разные ветви спектра.

III. ДЛИННОВОЛНОВЫЙ ПРЕДЕЛ, $k \rightarrow 0$

U инвариантно относительно однородного сдвига $u_{\mathbf{a},j,\alpha} \mapsto u_{\mathbf{a},j,\alpha} + v_\alpha$. Соответствующая мода имеет нулевую энергию.

Теорема Голдстоуна. Если при некотором однородном преобразовании энергия не меняется, то этому преобразованию соответствует мягкая мода ($\omega \rightarrow 0$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$).

На языке матрицы силовых постоянных трансляционная инвариантность означает, что

$$\sum_{\mathbf{a}',j'} D_{\mathbf{a},j,\alpha,\mathbf{a}',j',\alpha'} = \sum_{\mathbf{b},j'} D_{(j,\alpha)(j',\alpha')}(\mathbf{b}) = 0. \quad (3.1)$$

Вспомогая, что

$$\hat{D}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{b}} D_{\gamma\gamma'}(\mathbf{b}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{b}}, \quad (3.2)$$

получаем

$$\sum_{j'} \hat{D}_{(j,\alpha)(j',\alpha')}(0) = 0. \quad (3.3)$$

Вспоминая уравнения движения

$$m_j \omega^2 v_{j\alpha} = \hat{D}_{(j\alpha)(j'\alpha')}(\mathbf{k}) v_{j'\alpha'} \quad (3.4)$$

и полагая в них $\mathbf{k} = 0$ и $v_{j\alpha} = v_\alpha$, видим, что $\omega = 0$ является собственным значением. Таким образом, мы убедились, что т. Голдстоуна выполняется.

Можно получить чуть больше: положив в (3.4) $\mathbf{k} = 0$ и просуммировав по j , получаем

$$\omega^2(0) \sum_j m_j \mathbf{v}_j = 0. \quad (3.5)$$

Поэтому в целом при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ есть две возможности: либо $\omega(0) = 0$, либо $\sum_j m_j \mathbf{v}_j = 0$. Первый случай — акустические колебания (все атомы одной элементарной ячейки колеблются в фазе), второй — оптические (атомы одной элементарной ячейки колеблются так, что центр тяжести ячейки остаётся в покое).¹

Если кристалл изотропен в отношении своих упругих свойств, то есть одна продольная акустическая ветвь и две поперечные (скорости звука для двух поперечных мод равны).

Соотношение ортогональности: собственные векторы $x_{j\alpha}^{(s)} = \sqrt{m_j} v_{j\alpha}^{(s)}$, отвечающие разным номерам мод s , должны быть ортогональны, поэтому

$$\sum_{j,\alpha} m_j v_{j\alpha}^{(s)*} v_{j\alpha}^{(s')} = 0 \quad \text{при } s \neq s'. \quad (3.6)$$

Мы можем нормировать собственные векторы $v_{j\alpha}^{(s)}$ как угодно, физические амплитуды колебаний $v_{j\alpha}$ будут выражаться через них с помощью размерных амплитуд w_s :

$$v_{j\alpha} = \sum_s w_s v_{j\alpha}^{(s)}. \quad (3.7)$$

Выберем следующую нормировку:²

$$\sum_{j,\alpha} m_j v_{j\alpha}^{(s)*} v_{j\alpha}^{(s')} = M \delta_{ss'}, \quad (3.8)$$

¹ См. Левитов, Шитов, Задача 1. (Классическая цепочка осцилляторов).

² В дополнение к (3.8) можно получить ещё одно полезное соотношение:

$$\sum_s v_{j\alpha}^{(s)*} v_{j'\beta}^{(s)} = \frac{M}{m_j} \delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta}.$$

Для этого нужно умножить (3.8) на $v_{j'\beta}^{(s)}$ и просуммировать по s .

И это соотношение, и (3.8) на самом деле просто следствия того, что v — собственные векторы эрмитовой матрицы. А весовые множители возникли потому, что это не матрица \hat{D} , а матрица $\hat{D}/\sqrt{m_j m_{j'}}$.

где M — полная масса элементарной ячейки. При этом $v_{j\alpha}^{(s)}$ — безразмерные векторы.

Акустическая мода с номером β : $v_{j\alpha}^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta}$ при $\mathbf{k} = 0$. Она ортогональна любой оптической моде, поэтому

$$\sum_{j,\alpha} m_j v_{j\alpha}^{(\beta)} v_{j\alpha}^{\text{опт}} = 0 = \sum_j m_j v_{j\beta}^{\text{опт}}. \quad (3.9)$$

Таким образом, мы видим, что центр масс в оптической моде действительно не смещается.

IV. СИНГУЛЯРНОСТИ ВАН ХОВА

Пусть мы вычисляем величину типа энергии (или теплоёмкость и т.д.). При этом возникают интегралы вида

$$\int f(\omega(\mathbf{k})) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} = \int f(\omega) \nu(\omega) d\omega, \quad \nu(\omega) = \int \delta(\omega - \omega(\mathbf{k})) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}. \quad (4.1)$$

Здесь $\nu(\omega)$ — плотность состояний.

Например,

$$E = \int \frac{\omega(\mathbf{k})}{\exp \frac{\omega(\mathbf{k})}{T} - 1} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}. \quad (4.2)$$

Напоминалка (функция одной переменной):

$$\delta(g(x)) = \frac{1}{|g'(x_0)|} \delta(x - x_0). \quad (4.3)$$

Плотность состояний (для наглядности в 2D):

$$\nu(\omega) = \int_{\omega(\mathbf{k})=\omega} \frac{1}{|\omega'(\mathbf{k})|} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}. \quad (4.4)$$

В знаменателе возникает групповая скорость:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}. \quad (4.5)$$

Критические точки $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = 0$, в них особенности плотности состояний. Это называется сингулярности Ван Хова (Van Hove singularities), они дают большой вклад в вычисляемую величину. Это общая вещь для всех типов квазичастиц, не только для фононов.

Скажем, 1D цепочка атомов со спектром, осциллирующим между ω_{\min} и ω_{\max} . Вблизи экстремума

$$\omega(k) \approx \omega_0 + \frac{A}{2}(k - k_0)^2, \quad v(k) \approx A(k - k_0). \quad (4.6)$$

Тогда

$$\nu(\omega) \propto \frac{1}{v} \Big|_{k=k_0 \pm \sqrt{\frac{|\omega - \omega_0|}{|A|}}} \propto \frac{1}{\sqrt{|\omega - \omega_0|}}. \quad (4.7)$$

V. ЧАСТОТНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ

Свет взаимодействует с оптическими фононами (почему не с акустическими — увидим чуть позже). Фононы дают вклад в диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\omega)$. Это величина, которая для монохроматического поля определяет связь напряжённости электрического поля и электрической индукции:

$$\mathbf{D} = \varepsilon(\omega)\mathbf{E}. \quad (5.1)$$

$\varepsilon(\infty)$ определяется электронами (нарушается адиабатическое приближение). Можно записать $\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + 4\pi\kappa(\omega)$, где $\kappa(\omega)$ — диэлектрическая восприимчивость фононов.

Будем рассматривать однородное электрическое поле ($k \ll a^{-1}$). Уравнение движения при наличии поля:

$$m_j \ddot{v}_{j\alpha} = -\hat{D}_{j\alpha, j'\alpha'}(0)v_{j'\alpha'} + q_j E_\alpha. \quad (5.2)$$

Ищем решение для смещения в виде $v \propto e^{-i\omega t}$, где ω — частота поля. Решение можно разложить по фоновым модам как

$$v_{j\alpha} = \sum_s w_s v_{j\alpha}^{(s)}, \quad (5.3)$$

где $v_{j\alpha}^{(s)}$ — собственные векторы динамической матрицы:

$$\hat{D}_{j\alpha, j'\alpha'}(0)v_{j'\alpha'}^{(s)} = m_j \omega_s^2 v_{j\alpha}^{(s)}. \quad (5.4)$$

Подставляем-получаем:

$$-\sum_s m_j \omega_s^2 v_{j\alpha}^{(s)} w_s = -\sum_s m_j \omega_s^2 v_{j\alpha}^{(s)} w_s + q_j E_\alpha. \quad (5.5)$$

Собственные векторы $v_{j\alpha}^{(s)}$ безразмерные, а $v_{j\alpha}$ и w_s имеют размерность длины.

Применяя операцию

$$\sum_{j\alpha} v_{j\alpha}^{(s')} \times \quad (5.6)$$

и используя ортонормированность (3.8), находим

$$w_s = \frac{\sum_{j\alpha} v_{j\alpha}^{(s)} q_j E_\alpha}{M(\omega_s^2 - \omega^2)}. \quad (5.7)$$

Комбинация

$$q_\alpha^{(s)} = \sum_j v_{j\alpha}^{(s)} q_j \quad (5.8)$$

имеет смысл эффективного дипольного момента, соответствующего s -той моде. Таким образом,

$$w_s = \frac{\sum_\alpha q_\alpha^{(s)} E_\alpha}{M(\omega_s^2 - \omega^2)}. \quad (5.9)$$

Поляризация (точнее, дипольный момент одной элементарной ячейки):

$$P_\alpha = \sum_j v_{j\alpha} q_j = \sum_{sj} w_s v_{j\alpha}^{(s)} q_j = \sum_s w_s q_\alpha^{(s)} = \sum_s \frac{q_\alpha^{(s)} q_\beta^{(s)}}{M(\omega_s^2 - \omega^2)} E_\beta. \quad (5.10)$$

Тут становится ясно, почему мы рассматриваем именно оптические фононы: акустические не имеют дипольного момента. Чтобы получить дипольный момент единицы объёма, нужно еще умножить на концентрацию N элементарных ячеек в веществе. В результате получаем тензор диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \varepsilon_{\alpha\beta}(\infty) + 4\pi \sum_s \frac{N q_\alpha^{(s)} q_\beta^{(s)}}{M(\omega_s^2 - \omega^2)}. \quad (5.11)$$

Ответ к задаче будет иметь вид

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{A}{\omega_0^2 - \omega^2}. \quad (5.12)$$

Рассмотрим теперь трёхмерный кубический кристалл. Считаем $k \ll a^{-1}$.

Пусть мы возбуждаем собственную продольную моду. Тогда

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{D} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{D} = 0, \quad (5.13)$$

поэтому $\varepsilon(\omega_{\parallel}) = 0$.

Теперь пусть мы возбуждаем собственную поперечную моду. Если $\omega/c \ll k$, то

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{k} \times \mathbf{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E} = 0, \quad (5.14)$$

поэтому $\varepsilon(\omega_{\perp}) = \infty$.

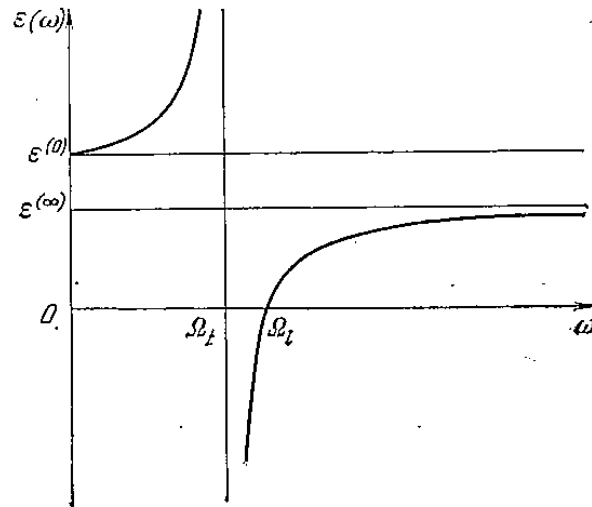


Рис. 1. $\varepsilon(\omega)$ для случая одной оптической моды. В наших обозначениях $\Omega_{\perp} \equiv \omega_{\perp}$, $\Omega_{\parallel} \equiv \omega_{\parallel}$. Интервал частот, в котором $\varepsilon(\omega) < 0$ — это область непрозрачности кристалла. [Рисунок из книги В.Л. Гуревича «Кинетика фононных систем».]

Полученные соотношения означают, что

$$\omega_{\perp} = \omega_0, \quad (5.15)$$

$$\omega_{\parallel}^2 = \omega_0^2 + \frac{A}{\varepsilon(\infty)}. \quad (5.16)$$

С точки зрения эксперимента A напрямую неизвестно. Избавляясь от неё, можем переписать (5.12) в виде

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \frac{\omega^2 - \omega_{\parallel}^2}{\omega^2 - \omega_{\perp}^2}, \quad (5.17)$$

причём частоты ω_{\parallel} и ω_{\perp} связаны соотношением Лиддана–Сакса–Теллера:

$$\frac{\omega_{\parallel}^2}{\omega_{\perp}^2} = \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)}. \quad (5.18)$$

Если не предполагать условия $\omega/c \ll k$, то для поперечных колебаний нужно писать:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{k} \times \mathbf{E} = \frac{\omega}{c} \mathbf{B}. \quad (5.19)$$

Если вещество немагнитно, то можно заменить \mathbf{B} на \mathbf{H} . Тогда, применяя операцию $\mathbf{k} \times$ и используя ещё одно уравнение Максвелла

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\frac{\omega}{c} \mathbf{D}, \quad (5.20)$$

получаем соотношение

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega). \quad (5.21)$$

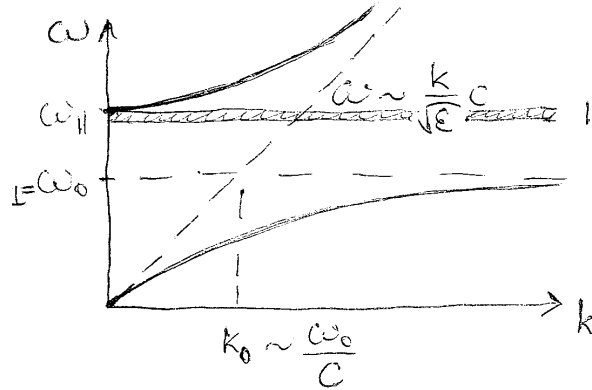


Рис. 2. Две ветви поляритонов $\omega_{1,2}(k)$ и две асимптотики $\omega = ck/\sqrt{\varepsilon(0)}$ и $\omega = ck/\sqrt{\varepsilon(\infty)}$. Поляритоны — это поперечные оптические фононы, взаимодействующие с электромагнитным полем.

VI. ТЕОРИЯ УПРУГОСТИ ДЛЯ АКУСТИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ

Атомы в элементарной ячейке колеблются в фазе, волновой вектор моды предполагается малым, $k \ll a^{-1}$. В этом случае смещение очень медленно меняется в пространстве и вещество можно считать непрерывной средой. Тогда работает теория упругости. В гармоническом приближении энергию упругой деформации можно записать через тензор деформации

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (6.1)$$

в случае $u_{ij} \ll 1$ как

$$E = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \lambda_{ijkl} u_{ij} u_{kl}. \quad (6.2)$$

[Полезно понимать, что случай $\partial u_i / \partial x_j = -\partial u_j / \partial x_i$, в котором тензор деформации зануляется, соответствует повороту.]

Пусть на вещество действуют силы $f_i(\mathbf{r})$. Это приводит к деформации и изменению энергии:

$$\delta E = \int d\mathbf{r} \lambda_{ijkl} \delta u_{ij} u_{kl} = \int d\mathbf{r} \lambda_{ijkl} \frac{\partial(\delta u_i)}{\partial x_j} u_{kl}. \quad (6.3)$$

Вводя понятие тензора упругих напряжений

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijkl} u_{kl}, \quad (6.4)$$

можем написать

$$\delta E = \int d\mathbf{r} \sigma_{ij} \frac{\partial(\delta u_i)}{\partial x_j} = \int d\mathbf{r} \left(-\delta u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} \delta u_i) \right) = - \int d\mathbf{r} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \delta u_i + \int dS \sigma_{ij} \delta u_i n_j. \quad (6.5)$$

С другой стороны, изменение энергии можно записать через действие внешних сил:

$$\delta E = \int d\mathbf{r} f_i \delta u_i + \delta E_{\text{surface}}. \quad (6.6)$$

Нас интересует объёмная часть. Видим, что условием равновесия является

$$f_i = - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}. \quad (6.7)$$

Величины λ_{ijkl} составляют тензор модулей упругости. В изотропном случае можно доказать, что он задаётся двумя независимыми переменными, коэффициентами Ламэ λ и μ (второй коэффициент Ламэ μ — это модуль сдвига):³

$$\lambda_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (6.8)$$

Собственные колебания:

$$\rho \ddot{u}_i = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \quad (6.9)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) = \lambda_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l}, \quad (6.10)$$

откуда получаем

$$- \rho \omega^2 u_i = - \lambda_{ijkl} k_j k_l u_k. \quad (6.11)$$

³ Покажем, как коэффициенты Ламэ связаны с модулем всестороннего сжатия K . Модуль всестороннего сжатия вводится следующим образом:

$$u_{ij} = \frac{\varepsilon}{3} \delta_{ij}, \quad \sigma_{ij} = -p \delta_{ij}, \quad \delta V = u_{ii} = \varepsilon, \\ K = -\frac{p}{\varepsilon},$$

где p — давление.

При этом

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijkl} u_{kl} = \lambda \delta_{ij} u_{kk} + 2\mu u_{ij} = \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu \right) \varepsilon \delta_{ij},$$

поэтому

$$K = \lambda + \frac{2}{3}\mu.$$

Записывая волновой вектор с помощью направляющих косинусов,

$$k_j = \nu_j k, \quad (6.12)$$

видим, что закон дисперсии должен иметь вид

$$\omega(\mathbf{k}) = c_s(\boldsymbol{\nu})k, \quad (6.13)$$

а скорость звука c_s находится из дисперсионного уравнения

$$|\rho c_s^2 \delta_{ik} - \lambda_{ijkl} \nu_j \nu_l| = 0. \quad (6.14)$$

VII. АНГАРМОНИЗМ И ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ

Помимо гармонического есть также ангармонические вклады в энергию деформации кристалла, главный из них — кубический:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} D_{\lambda\lambda'} u_\lambda u_{\lambda'} + \frac{1}{6} \sum_{\lambda\lambda'\lambda''} K_{\lambda\lambda'\lambda''} u_\lambda u_{\lambda'} u_{\lambda''}. \quad (7.1)$$

Можно сделать преобразование Фурье и записать кубический ангармонизм в виде

$$U_3 = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{q}''} K(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'') u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} u_{\mathbf{q}''}. \quad (7.2)$$

Вследствие трансляционной инвариантности должно выполняться условие

$$\mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{q}'' = 0. \quad (7.3)$$

Здесь содержатся различные процессы. Обратим внимание на случай $\mathbf{q} = 0$ (это соответствует однородному расширению, т.е. нас интересует вклад

$$\sum_{\mathbf{q}'} K(0, \mathbf{q}', -\mathbf{q}') u_0 u_{\mathbf{q}'} u_{-\mathbf{q}'}. \quad (7.4)$$

Этот вклад описывает сдвиг частоты фононов за счёт однородного расширения:

$$\tilde{\omega}_{s,q} = \omega_{s,q}(1 + \gamma\varepsilon), \quad u_{ij} = \frac{\varepsilon}{3} \delta_{ij}. \quad (7.5)$$

Здесь γ — константа Грюнайзена. Для многих веществ она оказывается примерно равной -2 . Это обусловлено тем, что межатомные силы в различных веществах имеют похожий вид.

Свободная энергия с учётом вкладов однородного расширения и свободного фононного газа:

$$F = \frac{K\varepsilon^2}{2} + F_{\text{ph}}(\varepsilon), \quad (7.6)$$

где K — модуль однородного сжатия, a^4

$$F_{\text{ph}} = T \sum_{s,\mathbf{q}} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{T}} \right). \quad (7.7)$$

Минимизируем F по ε :

$$\frac{\partial F}{\partial \varepsilon} = 0 = K\varepsilon + \frac{\partial F_{\text{ph}}}{\partial \varepsilon}. \quad (7.8)$$

Найдём последнее слагаемое:

$$\frac{\partial F_{\text{ph}}}{\partial \varepsilon} = \sum_{s,\mathbf{q}} \frac{e^{-\frac{\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{T}} \hbar \frac{\partial \tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{\partial \varepsilon}}{1 - e^{-\frac{\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{T}}} = \gamma \sum_{s,\mathbf{q}} \hbar\omega_{s,\mathbf{q}} n_{s,\mathbf{q}} = \gamma E_{\text{ph}}. \quad (7.9)$$

Поэтому получаем

$$\varepsilon = \frac{-\gamma}{K} E_{\text{ph}}, \quad (7.10)$$

что означает, что ε растёт с температурой.

VIII. КВАНТОВАНИЕ ФОНОНОВ

$n_{s,\mathbf{q}} \ll 1$ при $T \ll T_D$ и наоборот, $n_{s,\mathbf{q}} \gg 1$ при $T \gg T_D$. Обычно $T_D \sim 100\text{-}1000$ К.

Имея в виду формулы

$$u_{\mathbf{a},j,\alpha} = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{a}} v_{j,\alpha}, \quad v_{j,\alpha} = \sum_s w_{s,\mathbf{q}} v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})}, \quad (8.1)$$

введём нормальные координаты $Q_{s,\mathbf{q}} = \sqrt{N} w_{s,\mathbf{q}}$:

$$u_{\mathbf{a},j,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s,\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{a}} v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} Q_{s,\mathbf{q}}, \quad (8.2)$$

где N — число ячеек во всём кристалле. Будем использовать соотношения

$$Q_{s,\mathbf{q}}^* = Q_{s,-\mathbf{q}}, \quad \left(v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} \right)^* = v_{j,\alpha}^{(s,-\mathbf{q})}, \quad (8.3)$$

⁴ Пояснение к формуле (7.7):

$$\begin{aligned} F_{\text{ph}} &= \sum_{s,\mathbf{q}} F_{\text{ph}}^{(s,\mathbf{q})} = \sum_{s,\mathbf{q}} -T \ln \sum_n e^{-E_n/T} = -T \sum_{s,\mathbf{q}} \ln \sum_n e^{-n\hbar\omega_{s,\mathbf{q}}/T} = \\ &= -T \sum_{s,\mathbf{q}} \ln \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega_{s,\mathbf{q}}/T}} = T \sum_{s,\mathbf{q}} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{T}} \right). \end{aligned}$$

которые получаются следующим образом. Во-первых, $v_{j,\alpha}$ — собственные векторы динамической матрицы $\hat{D}(\mathbf{q})$. В задаче мы доказывали, что $\hat{D}^\dagger = \hat{D}$ и $\hat{D}(-\mathbf{q}) = \hat{D}^T(\mathbf{q})$. Отсюда $\hat{D}(-\mathbf{q}) = \hat{D}^*(\mathbf{q})$. Поэтому собственные векторы можно взять такими, чтобы изменение знака импульса приводило к комплексному сопряжению. А дальше можно сказать, что $u_{\mathbf{a},j,\alpha}$ — вещественная функция, поэтому для её фурье-образа $v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} Q_{s,\mathbf{q}}$ изменение знака приводит к комплексному сопряжению. Это даёт нужное соотношение и для Q .

В нормальных координатах получаем

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} m_j \dot{u}_{\lambda}^2 = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{a},j,\alpha} \sum_{s,\mathbf{q}} \sum_{s',\mathbf{q}'} m_j e^{i\mathbf{q}\mathbf{a} + i\mathbf{q}'\mathbf{a}} v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} v_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')} \dot{Q}_{s,\mathbf{q}} \dot{Q}_{s',\mathbf{q}'}. \quad (8.4)$$

Учитывая соотношение

$$\sum_{\mathbf{a}} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{a}} = N \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}, \quad (8.5)$$

условие нормировки (3.8) и соотношения (8.3), получаем (потенциальная энергия вычисляется аналогично)

$$K = \frac{M}{2} \sum_{s,\mathbf{q}} |\dot{Q}_{s,\mathbf{q}}|^2, \quad U = \frac{M}{2} \sum_{s,\mathbf{q}} \omega_{s,\mathbf{q}}^2 |Q_{s,\mathbf{q}}|^2, \quad (8.6)$$

где M — масса элементарной ячейки.

