East Eur. J. Phys. Vol.3 No.3 (2016) 35-46

PACS: 63.20.-e, 63.20.Ry, 05.30.Jp

SELF-CONSISTENT DESCRIPTION OF INTERACTING PHONONS IN A CRYSTAL LATTICE

Yu.M. Poluektov[1,2]
[1]*National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"*
1, Akademicheskaya Str., 61108 Kharkov, Ukraine
[2]*Kharkov V.N. Karazin National University*
Sq. Svobody 4, Kharkov, 61022, Ukraine
e-mail:yuripoluektov@kipt.kharkov.ua
Received September 15, 2016

Self-consistent approach for interacting phonons description in lattice, which generalizes Debye model, is proposed. Notion of "self-consistent" phonons is introduced, speed of which depends on temperature and is determined from non-linear equation. Debye energy is also a function of temperature in this approach. Thermodynamics of "self-consistent" phonon gas is constructed. It is shown, that at low temperatures there is a correction propotional to the seventh power of temperature to the cubic law of specific heat dependence on temperature. This may be one of the reasons why cubic law for specific heat is observed only at rather low temperatures. At high temperatures the theory predicts linear deviation from Dulong-Petit law, which is observed experimentally.
KEY WORDS: phonon, specific heat, phonon- phonon interaction, Debye energy, quasiparticle

САМОУЗГОДЖЕНИЙ ОПИС ВЗАЄМОДІЮЧИХ ФОНОНІВ У КРИСТАЛІЧНІЙ РЕШІТЦІ

Ю.М. Полуектов[1,2]
[1]*Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут"*
61108, вул. Академічна, 1, Харків, Україна
[2]*Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна*
пл. Свободи, 4, м Харків, 61022, Україна

Запропоновано метод самоузгодженого опису газу фононів в решітці, який узагальнює модель Дебая з урахуванням фонон-фононної взаємодії. Уведено поняття про "самоузгоджені" фонони, швидкість яких залежить від температури і знаходиться в результаті рішення нелінійного рівняння. Енергія Дебая в запропонованому підході також є функцією температури. Побудовано термодинаміку газу "самоузгоджених" фононів. Показано, що при низьких температурах до кубічного закону в температурній залежності теплоємності присутня добавка, пропорційна сьомому ступені температури. Це може бути однією з причин по якій кубічний закон для теплоємності спостерігається тільки при досить низьких температурах. При високих температурах теорія пророкує лінійне по температурі відхилення від закону Дюлонга-Пті, що спостерігається експериментально.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: фонон, теплоємність, фонон-фононна взаємодія, енергія Дебая, квазічастинка

САМОСОГЛАСОВАННОЕ ОПИСАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ФОНОНОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Ю.М. Полуэктов[1,2]
[1]*Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт"*
61108, Академическая, 1, Харьков, Украина
[2]*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина*
пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61022, Украина

Предложен метод самосогласованного описания газа фононов в решетке, обобщающий модель Дебая с учетом фонон-фононного взаимодействия. Введено представление о «самосогласованных» фононах, скорость которых зависит от температуры и определяется в результате решения нелинейного уравнения. Энергия Дебая в рамках предложенного подхода также является функцией температуры. Построена термодинамика газа «самосогласованных» фононов. Показано, что при низких температурах к кубическому закону в температурной зависимости теплоемкости имеется добавка, пропорциональная седьмой степени температуры. Это может быть одной из причин, по которой кубический закон для теплоемкости наблюдается только при довольно низких температурах. При высоких температурах теория предсказывает линейное по температуре отклонение от закона Дюлонга-Пти, наблюдаемое экспериментально.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: фонон, теплоемкость, фонон-фононное взаимодействие, энергия Дебая, квазичастица

