Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 4—1965

УДК 548.0 : 53

И. П. БАЗАРОВ

КВАНТОВОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ И КОЛЛЕКТИВНЫЕ КОЛЕБАНИЯ В КРИСТАЛЛАХ

Развивается метод квантового кинетического уравнения с самосогласованным полем для определения коллективных колебаний в кристаллах.

В работах [1, 2, 3] был развит метод кинетического уравнения с самосогласованным полем для вариации функций распределения (линеаризованное уравнение Власова) для определения спектра коллективных колебаний в кристаллах при различных температурах. В частности, при абсолютном нуле уравнение Власова приводит к хорошо известному борновскому колебательному спектру, причем этот спектр является единственным у этого уравнения, хотя нелинейное кинетическое уравнение Власова [4], из которого получается уравнение в вариациях, имеет весьма обширный класс решений самого разнообразного типа. Поскольку, однако, область низких температур является квантовой областью состояний статистической системы, то естественным является применение квантового кинетического уравнения с самосогласованным полем для определения коллективных колебаний в кристаллах. Метод квантового кинетического уравнения позволяет преодолеть известные ограничения как метода Дебая, так и метода Борна—Кармана.

§ 1. Уравнение для коллективных колебаний

В квантовой статистической физике [5, 6] функции распределения $F_s(t, q_1, q_2, \ldots, q_s; q_1', q_2', \ldots, q_s')$ определяются через матрицу плотности всей системы (q_i определяет точку пространства, соответствующую i-той частице, декартовы координаты которой будут обозначаться через q_i^α $(\alpha=1, 2, 3)$). Диагональные элементы квантовой функции распределения D_s представляют плотность вероятности распределения комплекса s частиц в каждый момент времени.

В приближении самосогласованного поля вариация квантовой функции распределения одной частицы

$$\delta D_1(t, q, q') = D_1(t, q, q') - D_1^0(q, q') \equiv \varphi(t, q, q')$$

определяется квантовым кинетическим уравнением

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(t, q, q')}{\partial t} = (H_q - H_{q'})\,\varphi(t, q, q') +$$

$$+ D_1^0(q, q') \int \{\Phi(|q - q_1|) - \Phi(|q' - q_1|)\}\,\varphi(t, q_1, q_1)\,dq_1, \qquad (1)$$

где $D_1^0(q, q')$ и $D_1(t, q, q')$ — соответственно равновесная и неравновесная квантовые функции распределения одной частицы,

$$H = H_q = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_q + U_0(q),$$

$$U_0(q) = \int \Phi(|q - q_1|)\rho_0(q_1)\,dq_1,\ \rho_0(q) = D_1^0(q, q),$$

$\Phi(|q - q_1|)$ — потенциал парного взаимодействия.

Для определения спектра коллективных колебаний в кристалле положим

$$\varphi(t, q, q') = \varphi_\omega(q, q')\,e^{-i\omega t}. \tag{2}$$

После подстановки (2) в (1) получим

$$\hbar\omega\varphi_\omega(q, q') = (H_q - H_{q'})\,\varphi_\omega(q, q') +$$
$$+ D_1^0(q, q')\int\{\Phi(|q - q_1|) - \Phi(|q' - q_1|)\}\,\rho_\omega(q_1)\,dq_1, \tag{3}$$

где

$$\rho_\omega(q_1) = \varphi_\omega(q_1, q_1).$$

Положив в (3) $q' = q$, будем иметь

$$-i\omega\rho_\omega(q) + \frac{1}{m}\sum_\alpha \frac{\partial j_\omega^\alpha(q)}{\partial q^\alpha} = 0, \tag{4}$$

где

$$j_\omega^\alpha(q) = j_\omega^\alpha(q, q')|_{q'=q} = \hat{p}^\alpha(q, q')\,\varphi_\omega(q, q')|_{q'=q},$$

$$\hat{p}^\alpha(q, q') = -\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha} - \frac{\partial}{\partial q'^\alpha}\right). \tag{5}$$

Умножая (3) слева на $\hat{p}^\alpha$ и полагая потом в полученном уравнении $q' = q$, будем иметь

$$-i\omega j_\omega^\alpha(q) + \frac{1}{m}\sum_\beta \frac{\partial T_\omega^{\alpha,\beta}(q)}{\partial q^\beta} + \frac{\partial U_0(q)}{\partial q^\alpha}\rho_\omega(q) =$$
$$= -\rho_0(q)\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\int \Phi(|q - q_1|)\,\rho_\omega(q_1)\,dq_1, \tag{6}$$

где

$$T_\omega^{\alpha,\beta}(q) = T_\omega^{\alpha,\beta}(q, q')|_{q'=q} = \hat{p}^\alpha\hat{p}^\beta\,\varphi_\omega(q, q')|_{q'=q}. \tag{7}$$

Выражение (7) можно представить в виде

$$T_\omega^{\alpha,\beta}(q) = \int Q_\omega^{\alpha,\beta}(q, q_1)\,\rho_\omega(q_1)\,dq_1, \tag{8}$$

где

$$Q_\omega^{\alpha,\beta}(q, q_1) = \hat{p}^\alpha\hat{p}^\beta K_\omega(q, q', q_1)|_{q'=q}, \tag{9}$$

$$K_\omega(q, q', q_1) = \int_0^\infty dt\,e^{i\omega t}(S_t[\Phi, D_1^0]\,S_t^+)_{qq'}, \tag{10}$$

$$[\Phi, D_1^0] = \frac{\Phi D_1^0 - D_1^0\Phi}{i\hbar}$$

и S_t — унитарный оператор, равный

$$S_t = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}.$$

Действительно, уравнение (1) в операторной форме имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi - \varphi H + f, \tag{11}$$