Теперь можно произвести квантование по аналогии с гармоническим осциллятором, в котором

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (8.7)$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}}. \quad (8.8)$$

В нашем случае

$$\hat{Q}_{s,\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{s,\mathbf{q}}}} (\hat{a}_{s,\mathbf{q}} + \hat{a}_{s,-\mathbf{q}}^\dagger), \quad (8.9)$$

$$\hat{P}_{s,\mathbf{q}} = -i \sqrt{\frac{\hbar M \omega_{s,\mathbf{q}}}{2}} (\hat{a}_{s,\mathbf{q}} - \hat{a}_{s,-\mathbf{q}}^\dagger), \quad (8.10)$$

что означает (т.к. $\hat{a}_{s,\mathbf{q}} \propto e^{-i\omega_{s,\mathbf{q}}t}$)

$$P_{s,\mathbf{q}} = M \dot{Q}_{s,\mathbf{q}}. \quad (8.11)$$

Учитывая, что

$$|P_{s,\mathbf{q}}|^2 = P_{s,\mathbf{q}} P_{s,-\mathbf{q}}, \quad (8.12)$$

можем переписать гамильтониан в виде

$$H = \sum_{s,\mathbf{q}} \left(\frac{|P_{s,\mathbf{q}}|^2}{2M} + \frac{M\omega_{s,\mathbf{q}}^2}{2} |Q_{s,\mathbf{q}}|^2 \right) = \sum_{s,\mathbf{q}} \hbar\omega_{s,\mathbf{q}} \left(\hat{a}_{s,\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{s,\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right). \quad (8.13)$$

Величину тепловых флуктуаций положений атомов можно выяснить, посчитав при заданной температуре следующее среднее: ⁵

$$\langle u_{\mathbf{a},j,\alpha} u_{\mathbf{a},j,\beta} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,\mathbf{q},s',\mathbf{q}'} v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} v_{j,\beta}^{(s',\mathbf{q}')} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{a}} \langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s',\mathbf{q}'} \rangle. \quad (8.14)$$

Рассмотрим получившееся среднее от нормальных координат:

$$\langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s',\mathbf{q}'} \rangle = \frac{\hbar}{2M\sqrt{\omega_{s,\mathbf{q}}\omega_{s',\mathbf{q}'}}} \left\langle (a_{s,\mathbf{q}} + a_{s,-\mathbf{q}}^\dagger)(a_{s',\mathbf{q}'} + a_{s',-\mathbf{q}'}^\dagger) \right\rangle. \quad (8.15)$$

Ненулевой результат в этом среднем получится только в случае $s' = s$, $\mathbf{q}' = -\mathbf{q}$:

$$\begin{aligned} \langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s,-\mathbf{q}} \rangle &= \frac{\hbar}{2M\omega_{s,\mathbf{q}}} \left(\langle a_{s,\mathbf{q}} a_{s,\mathbf{q}}^\dagger \rangle + \langle a_{s,-\mathbf{q}}^\dagger a_{s,-\mathbf{q}} \rangle \right) = \\ &= \frac{\hbar}{2M\omega_{s,\mathbf{q}}} (n_{s,\mathbf{q}} + n_{s,-\mathbf{q}} + 1). \end{aligned} \quad (8.16)$$

В результате (8.14) даёт:

$$\langle u_{\mathbf{a},j,\alpha} u_{\mathbf{a},j,\beta} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,\mathbf{q}} v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} v_{j,\beta}^{(s,\mathbf{q})*} \langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s,-\mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,\mathbf{q}} v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} v_{j,\beta}^{(s,\mathbf{q})*} \frac{\hbar}{M\omega_{s,\mathbf{q}}} \left(n_{s,\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right). \quad (8.17)$$

В пределе бесконечного кристалла (объём $V \rightarrow \infty$) сумма по \mathbf{q} превращается в интеграл:

$$\langle u_{\mathbf{a},j,\alpha} u_{\mathbf{a},j,\beta} \rangle = \frac{V}{N} \sum_s \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} v_{j,\beta}^{(s,\mathbf{q})*} \frac{\hbar}{M\omega_{s,\mathbf{q}}} \left(n_{s,\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right). \quad (8.18)$$

Частота оказалась в знаменателе, поэтому особенно важны мягкие моды. У акустических мод $\omega \propto q$, поэтому вклад квантовых флуктуаций имеет вид

$$\int \frac{1}{\omega} d^d q \propto \int \frac{d^d q}{q}. \quad (8.19)$$

В размерности $d = 1$ возникает инфракрасная расходимость, поэтому бесконечных одномерных кристаллов не существует.

Вклад тепловых флуктуаций имеет вид

$$\int \frac{1}{\omega} n_q d^d q \propto \int \frac{n_q d^d q}{q}. \quad (8.20)$$

⁵ См. Левитов, Шитов, Задача 38. (Флуктуации смещений решётки).

При ненулевой температуре и малых q для мягких мод имеем

$$n_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} \approx \frac{T}{\hbar\omega}. \quad (8.21)$$

Поэтому акустические фононы дают следующий вклад в тепловые флуктуации:

$$\int \frac{d^d q}{q^2}. \quad (8.22)$$

В размерностях $d = 1, 2$ возникает инфракрасная расходимость. С одномерными кристаллами всё совсем плохо, расходимость сильная. В двумерном случае — логарифмическая, но все равно бесконечных двумерных кристаллов не существует. В целом, роль флуктуаций растёт с понижением размерности (меньше соседей, флуктуации легче распространяться).

Здесь нужно оговориться, заметив, что речь идёт о чисто одномерных и двумерных кристаллах. Может возникнуть вопрос: а как же графен? Дело в том, что графен при собственной двумерности вложен в трёхмерное пространство. Поэтому возможна рябь, делающая его не совсем плоским, а кроме того помимо деформаций в плоскости имеются также поперечные деформации. В результате рассуждение с двумерным интегрированием по \mathbf{q} к графену неприменимо и он оказывается стабильным.

IX. РАССЕЙЯНИЕ ЗВУКА НА ПРИМЕСИ

Рассматриваем точечный дефект. Например, это может быть атом примеси, замещающий основной атом решётки. От примеси есть два эффекта: 1) у неё другая масса, поэтому меняется кинетическая энергия, 2) она по-другому взаимодействует с соседними атомами, поэтому меняются силовые константы (потенциальная энергия). Для простоты будем говорить об изотопическом рассеянии, когда важен только первый эффект. Изменение массы при этом почти всегда мало (за исключением случаев водорода и гелия), будем считать его малым параметром и делать теорию возмущений.

Выберем начало отсчёта в точке расположения примеси. Тогда возмущение имеет вид

$$\delta H = \frac{\delta m}{2} \dot{u}_{0,j,\alpha}^2 = -\frac{V}{N} \frac{\delta m}{2} \sum_{s,s'} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} v_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} v_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')} Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s',\mathbf{q}'} \omega_{s,\mathbf{q}} \omega_{s',\mathbf{q}'}. \quad (9.1)$$

Подставляем Q через a (как в (8.15)) и находим матричный элемент, входящий в запись

$$H = H_0 + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}'}^\dagger a_{\mathbf{q}}. \quad (9.2)$$

Он имеет вид

$$V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = -\frac{V}{N} \frac{\delta m}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_{s,\mathbf{q}}}} \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_{s',\mathbf{q}'}}} (vv) \omega_{s,\mathbf{q}} \omega_{s',\mathbf{q}'}. \quad (9.3)$$

Вероятность перехода в единицу времени:

$$w = \int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}|^2 \delta(\hbar\omega_{s',\mathbf{q}'} - \hbar\omega_{s,\mathbf{q}}). \quad (9.4)$$

Учитывая, что

$$\delta(\hbar\omega_{s',\mathbf{q}'} - \hbar\omega_{s,\mathbf{q}}) = \frac{\delta(q' - \frac{c}{c'}q)}{\hbar c'} \quad (9.5)$$

(поскольку $c' = d\omega'/dq'$), получаем

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{|V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}|^2}{c'} \frac{4\pi q'^2}{(2\pi)^3}, \quad q' = \frac{c}{c'}q. \quad (9.6)$$

Матричный элемент ведёт себя как

$$V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = -\frac{\delta m}{2} (\dots) \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega'}} \omega\omega' \propto \sqrt{\omega\omega'}. \quad (9.7)$$

Поэтому частотное поведение сечения рассеяния оказывается следующим:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{dw}{d\Omega} \propto \omega^4. \quad (9.8)$$

Рассеяние с таким законом называют рэлеевским рассеянием.

Х. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ФОНОННОГО ГАЗА

Будем держать в голове задачу о приложенном градиенте температуры, в результате чего через решётку начинает течь тепло (т.е. фононы). В этом случае имеется пространственная неоднородность макроскопического масштаба. Тогда удобно использовать представление фоновых волновых пакетов (волновой пакет — это суперпозиция монохроматических колебаний решётки, принадлежащих к определённой ветви, занимающая ограниченную область в пространстве).⁶ Если у волнового пакета размер a , то разброс импульсов составляющих его колебаний имеет порядок $\delta k \sim 1/a$.

⁶ Переход к описанию с помощью волновых пакетов можно рассматривать как каноническое преобразование.

Предполагаем

$$L \gg a \gg \lambda, \quad (10.1)$$

где L — размер образца (например, в направлении градиента температуры). Первое условие позволяет говорить о координате пакета \mathbf{r} . Второе условие означает $1/\delta k \gg 2\pi/k$, т.е. $k \gg \delta k$, т.е. можно говорить об определённом импульсе пакета k .

В результате, о пакетах можно говорить как о частицах с координатой и импульсом. Их дальше и будем называть фононами.

Введём функцию распределения в фазовом пространстве f (т.е. плотность вероятности в фазовом пространстве), так что число фононов в интервале импульсов и координат есть

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \frac{d^3 k dV}{(2\pi)^3}. \quad (10.2)$$

Закон дисперсии $\omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ может зависеть от координаты в неоднородном случае.

Уравнения движения (можно вывести, но не будем этого делать для экономии времени, фактически все сводится к тому, что ω является функцией Гамильтона):

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} = \frac{\partial \omega(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}, \quad (10.3)$$

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}}. \quad (10.4)$$

Если число фононов фиксировано, то $df/dt = 0$, что приводит к уравнению

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \dot{\mathbf{k}} = 0, \quad (10.5)$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = 0. \quad (10.6)$$

Если же есть процессы, в результате которых число фононов может меняться, то в правой части стоит так называемый интеграл столкновений $I_{\text{ст}}(f)$ [иногда его обозначают $(\partial f/\partial t)_{\text{ст}}$ или $(df/dt)_{\text{ст}}$] — в результате получается кинетическое уравнение

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = I_{\text{ст}}(f)}. \quad (10.7)$$

В интеграл столкновений могут давать вклад разные процессы, например,

$$I_{\text{ст}} = I_{\text{ph-ph}} + I_{\text{imp}} + I_{\text{b}}, \quad (10.8)$$

где первый вклад — из-за фонон-фононного взаимодействия (ангармонизм), второй — от рассеяния на примесях, третий — от рассеяния на стенках. Условие применимости кин.уравнения:

$$\omega\tau \gg 1, \quad (10.9)$$

где τ — время свободного пробега между столкновениями (т.е. τ велико по сравнению с периодом колебаний решётки).

При учёте ангармонизма отдельные фононные состояния не стационарны, между ними происходят квантовые переходы. Если ангармонизм мал, то переходы редки, а между ними фононы ведут себя как свободные частицы (аналогия с почти идеальным газом). При фонон-фононных столкновениях число фононов может не сохраняться (они могут рождаться и уничтожаться).

Рассмотрим линейный коэффициент теплопроводности. В этом случае в системе есть слабый градиент температуры, температура является функцией координаты. В то же время, ω от \mathbf{r} не зависит. В τ -приближении имеем

$$\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{f - f_0}{\tau} = -\frac{\delta f}{\tau}, \quad (10.10)$$

где функция распределения f слабо отличается от равновесной f_0 . Поток тепла обозначим \mathbf{Q} . Тогда

$$Q_i = -\kappa_{ij} \nabla_j T = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \delta f = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tau \hbar\omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \left(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f}{\partial T} \nabla T \right). \quad (10.11)$$

Малость здесь уже содержится в градиенте температуры, поэтому f можно заменить на f_0 . В результате

$$\kappa_{ij} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tau \hbar\omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial T}. \quad (10.12)$$

Низкие температуры ($T \ll T_D$):

$$\kappa \sim \int dk \cdot k^2 \tau \hbar\omega c^2 \cdot \frac{\hbar\omega}{T^2} \frac{1}{\text{sh}^2 \frac{\hbar\omega}{2T}} \sim \frac{\tau T^3}{\hbar^3 c} \int_0^{T_D/2T} \frac{x^4 dx}{\text{sh}^2 x} \propto T^3 \quad (10.13)$$

— закон Казимира. ⁷

⁷ Это баллистический (кнудсеновский) режим. Другие режимы: диффузионный, пуазейлев, второй звук.

XI. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФОНОНОВ

Буква \mathbf{v} занята скоростью, будем обозначать собственные векторы динамической матрицы буквой \mathbf{e} (поляризация колебаний). А буква a занята оператором уничтожения, будем обозначать вектор ячейки буквой \mathbf{R} . Тогда

$$\mathbf{u} = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}s} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})}} (a_{\mathbf{k}s} + a_{-\mathbf{k}s}^\dagger). \quad (11.1)$$

Энергия деформации имеет вид

$$\begin{aligned} U = U_0 + \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} D_1(\mathbf{R} - \mathbf{R}') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'))^2 + \\ + \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',\mathbf{R}''} K_1(\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}')) (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'')) (u(\mathbf{R}') - u(\mathbf{R}'')). \end{aligned} \quad (11.2)$$

Ангармоническое слагаемое даёт

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar}{2MN} \right)^{3/2} \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',\mathbf{R}''} K_2(\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''} \frac{1}{\sqrt{\omega(k)\omega(k')\omega(k'')}} \times \\ \times (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger) (a_{\mathbf{k}'} + a_{-\mathbf{k}'}^\dagger) (a_{\mathbf{k}''} + a_{-\mathbf{k}''}^\dagger) \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}'} \right) \left(e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}''} \right) \left(e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}'} - e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}''} \right). \end{aligned} \quad (11.3)$$

Здесь есть разные процессы (про процессы aaa и $a^\dagger a^\dagger a^\dagger$ не говорим, потому что в главном порядке в рамках золотого правила Ферми они не сработают — в них нельзя удовлетворить закону сохранения энергии; в то же время они могут давать вклад в более высокие порядки теории возмущений как виртуальные процессы):

$$\text{Слияние: } a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}''}^\dagger,$$

$$\text{Распад: } a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger,$$

причём амплитуды этих процессов умножаются на

$$e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{k}'')\mathbf{R}} \left(1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} \right) \left(1 - e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R}''-\mathbf{R})} \right) \left(e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} - e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}''-\mathbf{R})} \right). \quad (11.4)$$

Из-за суммирования по \mathbf{R} первый множитель даёт что-то типа дельта-функции. Но тут нужна некоторая осторожность.

Как мы формулируем задачу о кристалле? Обычно рассматривается решётка с дискретным расположением атомов и периодическими граничными условиями, $\mathbf{u}(L) = \mathbf{u}(0)$. Вспоминая формулу (11.1), понимаем, что должно быть

$$e^{ikL} = 1, \quad (11.5)$$

поэтому \mathbf{k} дискретны с шагом $2\pi/L$ (именно это мы и имеем в виду, когда пишем сумму по \mathbf{k}). То есть, ограниченность координаты сверху привела к дискретности при малых k . Аналогично, дискретность положений атомов на малых расстояниях приводит к ограниченности k сверху (т.е. мы можем считать \mathbf{k} лежащими в первой зоне Бриллюэна). В результате,

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n, \quad n = 0, \dots, \frac{L}{a_x}, \quad (11.6)$$

$$k_x \in \left(0, \frac{2\pi}{a_x}\right) \quad \text{или} \quad -\frac{\pi}{a_x} < k_x < \frac{\pi}{a_x}. \quad (11.7)$$

Базисные векторы обратной решётки:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}. \quad (11.8)$$

Так вот, из-за суммирования по \mathbf{R} в формуле (11.4) сумма $(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'')$ должна быть равна нулю с точностью до вектора обратной решётки:

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}. \quad (11.9)$$

В результате ангармоническое слагаемое (11.3) можно переписать как

$$H_{\text{вз}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{k}''=\mathbf{b}} B(a_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}'}a_{-\mathbf{k}''}^\dagger + a_{\mathbf{k}}a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger), \quad (11.10)$$

где

$$B(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') = \left(\frac{\hbar}{2M}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\omega\omega'\omega''}} \sum_{\mathbf{R}-\mathbf{R}', \mathbf{R}-\mathbf{R}''} K_2(\mathbf{R}-\mathbf{R}', \mathbf{R}-\mathbf{R}'') \times \\ \times \left(1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}'-\mathbf{R})}\right) \left(1 - e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R}''-\mathbf{R})}\right) \left(e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} - e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}''-\mathbf{R})}\right). \quad (11.11)$$

Два слагаемых в гамильтониане (11.10) эрмитово сопряжены друг другу и описывают обратные друг другу процессы. Первое — это слияние (два в один), а второе — распад фононов (один в два). Если $\mathbf{b} = 0$, то это N-процесс (нормальный). Если $\mathbf{b} \neq 0$, то это U-процесс (Umklapp — процесс переброса).

Энергия должна сохраняться,

$$\omega(\mathbf{k}) \pm \omega(\mathbf{k}') - \omega(\mathbf{k}'') = 0 \quad (11.12)$$

(верхний знак — слияние, нижний — распад). При этом полезно иметь в виду соотношения

$$\omega(-\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k}), \quad \omega(\mathbf{k} + \mathbf{b}) = \omega(\mathbf{k}). \quad (11.13)$$

Обсудим некоторые особенности N- и U-процессов. Мы говорим о трёхфононных процессах. В N-процессах все три фонона могут быть длинноволновыми, а могут быть коротковолновыми (т.е. с длиной волны порядка межатомного расстояния). В U-процессе по крайней мере два фонона из трёх должны быть коротковолновыми (один — в начальном, один — в конечном состоянии). Третий может быть любым. Это можно углядеть из законов сохранения импульса и энергии:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = \mathbf{b}, \quad (11.14)$$

$$k_1 \pm k_2 - k_3 = 0, \quad (11.15)$$

где \pm в последнем равенстве (закон сохранения энергии) соответствует слиянию и распаду соответственно. Можно считать, что \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_3 — коротковолновые. Если же третий фонон \mathbf{k}_2 длинноволновый, то $k_1 \approx k_3$, а $\mathbf{k}_1 \approx \mathbf{k}_3 \approx \mathbf{b}/2$, поэтому начальный импульс \mathbf{k}_1 сменяется на почти противоположный $-\mathbf{k}_3 \approx -\mathbf{k}_1$, отсюда и название «процессы переброса».

Теперь выясним вид интеграла столкновений, обусловленного взаимодействием фононов. Рассмотрим вклад от распадного слагаемого $a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger$ в гамильтониане взаимодействия. У нас задача статфизическая, поэтому интеграл столкновений будет зависеть от чисел заполнения участвующих в процессе состояний, но этим мы займёмся чуть позже. Сначала рассмотрим задачу квантовомеханическую, в которой есть исходный фонон, а оба конечных состояния свободны. Тогда по золотому правилу Ферми можно написать вероятность перехода в единицу времени:

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{\text{вз}} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (11.16)$$

В нашем случае эта общая формула даёт

$$w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}', \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|B|^2}{N} \delta(\hbar\omega_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega_{\mathbf{k}''}) \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'', \mathbf{b}} \quad (11.17)$$

— здесь мы ещё учли кроме закона сохранения энергии закон сохранения квазиимпульса (с точностью до вектора обратной решётки).

Интеграл столкновений — это скорость изменения функции распределения. Для интересующего нас состояния (с данной функцией распределения) распадное слагаемое даёт как приходный, так и уходный процессы:

$$\begin{pmatrix} n_k + 1 \\ n_{k'} - 1 \\ n_{k''} - 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{приход}} \begin{pmatrix} n_k \\ n_{k'} \\ n_{k''} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{уход}} \begin{pmatrix} n_k - 1 \\ n_{k'} + 1 \\ n_{k''} + 1 \end{pmatrix}. \quad (11.18)$$

Здесь посередине написана функция распределения, скорость изменения которой нас интересует (точнее, интересует нас скорость изменения функции n_k , а по k и k' мы потом будем суммировать). Для уходного процесса получаем:

$$\langle f | H_{\text{вз}} | i \rangle = \langle n_k - 1, n_{k'} + 1, n_{k''} + 1 | a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger | n_k, n_{k'}, n_{k''} \rangle = \sqrt{n_k(n_{k'} + 1)(n_{k''} + 1)}. \quad (11.19)$$

Для приходного:

$$\langle f | H_{\text{вз}} | i \rangle = \langle n_k, n_{k'}, n_{k''} | a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger | n_k + 1, n_{k'} - 1, n_{k''} - 1 \rangle = \sqrt{(n_k + 1)n_{k'}n_{k''}}. \quad (11.20)$$

В результате

$$I_{\text{ст/расп}} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}', \mathbf{k}''} [-n_k(n_{k'} + 1)(n_{k''} + 1) + (n_k + 1)n_{k'}n_{k''}]. \quad (11.21)$$

Общее утверждение: равновесная функция распределения зануляет интеграл столкновений. Проверим это на данном примере:

$$\begin{aligned} -n_k(n_{k'} + 1)(n_{k''} + 1) + (n_k + 1)n_{k'}n_{k''} &= -f_0 e^{\hbar\omega'/T} f_0' e^{\hbar\omega''/T} f_0'' + e^{\hbar\omega/T} f_0 f_0' f_0'' = \\ &= f_0 f_0' f_0'' \left(-e^{(\hbar\omega' + \hbar\omega'')/T} + e^{\hbar\omega/T} \right) = 0. \end{aligned} \quad (11.22)$$

Поэтому нужно отклонение от равновесной функции распределения. Пусть отклонение — только в $n_k = f_0 + \delta n$, тогда как $n_{k'}$ и $n_{k''}$ равновесные. Тогда из (11.21) получаем

$$-\delta n(f_0' + 1)(f_0'' + 1) + \delta n f_0' f_0'' = -\delta n(f_0' + f_0'' + 1). \quad (11.23)$$

В скобке комбинация $(f_0' + f_0'')$ приводит к индуцированному распаду, а 1 — к спонтанному распаду.

Если в процессах, описываемых формулами (11.10) и (11.11), все три фоновые акустические, то нас интересуют малые \mathbf{k} , \mathbf{k}' , \mathbf{k}'' и $\mathbf{b} = 0$. В этом случае можно выяснить, как ведет себя B .

Если вспомнить запись (7.2), то в пределе малых \mathbf{q} , \mathbf{q}' , \mathbf{q}'' имеется следующее соотношение. При $\mathbf{q} \rightarrow 0$ акустические колебания переходят в трансляцию (параллельный перенос решётки как целого). Такое движение не может изменить энергию системы, поэтому при малых \mathbf{q} ангармонический вклад в энергию должен зависеть не от самого смещения, а лишь от его пространственных производных. Такое же рассуждение верно и для двух других импульсов. Поэтому в длинноволновом пределе ангармонические коэффициенты должны вести себя как

$$K(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'') \propto qq'q''. \quad (11.24)$$

На языке формулы (11.11) это означает, что фигурирующая там сумма ведёт себя как $kk'k''$. Поэтому в целом в случае N -процессов с тремя акустическими фоновыми имеем

$$B \propto \sqrt{\omega\omega'\omega''}, \quad (11.25)$$

где коэффициент пропорциональности — функция от углов, описывающих направления импульсов.

Учитывая (11.25), пишем

$$\frac{|B|^2}{N} = A\hbar^3\omega_k\omega_{k'}\omega_{k''}. \quad (11.26)$$

Можно получить оценку

$$A \sim \frac{a_0^3}{mc^2V}, \quad (11.27)$$

где V — объём всего кристалла. Можно это делать, начиная с выражения для ангармонической энергии: при смещении атомов на величину порядка межатомного расстояния a_0 ангармоническая энергия в расчёте на один атом — порядка атомной (а та — порядка mc^2 , где m — средняя масса атома решётки), поэтому в формуле (11.2) получаем $K_1(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) \sim mc^2/a_0^3$ и т.д. Но можно это сообразить и по размерности. Из формул (11.17) и (11.26) следует, что размерность A есть обратная энергия. При этом эта буква может складываться из микроскопических параметров a_0 , m , c и полного объёма V (фурье-преобразования и т.д.). Можно сначала проверить, что зависимость от V имеет вид $A \propto 1/V$. Тогда нужную размерность мы получим, обезразмерив объём с помощью a_0^3 и сделав энергию mc^2 . Это и даёт оценку (11.27).

Аналогично, для процессов слияния (рассеяния)

$$I_{\text{ст/сл}} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}''} [\dots], \quad (11.28)$$

где $[\dots]$ — см. задачу 4, а

$$w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{|B|^2}{N} \delta(\omega_k + \omega_{k'} - \omega_{k''}) \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'', \mathbf{b}}. \quad (11.29)$$

XII. ВРЕМЯ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ОТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОНОНОВ

Время релаксации τ определяем так:

$$I_{\text{ст}} = -\frac{\delta n_k}{\tau}. \quad (12.1)$$

От чего зависит: $\tau = \tau(T, \omega)$. Важно, что при этом τ не зависит от функции распределения n_k . Это означает, что работает τ -приближение — формула (12.1) соответствует именно такому виду.