Квантовая механика к описанию теплоемкости твердых тел впервые была применена Эйнштейном [1,2]. В его модели твердое тело рассматривается как набор квантовых гармонических осцилляторов. Эйнштейну удалось объяснить отклонение в поведении теплоемкости при низких температурах от закона Дюлонга - Пти, однако полученная скорость убывания теплоемкости имела экспоненциальный характер и существенно отличалась от степенного закона убывания, наблюдаемого в эксперименте. Иной подход к квантовому описанию твердого тела был предложен Дебаем [3]. В его модели твердое тело рассматривается как сплошная среда, возбуждения которой квантованы. Дебаю удалось получить правильное поведение низкотемпературной теплоемкости, пропорциональное кубу температуры, и им было введенное в физику фундаментальное для теории твердого тела понятие температуры (энергии или частоты) Дебая. Фактически, как сейчас ясно, модели Эйнштейна и Дебая описывают твердое тело с различных сторон и дополняют друг друга. Модель Эйнштейна описывает одночастичные возбуждения и сохраняет свое значение при описании, например, оптических ветвей колебаний, а модель Дебая дает квантовое описание коллективных возбуждений твердого тела. Теория Дебая в своей простоте и наглядности оказалась столь удачной, что применялась и продолжает применяться гораздо чаще, чем, опубликованная примерно в тоже время, более детальная теория кристаллической решетки Борна-Кармана [4-6].

В модели Дебая возбуждения среды представляют собой газ невзаимодействующих при любой температуре квазичастиц – фононов. Однако нетрудно убедиться, что число фононов растет с увеличением температуры и, следовательно, становится все более существенным взаимодействие между ними. Целью данной работы является обобщение модели Дебая для газа фононов, взаимодействие между которыми учитывается в приближении самосогласованного поля. Для описания ангармонических эффектов в кристаллической решетке модель самосогласованного поля в различных вариантах использовалась в работах [7-17], однако, автору неизвестно, чтобы самосогласованный подход использовался при описании кристалла, как квантованной сплошной среды. Учет фонон-фононного взаимодействия приводит к тому, что скорость таких «самосогласованных» фононов становится функцией температуры и не предполагается заданной, а находится в результате решения нелинейного алгебраического уравнения, которое выводится из условия минимума свободной энергии. «Самосогласованная» энергия Дебая в данном подходе также является функцией температуры. Найдены термодинамические функции газа таких фононов и, в частности, вычислена фононная теплоемкость. Показано, что при низких температурах к кубическому закону в температурной зависимости теплоемкости имеется добавка, пропорциональная седьмой степени температуры. Это, по-видимому, может являться одной из причин, по которой кубический закон для теплоемкости наблюдается в эксперименте только при довольно низких температурах. При высоких температурах теория предсказывает линейное по температуре отклонение теплоемкости от закона Дюлонга - Пти, наблюдаемое экспериментально. В модели скалярного кристалла предлагаемый подход был развит автором в работе [18]. В предлагаемой работе самосогласованная модель обобщена для анизотропной среды с учетом поляризации фононов.

ФОРМУЛИРОВКА МОДЕЛИ

Пусть фононы в кристаллической решетке описываются плотностью оператора Гамильтона

$$\mathrm{H}(\mathbf{r}) = \frac{\pi_a(\mathbf{r})^2}{2\rho} + U_2(\mathbf{r}) + U_3(\mathbf{r}) + U_4(\mathbf{r}), \tag{1}$$

где квадратичные, кубические и члены четвертого порядка по тензору деформации

$$u_{ij} = \frac{1}{2}\left(\nabla_j u_i + \nabla_i u_j + \nabla_i u_a \nabla_j u_a\right) \tag{2}$$

имеют вид

$$U_2 = \frac{1}{2}\lambda_{aibj} u_{ai} u_{bj}, \quad U_3 = \frac{1}{6}\lambda_{aibjck} u_{ai} u_{bj} u_{ck}, \; U_4 = \frac{1}{24}\lambda_{aibjckdl} u_{ai} u_{bj} u_{ck} u_{dl}, \tag{3}$$

$\pi_a(\mathbf{r})$ - канонический импульс, ρ - плотность. Вследствие симметрии тензора деформации $u_{ij} = u_{ji}$ модули упругости симметричны относительно как перестановок пар индексов, так и перестановок индексов внутри каждой пары, в частности

$$\lambda_{aibj} = \lambda_{bjai} = \lambda_{jbai} = \lambda_{jbia}. \tag{4}$$

Аналогичные условия симметрии выполняются для модулей упругости третьего и четвертого порядков.