где

$$f = \int (\Phi D_1^0 - D_1^0 \Phi)\, \varphi(t, q_1, q_1)\, dq_1.$$

С помощью унитарного преобразования

$$\psi = S_t^+ \varphi S_t \text{ и } \varphi = S_t \psi S_t^+$$

из (11) получаем

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = S_t^+ f S_t,$$

откуда

$$\varphi(t) = \varphi(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} d\tau S_{t-\tau} f S_{t-\tau}^+.$$

При адиабатическом включении бесконечно-малого возмущения в начальный момент $t_0 = -\infty$ получаем

$$\varphi(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} d\tau\, S_{t-\tau} f S_{t-\tau}^+$$

и

$$\varphi(t, q, q') = \int_{-\infty}^{t} d\tau \int \{S_{t-\tau}[\Phi, D_1^0]\, S_{t-\tau}^+\}_{qq'}\, \varphi(\tau, q_1, q_1)\, dq_1.$$

Подставляя сюда (2) и делая замену $t - \tau \to t$, получим

$$\varphi_\omega(q, q') = \int K_\omega(q, q', q_1)\, \rho_\omega(q_1)\, dq_1 \tag{12}$$

и

$$\rho_\omega(q) = \int K_\omega(q, q, q_1)\, \rho_\omega(q_1)\, dq_1, \tag{13}$$

где $K_\omega(q, q', q_1)$ совпадает с (10).

Умножая слева (12) на $\widehat{p^\alpha p^\beta}$ и полагая потом $q' = q$, получим (8).

Таким образом, уравнение (6) при учете (4) и (8) приводится к следующему:

$$\omega^2 j_\omega^\alpha(q) + \frac{1}{m} \sum_\beta \frac{\partial}{\partial q_\beta} \left\{ -\frac{1}{m} \sum_\gamma \int \frac{\partial Q_\omega^{\alpha,\beta}(q, q_1)}{\partial q_1^\gamma} j_\omega^\gamma(q_1)\, dq_1 + \right.$$

$$\left. + \frac{\partial U_0(q)}{\partial q^\alpha} j_\omega^\beta(q) \right\} = \frac{1}{m} \sum_\beta \left\{ \frac{\partial^2 U_0(q)}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} j_\omega^\beta(q) - \right.$$

$$\left. - \rho_0(q) \frac{\partial^2}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} \int \Phi(|q - q_1|)\, j_\omega^\beta(q_1)\, dq_1 \right\}. \tag{14}$$

В применении к кристаллу это уравнение определяет полный спектр коллективных колебаний в нем при любых температурах.

§ 2. Спектр коллективных колебаний в кристалле при малых волновых числах

Найдем спектр коллективных колебаний в одноатомном кристалле при малых волновых числах и любых температурах, пользуясь уравнением (14).

Ядро уравнения (13) для кристалла инвариантно относительно смещения аргументов q и q_1 на период решетки, поэтому решение уравнения (14) имеет вид

$$j_{\omega}^{\alpha}(q) = U_{\omega}^{\alpha}(q)\, e^{i(k,q)}, \tag{15}$$

где $U_{\omega}^{\alpha}(q)$ — некоторая периодическая функция с периодом решетки.

Если $U_{\omega}^{\alpha}(q) = A_{\omega}^{\alpha}\rho_0(q)$, то можно показать, что решение

$$j_{\omega}^{\alpha}(q) = A_{\omega}^{\alpha}\rho_0(q)\, e^{i(k,q)} \tag{16}$$

точно удовлетворяет уравнению (14) при $\omega=0$ и $k=0$. Это означает, что спектр коллективных колебаний в одноатомном кристалле при любых температурах начинается с нуля. Для определения $\omega(k)$ при малых волновых числах подставим (16) в (14), умножим получившееся уравнение на $\exp\{-i(k, q)\}$ и проинтегрируем его по объему ячейки кристалла. Тогда, оставляя в уравнении главные относительно ω и k члены, после несложных вычислений получим, что при малых ω и k и любых температурах рассматриваемого кристалла квадрат частоты коллективных колебаний в нем во всех случаях, кроме структур со слоистыми решетками (типа графита), квадратично зависит от составляющих волнового вектора: $\omega^2(k) = C_{ij}k_ik_j$.

Более подробное решение уравнения (14) для различных кристаллических структур и вычисление коэффициентов c_{ij}, определяющих температурную зависимость скорости звука в кристаллах, составит содержание другой работы.

Выражаю глубокую благодарность акад. Н. Н. Боголюбову за обсуждение настоящей работы и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Базаров И. П. ДАН СССР, 148, 1283, 1963.
2. Базаров И. П. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астрон., № 1, 56, 1964.
3. Базаров И. П. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астрон., № 2, 1965.
4. Власов А. А. Теория многих частиц. М., ГИТТЛ, 1950.
5. Боголюбов Н. Н., Гуров К. П. ЖЭТФ, 17, 614, 1947.
6. Боголюбов Н. Н. Лекции по квантовой статистике (на украинском языке). Киев, 1959.

Поступила в редакцию
2. 2 1964 г.

Кафедра
теоретической физики