Рассмотрим сначала N-процессы.

Учитывая

$$\sum_{\mathbf{k}} = V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}, \quad (12.2)$$

имеем (\mathbf{k} задано, по \mathbf{k}' интегрируем; при каждом \mathbf{k}' третий волновой вектор \mathbf{k}'' определён однозначно, поэтому только одно интегрирование)

$$\left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{расп}} = 2\pi\hbar V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} A\omega\omega'\omega''(f_{k'} + f_{k''} + 1)\delta(\omega - \omega' - \omega''), \quad (12.3)$$

$$\left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{сл}} = 2\pi\hbar V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} A\omega\omega'\omega''(f_{k'} - f_{k''})\delta(\omega + \omega' - \omega''). \quad (12.4)$$

Учтём ещё, что

$$d^3 k' = \frac{\omega'^2 d\omega' d\Omega_{k'}}{c^3}. \quad (12.5)$$

Получим оценки $1/\tau$ для нескольких случаев:

1. Спонтанный распад.

Основной вклад даёт область $\omega \sim \omega' \sim \omega''$, в результате (учитывая, что $\omega_D = ck_D = c/a_0$)

$$\left(\frac{1}{\tau}\right)_{\text{сп.расп.}} \sim \frac{\hbar a_0^3 \omega^5}{mc^5} = \frac{\hbar a_0^3 \omega_D^5}{mc^5} \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^5 = \frac{\hbar}{ma_0^2} \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^5 = \omega_D \left(\frac{\hbar\omega_D}{mc^2}\right) \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^5. \quad (12.6)$$

Оценим численно параметр, который здесь возник (считаем $c \sim 1 \text{ км/с}$):

$$\gamma = \frac{\hbar\omega_D}{mc^2} = \frac{\hbar}{a_0 mc} \sim \frac{10^{-27}}{5 \cdot 10^{-8} \cdot (10^{-27} \cdot 2 \cdot 10^3 \cdot 10^2) \cdot 10^5} \sim 10^{-3}. \quad (12.7)$$

2. Распад холодного фонона (индуцированный).

Холодный фонон означает фонон с $\hbar\omega \ll T$. Из-за закона сохранения энергии из холодного фонона могут родиться только два холодных. Основной вклад даёт область $\hbar\omega \sim \hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \ll T$, при этом $f(\omega) \approx T/\hbar\omega$. Получается комбинация вида

$$\omega^5(f_{\omega'} + f_{\omega''}). \quad (12.8)$$

В результате

$$\left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{инд.расп.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar\omega_D}{mc^2}\right) \frac{\omega^4 T}{\hbar\omega_D^5}. \quad (12.9)$$

3. Слияние для холодного фонона.

В этом случае $\hbar\omega \ll T$, при этом фонон, с которым сливаемся, может быть тепловым с $\hbar\omega' \sim T$, тогда и получающийся фонон будет тепловым. Именно этот случай даёт основной вклад: $\hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \sim T$. При этом в разности $(f_{\omega'} - f_{\omega''})$, входящей в формулу (12.4), каждое слагаемое порядка единицы, а разность мала по параметру $\hbar\omega/T$. Но это ещё не всё. В этом случае есть хитрость, связанная с дельта-функцией $\delta(\omega + \omega' - \omega'')$, обеспечивающей закон сохранения энергии. Дело в том, что если все три фонона принадлежат одной акустической ветви с одинаковой скоростью звука, то законы сохранения энергии и импульса дают соотношения

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = 0, \quad (12.10)$$

$$k + k' - k'' = 0, \quad (12.11)$$

и единственный вариант (при заданном \mathbf{k} исходного фонона) этим соотношениям удовлетворить — это направить \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' вдоль той же прямой (иначе по неравенству треугольника $k + k' > k''$). Тогда угловое интегрирование по d^3k' вырождается (приводит к интегрированию по линии, а не по поверхности, как могло бы быть). Значит, необходимо участие фононов двух разных ветвей (при этом тепловые фононы \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' должны относиться к одной ветви — переключить ветвь при

столь малой разнице и между импульсами, и между энергиями, не получится; а вот исходный холодный фонон должен быть с другой ветви). Тогда

$$\omega'' - \omega' \equiv \omega_{-\mathbf{k}''} - \omega_{\mathbf{k}'} = \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}'}}{\partial \mathbf{k}'} \mathbf{k} = c' k \cos \theta = \omega \frac{c'}{c} \cos \theta, \quad (12.12)$$

где θ — угол между \mathbf{k} и $\mathbf{k}' \approx -\mathbf{k}''$. Подставляя это в дельта-функцию, получаем

$$\delta(\omega + \omega' - \omega'') = \delta\left(\omega - \omega \frac{c'}{c} \cos \theta\right) = \frac{1}{\omega} \delta\left(1 - \frac{c'}{c} \cos \theta\right). \quad (12.13)$$

Таким образом, получилась дополнительная степень ω в знаменателе, а дельта-функция снимется угловым интегрированием в $d^3 k'$, поэтому в целом из комбинации $d\omega' \delta(\omega + \omega' - \omega'')$ мы зарабатываем безразмерный параметр ω'/ω (а раньше получали единицу, т.к. говорили, что дельта-функция снимается интегрированием по частоте). Необходимо уточнить, что такое возможно только если $c'/c > 1$, т.е. исходный фонон должен быть с ветви с не самой большой скоростью, т.е. он является поперечным. А в рассмотренных выше случаях распада исходный фонон из-за неравенства треугольника $k < k' + k''$ не может быть с ветви с наименьшей скоростью звука; больших или малых параметров в этом случае не возникает, т.к. нет разделения масштабов частот.

В результате получается комбинация вида

$$\omega \omega'^3 \omega'' (f_{\omega'} - f_{\omega''}) \frac{\omega'}{\omega} \sim \omega T^4. \quad (12.14)$$

В итоге

$$\left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{сл.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2}\right) \frac{\omega T^4}{\hbar^4 \omega_D^5}. \quad (12.15)$$

4. Распад и слияние тепловых фононов.

Оценку для случая $\hbar \omega \sim T$ можно получить из вышеприведённых формул (они все стыкуются в этом случае):

$$\frac{1}{\tau_N} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2}\right) \left(\frac{T}{\hbar \omega_D}\right)^5. \quad (12.16)$$

5. Процессы переброса для тепловых фононов.

При $T \ll T_D$ исходный импульс теплового фонона недостаточен для процесса переброса, поэтому распады (ни спонтанные, ни индуцированные) невозможны.

Слияния возможны, мы можем рассмотреть слияние с любым фононом — этот процесс может содержать малость из-за функции распределения, но он возможен. Основной вклад будет от $\omega' \sim \omega'' \sim \omega_D$ (нам нужны большие частоты, чтобы был переброс). Получается комбинация вида

$$\omega \omega'^3 \omega'' (f_{\omega'} - f_{\omega''}) \sim T \omega_D^4 e^{-T_D/T}. \quad (12.17)$$

В результате

$$\frac{1}{\tau_U} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2} \right) \frac{T}{T_D} e^{-T_D/T}. \quad (12.18)$$

ХIII. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ РЕШЁТКИ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

$$(T < T_D)$$

Отталкиваясь от формулы (10.12) и используя понятие удельной теплоёмкости фононов с импульсом k , $c_{\text{ph}}(k) = \partial(\hbar \omega(k) f_0) / \partial T$, мы можем вместо (10.13) записать то же самое чуть в другом виде:

$$\varkappa \sim \int d^3 k \cdot c_{\text{ph}}(k) l c, \quad l = ct. \quad (13.1)$$

Если же τ не зависит от k (а мы ниже будем рассматривать тепловые фононы, для которых это можно считать справедливым, т.к. их частота задана температурой), то интегрирование относится только к теплоёмкости на импульсе и даёт в результате удельную теплоёмкость с учётом всего спектра (полную в этом смысле):

$$\varkappa \sim c_{\text{ph}} l c. \quad (13.2)$$

Мы считаем, что есть образец с некоторым поперечным размером d , а теплопроводность мы измеряем вдоль образца. При самых низких температурах длина свободного пробега определяется рассеянием на стенках, поэтому $l \sim d$, что с учётом

$$c_{\text{ph}} \sim \left(\frac{T}{\hbar c} \right)^3 \sim k_D^3 \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \quad (13.3)$$

даёт

$$\varkappa \sim \frac{\omega_D^3}{c^2} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 d. \quad (13.4)$$

Это — закон Казимира T^3 , который мы уже получали [см. (10.13) — теперь мы уточнили, что за τ там возникает]. Соответствует баллистическому (кнудсеновскому на гидродинамическом языке) режиму — фононы рассеиваются на стенках, между рассеяниями летят по прямой.

При самых низких T

$$d \ll l_N \ll l_U. \quad (13.5)$$

Закон T^3 работает, пока $d < l_N$, где l_N обусловлена нормальными процессами. Граница — T_1 :

$$\frac{1}{d} = \frac{1}{\tau_N c} = \frac{\omega_D}{c} \gamma \left(\frac{T_1}{T_D} \right)^5, \quad (13.6)$$

откуда

$$T_1 = T_D \left(\frac{1}{dk_D \gamma} \right)^{1/5}. \quad (13.7)$$

Если взять $d \sim 1$ см, то получаем оценку

$$T_1 = T_D \left(\frac{5 \cdot 10^{-8}}{1 \cdot 10^{-3}} \right)^{1/5} \approx \frac{T_D}{10}. \quad (13.8)$$

С повышением T убывают l_N и l_U , поэтому можем попасть в режим

$$l_N \ll d \ll l_U. \quad (13.9)$$

При $T > T_1$ получаем $l_N < d$. Казалось бы, тогда в формуле (13.2) просто нужно в качестве l взять l_N . Однако, всё несколько хитрее. Дело в том, что при вычислении теплопроводности важны процессы рассеяния, меняющие импульс фононной системы в целом. Рассеяние на стенках относилось именно к таким процессам. А вот N-процессы полный импульс фононной системы не меняют:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} \frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} I_{\text{ст/N}} = 0. \quad (13.10)$$

Поэтому режим движения фононов изменился, но изменение полного импульса по-прежнему будет определяться рассеянием на стенках.

Однако, между стенками движение диффузное с шагом l_N . Чтобы пройти расстояние d , нужно сделать $(d/l_N)^2$ шагов, поэтому полная длина, которую надо пролететь до столкновения со стенкой, есть

$$l_{\text{eff}} \sim l_N \left(\frac{d}{l_N} \right)^2. \quad (13.11)$$

В результате

$$\kappa \sim c_{\text{ph}} \frac{d^2}{\tau_N c} \sim \frac{\omega_D^4}{c^3} \gamma \left(\frac{T}{T_D} \right)^8 d^2. \quad (13.12)$$

Это называется область Гурджи: пуазейлево течение фононов (как при (ламинарном) течении вязкой жидкости по трубе), фононы рассеиваются на стенках, но до них летят не по прямой.

При дальнейшем росте T включатся U -процессы и мы можем попасть в режим

$$l_U \ll \frac{d^2}{l_N}. \quad (13.13)$$

Это происходит при T_2 , таком что

$$l_{\text{eff}} = l_U, \quad d^2 = l_N l_U = c^2 \tau_N \tau_U. \quad (13.14)$$

При этом

$$\kappa \sim c_{\text{ph}} l_U c = \frac{k_D^2 c}{\gamma} \left(\frac{T}{T_D} \right)^2 e^{T_D/T}. \quad (13.15)$$

Такой закон было получен Пайерлсом. Эта функция убывает с ростом температуры при $T < T_D/2$.

В образцах очень малых размеров d может оказаться, что с ростом температуры $l_U \sim l_N$ стало раньше, чем l_N стало меньше d , т.е. имеет место ситуация

$$d \ll l_N \sim l_U. \quad (13.16)$$

Тогда области Гурджи не будет, после T^3 сразу пойдёт экспонента.

XIV. РАССЕЙЯНИЕ НА ПРИМЕСЯХ

Время свободного пробега можно записать через сечение рассеяния:

$$\frac{1}{\tau_i} = N_i c \sigma. \quad (14.1)$$

Закон Рэлея: $\sigma \propto \omega^4$. Префактор можно восстановить по размерности: $\sigma \propto (R^6/c^4)\omega^4$, где R — размер примеси. Учтём, что $R \sim a$ и будем по возможности использовать $\omega_D \sim c/a$. Ещё должен быть безразмерный множитель, описывающий силу примеси. Например, для изотопических примесей получается малость $(\delta m/m)^2$. В результате

$$\frac{1}{\tau_i} = \left(\frac{\delta m}{m} \right)^2 N_i a^3 \omega_D \left(\frac{\omega}{\omega_D} \right)^4. \quad (14.2)$$

Вспоминая вывод коэффициента теплопроводности (10.13) при низких температурах ($T \ll T_D$), мы можем приспособить его к случаю, когда рассеяние определяется примесями. При выводе закона Казимира (10.13) из формулы (10.12) предполагалось, что τ не зависит от частоты, что в действительности может быть обусловлено рассеянием на стенках. Если же речь идёт о примесях, то зависимость от частоты есть, поэтому подставим (14.2) в (10.13):

$$\kappa \sim \int dk \cdot k^2 \tau_i \hbar \omega c^2 \cdot \frac{\hbar \omega}{T^2} \frac{1}{\text{sh}^2 \frac{\hbar \omega}{2T}}. \quad (14.3)$$

Переходя к интегрированию по ω и анализируя поведение интеграла на малых ω , находим

$$\kappa \propto \int d\omega \cdot \omega^2 \frac{1}{\omega^4} \omega \cdot \frac{\omega}{\omega^2} \propto \int \frac{d\omega}{\omega^2}, \quad (14.4)$$

т.е. интеграл расходится. Но это просто означает, что рассеяния на примесях сами по себе не могут дать конечного теплового сопротивления, для этого необходимо вспомнить об остальных механизмах рассеяния. В то же время, рассеяние на примесях похоже на процессы переброса в том смысле, что в этих процессах не сохраняется импульс. Поэтому при $\tau_i < \tau_U$ роль процессов переброса переходит к примесному рассеянию, и в формулах нужно заменять $\tau_U \mapsto \tau_i$ (конечно, нужна аккуратность, но в некоторых случаях именно так).

Полезно ещё иметь в виду следующую картину релаксации функции распределения за счёт различных процессов. Вот есть $\tau_i \propto 1/\omega^4$, а есть на малых частотах рассеяние холодных фононов $\tau_N \propto 1/\omega$.⁸ Поэтому при малых ω имеем $\tau_N < \tau_i$ и рассеяние определяется τ_N . Но N-процессы не приводят к релаксации импульса. Поэтому будет происходить следующая двухступенчатая релаксация. Сначала неравновесная функция распределения $n_{\mathbf{k}}$ за времена порядка τ_N будет релаксировать к равновесной (релаксация по числу частиц), но с ненулевой средней скоростью (определяемой исходным распределением):

$$n_{\mathbf{k}} \mapsto f_0 \left(\frac{\hbar \omega - \mathbf{k} \mathbf{u}}{T} \right), \quad \mathbf{u} = \frac{\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}}{\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}}. \quad (14.5)$$

А уже затем за время τ_i отрелаксирует импульс:

$$f_0 \left(\frac{\hbar \omega - \mathbf{k} \mathbf{u}}{T} \right) \mapsto f_0 \left(\frac{\hbar \omega}{T} \right). \quad (14.6)$$

⁸ Вспоминаем, что для спонтанного распада $\tau_N^{-1} \propto \omega^5$, для индуцированного распада холодного фонона $\tau_N^{-1} \propto \omega^4$, для слияния холодного фонона $\tau_N^{-1} \propto \omega$.

Если же, наоборот, $\tau_i < \tau_N$, то сначала распределение за время τ_i отрелаксирует по импульсу к некоторому однородному, но нетепловому (примеси упругие, поэтому направления импульсов они перемешивают, но сами импульсы не меняют):

$$n_{\mathbf{k}} \mapsto \overline{n_{\mathbf{k}}} = n_k, \quad (14.7)$$

а затем за время τ_N произойдёт релаксация к равновесной функции распределения:

$$n_k \mapsto f_0 \left(\frac{\hbar\omega}{T} \right). \quad (14.8)$$

XV. ВТОРОЙ ЗВУК

Фононный газ похож на газ обычных частиц, особенно при низких температурах, когда рассеяния обусловлены N-процессами (а процессами переброса можно пренебречь), $\tau_N \ll \tau_U$. В этом случае законы сохранения энергии и импульса — обычные. В обычном газе может распространяться звук (колебания плотности). Оказывается, что в газе фононов тоже могут распространяться колебания плотности. Колебания плотности фононного газа (т.е. колебания температуры) называются вторым звуком (первый звук — это сами фононы).

Нужно, чтобы температура успевала установиться локально. Если ω и λ — частота и длина волны второго звука, нужно выполнение условий

$$\omega\tau \ll 1, \quad l \ll \lambda. \quad (15.1)$$

Кин.уравнение [$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \equiv n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$]:

$$\frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{r}} = I_{\text{ст}}, \quad (15.2)$$

причём $v_{\mathbf{k}} = c$, поэтому для вектора можно написать $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = c\mathbf{k}/k$.

Плотность энергии и импульса фононного газа:

$$E(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega_k n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (15.3)$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\mathbf{k} n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (15.4)$$

Домножим (15.2) на $\hbar\omega_k$ и на $\hbar\mathbf{k}$ и проинтегрируем по импульсам:

$$\frac{\partial E(\mathbf{r})}{\partial t} + c^2 \frac{\partial}{\partial r_i} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar k_i n_{\mathbf{k}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega_k I_{\text{ст}}, \quad (15.5)$$

$$\frac{\partial P_i(\mathbf{r})}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial r_j} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k_i k_j}{k} n_{\mathbf{k}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar k_i I_{\text{ст}}. \quad (15.6)$$

В правых частях получаются нули в силу закона сохранения энергии и импульса при нормальных столкновениях:

$$\frac{dE}{dt} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega_k I_{\text{ст}} = 0, \quad (15.7)$$

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\mathbf{k} I_{\text{ст}} = 0. \quad (15.8)$$

Кроме того, учитывая, что второй звук является слабым возмущением и не нарушает изотропию функции распределения по \mathbf{k} , можем преобразовать второе слагаемое в левой части (15.6) следующим образом:

$$c \frac{\partial}{\partial r_j} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\delta_{ij}}{3} \frac{k^2}{k} n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial r_i} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega_k n_{\mathbf{k}}. \quad (15.9)$$

В результате уравнения (15.5)-(15.6) принимают вид

$$\frac{\partial E}{\partial t} + c^2 \operatorname{div} \mathbf{P} = 0, \quad (15.10)$$

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \frac{1}{3} \operatorname{grad} E = 0, \quad (15.11)$$

откуда следует

$$\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} - \frac{c^2}{3} \Delta E = 0. \quad (15.12)$$

Это волновое уравнение для второго звука, его скорость есть $c_2 = c/\sqrt{3}$. Можно ещё сказать, что второй звук — это колебания температуры.

Про распространение температуры мы обычно думаем как про диссипативный процесс. Почему же здесь незатухающие волны? Иными словами, если локально вкачать энергию, почему будет не диффузия (уравнение теплопроводности), а распространение волн (волновое уравнение)? Дело в том, что мы учли только N-процессы, при которых полный импульс фононной системы сохраняется. Если же учесть U-процессы или рассеяние на примесях, то возникает возможность сбросить импульс (решётке или примесям соответственно), и это приведёт к диффузии.

Экспериментально наблюдать второй звук можно, например, запуская импульс тепла с одной стороны и детектируя его при помощи сверхпроводящего болометра с другой стороны (например, см. V. Narayanamurti, R. Dynes, “Observation of Second Sound in Bismuth”, Phys. Rev. Lett. **28**, 1461 (1972)).

XVI. СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ ТЕЛ (МЕТОДЫ РАССЕЯНИЯ)

Запускаем в кристаллический образец волну, слабо взаимодействующую с кристаллом (например, медленные нейтроны, рентген). На входе — волна с импульсом \mathbf{k} , на выходе — волна \mathbf{k}' . Вероятность рассеяния $w_{fi} \propto |M|^2$ (она же пропорциональна сечению рассеяния). При этом

$$M = \langle f | \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3r | i \rangle, \quad (16.1)$$

где $|i\rangle$ и $|f\rangle$ — начальное и конечное состояние образца, а потенциал взаимодействия волны и образца можно записать в виде суммы по атомам:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_l V_l(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l). \quad (16.2)$$

Определив вектор рассеяния $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, можем записать интеграл в формуле (16.1) как

$$\sum_l \int e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_l)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} V_l(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) d^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) = \sum_l V_l(\mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l}. \quad (16.3)$$

Таким образом,

$$|M|^2 \propto \left| \sum_l V_l(\mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} \right|^2 = \sum_{l,m} V_l V_m^* e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)}. \quad (16.4)$$

В потенциале (16.2) есть когерентная часть (одинаковая для всех атомов) и добавка, разная для разных атомов (обусловлена локальными дефектами кристаллической решётки или тепловыми колебаниями атомов:

$$V_l = V + \delta V_l, \quad (16.5)$$

Если между величинами δV_l и δV_m нет корреляции, то статистическое среднее (по ансамблю) имеет вид

$$\overline{V_l V_m^*} = |V|^2 + \delta_{lm} \overline{|\delta V|^2}, \quad (16.6)$$

поэтому

$$|M|^2 \propto \left| V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} \right|^2 + N \overline{|\delta V|^2}. \quad (16.7)$$

Первое слагаемое — когерентное брэгговское рассеяние (результат интерференции волн, рассеявшихся на разных атомах), второе — диффузное рассеяние (знает про один атом, не знает про интерференцию).

Рассмотрим когерентное рассеяние, учтя, что есть равновесные положения атомов и малые смещения относительно них, $\mathbf{r}_l = \mathbf{R}_l + \mathbf{u}_l$. Тогда от равновесных положений получится:

$$M \propto V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_l} = V(\mathbf{K}) N \delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}}, \quad (16.8)$$

где \mathbf{b} — любой вектор обратной решётки. Получаются брэгговские пики.

Вектора смещения можно разложить на фурье-гармоники. Рассмотрим одну из них:

$$\mathbf{r}_l = \mathbf{R}_l + \mathbf{a} \sin \mathbf{Q}\mathbf{R}_l. \quad (16.9)$$

Тогда

$$\begin{aligned} M &\propto \sum_l e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l + \mathbf{a} \sin \mathbf{Q}\mathbf{R}_l)} = \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_l} \left(1 - i\mathbf{K}\mathbf{a} \frac{e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_l} - e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}_l}}{2i} \right) = \\ &= \sum_l \left[e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_l} - \frac{\mathbf{K}\mathbf{a}}{2} (e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{Q})\mathbf{R}_l} - e^{-i(\mathbf{K}+\mathbf{Q})\mathbf{R}_l}) \right]. \end{aligned} \quad (16.10)$$

Поэтому в дополнение к основным брэгговским пикам ($\delta_{\mathbf{k},\mathbf{b}}$) появляются ещё и спутники ($\delta_{\mathbf{k},\mathbf{Q}+\mathbf{b}}$ и $\delta_{\mathbf{k},-\mathbf{Q}+\mathbf{b}}$). Так можно «увидеть» смещения.

XVII. НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ

Идея состоит в том, что рассеивая на кристалле нейтроны неупругим образом, с возбуждением фононов, мы можем, детектируя вылетающие нейтроны, получить информацию о фононах в кристалле. Для простоты будем рассматривать случай кубического кристалла с одним атомом в элементарной ячейке (изотропная среда).

Рассмотрим вероятность рассеяния (пропорциональную сечению рассеяния):

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \delta(\varepsilon_f + \hbar\omega - \varepsilon_i), \quad (17.1)$$

$$M = \langle f | \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} | i \rangle V(\mathbf{K}), \quad \mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}. \quad (17.2)$$

Здесь $|i\rangle$ и $|f\rangle$ — начальное и конечное состояние кристалла, $\hbar\omega$ — переданная кристаллу энергия.