Поскольку тензор деформации (2) содержит помимо линейных членов, также квадратичные члены по градиентам вектора деформации $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, то с точностью до четвертого порядка по градиентам, потенциальные энергии (3) можно записать в виде $U_2 = U_2^{(2)} + U_2^{(3)} + U_2^{(4)}$, $U_3 = U_3^{(3)} + U_3^{(4)}$, где

$$\begin{gathered} U_2^{(2)} = \frac{1}{2}\lambda_{aibj}\nabla_i u_a \nabla_j u_b, \qquad U_2^{(3)} = \frac{1}{2}\lambda_{aibj}\nabla_i u_a \nabla_j u_c \nabla_b u_c, \qquad U_2^{(4)} = \frac{1}{8}\lambda_{aibj}\nabla_a u_c \nabla_i u_c \nabla_b u_s \nabla_j u_s, \\ U_3^{(3)} = \frac{1}{6}\lambda_{aibjck}\nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_c, \qquad U_3^{(4)} = \frac{1}{4}\lambda_{aibjck}\nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_s \nabla_c u_s. \end{gathered} \tag{5}$$

Таким образом, с точностью до величин четвертого порядка по градиентам вектора деформации плотность гамильтониана принимает вид

$$\mathrm{H}(\mathbf{r}) = \frac{\pi_a(\mathbf{r})^2}{2\rho} + \frac{1}{2}\lambda_{aibj}\nabla_i u_a \nabla_j u_b + \tilde{U}_3 + \tilde{U}_4, \tag{6}$$

где

$$\tilde{U}_3 = \frac{1}{2}\lambda_{aibj}\nabla_i u_a \nabla_j u_c \nabla_b u_c + \frac{1}{6}\lambda_{aibjck}\nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_c,$$
$$\tilde{U}_4 = \frac{1}{8}\lambda_{aibj}\nabla_a u_c \nabla_i u_c \nabla_b u_s \nabla_j u_s + \frac{1}{4}\lambda_{aibjck}\nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_s \nabla_c u_s + \frac{1}{24}\lambda_{aibjckdl}\nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_c \nabla_l u_d, \quad (7)$$

При квантовом описании вектор деформации $u_a(\mathbf{r}) = u_a^+(\mathbf{r})$ и канонический импульс $\pi_a(\mathbf{r})$ следует рассматривать как операторы, для которых справедливы известные соотношения коммутации

$$\pi_a(\mathbf{r})u_b(\mathbf{r}') - u_b(\mathbf{r}')\pi_a(\mathbf{r}) = -i\hbar\delta_{ab}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$
$$u_a(\mathbf{r})u_b(\mathbf{r}') - u_b(\mathbf{r}')u_a(\mathbf{r}) = 0, \qquad \pi_a(\mathbf{r})\pi_b(\mathbf{r}') - \pi_b(\mathbf{r}')\pi_a(\mathbf{r}) = 0. \quad (8)$$

Модули упругости, вообще говоря, могут являться функциями температуры, но в данной работе, как и в модели Дебая, будем этим пренебрегать и учтем впоследствии только температурную зависимость наблюдаемых величин, связанную с возбуждением фононов. Полный гамильтониан $H = \int \mathrm{H}(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ есть сумма гамильтонианов свободных фононов и их взаимодействия: $H = H_0 + H_I$, где

$$H_0 = \int \left\{ \frac{\pi_a(\mathbf{r})^2}{2\rho} + \frac{1}{2}\lambda_{aibj}\nabla_i u_a \nabla_j u_b \right\} d\mathbf{r}, \qquad H_I = \int \left[\tilde{U}_3(\mathbf{r}) + \tilde{U}_4(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r}. \quad (9)$$

Прежде чем переходить к детальному построению модели, введем определения некоторых функций, необходимых в дальнейшем. Определим обобщенные функции Дебая:

$$D_n(x) = \frac{n}{x^n}\int_0^x \frac{z^n dz}{e^z - 1}, \qquad (n \ge 1) \quad (10)$$

Фактически эти функции впоследствии понадобятся только при $n = 1, 2, 3$. Стандартная функция Дебая в таких обозначениях есть $D_3(x)$ [19]. Функции (10) могут быть представлены в виде

$$D_n(x) = \frac{n}{x^n}\left[n!\zeta(n+1) - \sum_{m=0}^{\infty}\int_x^{\infty} e^{-(m+1)z} z^n dz \right], \quad (11)$$