Предполагая, что образец находится в состоянии $|i\rangle$ с вероятностью p_i (гиббсовское распределение), получаем

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |V(\mathbf{K})|^2 \sum_{l,m;i,f} p_i \langle i | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} | f \rangle \langle f | e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m} | i \rangle \delta(\varepsilon_f + \hbar\omega - \varepsilon_i). \quad (17.3)$$

Используя интегральное представление дельта-функции и гейзенберговское представление операторов,

$$2\pi\delta(\varepsilon_f + \hbar\omega - \varepsilon_i) = \frac{1}{\hbar} \int dt e^{i(\varepsilon_f/\hbar + \omega - \varepsilon_i/\hbar)t}, \quad (17.4)$$

$$e^{iH_0t/\hbar} \mathbf{r}_m e^{-iH_0t/\hbar} = \mathbf{r}_m(t), \quad (17.5)$$

можем написать

$$\begin{aligned} w &= \frac{1}{\hbar^2} |V(\mathbf{K})|^2 \int dt e^{i\omega t} \sum_{l,m;i,f} p_i \langle i | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} | f \rangle \langle f | e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} | i \rangle = \\ &= \frac{1}{\hbar^2} |V(\mathbf{K})|^2 \int dt e^{i\omega t} \sum_{l,m} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} \rangle_T, \end{aligned} \quad (17.6)$$

где $\langle \dots \rangle_T$ означает квантово-механическое среднее и статистическое среднее (гиббсовское) при температуре T .

Этот результат полезно связать с величиной, называемой динамическим структурным фактором (и являющейся фурье-образом корреляционной функции плотностей):

$$\begin{aligned} S(\mathbf{K}, \omega) &= \int dt e^{i\omega t} \sum_{l,m} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} \rangle_T = \\ &= \int dt d^3r d^3r' e^{i\omega t + i\mathbf{K}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \langle \rho(\mathbf{r}, 0) \rho(\mathbf{r}', t) \rangle_T, \end{aligned} \quad (17.7)$$

где оператор плотности (точнее, концентрации) есть

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l(t)). \quad (17.8)$$

Таким образом,

$$w = \frac{1}{\hbar^2} |V(\mathbf{K})|^2 S(\mathbf{K}, \omega). \quad (17.9)$$

Нам нужно разобраться с выражением

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} \rangle_T. \quad (17.10)$$

Запишем операторы координаты через равновесные положения атомов и операторы смещения:

$$\mathbf{r}_l(0) = \mathbf{R}_l + \mathbf{u}_l(0), \quad (17.11)$$

$$\mathbf{r}_m(t) = \mathbf{R}_m + \mathbf{u}_m(t), \quad (17.12)$$

тогда

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{u}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{u}_m(t)} \rangle_T. \quad (17.13)$$

Проблема с экспонентами, содержащими операторы смещения, состоит в том, что операторы $\mathbf{u}(t)$ в разные моменты времени не коммутируют. Чтобы в этом убедиться, запишем их во вторично квантованном виде:

$$\mathbf{u}_m(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{q},s} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{q}s}}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}s}}} (a_{\mathbf{q}s} e^{i\varphi_m} + a_{\mathbf{q}s}^\dagger e^{-i\varphi_m}), \quad \varphi_m = \mathbf{q}\mathbf{R}_m - \omega_{\mathbf{q},s}t. \quad (17.14)$$

Тогда

$$\begin{aligned} [\mathbf{u}_l(0), \mathbf{u}_m(t)] &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}',s,s'} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{q}s}\mathbf{e}_{\mathbf{q}'s'}}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}s}\omega_{\mathbf{q}'s'}}} \left(\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{ss'} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_l - i\mathbf{q}'\mathbf{R}_m + i\omega_{\mathbf{q}'s'}t} - \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{ss'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_l + i\mathbf{q}'\mathbf{R}_m - i\omega_{\mathbf{q}'s'}t} \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{MN} \sum_{\mathbf{q},s} \frac{\sin \varphi_{lm}}{\omega_{\mathbf{q}s}}, \quad \varphi_{lm} = \varphi_l(0) - \varphi_m(t). \end{aligned} \quad (17.15)$$

Таким образом, коммутатор действительно не ноль, однако является числом.

Вспомним полезный факт из жизни операторов. Если есть операторы A и B такие, что

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0, \quad (17.16)$$

то

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}. \quad (17.17)$$

Поскольку у нас коммутатор — число, эта формула в нашем случае работает. Таким образом,

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \langle e^{i\mathbf{K}(\mathbf{u}_l(0) - \mathbf{u}_m(t))} \rangle_T e^{\frac{1}{2}[\mathbf{K}\mathbf{u}_l(0), \mathbf{K}\mathbf{u}_m(t)]}. \quad (17.18)$$

Поскольку в изотропной среде все фононные колебания с заданным волновым вектором \mathbf{q} вырождены, мы можем выбрать одно из трёх направлений поляризации параллельным \mathbf{K} . Тогда

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \langle e^{iK(u_l(0) - u_m(t))} \rangle_T e^{\frac{K^2}{2}[u(0), u(t)]}, \quad (17.19)$$

где u — амплитуда колебания вдоль \mathbf{K} . Для гармонического осциллятора

$$\langle e^{iK(u_l(0) - u_m(t))} \rangle_T = e^{-\frac{K^2}{2} \langle (u_l(0) - u_m(t))^2 \rangle_T}. \quad (17.20)$$

Расписывая среднее в экспоненте, получаем:

$$\begin{aligned}
\langle (u_l(0) - u_m(t))^2 \rangle_T &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left\langle \left(a_{\mathbf{q}} (e^{i\varphi_l(0)} - e^{i\varphi_m(t)}) + a_{\mathbf{q}}^\dagger (e^{-i\varphi_l(0)} - e^{-i\varphi_m(t)}) \right)^2 \right\rangle_T = \\
&= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \langle a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger + a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \rangle_T (2 - 2 \cos \varphi_{lm}) = \\
&= \frac{\hbar}{MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} (2n_{\mathbf{q}} + 1) (1 - \cos \varphi_{lm}). \tag{17.21}
\end{aligned}$$

Здесь суммирование по (трём) ветвям спектра пропало, т.к. для каждого \mathbf{q} мы оставили одну ветвь, у которой поляризация параллельна \mathbf{K} .

Собирая всё вместе, получаем

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{K}, t) &= \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \exp \left[\frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{i \sin \varphi_{lm} - (1 - \cos \varphi_{lm})(2n_{\mathbf{q}} + 1)}{\omega_{\mathbf{q}}} \right] = \\
&= e^{-2W} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \exp \left[\frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{i \sin \varphi_{lm} + (2n_{\mathbf{q}} + 1) \cos \varphi_{lm}}{\omega_{\mathbf{q}}} \right], \tag{17.22}
\end{aligned}$$

где в последней записи мы отделили независимый от времени множитель

$$e^{-2W} = \exp \left[-\frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2n_{\mathbf{q}} + 1}{\omega_{\mathbf{q}}} \right], \tag{17.23}$$

называемый фактором Дебая-Уоллера.

В общем случае, не выбирая направления поляризации специальным образом, можно записать фактор Дебая-Уоллера в виде

$$e^{-2W} = \exp \left(-\langle (\mathbf{K}\mathbf{u})^2 \rangle_T \right).$$

Преобразуем зависящий от времени множитель в (17.22), учитывая, что аргумент экспоненты мал в силу большого N (оставляем первый порядок, т.е. пренебрегаем многофоновыми процессами):

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{K}, t) &= e^{-2W} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \left\{ 1 + \frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} [(n_{\mathbf{q}} + 1)e^{i\varphi_{lm}} + n_{\mathbf{q}}e^{-i\varphi_{lm}}] \right\} = \\
&= e^{-2W} \sum_{l,m} \left\{ e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} + \frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} [(n_{\mathbf{q}} + 1)e^{i(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)(\mathbf{K} + \mathbf{q})} e^{i\omega_{\mathbf{q}}t} + \right. \\
&\quad \left. + n_{\mathbf{q}}e^{i(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)(\mathbf{K} - \mathbf{q})} e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t}] \right\}. \tag{17.24}
\end{aligned}$$

Здесь три слагаемых — это (i) упругое рассеяние, (ii) неупругое рассеяние, при котором нейтрон испускает фонон и (iii) неупругое рассеяние, при котором нейтрон поглощает фонон. Фактор Дебая-Уоллера описывает уменьшение пиков рассеяния из-за теплового движения атомов.

ЧАСТЬ II: ЭЛЕКТРОНЫ В МЕТАЛЛАХ

Изложение этой части в основном следует книге [1]. Также могут оказаться полезными книги [2,3].

Литература по части II:

- [1] А.А. Абрикосов, «Основы теории металлов», М.: Физматлит, 2009.
- [2] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, «Физическая кинетика» («Теоретическая физика», том X), М.: Физматлит, 2007.
- [3] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, «Статистическая физика. Часть 2.» («Теоретическая физика», том IX), М.: Физматлит, 2004.

XVIII. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛЕ

Функция распределения в фазовом пространстве: $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$. Меняется за счёт столкновений электрона с другими электронами, фононами, и дефектами кристалла (примесные атомы, структурные дефекты). Кин.уравнение:

$$\frac{df}{dt} = I_{\text{ст}}(f), \quad (18.1)$$

где $I_{\text{ст}}(f)$ — интеграл столкновений. Поскольку

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E}, \quad (18.2)$$

можем написать⁹

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + e\mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I_{\text{ст}}(f). \quad (18.3)$$

Рассмотрим рассеяние на примесях в борновском приближении. Вероятность рассеяния в единицу времени:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \int |V_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')) \frac{d^3\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} V, \quad (18.4)$$

где $V_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ — матричный элемент энергии взаимодействия электрона с примесями, расположенными в точках \mathbf{R}_i :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (18.5)$$

Матричный элемент берётся между блоховскими функциями:

$$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \quad (18.6)$$

[здесь V — объём образца, поэтому периодические функции $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ нормированы на единицу]. Поэтому

$$V_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{1}{V} \sum_i \int v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}/\hbar} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} u_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (18.7)$$

Предположим для простоты, что примеси одинаковы и занимают эквивалентные положения в ячейках кристалла (т.е. расположены случайным образом в некоторых узлах

⁹ В случае фононов третье слагаемое в левой части имело вид

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = - \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}}$$

и играло роль только в особых случаях крупномасштабной неоднородности решётки.

периодической решётки, имеющей ту же периодичность, что и кристаллическая решётка). Тогда можно сдвинуть переменную интегрирования на \mathbf{R}_i и учесть, что $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ — периодическая функция:

$$V_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{1}{V} \sum_i e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\mathbf{R}_i/\hbar} \int v(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\mathbf{r}/\hbar} u_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \frac{1}{V} \sum_i e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\mathbf{R}_i/\hbar} v_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}. \quad (18.8)$$

Тогда

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \int |v_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 \sum_{i,k} e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_k)/\hbar} \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')) \frac{d^3\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (18.9)$$

В сумме из-за быстрых осцилляций обратятся в нуль все слагаемые кроме $i = k$, поэтому

$$\sum_{i,k} e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_k)/\hbar} \mapsto N_i, \quad (18.10)$$

где N_i — число примесей.

В результате

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |v_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')) \frac{d^3\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (18.11)$$

где n_i — концентрация примесей.

До сих пор мы думали про один электрон. Теперь учтём, что электронов много, они описываются функцией распределения. Для заданного импульса \mathbf{p} могут быть уходные процессы ($\mathbf{p} \mapsto \mathbf{p}'$) и приходные процессы ($\mathbf{p}' \mapsto \mathbf{p}$). Чтобы процесс произошёл, начальное состояние должно быть заполнено, конечное — свободно. Поэтому

$$\begin{aligned} I_{\text{ст}}(f) &= \frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |v_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 [-f(\mathbf{p})(1-f(\mathbf{p}')) + f(\mathbf{p}')(1-f(\mathbf{p}))] \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')) \frac{d^3\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |v_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 [f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})] \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')) \frac{d^3\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3}, \end{aligned} \quad (18.12)$$

Интегрирование в импульсном пространстве запишем следующим образом. Пусть dS — элемент изоэнергетической поверхности $\varepsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$ в импульсном пространстве.

Тогда

$$d^3\mathbf{p} = dS dp_n, \quad (18.13)$$

где dp_n обозначает интегрирование по нормали к dS . При этом

$$dp_n = \frac{d\varepsilon}{|\partial\varepsilon/\partial\mathbf{p}|} = \frac{d\varepsilon}{v}. \quad (18.14)$$

Поэтому

$$d^3\mathbf{p} = dS \frac{d\varepsilon}{v}. \quad (18.15)$$

Плотность состояний (в расчёте на одну проекцию спина) тогда можно записать как

$$\nu(\varepsilon) = \int \frac{dS}{v(2\pi\hbar)^3}. \quad (18.16)$$

Таким образом,

$$I_{\text{ст}}(f) = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |v_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 [f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})] \frac{dS'}{v(\mathbf{p}')(2\pi\hbar)^3}, \quad (18.17)$$

где интегрирование ведётся по поверхности $\varepsilon(\mathbf{p}') = \varepsilon(\mathbf{p})$.

Равновесная функция распределения f_0 зависит только от энергии, поэтому интеграл столкновений зануляется. Это значит, что в него на самом деле входит только отклонение от равновесной функции:

$$f = f_0 + f_1. \quad (18.18)$$

Мы будем рассматривать только ситуации, когда внешнее электрическое поле и градиент температур малы, в этом случае отклонение от равновесной функции малоб: $|f_1| \ll f_0$.

В изотропном случае изоэнергетическая поверхность — это сфера, и выражения упрощаются. $v_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ зависит только от угла θ между \mathbf{p}' и \mathbf{p} (которые равны по модулю), а интегрирование по dS' превращается в интегрирование по телесному углу. Поскольку

$$\nu(\varepsilon) = \int \frac{p^2 d\Omega}{v(2\pi\hbar)^3} = \frac{4\pi p^2}{v(2\pi\hbar)^3}, \quad (18.19)$$

можем написать

$$I_{\text{ст}}(f) = \int W(\theta) [f_1(\mathbf{p}') - f_1(\mathbf{p})] \frac{d\Omega}{4\pi}, \quad (18.20)$$

где

$$W(\theta) = \frac{2\pi}{\hbar} n_i |v(\theta)|^2 \nu(\varepsilon). \quad (18.21)$$

Пусть есть слабое электрическое поле (аналогично для малого градиента температуры). $f_1(\mathbf{p})$ должно быть скаляром, линейным по \mathbf{E} (в первом приближении). Поэтому оно должно иметь вид

$$f_1(\mathbf{p}) = \mathbf{p}\mathbf{E}\eta(\varepsilon). \quad (18.22)$$

Тогда

$$I_{\text{ст}}(f) = pE\eta(\varepsilon) \int W(\theta) \left[\cos(\widehat{\mathbf{p}'}, \widehat{\mathbf{E}}) - \cos(\widehat{\mathbf{p}}, \widehat{\mathbf{E}}) \right] \frac{d\Omega}{4\pi}. \quad (18.23)$$

Полярная ось z у нас направлена вдоль \mathbf{p} . Можем написать

$$\mathbf{p}'\mathbf{E} = p'_z E_z + \mathbf{p}'_{\perp} \mathbf{E}_{\perp}. \quad (18.24)$$

Делим на $p'E$, получаем

$$\cos(\widehat{\mathbf{p}'}, \widehat{\mathbf{E}}) = \cos\theta \cos(\widehat{\mathbf{p}}, \widehat{\mathbf{E}}) + \sin\theta \sin(\widehat{\mathbf{p}}, \widehat{\mathbf{E}}) \cos(\widehat{\mathbf{p}'_{\perp}}, \widehat{\mathbf{E}_{\perp}}). \quad (18.25)$$

Интегрирование в (18.23) ведётся по $\sin\theta d\theta d\varphi$, где углы определяют направление вектора \mathbf{p}' . Единственная величина, которая зависит от φ — это $\cos(\widehat{\mathbf{p}'_{\perp}}, \widehat{\mathbf{E}_{\perp}})$, и интегрирование по $d\varphi$ зануляет соответствующее слагаемое. Получаем

$$I_{\text{ст}}(f) = (\mathbf{p}\mathbf{E})\eta(\varepsilon) \int W(\theta) [\cos\theta - 1] \frac{d\Omega}{4\pi}. \quad (18.26)$$

То есть мы получили, что

$$I_{\text{ст}}(f) = -\frac{f_1}{\tau}, \quad \frac{1}{\tau} = \int W(\theta)(1 - \cos\theta) \frac{d\Omega}{4\pi}. \quad (18.27)$$

Это пример применимости τ -приближения.

XIX. ПРОВОДИМОСТЬ, ОБУСЛОВЛЕННАЯ ПРИМЕСЯМИ

Пусть в металле есть однородное электрическое поле \mathbf{E} . В кин.уравнении (18.3) исчезают первые два члена, остаётся

$$e\mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f_1}{\tau}, \quad (19.1)$$

где в левой части мы заменили f на равновесную функцию f_0 , т.к. электрическое поле слабое. При этом f_0 зависит только от энергии, поэтому

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}. \quad (19.2)$$

Это даёт

$$f_1 = -e\mathbf{E}\mathbf{v}\tau \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}. \quad (19.3)$$

Плотность электрического тока выражается через функцию распределения следующим образом:

$$\mathbf{j} = 2e \int \mathbf{v} f \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (19.4)$$

Функция $f_0(\varepsilon)$ зануляет интеграл из-за нечётности подынтегрального выражения, поэтому вместо f можно написать f_1 . Получаем

$$\mathbf{j} = -2e^2 \int \mathbf{v}(\mathbf{v}\mathbf{E}) \tau \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon \frac{d\Omega}{4\pi}. \quad (19.5)$$

Если функция $\nu(\varepsilon)$ медленно меняется в окрестности $\varepsilon = \mu$ ширины T , то можно считать

$$\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \approx -\delta(\varepsilon - \mu). \quad (19.6)$$

В изотропном случае, интегрируя по углам, получаем результат

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad \sigma = \frac{2e^2}{3} [v^2 \tau \nu(\varepsilon)]_{\varepsilon=\mu}. \quad (19.7)$$

Если дополнительно предположить модель свободных электронов, то получим

$$\nu(\varepsilon) = \frac{mp}{2\pi^2 \hbar^3} = \frac{m\sqrt{2m\varepsilon}}{2\pi^2 \hbar^3}, \quad (19.8)$$

$$n_e = 2 \int_0^\mu \nu(\varepsilon) d\varepsilon = 2\nu(\mu) \frac{2}{3} \mu, \quad (19.9)$$

$$\sigma = \frac{2e^2}{3} v^2 \tau \frac{3n_e}{4\mu} = \frac{n_e e^2 \tau}{m} \quad (19.10)$$

— формула Друде.

XX. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

В случае металлов в теплопроводность есть как фононный, так и электронный вклад, причём обычно электронный вклад больше (например, он линеен по T при $T \rightarrow 0$ в отличие от T^3 для фононов). Рассмотрим электронную теплопроводность.

Для расчёта теплопроводности можно пользоваться моделью свободного электронного газа, но мы будем пользоваться моделью квазичастиц и на этом примере познако-

мимся с кин.уравнением для квазичастиц. Их спектр, заряд и скорость:

$$\varepsilon_{\text{кв}} = |\xi|, \quad \xi = \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu, \quad (20.1)$$

$$e_{\text{кв}} = e \operatorname{sgn} \xi, \quad (20.2)$$

$$\mathbf{v}_{\text{кв}} = \frac{\partial |\xi|}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} \operatorname{sgn} \xi, \quad \mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{m_*}, \quad (20.3)$$

где мы учли, что в рамках теории ферми-жидкости Ландау эффективная масса квазичастиц m_* может отличаться от массы реальных электронов.

Равновесная функция распределения квазичастиц есть

$$f_0 = \frac{1}{e^{|\xi|/T} + 1}. \quad (20.4)$$

Хим.потенциал для квазичастиц равен нулю — это условие минимума термодинамического потенциала по числу частиц (которое не задано).

Кин.уравнение для квазичастиц имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{sgn} \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + e \mathbf{E} \operatorname{sgn} \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (20.5)$$

причём τ для квазичастиц такое же, как для электронов, т.к. в него входит квадрат заряда.

В результате вычисления теплопроводности получится

$$\mathbf{q} = -\varkappa \nabla T, \quad \varkappa = \frac{2\pi^2}{9} T [v^2 \tau \nu(\varepsilon)]_{\varepsilon=\mu}. \quad (20.6)$$

Сравнивая этот результат с проводимостью (19.7), находим

$$\frac{\varkappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3e^2} \quad (20.7)$$

— закон Видемана-Франца, константа в правой части называется постоянной Лоренца.

В анизотропном случае такое же соотношение получится между тензорами теплопроводности и электропроводности. Но это всё для упругого рассеяния. Если же рассеяние электронов перестает быть упругим, закон не выполняется.

XXI. РАССЕЯНИЕ НА ПРИМЕСЯХ

В реальных металлах спектры $\varepsilon(\mathbf{p})$ и амплитуды рассеяния устроены сложно, поэтому точно посчитать проводимость и теплопроводность из первых принципов трудно.

Но можно относительно легко найти порядки этих величин и их зависимость от температуры.

Рассмотрим рассеяние на примесях. Пусть Σ — сечение рассеяния электронов на примесях, его характерная величина $\Sigma \sim 10^{-16} \text{ см}^2$. Пусть электрон пролетел расстояние l . При этом он столкнётся с примесями, находящимися в объёме Σl . Если n_i — плотность примесей, то всего столкновений $n_i \Sigma l$. Длина свободного пробега соответствует тому, что будет порядка одного столкновения, поэтому

$$l \sim \frac{1}{n_i \Sigma}. \quad (21.1)$$

Подставим это в формулу Друде:

$$\sigma \sim \frac{n_e e^2 \tau}{m} \sim \frac{n_e e^2 l}{p_0} \sim \frac{n_e e^2}{p_0 n_i \Sigma}. \quad (21.2)$$

Число электронов обычно того же порядка, что и число атомов, поэтому $n_i/n_e \sim c_i$ — порядка атомной концентрации примесей. Учтём также, что скорости Ферми в металлах обычно порядка нескольких единиц на 10^8 см/с , т.е. на два порядка меньше скорости света. Поэтому $e^2/\hbar v \sim 1$. В результате

$$\sigma \sim \frac{\hbar v}{p_0 c_i \Sigma} \sim \frac{\hbar}{m c_i \Sigma} \sim \frac{10^{16}}{c_i} \text{ с}^{-1}. \quad (21.3)$$

Эта величина (остаточная проводимость) не зависит от температуры.

Теплопроводность, как следует из определения [см. (20.6)], имеет размерность $\text{эрг/см} \cdot \text{с} \cdot \text{К}$. Найдём её из закона Видемана-Франца (20.7):

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{\pi^2}{3e^2} \sigma T \sim \frac{9}{3 \cdot 5^2 \cdot 10^{-20} \text{ эрг} \cdot \text{см}} \frac{10^{16}}{c_i} \frac{1}{\text{с}} T \sim \frac{10^{35}}{c_i} T \frac{1}{\text{эрг} \cdot \text{см} \cdot \text{с}} \sim \\ &\sim \frac{10^{35}}{c_i} T \frac{\text{эрг}}{\text{см} \cdot \text{с} \cdot \text{К}^2} \cdot \frac{\text{К}^2}{\text{эрг}^2} \sim \frac{10^3}{c_i} \frac{T}{1 \text{ К}} \frac{\text{эрг}}{\text{см} \cdot \text{с} \cdot \text{К}}. \end{aligned} \quad (21.4)$$

XXII. ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННОЕ РАССЕЯНИЕ

Рассмотрим процесс рассеяния для исходного электрона, находящегося над ферми-морем. Разберёмся, как устроены импульсы. Электрон 1 рассеивается на электроне 2, получаются электроны 1' и 2'.

Первый электрон — вне ферми-сферы, второй нужно брать внутри. 1' и 2' должны быть вне ферми-сферы, из-за принципа Паули. Сохранение импульса:

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2, \quad (22.1)$$

$$p_1, p'_1, p'_2 > p_0, \quad p_2 < p_0. \quad (22.2)$$

Обратное время свободного пробега — порядка вероятности рассеяния в единицу времени:

$$\frac{1}{\tau} \propto \int \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon'_1 - \varepsilon'_2) d^3 \mathbf{p}_2 d^3 \mathbf{p}'_1. \quad (22.3)$$

Интегрировать по \mathbf{p}'_2 не нужно, т.к. этот импульс фиксируется законом сохранения импульса. Интегрируя по углу между \mathbf{p}_2 и \mathbf{p}'_1 , мы пройдём конфигурацию, при которой в дополнение к закону сохранения импульса выполнится закон сохранения энергии. Поэтому можно считать, что это интегрирование снимает дельта-функцию от энергий. Остаётся интегрирование по модулям векторов p_2 и p'_1 .

Будем предполагать, что p_1 близко к p_0 . Тогда все остальные импульсы по модулю также близки к p_0 . В результате оба треугольника на рисунке ($\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ и $\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2, \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$) почти совпадают между собой и являются равнобедренными. Углы почти совпадают, поэтому из равенства сумм проекций на основание следует примерное равенство сумм модулей: $p_1 + p_2 \approx p'_1 + p'_2$. Учитывая величины модулей векторов, формулы (22.2), получаем, что интегрирование по p_2 и p'_1 ограничено на интервалы

$$2p_0 - p_1 < p_2 < p_0, \quad p_0 < p'_1 < p_1 + p_2 - p_0. \quad (22.4)$$

Отсюда

$$\int dp_2 dp'_1 = \frac{(p_1 - p_0)^2}{2} \quad (22.5)$$

то есть

$$\frac{1}{\tau} \propto \xi^2. \quad (22.6)$$

При конечной температуре $\xi \sim T$, а для обезразмеривания у нас есть хим. потенциал μ .

Поэтому получаем оценку

$$\tau \sim \hbar \frac{\mu}{T^2}. \quad (22.7)$$

Поэтому ($e^2 \sim \hbar v$)

$$\sigma \sim \frac{n_e e^2 \hbar \mu}{m T^2} \sim \left(\frac{p_0}{\hbar}\right)^3 \frac{\hbar^2 v}{m \mu} \left(\frac{\mu}{T}\right)^2 \sim \frac{\hbar}{m} \left(\frac{p_0}{\hbar}\right)^2 \left(\frac{\mu}{T}\right)^2. \quad (22.8)$$

Оценивая $\hbar/p_0 \sim 10^{-8}$ см, получаем

$$\sigma \sim 10^{16} \left(\frac{\mu}{T}\right)^2 \text{ с}^{-1}. \quad (22.9)$$

Из закона Видемана-Франца оцениваем

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{\pi^2}{3e^2} \sigma T \sim \frac{9}{3 \cdot 5^2 \cdot 10^{-20} \text{ эрг} \cdot \text{см}} 10^{16} \frac{1}{\text{с}} \left(\frac{\hbar^2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}}{2m}\right)^2 \frac{1}{T} \sim \\ &\sim \frac{10^{19} \cdot 10^{16}}{\text{эрг} \cdot \text{см} \cdot \text{с}} (0.5 \cdot 10^{-11} \text{ эрг})^2 \frac{1}{T} \sim 10^{12} \frac{\text{эрг}}{\text{см} \cdot \text{с}} \cdot \frac{1}{T}. \end{aligned} \quad (22.10)$$

Вообще-то электрон-электронные столкновения не являются упругими, т.к. электроны обмениваются энергией, поэтому закон Видемана-Франца не обязан быть применим. Но на самом деле его неприменимость связана с тем, что возникают два разных времени τ — для импульсной и энергетической релаксации. Для ee столкновений энергии электронов порядка T , и передача энергии того же порядка. Импульсы порядка p_0 , и передача импульса того же порядка. Поэтому оба процесса релаксации проходят одинаково эффективно, и их τ одинаковые. Таким образом, нового параметра не возникает, и в результате закон Видемана-Франца по порядку величины работает.

XXIII. ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ РАССЕЯНИЕ

При деформации решётки возникает поляризация $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ (сейчас рассматриваем решётку в непрерывном пределе). Поляризационный заряд единицы объёма есть $\text{div } \mathbf{P}$, а энергия взаимодействия электронов с этим зарядом равна

$$e \int Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \text{div } \mathbf{P}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'. \quad (23.1)$$

Без экранирования ядро было бы чистым кулоновским взаимодействием: $Q = 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Однако, из-за экранировки оно становится короткодействующим. Считая атомные расстояния малыми, можем считать ядро дельта-функцией:

$$Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx a^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (23.2)$$

где a имеет порядок атомного пространственного масштаба, $a \sim 10^{-8}$ см $\sim 1/p_0$. Поляризацию можно оценить как $\mathbf{P} \sim ne\mathbf{u}$, где n — плотность атомов (порядка плотности электронов), \mathbf{u} — смещение. Взаимодействие содержит $\text{div } \mathbf{P}$, поэтому в фурье-компоненту войдёт $iku_{\mathbf{k}}$ или $-iku_{\mathbf{k}}^\dagger$, при том что для длинноволновых фононов $\omega = ck$.

$$V_{\mathbf{k}} \sim ie^2 a^2 n \frac{\omega}{c} u_{\mathbf{k}}. \quad (23.3)$$

В первом порядке теории возмущений есть процессы, соответствующие матричным элементам $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^\dagger$, т.е. процессам с поглощением или испусканием одного фонона. Например, для испускания будет матричный элемент $\langle n_{\mathbf{k}} + 1 | a_{\mathbf{k}}^\dagger | n_{\mathbf{k}} \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}} + 1}$, и мы получим (N — число элементарных ячеек, M — масса элементарной ячейки):

$$V_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k},\mathbf{p}} \sim -ie^2 a^2 n \left(\frac{\hbar(n_{\mathbf{k}} + 1)}{NM\omega} \right)^{1/2} \frac{\omega}{c} \sim -ina^3 \frac{e^2}{a} \left(\frac{\hbar\omega(n_{\mathbf{k}} + 1)}{N} \right)^{1/2} \frac{1}{c\sqrt{M}}. \quad (23.4)$$

Поскольку $na^3 \sim 1$, $e^2/a \sim p_0^2/m$, $c\sqrt{M} \sim v\sqrt{m}$, получаем

$$V_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k},\mathbf{p}} \sim -ip_0 \left(\frac{\hbar\omega(n_{\mathbf{k}} + 1)}{Nm} \right)^{1/2}. \quad (23.5)$$

Рассмотрим теперь предельные случаи высоких и низких температур.

1. Высокие температуры, $T \gg \hbar\omega_D$. Наиболее вероятно испускание и поглощение фононов с большими энергиями, порядка $\hbar\omega_D$. Вероятность рассеяния с испусканием фонона равна

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \int |V_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k},\mathbf{p}}|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{k})) \frac{V d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (23.6)$$

Дельта-функцию в этой формуле можно записать как

$$\delta\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k})^2}{2m} - \hbar\omega(\mathbf{k})\right) = \delta\left(\frac{\hbar\mathbf{p}\mathbf{k}}{m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \hbar\omega(\mathbf{k})\right) = \frac{m}{\hbar p k} \delta\left(\cos\theta - \frac{\hbar k}{2p} - \frac{m\omega}{pk}\right). \quad (23.7)$$

В нашем пределе $\hbar k/p \sim \hbar k_D/p_0 \sim 1$. Кроме того, $m\omega/pk \sim mc/p_0 \sim c/v \ll 1$. Поэтому дельта-функция сработает при интегрировании по углам (причём $\cos\theta \sim 1$, т.е. фононы имеют широкое угловое распределение. Интегрирование дельта-функции по $d^3\mathbf{k}$ даёт множитель порядка

$$\delta(\dots) d^3\mathbf{k} \sim \frac{m}{\hbar p_0} k_D^2 \sim \frac{mp_0}{\hbar^3}. \quad (23.8)$$

В матричном элементе взаимодействия можно взять

$$n_{\mathbf{k}} + 1 \approx n_{\mathbf{k}} \approx \frac{T}{\hbar\omega_D}. \quad (23.9)$$

В результате

$$\frac{1}{\tau} \sim W \sim \frac{1}{\hbar} \frac{p_0^3 T}{\hbar^3 n} \sim \frac{T}{\hbar}. \quad (23.10)$$

Поэтому

$$\sigma \sim \frac{n_e e^2 \tau}{m} \sim \frac{\hbar}{m} \left(\frac{p_0}{\hbar}\right)^2 \frac{\mu}{T} \sim 10^{16} \frac{\mu}{T} \text{ c}^{-1}. \quad (23.11)$$

Таким образом, при высоких T получаем $\rho \propto T$.

Поскольку $\hbar\omega_D \ll T$, энергия электрона при столкновениях почти не меняется, поэтому столкновения почти упругие, и работает закон Видемана-Франца. Отсюда

$$\varkappa = \text{const} \sim \frac{10^{19}}{\text{эрг} \cdot \text{см}} \cdot \frac{10^{16}}{\text{с}} \cdot 0.5 \cdot 10^{-11} \text{эрг} \cdot k_B \sim 10^8 \frac{\text{эрг}}{\text{с} \cdot \text{см} \cdot \text{К}}. \quad (23.12)$$

2. Низкие температуры, $T \ll \hbar\omega_D$. Основную роль играют фононы с энергией $\hbar\omega \sim T$, поэтому энергия электронов существенно изменяется при каждом столкновении. Импульс фононов порядка $\hbar\omega/c \sim T/c$, а импульс электронов порядка p_0 , поэтому относительная величина изменения импульса электрона при каждом столкновении есть $T/cp_0 \sim T/\hbar\omega_D \ll 1$. То есть энергия меняется сильно, а импульс слабо. Поэтому этот случай противоположен упругим столкновениям, при которых, наоборот, энергия меняется слабо, а импульс сильно. Из-за этого применять Видемана-Франца нельзя.

Но можно ввести разные τ для электро- и теплопроводности. Для теплопроводности каждое столкновение эффективно (импульс передаётся слабо, зато энергия передаётся хорошо), поэтому соответствующее τ_t можно найти как W^{-1} , см. формулу (23.6). В дельта-функции (23.7) теперь имеем $\hbar k/p_0 \ll 1$, а третье слагаемое по-прежнему мало в меру $c/v \ll 1$. Поэтому дельта-функция определённо сработает при интегрировании по углам (причём $\cos \theta \ll 1$, т.е. импульс фонона почти перпендикулярен импульсу электрона). В результате остаётся¹⁰

$$W \sim \frac{1}{\hbar} p_0^2 \frac{T}{Nm} V \frac{m}{\hbar p_0 k} k^3 \sim \frac{p_0 k^2 T}{\hbar^2 n} \sim \frac{p_0}{\hbar^2 (p_0/\hbar)^3} \left(\frac{T}{\hbar c} \right)^2 T \sim \left(\frac{T}{\hbar\omega_D} \right)^2 \frac{T}{\hbar}. \quad (23.13)$$

Для вычисления теплопроводности можно использовать $\tau_t \sim 1/W$. Поэтому (первое

¹⁰ См. Левитов, Шитов, задача 28 (Время жизни квазичастиц). Там нужно вычислить собственно-энергетическую часть для электронов из-за рассеяния на фононах при $T = 0$. Её мнимая часть определяет затухание квазичастиц. При $|\varepsilon| < \omega_D$ получается

$$\text{Im} \Sigma(\varepsilon) = -\frac{\zeta \pi}{12 p_0^2 c^2} \varepsilon^3,$$

где ζ — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия. В нашем же вычислении затухание квазичастиц — это W , а чтобы сравнить результаты, вместо T надо взять энергию квазичастицы (температура, собственно, возникла как характерная величина этой энергии). Видим, что с точностью до численного коэффициента результаты совпадают.

соотношение аналогично тому, что мы получали для фононной теплопроводности)¹¹

$$\begin{aligned} \kappa &\sim c_e l v \sim c_e v^2 \tau_t \sim \frac{m p_0}{\hbar^3} T \left(\frac{p_0}{m}\right)^2 \left(\frac{\hbar \omega_D}{T}\right)^2 \frac{\hbar}{T} \sim \frac{p_0^3}{\hbar^2 m} \left(\frac{\hbar \omega_D}{T}\right)^2 \sim \\ &\sim \kappa(T \gg \hbar \omega_D) \left(\frac{\omega_D}{T}\right)^2 \sim 10^8 \left(\frac{\hbar \omega_D}{T}\right)^2 \frac{\text{эрг}}{\text{с} \cdot \text{см} \cdot \text{К}}. \end{aligned} \quad (23.14)$$

Теперь подумаем про электропроводность. Когда мы выводили интеграл столкновений для примесей и получали из него время свободного пробега (18.27), фактически использовалось только то, что импульс электрона почти не меняется по модулю при столкновениях. Это и сейчас справедливо, поэтому полученную тогда формулу для τ можно применять. В этой формуле учтём, что угол рассеяния θ по порядку величины равен отношению импульса фонона к импульсу электрона:

$$\theta \sim \frac{\hbar k}{p_0} \sim \frac{T}{\hbar \omega_D} \ll 1. \quad (23.15)$$

Поэтому (18.27) даёт

$$\frac{1}{\tau_e} \sim \overline{W(\theta)\theta^2} \sim \left(\frac{T}{\hbar \omega_D}\right)^4 \frac{T}{\hbar} \quad (23.16)$$

[в $W(\theta)$ будет дельта-функция, которая просто даст правильное значение θ под знаком усреднения]. Сравнивая этот результат с (23.10), вместо (23.11) можем сразу написать

$$\sigma \sim \sigma(T \gg \hbar \omega_D) \left(\frac{\hbar \omega_D}{T}\right)^4 \sim 10^{16} \frac{\mu}{T} \left(\frac{\hbar \omega_D}{T}\right)^4 \text{ с}^{-1}. \quad (23.17)$$

Таким образом, при низких T получаем $\rho \propto T^5$ (закон Блоха-Грюнайзена).

Закон Видемана-Франца в этом случае не выполняется, вместо него получаем

$$\frac{\kappa}{\sigma} \sim \frac{T}{e^2} \left(\frac{T}{\hbar \omega_D}\right)^2. \quad (23.18)$$

XXIV. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПРОВОДИМОСТИ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Мы рассматривали механизмы рассеяния по-отдельности. Если же они действуют одновременно, то в случае редких процессов вероятности рассеяния должны складываться (пренебрегаем интерференцией различных процессов рассеяния). В этом случае

¹¹ Электронная теплоёмкость может быть записана как

$$c_e = \frac{m p_0}{3 \hbar^3} T.$$

должны складываться сопротивления (т.к. они пропорциональны $1/\tau$) — правило Матиссена. Поэтому при низких температурах ($T < T_D$) можно ожидать

$$\rho = c + aT^2 + bT^5, \quad (24.1)$$

где сложены вклады от примесей, электрон-электронного и электрон-фононного рассеяния. Для теплопроводности имеем

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{d}{T} + fT + gT^2. \quad (24.2)$$

Первые два вклада подчиняются закону Видемана-Франца, третий — нет.

При высоких температурах ($T > T_D$) обычно основной вклад даёт электрон-фононное рассеяние:

$$\rho = BT, \quad \kappa = \text{const}. \quad (24.3)$$

Электрон-электронное при этом много меньше: сопоставляя (22.8) и (23.11), получаем

$$\frac{\rho_{e-e}}{\rho_{e-ph}} \sim \frac{T}{\mu} \ll 1. \quad (24.4)$$

Меру чистоты образца экспериментально часто оценивают с помощью RRR (residual-resistivity ratio). В идеале — это отношение сопротивления при комнатной и при нулевой температуре,

$$RRR = \frac{\rho(300 \text{ K})}{\rho(0 \text{ K})}, \quad (24.5)$$

в реальности берут наименьшую доступную температуру (хотя бы гелиевую, 4.2 К). Чем эта величина больше, тем чище образец (т.к. остаточное сопротивление определяется примесями).

XXV. КИН.УРАВНЕНИЕ ПРИ НАЛИЧИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

При наличии электрического и магнитного полей динамика электронов существенно зависит от топологии ферми-поверхности. В этом вопросе удобно говорить про всю обратную решётку (не только первую зону Бриллюэна). Энергия зависит от квазиимпульса периодически (с периодами, определяемыми векторами обратной решётки). Изоэнергетические поверхности (в частности, ферми-поверхность) также периодичны.

Поскольку динамика связана с движением электрона по ферми-поверхности, важно, является ли ферми-поверхность замкнутой (не доходит до границ первой зоны Бриллюэна) или открытой (доходит до границ и периодически продолжается дальше).

Рассмотрим электрон в магнитном поле. Уравнение движения:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{e}{c}[\mathbf{v}\mathbf{H}] = \mathbf{F}. \quad (25.1)$$

Изменение энергии:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{v}\mathbf{F} = 0. \quad (25.2)$$

Из этих уравнений следует

$$\varepsilon = \text{const}, \quad p_z = \text{const}, \quad (25.3)$$

где в качестве оси z выбрано направление магнитного поля \mathbf{H} .

Таким образом, в импульсном пространстве траектория — это сечение изоэнергетической поверхности $\varepsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$ плоскостью $p_z = \text{const}$. У замкнутой ферми-поверхности все сечения — замкнутые контура. Если ферми-поверхность открытая, то сечение может быть как замкнутым, так и открытым (продолжающимся по всей обратной решётке).

Уравнение движения в компонентах:

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{e}{c}v_y H, \quad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{e}{c}v_x H. \quad (25.4)$$

Возводим в квадрат и складываем:

$$\frac{dp_x^2 + dp_y^2}{dt^2} = \left(\frac{e}{c}\right)^2 (v_x^2 + v_y^2) H^2. \quad (25.5)$$

Обозначая $dl = \sqrt{dp_x^2 + dp_y^2}$ элемент длины траектории в импульсном пространстве, мы можем написать

$$dt = \frac{c}{eH} \frac{dl}{v_\perp}, \quad t = \frac{c}{eH} \int \frac{dl}{v_\perp}, \quad (25.6)$$

$$v_\perp = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}. \quad (25.7)$$

В случае замкнутой траектории интеграл по замкнутому контуру даёт период движения:

$$T = \frac{c}{eH} \oint \frac{dl}{v_\perp}. \quad (25.8)$$

Площадь сечения $p_z = \text{const}$ даётся интегралом

$$S = \int dp_x dp_y. \quad (25.9)$$

Но удобнее перейти от этих декартовых координат к аналогу полярных, интегрируя в плоскости $p_z = \text{const}$ вдоль контуров $\varepsilon = \text{const}$ и по нормали к ним. Кольцо между контурами с ε , различающимися на $d\varepsilon$, в данном месте имеет ширину

$$\frac{d\varepsilon}{|\partial\varepsilon/\partial\mathbf{p}_\perp|} = \frac{d\varepsilon}{v_\perp}. \quad (25.10)$$

Чтобы получить площадь кольца, надо взять интеграл по dl , а площадь сечения в результате равна

$$S = \int d\varepsilon \oint \frac{dl}{v_\perp}. \quad (25.11)$$

Сопоставляя с (25.8), получаем

$$T = \frac{c}{eH} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}. \quad (25.12)$$

Определим так называемую «циклотронную массу» (имеет смысл лишь для замкнутых орбит)

$$m_* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}. \quad (25.13)$$

Период движения можно записать через ларморовскую частоту:

$$T = \frac{2\pi}{\Omega}, \quad \Omega = \frac{eH}{m_*c}. \quad (25.14)$$

Если внутри орбиты $\varepsilon = \text{const}$ — область меньшей энергии, то m_* положительно (электроноподобные носители; например, почти пустая зона). Наоборот — тогда m_* отрицательно (дырочноподобные носители; например, почти заполненная зона).

От движения в импульсном пространстве можно перейти к движению в координатном пространстве. Уравнение движения перепишем в виде

$$d\mathbf{p} = \frac{e}{c} [d\mathbf{r}\mathbf{H}]. \quad (25.15)$$

Это означает, что проекция траектории электрона на плоскость, перпендикулярную \mathbf{H} , определяется траекторией в импульсном пространстве с точностью до замены

$$x \mapsto -\frac{c}{eH}p_y, \quad y \mapsto \frac{c}{eH}p_x, \quad (25.16)$$

в то время как по z происходит движение со скоростью $v_z = \partial\varepsilon/\partial p_z$. Если сечение ферми-поверхности плоскостью $p_z = \text{const}$ — замкнутое, то траектория — спираль с осью вдоль \mathbf{H} . Если траектория открыта в импульсном пространстве, то она будет открытой и в пространстве координатном.

В присутствии магнитного поля удобно перейти от p_x и p_y к новым независимым переменным — энергии ε и «времени движения по траектории»

$$t_1 = \frac{c}{eH} \int \frac{dl}{v_{\perp}}. \quad (25.17)$$

При наличии электрического поля (а ниже мы будем рассматривать такую ситуацию) это уже не истинное время, а некоторая функция p_x и p_y . Как мы уже знаем,

$$\int dp_x dp_y = \int d\varepsilon \frac{dl}{v_{\perp}}, \quad (25.18)$$

поэтому в новых переменных интегрирование по импульсному пространству приобретает вид

$$\int dp_x dp_y dp_z = \frac{eH}{c} \int dt_1 d\varepsilon dp_z. \quad (25.19)$$

При наличии постоянных и однородных электрического и магнитного полей кин.уравнение можно написать в виде [раньше у нас было $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$; теперь явной зависимости от t нет, зависимости от координаты \mathbf{r} тоже нет, а от трёх компонент \mathbf{p} переходим к трём новым переменным]

$$\frac{\partial f}{\partial t_1} \dot{t}_1 + \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \dot{\varepsilon} + \frac{\partial f}{\partial p_z} \dot{p}_z = I_{\text{cr}}(f). \quad (25.20)$$

При этом

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{v} \frac{d\mathbf{p}}{dt}, \quad (25.21)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}] + e\mathbf{E}, \quad (25.22)$$

откуда

$$\dot{\varepsilon} = e\mathbf{v}\mathbf{E}, \quad (25.23)$$

$$\dot{p}_z = eE_z. \quad (25.24)$$

Переменная t_1 должна быть определена из уравнений движения вида (25.4), в которых нет электрического поля. Но в реальности это отличие почти никогда не важно (если только магнитное поле не экстремально слабое), т.к. обычно $(v/c)H \gg E$.¹² Поэтому

¹² Например, возьмём магнитное поле Земли, $H_0 \approx 0.5$ Э, и предположим, что $E = (v/c)H_0$. Пусть сопротивление при комнатной температуре определяется фононами, см. формулу (23.11). Тогда для тока мы получим

$$j = \sigma E \sim 10^{16} \frac{\mu}{T} c^{-1} \cdot \frac{v}{c} H_0 \sim 10^{16} \cdot \frac{10^4}{10^2} \cdot 10^{-2} \cdot 0.5 \frac{\text{Э}}{c}.$$

Чтобы перевести в СИ, надо поделить на коэффициент $3 \cdot 10^9$, определяющий переход от единиц заряда СГСЭ к Кл, поэтому $j \sim 10^6$ А/см². При таких плотностях тока металл испарится.

$t_1 \approx 1$. В результате получаем

$$\frac{\partial f}{\partial t_1} + \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} e \mathbf{v} \mathbf{E} + \frac{\partial f}{\partial p_z} e E_z = I_{\text{ст}}(f). \quad (25.25)$$

Будем параметризовать отклонение функции распределения от равновесия новой функцией ψ :

$$f = f_0 - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \psi. \quad (25.26)$$

Сейчас мы работаем в независимых переменных ε , p_z и t_1 , поэтому f_0 нужно считать независимой от p_z (и от t_1 , само собой). Хотим линеаризовать кин.уравнение по ψ . Электрическое поле считаем слабым и вкладками, содержащими произведение ψ и E , пренебрегаем. Поэтому получаем

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \psi}{\partial t_1} + \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} e \mathbf{v} \mathbf{E} = I_{\text{ст}}(f), \quad (25.27)$$

откуда

$$\frac{\partial \psi}{\partial t_1} - I_1(\psi) = e \mathbf{v} \mathbf{E}, \quad (25.28)$$

где мы обозначили

$$I_1(\psi) = \frac{I_{\text{ст}}(f_0 - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \psi)}{-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}}. \quad (25.29)$$

По t_1 должны быть гран.условия. Если траектория электрона замкнутая, то ψ должна зависеть от t_1 периодически (интервал интегрирования по t_1 в этом случае — один полный период). Если траектория открытая, то функция ψ должна быть конечной.

XXVI. ЭФФЕКТ ХОЛЛА И МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ В СЛАБОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Рассмотрим слабое магнитное поле в рамках изотропной модели с использованием τ -приближения (слабость поля будет означать $\Omega\tau \ll 1$). В этом случае

$$I_1(\psi) = -\frac{\psi}{\tau}. \quad (26.1)$$

Кин.уравнение принимает вид

$$\frac{\partial \psi}{\partial t_1} + \frac{\psi}{\tau} = e \mathbf{v}(t_1) \mathbf{E}, \quad (26.2)$$

Линейное неоднородное уравнение, метод вариации произвольной постоянной:

$$\psi(t_1) = a(t_1)e^{-t_1/\tau}, \quad (26.3)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t_1} = e\mathbf{v}(t_1)\mathbf{E}e^{t_1/\tau}, \quad (26.4)$$

в результате решение записывается в виде

$$\psi(t_1) = \int_C^{t_1} e\mathbf{v}(t_2)\mathbf{E}e^{-(t_1-t_2)/\tau} dt_2. \quad (26.5)$$

Константа C должна находиться из гран.условий. В изотропном случае все орбиты замкнуты, поэтому функции ψ и \mathbf{v} должны быть периодическими.

Если постановка эксперимента такова, что ток течёт только в x -направлении, то

$$j_y = 0, \quad j_x = \frac{n_e e^2 \tau}{m_*} E_x, \quad (26.6)$$

$$E_y = \Omega \tau E_x. \quad (26.7)$$

Таким образом, в нашем приближении магнитное поле не меняет проводимость, но приводит к возникновению электрического поля, перпендикулярного току и магнитному полю. Это эффект Холла. Холловская константа определяется следующим образом:

$$R_H = \frac{E_y}{H j_x} = \frac{1}{n_e e c}. \quad (26.8)$$

Если всё-таки интересоваться малой поправкой в проводимость от магнитного поля, то её можно оценить следующим образом. Траектории электронов в магнитном поле искривляются (в слабом поле это слабый эффект), поэтому за время свободного пробега электрон будет проходить расстояние l вдоль дуги, а вдоль направления тока (т.е. вдоль внешнего поля \mathbf{E}) — меньшее расстояние. Поэтому эффективная длина свободного пробега в направлении тока уменьшается, это должно приводить к росту сопротивления.

В магнитном поле в плоскости xy движение происходит по окружности, имеющей ларморовский радиус

$$r_L = \frac{v}{\Omega} = \frac{c p_0}{e H}. \quad (26.9)$$

Пусть между двумя рассеяниями на примесях электрон проходит дугу с угловым размером 2φ , тогда $l = 2r_L\varphi$. При этом вдоль направления тока он переместится на расстояние, равное длине хорды, на которую опирается дуга. Разность длин дуги и хорды

составляет

$$2r_L\varphi - 2r_L \sin \varphi \approx \frac{r_L\varphi^3}{3} \sim l \left(\frac{l}{r_L} \right)^2. \quad (26.10)$$

Таким образом, эффективная длина свободного пробега вдоль направления тока отличается от l в меньшую сторону на величину, имеющую относительный порядок $(l/r_L)^2 \sim (\Omega\tau)^2$. В результате получаем положительное поперечное магнитосопротивление (магнитное поле перпендикулярно току)

$$\Delta\rho \sim \rho(\Omega\tau)^2. \quad (26.11)$$

XXVII. ЭФФЕКТ ХОЛЛА В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Рассмотрим предельный случай сильных магнитных полей, $\Omega\tau \gg 1$, для случая произвольного энергетического спектра. Наше рассмотрение следует работе [И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, ЖЭТФ **31**, 63 (1956)]. В задаче есть малый параметр $\gamma = 1/\Omega\tau$, и мы будем искать решение в виде ряда

$$\psi = \sum_k \psi_k, \quad \psi_k \sim \gamma^k \quad (27.1)$$

методом последовательных приближений. Нам будет важно, что интеграл столкновений $I_1(\psi)$ линеен относительно ψ . Сначала мы не будем предполагать замкнутость орбит, хотя позже перейдём именно к этому случаю.

Магнитное поле велико, а $t_1 \propto 1/H$, поэтому первое слагаемое в кин.уравнении (25.28) больше остальных. Таким образом, в нулевом приближении

$$\frac{\partial\psi_0}{\partial t_1} = 0. \quad (27.2)$$

В первом приближении

$$\frac{\partial\psi_1}{\partial t_1} - I_1(\psi_0) = e\mathbf{v}\mathbf{E}. \quad (27.3)$$

Во втором и дальнейших приближениях

$$\frac{\partial\psi_k}{\partial t_1} - I_1(\psi_{k-1}) = 0, \quad k = 2, 3, \dots \quad (27.4)$$

Получаем

$$\psi_0 = C_0, \quad (27.5)$$

$$\psi_1 = \int_0^{t_1} [I_1(C_0) + e\mathbf{v}(t_2)\mathbf{E}] dt_2 + C_1 \equiv \tilde{\psi}_1 + C_1, \quad (27.6)$$

$$\psi_k = \int_0^{t_1} I_1(\psi_{k-1}) dt_2 + C_k \equiv \tilde{\psi}_k + C_k, \quad k = 2, 3, \dots \quad (27.7)$$

Константы C здесь не зависят от t_1 , но могут зависеть от ε и p_z . Их можно найти, усреднив по времени уравнения (27.3)-(27.4). В силу ограниченности ψ усреднение производной всегда даёт нуль (в случае открытых орбит нужно интегрировать до бесконечности, как и написано; в случае замкнутых достаточно проинтегрировать по полному периоду):

$$\overline{\frac{\partial \psi}{\partial t_1}} = \lim_{T_1 \rightarrow \infty} \frac{1}{T_1} \int_0^{T_1} \frac{\partial \psi}{\partial t_1} dt_1 = \lim_{T_1 \rightarrow \infty} \frac{\psi(T_1) - \psi(0)}{T_1} = 0. \quad (27.8)$$

Поэтому получаем

$$-\overline{I_1(\psi_0)} = e\overline{\mathbf{v}}\mathbf{E}, \quad (27.9)$$

$$-\overline{I_1(\psi_k)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (27.10)$$

откуда

$$-I_1(C_0) = e\overline{\mathbf{v}}\mathbf{E}, \quad (27.11)$$

$$-I_1(C_k) = \overline{I_1(\tilde{\psi}_k)}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (27.12)$$

Этими уравнениями определяются константы C .

Теперь от произвольных орбит перейдём к случаю замкнутых орбит. При этом v_x и v_y периодичны, поэтому $\overline{v_x} = \overline{v_y} = 0$. Из уравнения (27.11) получаем, что C_0 может зависеть только $\overline{v_z}E_z$. Поэтому вклады, пропорциональные E_x и E_y , могут быть только в ψ_1 . Выражая v_x и v_y из уравнений движения, получаем

$$\psi_1 = \frac{c}{H} \int_0^{t_1} \left(-\frac{dp_y}{dt_2} E_x + \frac{dp_x}{dt_2} E_y \right) dt_2 + \int_0^{t_1} [I_1(C_0) + ev_z(t_2)E_z] dt_2 + C_1 = \quad (27.13)$$

$$= \frac{c}{H} [-E_x(p_y(t_1) - p_y(0)) + E_y(p_x(t_1) - p_x(0))] + \int_0^{t_1} [I_1(C_0) + ev_z(t_2)E_z] dt_2 + C_1. \quad (27.14)$$

Оставшийся интеграл в целом пропорционален E_z , обозначим его $\varphi(t_1)E_z$.

Найдём компоненту тока j_x . Из общей формулы для тока получаем

$$\begin{aligned}
 j_x &= \frac{2e^2 H}{(2\pi\hbar)^3 c} \int dp_z \int_0^T \psi_1(t_1) v_x(t_1) dt_1 = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int dp_z \int_0^T \psi_1(t_1) \frac{dp_y}{dt_1} dt_1 = \\
 &= -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int dp_z \left\{ -\frac{c}{H} E_x \int_0^T (p_y(t_1) - p_y(0)) \frac{dp_y}{dt_1} dt_1 + \frac{c}{H} E_y \int_0^T (p_x(t_1) - p_x(0)) \frac{dp_y}{dt_1} dt_1 + \right. \\
 &\quad \left. + E_z \int_0^T \varphi(t_1) \frac{dp_y}{dt_1} dt_1 + C_1 \int_0^T \frac{dp_y}{dt_1} dt_1 \right\}. \tag{27.15}
 \end{aligned}$$

Зависимость p_y от времени периодична: $p_y(T) = p_y(0)$. Из-за этого обращаются в ноль: первый интеграл в фигурных скобках, содержащая $p_x(0)$ часть второго интеграла и четвёртый интеграл. Остаётся

$$j_x = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int dp_z \left\{ \frac{c}{H} E_y \int_0^T p_x(t_1) \frac{dp_y}{dt_1} dt_1 + E_z \int_0^T \varphi(t_1) \frac{dp_y}{dt_1} dt_1 \right\}. \tag{27.16}$$

Рассмотрим xy -компоненту тензора проводимости:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xy} &= -\frac{2ec}{(2\pi\hbar)^3 H} \int dp_z \int_0^T p_x \frac{dp_y}{dt_1} dt_1 = -\frac{2ec}{(2\pi\hbar)^3 H} \int dp_z \oint p_x dp_y = \\
 &= \frac{2ec}{(2\pi\hbar)^3 H} \int dp_z [S_e(p_z, \mu) - S_h(p_z, \mu)]. \tag{27.17}
 \end{aligned}$$

Здесь S_e и S_h — это площади сечений ферми-поверхности плоскостью $p_z = \text{const}$ для случаев, когда внутри контура находится область меньших или больших энергий соответственно. Для дырок получается другой знак, т.к. их движение по орбите противоположно движению электрона. Мы предполагаем, что могут быть и электронные, и дырочные участки ферми-поверхности, и металл некомпенсированный ($n_e \neq n_h$).

В результате интегрирования по dp_z будут получаться объёмы импульсного пространства V_F , заключённые внутри соответствующей части ферми-поверхности. Они связаны с плотностью соответствующих квазичастиц соотношением

$$n = \frac{2V_F}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{27.18}$$

Поэтому

$$\sigma_{xy} = \frac{ec}{H} (n_e - n_h). \tag{27.19}$$

Эта формула сохраняет смысл также и в случае, когда ферми-поверхность открытая, но при данном направлении поля все её сечения плоскостями $p_z = \text{const}$ замкнуты. В этом случае под V_F нужно понимать объём, ограниченный ферми-поверхностью и гранями зоны Бриллюэна (величины n_e и n_h тогда могут зависеть от направления поля).

Формула (27.19) — результат первого порядка по γ (обратите внимание, что τ выпало, т.к. первый порядок по γ означает $\sigma \sim \sigma_0/\Omega\tau$).

Ещё одним следствием результата (27.16) для j_x является то, что в первом порядке по γ мы получили конечный результат для σ_{xz} . В то же время, в рассмотренном нами первом порядке по γ получается $\sigma_{xx} = 0$. Поэтому σ_{xx} — по крайней мере второго порядка по γ . Рассматривая уравнения в следующем порядке, можно убедиться, что такой вклад действительно есть. Аналогично получается, что $\sigma_{yz} \propto \gamma$, $\sigma_{yy} \propto \gamma^2$. В то же время, σ_{zz} — нулевого порядка.

Таким образом, выделяя явно главные порядки по γ , мы можем записать тензор проводимости в виде

$$\sigma_{ik} = \begin{pmatrix} \gamma^2 a_{xx} & \gamma a_{xy} & \gamma a_{xz} \\ \gamma a_{yx} & \gamma^2 a_{yy} & \gamma a_{yz} \\ \gamma a_{zx} & \gamma a_{zy} & a_{zz} \end{pmatrix}. \quad (27.20)$$

В пределе $H \rightarrow \infty$ все компоненты кроме σ_{zz} стремятся к нулю. Физически это связано с локализацией электронов на орбитах, малых по сравнению с длиной свободного пробега; конечность же σ_{zz} связана с тем, что движение вдоль магнитного поля всегда инфинитно.

Для тензора сопротивления (который обратный по отношению к тензору проводимости) в главном порядке по γ получаем

$$\rho_{ik} = \begin{pmatrix} b_{xx} & \gamma^{-1} b_{xy} & b_{xz} \\ \gamma^{-1} b_{yx} & b_{yy} & b_{yz} \\ b_{zx} & b_{zy} & b_{zz} \end{pmatrix}, \quad (27.21)$$

где

$$\begin{aligned} b_{xx} &= \frac{a_{yy}a_{zz} - a_{yz}a_{zy}}{a_{xy}a_{yx}a_{zz}}, & b_{xy} &= \frac{1}{a_{yx}}, \\ b_{yy} &= \frac{a_{xx}a_{zz} - a_{xz}a_{zx}}{a_{xy}a_{yx}a_{zz}}, & b_{yx} &= \frac{1}{a_{xy}}, \\ b_{zz} &= \frac{1}{a_{zz}}, & b_{xz} &= \frac{a_{zy}}{a_{xy}a_{zz}}, & b_{yz} &= -\frac{a_{zx}}{a_{xy}a_{zz}}. \end{aligned} \quad (27.22)$$

Холловские компоненты σ_{xy} и ρ_{yx} в этом приближении оказываются обратными друг другу. В общем случае, конечно, соответствующие компоненты тензоров проводимости и сопротивления не связаны друг с другом таким простым соотношением (обращать нужно матрицу). Обратим внимание, что при $H \rightarrow \infty$ диагональные компоненты ρ_{xx} и ρ_{yy} (в отличие от σ_{xx} и σ_{yy}) выходят на конечные значения.

Для константы Холла получаем:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x H} = \frac{\rho_{yx}}{H} = \frac{1}{\sigma_{xy} H} = \frac{1}{(n_e - n_h) e c}. \quad (27.23)$$

XXVIII. ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

Мы уже рассматривали проводимость и теплопроводность. Теперь рассмотрим случай, когда одновременно есть и электрическое поле, и градиент температуры:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} + \beta \nabla T, \quad (28.1)$$

$$\mathbf{q} = \gamma \mathbf{E} + \zeta \nabla T \quad (28.2)$$

(почему написано ζ , а не $-\kappa$, обсудим чуть позже).

Перекрестные коэффициенты β и γ связаны соотношением, следующим из принципа симметрии кинетических коэффициентов Онзагера. Принцип заключается в следующем. Пусть к системе приложены обобщённые силы F_1, \dots, F_n , под влиянием которых в системе возникают обобщённые токи J_1, \dots, J_n , связанные с силами соотношениями

$$J_i = - \sum_k \gamma_{ik} X_k. \quad (28.3)$$

Пусть при этом силы и токи определены таким образом, что производная по времени энтропии системы записывается в виде

$$\dot{S} = - \sum_i J_i X_i. \quad (28.4)$$

Тогда принцип Онзагера утверждает, что матрица коэффициентов симметрична:

$$\gamma_{ik} = \gamma_{ki}. \quad (28.5)$$

В нашем случае изменение энтропии во времени происходит по двум причинам. За счёт работы электрического поля в единице объёма в единицу времени диссипирует

энергия $\mathbf{j}\mathbf{E}$. Кроме того, из-за теплового потока из единицы объёма за единицу времени уходит количество теплоты $\operatorname{div} \mathbf{q}$. Учитывая, что $\delta Q = TdS$, получаем

$$\dot{S} = \int \frac{\mathbf{j}\mathbf{E}}{T} d^3\mathbf{r} - \int \frac{\operatorname{div} \mathbf{q}}{T} d^3\mathbf{r}. \quad (28.6)$$

Взяв по частям второй интеграл, получаем

$$\dot{S} = \int \frac{\mathbf{j}\mathbf{E}}{T} d^3\mathbf{r} + \int \mathbf{q}\nabla \left(\frac{1}{T} \right) d^3\mathbf{r}. \quad (28.7)$$

Возьмём в качестве обобщённых токов \mathbf{j} и \mathbf{q} — тогда, согласно (28.4), обобщёнными силами являются $-\mathbf{E}/T$ и $-\nabla(1/T) = (\nabla T)/T^2$. Переписывая (28.1)-(28.2) в виде

$$\mathbf{j} = -\sigma T \left(-\frac{\mathbf{E}}{T} \right) + \beta T^2 \left(\frac{\nabla T}{T^2} \right), \quad (28.8)$$

$$\mathbf{q} = -\gamma T \left(-\frac{\mathbf{E}}{T} \right) + \zeta T^2 \left(\frac{\nabla T}{T^2} \right), \quad (28.9)$$

из соотношения (28.5) получаем

$$\gamma = -\beta T. \quad (28.10)$$

В реальном эксперименте легче контролировать электрический ток, чем электрическое поле внутри образца. Поэтому перепишем соотношения в виде

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j} + Q \nabla T, \quad (28.11)$$

$$\mathbf{q} = \Pi \mathbf{j} - \varkappa \nabla T, \quad (28.12)$$

где

$$\rho = \frac{1}{\sigma}, \quad Q = -\frac{\beta}{\sigma}, \quad \Pi = \frac{\gamma}{\sigma}, \quad \varkappa = \frac{\gamma\beta}{\sigma} - \zeta. \quad (28.13)$$

Из соотношения (28.10) следует, что

$$\Pi = QT, \quad \varkappa = -\frac{\beta^2 T}{\sigma} - \zeta. \quad (28.14)$$

Для реальных металлов первое слагаемое в формуле для \varkappa всегда много меньше второго (в этом мы убедимся ниже). Именно поэтому, вместо действительного вычисления \varkappa (в постановке задачи с отсутствующим электрическим током), мы раньше на самом деле вычисляли $-\zeta$ (т.е. рассматривали задачу без электрического поля — на самом деле, оно есть, но им можно пренебречь).

Из уравнения (28.11) следует, что при наличии градиента температуры даже в отсутствие электрического тока будет возникать электрическое поле $\mathbf{E} = Q\nabla T$ — эффект

Зеебека, возникает термо-э.д.с. Если записать $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$, то получаем формулу для дифференциальной термо-э.д.с.:

$$-\frac{d\varphi}{dT} = Q. \quad (28.15)$$

Найдём дифференциальную термо-э.д.с. (коэффициент Q) для изотропного металла в предположении упругости столкновений. Как и при вычислении теплопроводности, будем работать в представлении квазичастиц, поэтому пишем кин.уравнение в форме (20.5):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{sgn} \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + e\mathbf{E} \operatorname{sgn} \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (28.16)$$

причём τ для квазичастиц такое же, как для частиц, т.к. в него входит квадрат заряда.

Предположим, что есть слабое электрическое поле и слабый градиент температуры ($f = f_0 + f_1$, $f_1 \ll f_0$). Тогда в левой части кин.уравнения остаются второй и третий члены (в которых функцию распределения нужно взять равновесную), которые имеют вид¹³

$$\mathbf{v} \operatorname{sgn} \xi \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{v} \operatorname{sgn} \xi \left(\frac{\partial f_0}{\partial T} \right) \nabla T = -\frac{|\xi|}{T} \left(\frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} \right) \operatorname{sgn} \xi (\mathbf{v} \nabla T) = -\frac{\xi}{T} \left(\frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} \right) (\mathbf{v} \nabla T), \quad (28.17)$$

$$e\mathbf{E} \operatorname{sgn} \xi \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = e\mathbf{E} \operatorname{sgn} \xi \left(\frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} \right) \frac{\partial |\xi|}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} \right) e\mathbf{E} \mathbf{v}. \quad (28.18)$$

Поэтому кин.уравнение принимает вид

$$\left(\frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} \right) \left[e\mathbf{E} \mathbf{v} - \frac{\xi}{T} (\mathbf{v} \nabla T) \right] = -\frac{f_1}{\tau}. \quad (28.19)$$

Плотность электрического тока:¹⁴

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= 2 \int (e \operatorname{sgn} \xi) (\mathbf{v} \operatorname{sgn} \xi) f_1 \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = 2e \int \mathbf{v} f_1 \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= -2e^2 \int \mathbf{v} (\mathbf{v} \mathbf{E}) \tau \nu(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} d\xi \frac{d\Omega}{4\pi} + 2e \int \mathbf{v} (\mathbf{v} \nabla T) \tau \nu(\varepsilon) \frac{\xi}{T} \frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} d\xi \frac{d\Omega}{4\pi} = \\ &= -\frac{2e^2}{3} \mathbf{E} \int v^2 \tau \nu(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} d\xi + \frac{2e}{3} \nabla T \int v^2 \tau \nu(\varepsilon) \frac{\xi}{T} \frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} d\xi. \end{aligned} \quad (28.20)$$

¹³ Напоминалка:

$$f_0 = \frac{1}{e^{|\xi|/T} + 1}, \quad \frac{\partial f_0}{\partial T} = -\frac{|\xi|}{T} \left(\frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} \right); \quad \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v}.$$

¹⁴ Используем

$$\frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \nu(\varepsilon) d\xi \frac{d\Omega}{4\pi}.$$

Правая часть здесь содержит коэффициенты σ и β , см. (28.1).

Поскольку

$$\frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} = -\frac{1}{4T} \cdot \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\xi}{2T}} \quad (28.21)$$

при $T \rightarrow 0$ даёт $-\delta(\xi)$, для σ получаем уже известный нам результат [см. формулу (19.7)]

$$\sigma = \frac{2e^2}{3}(v^2\tau\nu)_\mu. \quad (28.22)$$

Формула для β при наличии электрон-дырочной симметрии ($\xi \leftrightarrow -\xi$) даёт нуль из-за нечётности подынтегрального выражения по ξ . Поэтому нужно учитывать слабую асимметрию:

$$(v^2\tau\nu)_\varepsilon \approx (v^2\tau\nu)_\mu + \xi \frac{d}{d\mu}(v^2\tau\nu)_\mu. \quad (28.23)$$

Тогда мы получаем интеграл вида, с которым мы уже встречались [см. формулу (??.)]:

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{2e}{3T} \frac{d(v^2\tau\nu)_\mu}{d\mu} \int \xi^2 \frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} d\xi = -\frac{2e}{3T} \frac{d(v^2\tau\nu)_\mu}{d\mu} \cdot 2T^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 dx}{\operatorname{ch}^2 x} = -\frac{2e}{3T} \frac{d(v^2\tau\nu)_\mu}{d\mu} \cdot 2T^2 \cdot \frac{\pi^2}{6} = \\ &= -\frac{2\pi^2}{9} eT \frac{d(v^2\tau\nu)_\mu}{d\mu}. \end{aligned} \quad (28.24)$$

В результате

$$Q = -\frac{\beta}{\sigma} = \frac{\pi^2 T}{3e} \cdot \frac{d \ln(v^2\tau\nu)_\mu}{d\mu}. \quad (28.25)$$

Для случая, когда мы рассматриваем свободные электроны, рассеивающиеся на примесях, зависимость от μ под производной следующая:

$$\tau = \frac{l}{v}, \quad l \propto \operatorname{const}, \quad v \propto \nu \propto \sqrt{\mu}. \quad (28.26)$$

Поэтому

$$\frac{d \ln(v^2\tau\nu)_\mu}{d\mu} = \frac{1}{\mu}. \quad (28.27)$$

Тогда получаем

$$Q = \frac{\pi^2}{3e} \cdot \frac{T}{\mu}. \quad (28.28)$$

Теперь можно вернуться к формуле (28.14) и объяснить, почему мы считали $\varkappa \approx -\zeta$. Согласно закону Видемана-Франца, вычислявшаяся нами \varkappa (которая, на самом деле, $-\zeta$), имеет порядок

$$\varkappa \sim \frac{1}{e^2} \sigma T. \quad (28.29)$$

В то же время, согласно (28.14), мы пренебрегли следующей величиной:

$$\frac{\beta^2 T}{\sigma} \sim Q^2 \sigma T \sim \frac{1}{e^2} \sigma T \left(\frac{T}{\mu} \right)^2, \quad (28.30)$$

что оправдано в силу малого параметра T/μ .

Малость термоэлектрических явлений по этому параметру — общее явление. Обычно бывает так, что при наличии электрон-дырочной симметрии эффект зануляется, а учёт слабой асимметрии даёт именно такую малость.

Это всё было для изотропного металла. В общем же случае вместо формул (28.11)-(28.12) будут аналогичные выражения с тензорными коэффициентами:

$$E_i = \sum_k \rho_{ik} j_k + \sum_k Q_{ik} \nabla_k T, \quad (28.31)$$

$$q_i = \sum_k \Pi_{ik} j_k - \sum_k \varkappa_{ik} \nabla_k T. \quad (28.32)$$

Принцип симметрии кинетических коэффициентов в этом случае сообщает, что

$$\rho_{ik} = \rho_{ki}, \quad \varkappa_{ik} = \varkappa_{ki}, \quad \Pi_{ik} = T Q_{ki}. \quad (28.33)$$

XXIX. ТЕРМОМАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В СЛАБОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Если к металлу приложено магнитное поле, то уравнения (28.31)-(28.32) сохраняют свой вид, но коэффициенты начинают зависеть от магнитного поля. При выводе принципа симметрии кинетических коэффициентов используется симметрия уравнений механики по отношению к обращению времени, поэтому нужно учесть, что при таком обращении магнитное поле меняет знак. В результате, вместо (28.33) получается

$$\rho_{ik}(\mathbf{H}) = \rho_{ki}(-\mathbf{H}), \quad \varkappa_{ik}(\mathbf{H}) = \varkappa_{ki}(-\mathbf{H}), \quad \Pi_{ik}(\mathbf{H}) = T Q_{ki}(-\mathbf{H}). \quad (29.1)$$

Наличие магнитного поля приводит к анизотропии даже в случае изотропного металла, поэтому соотношения остаются тензорными. В то же время, некоторое упрощение возникает, если ограничиться линейными по \mathbf{H} членами, учитывая, что \mathbf{H} — аксиальный вектор, тогда как \mathbf{E} , ∇T , \mathbf{q} и \mathbf{j} — полярные. Поэтому в правых частях уравнений (28.11)-(28.12) могут лишь появиться члены $[\mathbf{H} \times \mathbf{j}]$ и $[\mathbf{H} \times \nabla T]$:

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j} + R[\mathbf{H} \times \mathbf{j}] + Q \nabla T + N[\mathbf{H} \times \nabla T], \quad (29.2)$$

$$\mathbf{q} = \Pi \mathbf{j} + B[\mathbf{H} \times \mathbf{j}] - \varkappa \nabla T + L[\mathbf{H} \times \nabla T]. \quad (29.3)$$

Из принципа симметрии кинетических коэффициентов следует, что $B = NT$. Относительный порядок новых вкладов в этих уравнениях — $\Omega\tau$. Например, $RH/\rho \sim \Omega\tau$.

Здесь сидит куча разных эффектов. Пусть \mathbf{H} смотрит по z , а ток течёт вдоль x . Второй член в (29.2) — это эффект Холла (при условии $\nabla T = 0$) [обратите внимание: раньше мы получали соотношения $R = 1/\sigma_{xy}H$, $\sigma_{xy} \sim \sigma_0/\Omega\tau$, откуда следует приведённая выше оценка $RH/\rho_0 \sim \Omega\tau$]. А если поставить условие $q_y = 0$, то это будет так называемый адиабатический эффект Холла:

$$q_y \approx BHj_x - \varkappa \nabla_y T = 0 \quad \Longrightarrow \quad \nabla_y T \approx \frac{BHj_x}{\varkappa}, \quad (29.4)$$

поэтому

$$E_y \approx RHj_x + Q \nabla_y T = \left(R + \frac{QB}{\varkappa} \right) Hj_x. \quad (29.5)$$

Поле по оси y может быть создано не только током по x (эффект Холла), но и градиентом температуры по x . При условии $\mathbf{j} = 0$, $\nabla_y T = 0$ из (29.2) получаем

$$E_y = NH \nabla_x T. \quad (29.6)$$

Это называется эффектом Нернста.

XXX. ТЕРМОМАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В разделе XXVII, посвящённом эффекту Холла в сильном магнитном поле, мы вычисляли тензоры σ_{ik} и $\rho_{ik} = \sigma_{ik}^{-1}$ в пределе $\Omega\tau \gg 1$. Можно вычислить и другие тензорные коэффициенты в уравнениях (28.31)-(28.32) в этом пределе. Условие $\Omega\tau \gg 1$ подразумевает большую длину свободного пробега, поэтому естественно рассмотреть случай низких температур, когда рассеяние электронов определяется примесями. При этом столкновения упругие.

Поступая аналогично выводу (28.19), можем привести общую запись (20.5) кин.уравнения для квазичастиц к виду

$$\frac{\partial f_1}{\partial t_1} - I_{\text{ст}}(f_1) = - \left[e \mathbf{E} \mathbf{v} - \frac{\xi}{T} (\mathbf{v} \nabla T) \right] \frac{\partial f_0}{\partial |\xi|}. \quad (30.1)$$

В f_1 должны быть вклады от \mathbf{E} и ∇T , поэтому будет искать её в виде

$$f_1 = - \sum_i e E_i \psi_i \frac{\partial f_0}{\partial |\xi|} + \sum_i (\nabla_i T) \varphi_i \frac{\xi}{T} \frac{\partial f_0}{\partial |\xi|}. \quad (30.2)$$

Поскольку столкновения упругие и энергия сохраняется, в интеграле столкновений множители, зависящие от энергии, выносятся за знак интеграла. В результате, ψ и φ_i удовлетворяют одинаковым уравнениям вида

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial t_1} - I_{\text{ст}}(\psi_i) = v_i. \quad (30.3)$$

Так как граничные условия для обеих функций одинаковы, получается, что функции просто равны друг другу,

$$\psi_i = \varphi_i. \quad (30.4)$$

Если от формул для \mathbf{j} и \mathbf{q} перейти к записи (28.31)-(28.32), в которой выражены \mathbf{E} и \mathbf{q} , то получается связь между тензорами линейного отклика:

$$\rho_{ik} = \sigma_{ik}^{-1}, \quad Q_{ik} = - \sum_l \rho_{il} \beta_{lk}, \quad (30.5)$$

$$\Pi_{ik} = \sum_l \gamma_{il} \rho_{lk}, \quad \varkappa_{ik} = \sum_{l,m} \gamma_{il} \rho_{lm} \beta_{mk} - \zeta_{ik}. \quad (30.6)$$

Как и в разделе про термоэлектрические явления, можно показать, что первое слагаемое в правой части формулы для \varkappa_{ik} мало по параметру $(T/\mu)^2$, поэтому

$$\varkappa_{ik} = -\zeta_{ik} = \frac{\pi^2 T}{3e^2} \sigma_{ik}. \quad (30.7)$$

Таким образом, закон Видемана-Франца для случая упругих столкновений имеет место и при наличии сильного магнитного поля.

Поэтому зависимость от магнитного поля у \varkappa_{ik} такая же, как у σ_{ik} — см. формулу (27.20), которую мы получили, рассматривая эффект Холла в сильном магнитном поле. В частности, компоненты \varkappa_{xx} и \varkappa_{yy} (для случая, когда z направлено по магнитному полю) для замкнутых траекторий убывают как $1/H^2$. Поэтому магнитным полем можно подавить электронный вклад в теплопроводность, выделив, таким образом, фононную теплопроводность (которая от магнитного поля не зависит). А выключив поле, можно увидеть добавку от электронов.

Теперь рассмотрим тензор термо-э.д.с. Q_{ik} , который выражается через ρ_{ik} и β_{ik} . Тензор β_{ik} (как показано в решении домашней задачи) зависит от магнитного поля так же, как σ_{ik} — см. формулу (27.20):

$$\beta_{ik} = \begin{pmatrix} \gamma^2 c_{xx} & \gamma c_{xy} & \gamma c_{xz} \\ -\gamma c_{xy} & \gamma^2 c_{yy} & \gamma c_{yz} \\ -\gamma c_{xz} & -\gamma c_{yz} & c_{zz} \end{pmatrix} \quad (30.8)$$

— здесь мы учли антисимметрию недиагональных элементов по перестановке индексов (следствие принципа Онзагера и линейности по магнитному полю). Домножаем слева на $-\rho_{ik}$ [случай замкнутых траекторий на поверхности Ферми в некомпенсированном металле, см. формулу (27.21)], получаем

$$Q_{ik} = \begin{pmatrix} \nu_{xx} & \gamma\nu_{xy} & \nu_{xz} \\ \gamma\nu_{yx} & \nu_{yy} & \nu_{yz} \\ \gamma\nu_{zx} & \gamma\nu_{zy} & \nu_{zz} \end{pmatrix} \quad (30.9)$$

При этом

$$\nu_{xx} = b_{xy}c_{xy}, \quad (30.10)$$

$$\nu_{yy} = -b_{yx}c_{xy}, \quad (30.11)$$

и учитывая антисимметрию $b_{yx} = -b_{xy}$, получаем

$$Q_{xx} = Q_{yy} = b_{xy}c_{xy}. \quad (30.12)$$

У нас

$$c_{xy} = \frac{\beta_{xy}}{\gamma} = -\frac{1}{\gamma} \frac{\pi^2 T}{3e} \frac{\partial}{\partial \mu} \sigma_{xy}(\mu), \quad (30.13)$$

а b_{xy} связано с соответствующим коэффициентом в тензоре σ_{ik} [см. формулы (27.20), (27.22)], в результате чего

$$b_{xy} = \frac{1}{a_{yx}} = -\frac{1}{a_{xy}} = -\frac{1}{\sigma_{xy}/\gamma}. \quad (30.14)$$

Таким образом,

$$Q_{xx} = Q_{yy} = \frac{\pi^2 T}{3e} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \sigma_{xy}(\mu). \quad (30.15)$$

А поскольку в случае замкнутых траекторий в некомпенсированном металле у нас получалась формула (27.19) для холловской проводимости, находим окончательно

$$Q_{xx} = Q_{yy} = \frac{\pi^2 T}{3e} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln [n_e(\mu) - n_h(\mu)]. \quad (30.16)$$

В результате, поперечная термо-э.д.с. изотропна, не зависит от времени свободного пробега и определяется только энергетическим спектром. Производная, входящая в эту формулу, характеризует спектр (а полученная формула даёт способ определить эту характеристику из эксперимента).

XXXI. НОРМАЛЬНЫЙ СКИН-ЭФФЕКТ

Рассмотрим металл в высокочастотном электромагнитном поле. Оказывается, что при этом поле проникает только в приповерхностный слой металла — это называется скин-эффект.

Рассмотрим сначала случай локального соотношения между полем и током, $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ (этот случай называется нормальным скин-эффектом; для простоты считаем металл изотропным). Уравнения Максвелла:

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (31.1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} = \frac{4\pi}{c} \sigma \mathbf{E}. \quad (31.2)$$

Токами смещения пренебрегли (в металлах это хорошее приближение при не слишком больших частотах).

Предполагаем следующую геометрию: металл занимает полупространство $x > 0$, волна падает по нормали, причём \mathbf{E} направлено по y , а \mathbf{H} — по z .

Будем искать решение, пропорциональное $\exp(ikx - i\omega t)$. Подставляем, получаем

$$ikE_y = \frac{i\omega}{c} H_z, \quad (31.3)$$

$$-ikH_z = \frac{4\pi}{c} \sigma E_y. \quad (31.4)$$

Подставляя одно в другое, находим волновой вектор:

$$k^2 = \frac{4\pi i \sigma \omega}{c^2}, \quad k = k_1 + ik_2 = \sqrt{\frac{2\pi \sigma \omega}{c^2}} (1 + i). \quad (31.5)$$

Глубина проникновения поля в металл (толщина скин-слоя):

$$\delta = \frac{1}{k_2} = \sqrt{\frac{c^2}{2\pi \sigma \omega}}. \quad (31.6)$$

Свойства металла в высокочастотном электромагнитном поле характеризует поверхностный импеданс Z (комплексная величина):

$$Z = \frac{E_y(0)}{\int_0^\infty j_y(x) dx} = R - iX. \quad (31.7)$$

R — активная часть импеданса, X — реактивная. Для их определения можно измерять амплитуду и фазу волны, отражённой от поверхности металла. Или измерять изменение

свойств резонатора при помещении в него образца конечных размеров. Активная часть R также может быть найдена по выделению тепла в металле, т.к. она определяет потери энергии волны при отражении.

Это определение поверхностного импеданса можно преобразовать к другому виду с помощью уравнения Максвелла (31.2):

$$Z = \frac{E_y(0)}{-\frac{c}{4\pi} \int_0^{\infty} \nabla_x H_z} = \frac{4\pi E_y(0)}{c H_z(0)}. \quad (31.8)$$

А с помощью уравнения Максвелла (31.1) теперь можно написать

$$Z = \frac{4\pi E_y(0)}{c H_z(0)} = \frac{4\pi \omega}{c^2 k}. \quad (31.9)$$

Обратите внимание, что формулы (31.8) и (31.9) справедливы при любой связи между \mathbf{j} и \mathbf{E} .

В случае же локальной связи, подставляя (31.5), находим

$$Z = \sqrt{\frac{4\pi\omega}{ic^2\sigma}} = \sqrt{\frac{2\pi\omega}{c^2\sigma}}(1-i). \quad (31.10)$$

Таким, образом в случае нормального скин-эффекта имеем

$$R = X = \sqrt{\frac{2\pi\omega}{c^2\sigma}}. \quad (31.11)$$

XXXII. АНОМАЛЬНЫЙ СКИН-ЭФФЕКТ

Из формул (31.6) видно, что глубина скин-слоя δ должна уменьшаться с уменьшением температуры (из-за роста σ), а также с увеличением частоты поля. С другой стороны, при понижении температуры растёт длина свободного пробега l . Поэтому при низких температурах и высоких частотах δ может стать меньше l . В этом случае локальная связь тока с полем $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$, основанная на предположении однородного поля, перестаёт работать, т.к. поле становится неоднородным на масштабе длины свободного пробега.

Рассмотрим предел $\delta \ll l$ — этот случай называется аномальным скин-эффектом. Проведём упрощённое рассуждение, которое затем подтвердится расчётом на основе кин.уравнения. Будем считать, что в скин-эффекте участвуют лишь электроны, движущиеся почти параллельно границе, а следовательно долго находящиеся под действием электрического поля и таким образом отбирающие у волны часть её энергии. Те же

электроны, которые движутся под конечным (не малым) углом к границе, быстро покидают область скин-слоя, и мы будем считать, что в скин-эффекте они не участвуют (неэффективны).

Доля таких электронов в случае изотропного спектра равна доле телесного угла, в котором лежат их импульсы. Выберем полярную систему координат так, что поверхность — это экваториальная плоскость. Если импульс электрона почти параллелен плоскости, он остаётся таковым на длине свободного пробега (затем электрон рассеивается под, вообще говоря, большим углом). Поэтому такие электроны занимают интервал $d\theta \sim \delta/l$ при $\theta \approx \pi/2$, а значит

$$d\Omega \sim 2\pi \sin \theta d\theta \sim 2\pi \delta/l. \quad (32.1)$$

Плотность эффективных (участвующих в скин-эффекте) электронов тогда есть

$$n_{\text{эфф}} \sim n_e \frac{d\Omega}{4\pi} \sim \frac{\delta}{l} n_e. \quad (32.2)$$

Поскольку проводимость пропорциональна числу электронов, эффективная проводимость также должна быть подавлена:

$$\sigma_{\text{эфф}} \sim \frac{\delta}{l} \sigma \sim \frac{\sigma}{k_2 l}. \quad (32.3)$$

Из честного решения (см. раздел XXXIII) оказывается, что можно записать

$$\sigma_{\text{эфф}} = ia \frac{\sigma}{kl}, \quad (32.4)$$

где $a \sim 1$ — действительный коэффициент. Замена k_2 на k справедлива по порядку величины (так было в нормальном скин-эффекте, так окажется и в аномальном). Поэтому нетривиальность формулы (32.4) в том, что комплексная структура $\sigma_{\text{эфф}}$ такая же, как у комбинации i/k . Это нельзя угадать, это берётся из честного решения (позже мы это получим).

Возьмём теперь формулу (31.5) для k^2 и подставим в неё $\sigma_{\text{эфф}}$ вместо σ . Получается уравнение на k , которое даёт

$$k = \left(\frac{4\pi a \sigma \omega}{c^2 l} \right)^{1/3} e^{i\pi/3}. \quad (32.5)$$

Здесь мы определённым образом выбрали кубический корень из -1 . Это было сделано из условия убывания решения при $x \rightarrow \infty$. Обратим внимание, что по порядку величины k_1 и k_2 совпадают.

Глубина скин-слоя — величина, обратная мнимой части k , поэтому

$$\delta = \left(\frac{c^2 l}{4\pi a \sigma \omega} \right)^{1/3} \frac{1}{\sin(\pi/3)}. \quad (32.6)$$

В то же время, подставляя k , для поверхностного импеданса получаем

$$Z = \frac{4\pi \omega}{c^2 k} = \left(\frac{4\pi \omega}{c^2} \right)^{2/3} \left(\frac{l}{a\sigma} \right)^{1/3} e^{-i\pi/3} = \left(\frac{2}{a} \right)^{1/3} \left(\frac{\pi \omega}{c^2} \right)^{2/3} \left(\frac{l}{\sigma} \right)^{1/3} (1 - i\sqrt{3}). \quad (32.7)$$

Важные следствия:

- $Z \propto \omega^{2/3}$ (а при нормальном скин-эффекте было $Z \propto \omega^{1/2}$)
- $X = \sqrt{3}R$ (а при нормальном скин-эффекте было $X = R$)
- Комбинация $\sigma/l = n_e e^2/p_0$ не зависит от температуры и определяется только электронным спектром.

Можно построить график зависимости R^{-1} от $\sigma^{1/2}$. Он должен начинаться линейным участком (нормальный скин-эффект, высокие температуры) а затем выходить на константу (аномальный скин-эффект, низкие температуры). Такая зависимость действительно наблюдается в эксперименте.

Оценим, при каких частотах можно наблюдать аномальный скин-эффект. Возьмём формулу (31.6) для δ и потребуем $\delta < l$. Это даёт

$$\omega > \frac{c^2}{2\pi \sigma l^2} = \frac{c^2 p_0}{2\pi n_e e^2 l^3} = \frac{c^2 \hbar (3\pi^2 n_e)^{1/3}}{2\pi n_e e^2 l^3} = \frac{137}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \frac{c}{n_e^{2/3} l}. \quad (32.8)$$

Взяв $n_e \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$, получаем в правой части примерно

$$\frac{137}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \frac{c}{n_e^{2/3} l} \sim 200 \frac{10^{10}}{(10^{22})^{2/3} l^3} \frac{\text{см}^3}{\text{с}} \sim \frac{10^{-2}}{l^3} \frac{\text{см}^3}{\text{с}}. \quad (32.9)$$

Для случая $l \sim 10^{-3} \text{ см}$ (такой, например, может быть длина свободного пробега в области остаточного сопротивления), получаем $\omega > 10^7 \text{ с}^{-1}$.

XXXIII. АНОМАЛЬНЫЙ СКИН-ЭФФЕКТ. РЕШЕНИЕ КИН.УРАВНЕНИЯ

Будем рассматривать предел $\delta \ll l$ и при этом считать металл анизотропным (т.е. поля и токи лежат в плоскости yz , но не обязательно направлены вдоль определённых

осей). На самом деле, ещё нам понадобится условие $\delta \ll v_F/\omega$. Случай выполнения этих двух условий называется предельно аномальным.

Сложность аномального случая связан с тем, что связь тока и поля перестаёт быть локальной. Найдём эту связь (отклик тока на слабое электрическое поле).

Функцию распределения ищем в виде

$$f = f_0 - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \psi, \quad (33.1)$$

тогда¹⁵

$$j_\alpha = 2e \int v_\alpha f \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int v_\alpha \psi \frac{dS}{v}, \quad (33.2)$$

где мы учли, что $\partial f_0/\partial \varepsilon \approx -\delta(\varepsilon - \mu)$, и осталось интегрирование по ферми-поверхности. У j_α есть только компоненты y и z .

Кин.уравнение напишем в той же форме, как мы писали раньше для случая рассеяния на примесях:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + e \mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau}. \quad (33.3)$$

На самом деле писать интеграл столкновений в такой форме для анизотропного металла нельзя. Но! Во-первых, в предельно аномальном случае ответ вообще не будет зависеть от τ . А во-вторых, оказывается, что в нашем случае интеграл столкновений действительно имеет такую форму, только τ зависит от \mathbf{p} .

Подставляя сюда f , получаем кин.уравнение в виде (у E_α есть только компоненты y и z ; от времени всё зависит как $e^{-i\omega t}$)

$$-i\omega\psi + v_x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\psi}{\tau} = eE_\alpha v_\alpha. \quad (33.4)$$

Делим на v_x , переписываем в виде

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\psi}{L_x} = eE_\alpha \frac{v_\alpha}{v_x}, \quad \frac{1}{L_x} = \frac{1}{v_x} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right). \quad (33.5)$$

Метод вариации произвольной постоянной:

$$\psi(x) = A(x)e^{-x/L_x}, \quad A'e^{-x/L_x} = eE_\alpha \frac{v_\alpha}{v_x}. \quad (33.6)$$

¹⁵ Напомним преобразование интеграла по импульсам к интегралу по изоэнергетической поверхности и по энергии [см. 18.15]:

$$d^3 \mathbf{p} = dS \frac{d\varepsilon}{v}.$$

В результате находим решение

$$\psi(x) = e^{-x/L_x} \int_C^x e E_\alpha(x_1) \frac{v_\alpha}{v_x} e^{x_1/L_x} dx_1. \quad (33.7)$$

Константу C нужно находить из гран.условий при $x = \infty$ и $x = 0$. Во-первых, $\psi \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$. Во-вторых, должно быть гран.условие на свободной поверхности, которое зависит от типа поверхности.

Мы будем предполагать, что свободная поверхность зеркальная. Тогда в изотропном металле при отражении p_y и p_z сохранялись бы, а p_x меняло бы знак. В анизотропном случае всё несколько сложнее. Поскольку поверхность трансляционно инвариантна в плоскости xy , компоненты p_y и p_z по-прежнему сохраняются. А вот вместо изменения знака p_x теперь надо требовать сохранения энергии. Обозначив отражённое значение за p'_x , мы требуем

$$\varepsilon(p_x, p_y, p_z) = \varepsilon(p'_x, p_y, p_z). \quad (33.8)$$

В изотропном случае было бы $p'_x = -p_x$, но в общем случае это не так.

Воспользуемся тем, что в предельно аномальном случае нам важны почти касательные траектории, у которых $v_x \approx 0$. Это значит, что

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_x} = v_x = a(p_y, p_z) (p_x - q(p_y, p_z)), \quad (33.9)$$

откуда

$$\varepsilon = \frac{a(p_y, p_z)}{2} (p_x - q(p_y, p_z))^2 + \epsilon(p_y, p_z). \quad (33.10)$$

Из сохранения p_y и p_z при отражении следует примерное сохранение $v_y \approx \partial \varepsilon / \partial p_y$ и $v_z \approx \partial \varepsilon / \partial p_z$. Что же касается v_x , сохранение энергии при переходе от $v_x < 0$ к некоторому $v_x > 0$ означает, что при этом комбинация $(p_x - q(p_y, p_z))$ меняет знак. Следовательно, $v_x = a(p_y, p_z) (p_x - q(p_y, p_z))$ меняет знак. Функция распределения при отражении не меняется, поэтому на зеркальной границе должно быть

$$\psi(v_x, v_y, v_z) = \psi(-v_x, v_y, v_z). \quad (33.11)$$

Гран.условие при $x \rightarrow \infty$ определяет константу C при $v_x < 0$. Действительно, в этом случае e^{-x/L_x} растёт на бесконечности, поэтому необходимо брать $C = \infty$:

$$\psi_{v_x < 0} = \int_\infty^x e E_\alpha(x_1) \frac{v_\alpha}{v_x} e^{(x_1-x)/L_x} dx_1. \quad (33.12)$$

При $v_x > 0$ экспонента e^{-x/L_x} убывает на бесконечности. А константа C должна определяться из гран. условия при $x = 0$:

$$\int_C^0 eE_\alpha(x_1) \frac{v_\alpha}{v_x} e^{x_1/L_x} dx_1 = - \int_\infty^0 eE_\alpha(x_1) \frac{v_\alpha}{v_x} e^{-x_1/L_x} dx_1, \quad (33.13)$$

где в правой части мы написали падающие на границу частицы (они соответствуют $-v_x < 0$, и мы это учли, в частности, изменив знак L_x). Мы имеем дело с некоторым распределением поля $E_\alpha(x_1)$ внутри образца, т.е. при $x_1 > 0$. Давайте отобразим это распределение симметричным образом на область $x_1 < 0$ и сделаем замену $x_1 \mapsto -x_1$ в интеграле в правой части. При этом мы получим точно такой же интеграл, как и слева, только интегрирование идёт от $-\infty$. Поэтому $C = -\infty$, и в результате

$$\psi_{v_x > 0}(x) = \int_{-\infty}^x eE_\alpha(x_1) \frac{v_\alpha}{v_x} e^{(x_1-x)/L_x} dx_1. \quad (33.14)$$

Подставляем найденные при разных знаках v_x решения в формулу для тока и обозначаем $n_\alpha = v_\alpha/v$:

$$j_\alpha = \frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \left\{ \int_{n_x > 0} dS \frac{n_\alpha n_\beta}{n_x} \int_{-\infty}^x E_\beta(x_1) e^{-(x-x_1)/L_x} dx_1 - \int_{n_x < 0} dS \frac{n_\alpha n_\beta}{n_x} \int_x^\infty E_\beta(x_1) e^{-(x-x_1)/L_x} dx_1 \right\}. \quad (33.15)$$

В последнем интеграле изменим знаки всех скоростей, тем самым приведя его к интегралу по $n_x > 0$:

$$\begin{aligned} j_\alpha &= \frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int_{n_x > 0} dS \frac{n_\alpha n_\beta}{n_x} \left[\int_{-\infty}^x E_\beta(x_1) e^{-(x-x_1)/L_x} dx_1 + \int_x^\infty E_\beta(x_1) e^{(x-x_1)/L_x} dx_1 \right] = \\ &= \frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int_{n_x > 0} dS \frac{n_\alpha n_\beta}{n_x} \int_{-\infty}^\infty E_\beta(x_1) e^{-|x-x_1|/L_x} dx_1. \end{aligned} \quad (33.16)$$

Это выражение можно переписать в виде свёртки с ядром:

$$j_\alpha = \int_{-\infty}^\infty K_{\alpha\beta}(x-x_1) E_\beta(x_1) dx_1, \quad (33.17)$$

$$K_{\alpha\beta}(x) = \frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int_{n_x > 0} dS \frac{n_\alpha n_\beta}{n_x} e^{-|x|/L_x}, \quad \frac{1}{L} \equiv \frac{n_x}{L_x} = \frac{1}{v} \left(\frac{1}{\tau} - i\omega \right). \quad (33.18)$$

Рассмотрим фурье-образ ядра:¹⁶

$$K_{\alpha\beta}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} K_{\alpha\beta}(x)e^{-ikx}dx = \frac{4e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int_{n_x > 0} dS \frac{n_\alpha n_\beta}{n_x} \cdot \frac{Ln_x}{1 + (Ln_x k)^2}. \quad (33.19)$$

Для описания скин-эффекта важны $k \sim 1/\delta$. При этом предельно аномальный случай соответствует тому, что $L/\delta \gg 1$. Значит, избежать большой величины в знаменателе можно только при $|n_x| \ll 1$. Это как раз соответствует нашей качественной картине, связанной с важностью почти касательных траекторий.

Перейдём от интеграла по ферми-поверхности к интегралу по углам, определяющим направление нормали к этой поверхности (это направление совпадает с направлением скорости $\mathbf{v} = \partial\varepsilon/\partial\mathbf{p}$), взяв в качестве полярной оси ось x . Можем написать

$$dS = \frac{d\Omega}{\varkappa(\theta, \varphi)}, \quad (33.20)$$

где мы ввели гауссову кривизну ферми-поверхности в точке, где направление нормали есть (θ, φ) ; она обратна произведению главных радиусов кривизны в этой точке: $\varkappa = 1/R_1 R_2$. В результате получается

$$K_{\alpha\beta}(k) = \frac{4e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \sin\theta d\theta \cdot \frac{n_\alpha n_\beta}{\varkappa(\theta, \varphi)} \cdot \frac{L}{1 + (Lk \cos\theta)^2}. \quad (33.21)$$

Ограничение $n_x > 0$ здесь учтено тем, что по θ мы интегрируем только до $\pi/2$.

Из-за $Lk \gg 1$ при характерных $k \sim 1/\delta$, мы можем сразу сказать, что существенны лишь малые значения $\cos\theta$, поэтому можно заменить

$$\varkappa(\theta, \varphi) \mapsto \varkappa(\varphi) \equiv \varkappa(\pi/2, \varphi). \quad (33.22)$$

Остаётся следующий интеграл по $\cos\theta$:¹⁷

$$\int_0^1 \frac{Ld\mu}{1 + (Lk\mu)^2} = \frac{1}{|k|} \int_0^{L|k|} \frac{dy}{1 + y^2} = \frac{1}{|k|} \arctg L|k| \approx \frac{\pi}{2|k|}. \quad (33.23)$$

¹⁶ В случае $\text{Re } \gamma > 0$ имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx - \gamma|x|} dx = \frac{2\gamma}{\gamma^2 + k^2}.$$

¹⁷ Комплексность величины L не мешает последнему соотношению. Проще всего в этом убедиться, воспользовавшись логарифмическим представлением для арктангенса:

$$\arctg z = \frac{i}{2} \ln \frac{i+z}{i-z}.$$

Поэтому получается

$$K_{\alpha\beta}(k) = \frac{4e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{\pi}{2|k|} \cdot \frac{n_\alpha n_\beta}{\varkappa(\varphi)} = \frac{e^2 B_{\alpha\beta}}{4\pi^2 \hbar^3 |k|}, \quad (33.24)$$

где

$$B_{\alpha\beta} = \int_0^{2\pi} \frac{n_\alpha n_\beta}{\varkappa(\varphi)} d\varphi \quad (33.25)$$

— тензор в плоскости yz .

Итак, мы выразили ток через поле и теперь можем обратиться к уравнениям Максвелла. Обычным образом из уравнений Максвелла получилось бы

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{E} - \Delta \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{rot } \mathbf{H} = -\frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t}. \quad (33.26)$$

Вектор \mathbf{E} зависит от координаты x , но не имеет одноимённой компоненты, поэтому $\text{div } \mathbf{E} = 0$. Поскольку наше решение зависит от времени как $e^{-i\omega t}$, можем написать

$$\frac{\partial^2 E_\alpha}{\partial x^2} = -\frac{4\pi i\omega}{c^2} j_\alpha. \quad (33.27)$$

Но нам ещё нужно учесть, что при выводе выражения для тока через поле мы продолжили поле симметричным образом в область $x < 0$. Это значит, что на границе получился излом, и производная скачет от $-E'(0)$ к $E'(0)$. То есть таким трюком мы добавили во вторую производную поля по координате лишнюю дельта-функцию $2E'(0)\delta(x)$. Её надо компенсировать при подстановке нашего решения в формулу (33.27):

$$E''_\alpha(x) - 2E'_\alpha(0)\delta(x) = -\frac{4\pi i\omega}{c^2} \int_{-\infty}^{\infty} K_{\alpha\beta}(x-x_1) E_\beta(x_1) dx_1. \quad (33.28)$$

После фурье-преобразования получаем

$$-k^2 E_\alpha(k) - 2E'_\alpha(x=0) = -\frac{ie^2\omega}{\pi\hbar^3 c^2} \frac{B_{\alpha\beta}}{|k|} E_\beta(k). \quad (33.29)$$

Это система двух уравнений (т.к. здесь $\alpha, \beta = y, z$). Выберем оси в плоскости yz вдоль главных осей тензора $B_{\alpha\beta}$. Тогда уравнения расцепляются на два совершенно аналогичных: одно для E_y и B_1 , другое — для E_z и B_2 . Каждое имеет вид

$$-k^2 E(k) - 2E'(x=0) = -\frac{ie^2\omega}{\pi\hbar^3 c^2} \frac{B}{|k|} E(k), \quad (33.30)$$

откуда

$$E(k) = -\frac{2E'(x=0)}{k^2 - ib/|k|}, \quad b = \frac{e^2\omega B}{\pi\hbar^3 c^2}. \quad (33.31)$$

Поскольку $E(k)$ чётно по k , можем написать

$$E(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} E(k) = 2 \int_0^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \cos(kx) E(k) = -\frac{2E'(0)}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k \cos kx}{k^3 - ib} dk, \quad (33.32)$$

откуда находим поле на поверхности:

$$E(0) = -\frac{2E'(0)}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k}{k^3 - ib} dk = -\frac{2E'(0)}{\pi} \cdot \frac{2\pi e^{i\pi/6}}{3^{3/2} b^{1/3}}. \quad (33.33)$$

Таким образом,

$$\frac{E(0)}{E'(0)} = -\frac{4e^{i\pi/6}}{3^{3/2} b^{1/3}}. \quad (33.34)$$

Теперь вспоминаем одну из формул для поверхностного импеданса и уравнение Максвелла:

$$Z = \frac{4\pi}{c} \frac{E_y(0)}{H_z(0)}, \quad \frac{dE_y}{dx} = \frac{i\omega}{c} H_z, \quad (33.35)$$

откуда

$$Z = \frac{4\pi i\omega}{c^2} \frac{E_y(0)}{E'_y(0)} = \frac{8\pi^2}{3^{3/2}} (1 - i\sqrt{3}) \frac{\omega}{c^2 b^{1/3}} = \frac{8\pi^{4/3}}{3^{3/2}} (1 - i\sqrt{3}) \frac{\hbar\omega^{2/3}}{e^{2/3} c^{4/3} B^{1/3}}. \quad (33.36)$$

Ответ зависит только от характеристик ферми-поверхности, но не от свойств рассеяния. Поэтому измерение поверхностного импеданса можно использовать для выяснения ферми-характеристик.

XXXIV. КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЫ

Уровни Ландау для свободных электронов:

$$\varepsilon = \mu_B H (2n + 1) + \frac{p_z^2}{2m}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}. \quad (34.1)$$

Кратность вырождения пропорциональна H . Число уровней в интервале dp_z равно (спиновое вырождение здесь не учитываем)

$$\frac{eH}{c} \frac{V dp_z}{(2\pi\hbar)^2}. \quad (34.2)$$

Рассматривая поправки порядка $(\mu_B H/\mu)^2$ к термодинамическому потенциалу Ω , получаем (спиновый) парамагнетизм Паули и (орбитальный) диамагнетизм Ландау:

$$\frac{\chi_{\text{диа}}}{\chi_{\text{пара}}} = -\frac{1}{3}, \quad \chi_{\text{пара}} = \mu_B^2 \nu(\mu). \quad (34.3)$$

Если же чуть обобщить задачу, взяв изотропный спектр $\varepsilon = p^2/2m_*$, то в диамагнетизм Ландау будет входить масса m_* , связанная с орбитальным движением. А спиновый магнетизм определяется магнетоном Бора, содержащим массу свободного электрона.

В результате

$$\frac{\chi_{\text{диа}}}{\chi_{\text{пара}}} = -\frac{1}{3} \left(\frac{m}{m_*} \right)^2. \quad (34.4)$$

Так можно простейшим образом объяснить, почему существуют диамагнитные металлы (m_* может быть достаточно мала).

Если сравнить расстояние между уровнями $\mu_B H$ с хим.потенциалом, то для характерных значений магнитного поля порядка 1 Тл получается

$$\frac{\mu_B H}{\mu} \sim 10^{-4}. \quad (34.5)$$

Квантовые эффекты связаны с дискретностью уровней, поэтому должны содержать степени этого отношения (степень зависит от конкретного рассматриваемого эффекта). Наиболее существенны должны быть высоколежащие уровни, для которых работает квазиклассика.

Квазиклассическое квантование уровней можно рассмотреть для произвольного спектра. В присутствии магнитного поля импульсы заменяются на

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}. \quad (34.6)$$

Взяв $A_y = Hx$, $A_x = A_z = 0$, получаем

$$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad P_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} Hx. \quad (34.7)$$

Обозначив $Y = (c/eH)P_x$, обнаруживаем, что эта величина играет роль координаты, канонически сопряжённой импульсу P_y :

$$[P_y, Y] = -i\hbar. \quad (34.8)$$

Для замкнутых орбит работает правило квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\oint P_y dY = 2\pi\hbar(n + \gamma), \quad |\gamma| < \frac{1}{2}. \quad (34.9)$$

То есть

$$\oint P_y dP_x = \frac{2\pi e\hbar H}{c}(n + \gamma). \quad (34.10)$$

Интеграл в левой части — это площадь, ограниченная траекторией электрона. А траектория ($p_z = \text{const}$, $\varepsilon = \text{const}$) — это сечение поверхности постоянной энергии плоскостью $p_z = \text{const}$. Поэтому

$$S(\varepsilon, p_z) = \frac{2\pi e\hbar H}{c}(n + \gamma). \quad (34.11)$$

Сколько состояний приходится на один уровень и интервал dp_z ? Вообще, число состояний определяется интегралом

$$\frac{V dp_z}{(2\pi\hbar)^3} \int dP_x dP_y. \quad (34.12)$$

Интеграл здесь — это площадь в плоскости $p_z = \text{const}$. На один уровень приходится площадь $\Delta S = 2\pi e\hbar H/c$.

Поэтому искомое число состояний даётся такой же формулой (34.2), как и для свободных электронов.

XXXV. ЭФФЕКТ ДЕ ГААЗА–ВАН АЛЬФЕНА

Парамагнетизм Паули и диамагнетизм Ландау — эффекты порядка $(\mu_B H/\mu)^2$ в термодинамическом потенциале. Теперь мы изучим следующую поправку в случае произвольного спектра. Она меньше, но быстро осциллирует с магнитным полем, поэтому её производная по H может превзойти вклад от монотонной части магнитного момента. Теоретически этот эффект был предсказан Ландау (1930) и экспериментально обнаружен де Гаазом и ван Альфеном (1930). Случай произвольного спектра был рассмотрен в работе И.Лифшица и Косевича (1955).

Термодинамический потенциал:

$$\Omega = -T \sum_i \ln [1 + e^{(\mu - \varepsilon_i)/T}], \quad (35.1)$$

где сумма берётся по всем состояниям. Учитывая кратность вырождения уровней и переходя к интегрированию по dp_z , получаем

$$\Omega = -\frac{VT}{(2\pi\hbar)^2} \frac{eH}{c} \sum_{n,\sigma} \int \ln [1 + e^{(\mu - \varepsilon_\sigma(n, p_z))/T}] dp_z, \quad (35.2)$$

где $\sigma = \pm 1$ — проекция спина, $\varepsilon_\sigma = \varepsilon(n, p_z) + \sigma \mu_B H$.

Дальше применим формулу Пуассона [для вещественной функции $f(n)$]:

$$\sum_{n_0}^{\infty} f(n) = \int_a^{\infty} f(n) dn + 2 \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_a^{\infty} f(n) e^{2\pi i k n} dn, \quad (35.3)$$

где a — число, лежащее между целыми значениями $n_0 - 1$ и n_0 . Эту формулу можно доказать следующим образом. Возьмём формулу пересуммирования Пуассона¹⁸

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x}, \quad (35.4)$$

умножим на $f(x)$ и проинтегрируем от a до ∞ . Первый член справа соответствует $k = 0$, а во втором объединены вклады от k и $-k$.

Применим формулу Пуассона к сумме по n , которая стоит в термодинамическом потенциале $\tilde{\Omega}$. Осциллирующая часть $\tilde{\Omega}$ возникает из второго интеграла, будем рассматривать только его:

$$\tilde{\Omega} = -2 \operatorname{Re} \sum_{k, \sigma} I_{k\sigma}, \quad I_{k\sigma} = \frac{VT e H}{(2\pi \hbar)^2 c} \int_a^{\infty} dn \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \ln [1 + e^{(\mu_\sigma - \varepsilon(n, p_z))/T}] e^{2\pi i k n}. \quad (35.5)$$

Здесь вместо $\mu - \varepsilon_\sigma(n, p_z)$ мы написали $\mu_\sigma - \varepsilon(n, p_z)$, где $\mu_\sigma = \mu + \sigma \mu_B H$.

От интегрирования по dn перейдём к $d\varepsilon$:

$$I_{k\sigma} = \frac{VT e H}{(2\pi \hbar)^2 c} \int_0^{\infty} d\varepsilon \ln [1 + e^{(\mu_\sigma - \varepsilon)/T}] \int_{p_z \min(\varepsilon)}^{p_z \max(\varepsilon)} \frac{\partial n(\varepsilon, p_z)}{\partial \varepsilon} e^{2\pi i k n(\varepsilon, p_z)} dp_z. \quad (35.6)$$

Нижний предел интегрирования по энергии положен равным нулю, но это неважно, т.к. существенна окажется лишь окрестность ферми-поверхности.

В интеграле по dp_z множитель $e^{2\pi i k n(\varepsilon, p_z)}$ — быстроосциллирующая функция (квазиклассика, n велико), поэтому основной вклад будет от окрестностей экстремумов

¹⁸ Рассмотрим правую часть. При $x = n$ справа получается бесконечность. При $x \neq n$ можем сдвинуть переменную суммирования $k \mapsto k + k_1$, что даёт

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x} = e^{2\pi i k_1 x} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x}.$$

Поскольку $e^{2\pi i k_1 x} \neq 1$ при $x \neq n$, это означает, что $\sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x} = 0$. При этом правая часть периодична по x с периодом 1. Осталось проверить нормировку. Проинтегрируем правую часть по малому интервалу вокруг нуля:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x} dx = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{\sin 2\pi k \varepsilon}{\pi k} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin 2\pi k \varepsilon}{\pi k} dk = 1.$$

аргумента, и мы будем использовать метод перевала. Пусть n достигает экстремума при $p_z = p_{zm}$:

$$n(\varepsilon, p_z) = n_m(\varepsilon) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right)_{p_{zm}} (p_z - p_{zm})^2. \quad (35.7)$$

Вблизи экстремума интеграл по dp_z превращается в

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \right)_m e^{2\pi i k n_m} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[i\pi k \left(\frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right)_m x^2 \right] dx. \quad (35.8)$$

Интеграл легко взять, повернув контур интегрирования в комплексной плоскости. В случае $(\partial^2 n / \partial p_z^2)_m > 0$ делаем замену $x = e^{i\pi/4} z$, а в случае $(\partial^2 n / \partial p_z^2)_m < 0$ — замену $x = e^{-i\pi/4} z$. В результате

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[i\pi k \left(\frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right)_m x^2 \right] dx = e^{\pm i\pi/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\pi k \left| \frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right|_m z^2 \right] dz = e^{\pm i\pi/4} \left(k \left| \frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right|_m \right)^{-1/2}. \quad (35.9)$$

Это даёт¹⁹

$$I_{k\sigma} = \frac{VTeH}{(2\pi\hbar)^2 c} \sum_m \int_0^{\infty} d\varepsilon \ln [1 + e^{(\mu_\sigma - \varepsilon)/T}] e^{\pm i\pi/4} \cdot \frac{dn_m}{d\varepsilon} \cdot e^{2\pi i k n_m} \left(k \left| \frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right|_m \right)^{-1/2}, \quad (35.10)$$

где сумма берётся по всем экстремумам функции $n(\varepsilon, p_z)$. Применим интегрирование по частям, написав

$$\frac{dn_m}{d\varepsilon} \cdot e^{2\pi i k n_m} d\varepsilon = \frac{1}{2\pi i k} d e^{2\pi i k n_m}. \quad (35.11)$$

Проинтегрированный член не приводит к осцилляционной зависимости от поля. Опуская его и учитывая, что $|\partial^2 n / \partial p_z^2|_m$ — медленная функция, получаем

$$\tilde{I}_{k\sigma} = \frac{VeH}{(2\pi\hbar)^2 c \cdot 2\pi i k^{3/2}} \sum_m e^{\pm i\pi/4} \int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{e^{2\pi i k n_m}}{e^{(\varepsilon - \mu_\sigma)/T} + 1} \left| \frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right|_m^{-1/2}, \quad (35.12)$$

В числителе стоит функция $e^{2\pi i k n_m}$, быстрые осцилляции которой делают интеграл по $d\varepsilon$ очень малым везде кроме области $\varepsilon - \mu_\sigma \sim T$, в которой быстро меняется знаменатель. Сама же функция $n_m(\varepsilon)$ в этой области меняется плавно, поэтому можем написать

$$n_m(\varepsilon) = n_m(\mu_\sigma) + \left(\frac{\partial n_m}{\partial \varepsilon} \right)_{\mu_\sigma} (\varepsilon - \mu_\sigma). \quad (35.13)$$

¹⁹ Мы можем заменить $\partial n(\varepsilon, p_z) / \partial \varepsilon$ на $dn_m / d\varepsilon$, т.к. в точке экстремума $\partial n / \partial p_z = 0$.

В результате получаем интеграл²⁰

$$\int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{e^{2\pi i k n_m}}{e^{(\varepsilon - \mu_\sigma)/T} + 1} = T e^{2\pi i k n_m(\mu_\sigma)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{2\pi i k x T (\partial n_m / \partial \varepsilon)_{\mu_\sigma}}}{e^x + 1} = T e^{2\pi i k n_m(\mu_\sigma)} \frac{-i\pi}{\text{sh} [2\pi^2 k T (\partial n_m / \partial \varepsilon)_{\mu_\sigma}]}. \quad (35.14)$$

Тогда

$$\tilde{I}_{k\sigma} = -\frac{V T e H}{2(2\pi\hbar)^2 c k^{3/2}} \sum_m e^{\pm i\pi/4} \frac{e^{2\pi i k n_m(\mu_\sigma)}}{\text{sh} [2\pi^2 k T (\partial n_m / \partial \varepsilon)_{\mu_\sigma}]} \left| \frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right|_{m, \mu_\sigma}^{-1/2}. \quad (35.15)$$

Теперь нужно подставлять это выражение в Ω -потенциал (35.5) и суммировать по σ . Поскольку мы считаем $\mu_B H \ll \mu$, во все части формулы кроме быстроосциллирующего множителя $e^{2\pi i k n_m(\mu_\sigma)}$ мы можем подставить $\mu_\sigma \approx \mu$. А для этого множителя можем написать

$$\sum_\sigma e^{2\pi i k n_m(\mu_\sigma)} = e^{2\pi i k n_m(\mu)} \sum_\sigma e^{2\pi i k (\partial n_m / \partial \varepsilon)_{\mu} \sigma \mu_B H} = e^{2\pi i k n_m(\mu)} \cdot 2 \cos [2\pi k (\partial n_m / \partial \varepsilon)_{\mu} \mu_B H]. \quad (35.16)$$

Из формулы (34.11) находим

$$n_m \approx \frac{c S_m}{2\pi e \hbar H}. \quad (35.17)$$

Получаем

$$\sum_\sigma \tilde{I}_{k\sigma} = -\frac{V T e H}{(2\pi\hbar)^2 c k^{3/2}} \sum_m \frac{e^{2\pi i k n_m(\mu) \pm i\pi/4} \cos [2\pi k \mu_B H \frac{c}{e\hbar H} m_*]}{\text{sh} [2\pi^2 k T \frac{c}{e\hbar H} m_*]} \left| \frac{c}{2\pi e \hbar H} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial p_z^2} \right|_{m, \mu}^{-1/2}. \quad (35.18)$$

Окончательно, собирая всё вместе, находим

$$\tilde{\Omega} = \frac{V}{2^{3/2} \pi^{7/2} \hbar^3} \left(\frac{e\hbar H}{c} \right)^{5/2} \sum_m \frac{1}{m_*(\mu, p_z m)} \left| \frac{\partial^2 S}{\partial p_z^2} \right|_{m, \mu}^{-1/2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda}{k^{3/2} \text{sh}(k\lambda)} \cos \left[k \frac{c S_m}{e\hbar H} \pm \frac{\pi}{4} \right] \cos \left[\pi k \frac{m_*}{m_e} \right], \quad (35.19)$$

$$\lambda = \frac{2\pi^2 T c m_*}{e\hbar H}, \quad m_* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}.$$

Буквой m_e мы здесь обозначили массу электрона (чтобы отличать её от индекса суммирования m по экстремальным сечениям ферми-поверхности).

Отсюда получаем осциллирующую часть намагниченности:

$$\tilde{M} = -\frac{1}{V} \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial H}. \quad (35.20)$$

²⁰ При переходе к интегрированию по x нижний предел можно заменить на $-\infty$.

Дифференцировать нужно наиболее быстро меняющиеся множители — косинусы. Поэтому

$$\tilde{M} = -\frac{1}{2^{3/2}\pi^{7/2}\hbar^3} \left(\frac{e\hbar}{c}\right)^{3/2} H^{1/2} \sum_m \frac{S_m}{m_*} \left| \frac{\partial^2 S}{\partial p_z^2} \right|_{m,\mu}^{-1/2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda}{k^{1/2} \text{sh}(k\lambda)} \sin \left[k \frac{cS_m}{e\hbar H} \pm \frac{\pi}{4} \right] \cos \left[\pi k \frac{m_*}{m_e} \right]. \quad (35.21)$$

Получилась сложная функция магнитного поля, содержащая члены различной периодичности. Вклады от экстремальных сечений ферми-поверхности каждый имеют свой период по $1/H$, равный

$$\Delta \frac{1}{H} = \frac{2\pi e\hbar}{cS_m}. \quad (35.22)$$

Эти периоды не зависят от температуры.

Температурная зависимость амплитуд осцилляций определяется множителем $\lambda/\text{sh}(k\lambda)$. При $\lambda \gg 1$ в сумме достаточно сохранить лишь член с $k = 1$, и осцилляции имеют экспоненциально малую амплитуду. При $\lambda \lesssim 1$ (низкие температуры) имеем $\lambda/\text{sh}(k\lambda) \sim 1/k$, т.е. λ выпадает. Оценим результат в этом случае.

Для оценок возьмём $m_* \sim m_e$, $S \sim p_0^2$. Тогда

$$\tilde{M} \sim \frac{1}{\hbar^3} \left(\frac{e\hbar}{c}\right)^{3/2} H^{1/2} \mu. \quad (35.23)$$

Неосциллирующая часть намагниченности имеет порядок

$$M_0 \sim \mu_B^2 \nu(\mu) H \sim \mu_B^2 \frac{m_e p_0}{\hbar^3} H. \quad (35.24)$$

Поэтому²¹

$$\frac{\tilde{M}}{M_0} \sim \left(\frac{\mu}{\mu_B H} \right)^{1/2} \gg 1. \quad (35.25)$$

Таким образом, при низких температурах осциллирующая часть даёт основной вклад в намагниченность. Это связано с высокой частотой осцилляций, которая сильно увеличивает эффект при дифференцировании.

Осцилляции такого же типа имеют место в кинетических явлениях. Например, осцилляции проводимости — эффект Шубникова–де Гааза (1930).

²¹ При этом

$$\frac{\Omega}{\tilde{\Omega}} \sim \left(\frac{\mu_B H}{\mu} \right)^{5/2} \ll 1.$$