так что при $x >> 1$ с точностью до экспоненциально малых членов

$$D_1(x) \approx \frac{\pi^2}{6x}, \quad D_2(x) \approx \frac{4}{x^2}\zeta(3), \quad D_3(x) \approx \frac{\pi^4}{5x^3}, \quad (12)$$

$\zeta(3) \approx 1{,}202$ - дзэта - функция Римана. При $x << 1$:

$$D_n(x) \approx 1 - \frac{n}{2(n+1)}x + \frac{n}{12(n+2)}x^2, \quad (13)$$

Кроме того, ниже будет использована функция

$$\Phi(x) \equiv 1 + \frac{8}{3x}D_3(x),$$
$$\Phi(x) \approx \frac{8}{3x} + \frac{2}{15}x, \quad (x < 1), \qquad \Phi(x) \approx 1 + \frac{8\pi^4}{15x^4}, \quad (x >> 1). \quad (14)$$

САМОСОГЛАСОВАННОЕ ОПИСАНИЕ СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ФОНОНОВ

Рассмотрим систему взаимодействующих фононов в формулировке модели самосогласованного поля, развитой в [20] для фермионных и в [21,22] для бозонных систем. На примере ангармонического осциллятора реализация данного подхода продемонстрирована в [23,24].

Разобьем полный гамильтониан на сумму двух слагаемых

$$H = H_S + H_C, \quad (15)$$

где перенормированный гамильтониан, описывающий «свободные» фононы, имеет вид

$$H_S = \int \left[\frac{\pi_a^2}{2\rho} + \frac{\tilde{\lambda}}{2}\nabla_i u_a \nabla_i u_a \right] d\mathbf{r} + \varepsilon_0, \quad (16)$$

а корреляционный гамильтониан

$$H_C = \int \left[\frac{1}{2}\left(\lambda_{aibj} - \tilde{\lambda}\delta_{ij}\delta_{ab}\right)\nabla_i u_a \nabla_j u_b + \tilde{U}_3 + \tilde{U}_4 \right] d\mathbf{r} - \varepsilon_0, \quad (17)$$

описывает взаимодействие таких фононов. Самосогласованный аппроксимирующий гамильтониан (16) содержит только один эффективный модуль упругости $\tilde{\lambda}$ и описывает фононную систему в изотропном приближении, когда фононы с произвольной поляризацией имеют одинаковую скорость. Кроме того, H_S включает неоператорное слагаемое ε_0, учет которого является существенным. Таким образом, с помощью перенормировки модуля упругости взаимодействие между исходными фононами в изотропном приближении учитывается в гамильтониане (16), а гамильтониан (17) учитывает остаточное взаимодействие, не включенное в модель самосогласованного поля. Воспользуемся разложением полевых операторов

$$\pi_a(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k,\alpha}\sqrt{\frac{\rho\hbar\omega(\mathbf{k},\alpha)}{2}}\, e_a(\mathbf{k},\alpha)\chi_{k\alpha}e^{i\mathbf{kr}}, \quad u_a(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k,\alpha}\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega(\mathbf{k},\alpha)}}\, e_a(\mathbf{k},\alpha)\psi_{k\alpha}e^{i\mathbf{kr}}, \tag{18}$$

где $\mathbf{e}(\mathbf{k},\alpha)$ - векторы поляризации, для которых предполагаются выполненными условия

$$\mathbf{e}(\mathbf{k},\alpha)\mathbf{e}^*(\mathbf{k},\alpha') = \delta_{\alpha\alpha'}, \qquad \sum_\alpha e_i^*(\mathbf{k},\alpha)e_j(\mathbf{k},\alpha) = \delta_{ij}, \qquad \mathbf{e}(-\mathbf{k},\alpha) = \mathbf{e}^*(\mathbf{k},\alpha). \tag{19}$$

В (18) введены операторы

$$\psi_{k\alpha} = \psi^+_{-k\alpha} = b_{k\alpha} + b^+_{-k\alpha}, \qquad \chi_{k\alpha} = \chi^+_{-k\alpha} = i\left(b_{k\alpha} - b^+_{-k\alpha}\right). \tag{20}$$

Предполагается, что решетка простая, так что $\alpha = 1,2,3$. Операторы рождения $b^+_{k\alpha}$ и уничтожения $b_{k\alpha}$ фононов подчиняются обычным условиям коммутации: $\left[b_{k\alpha}, b^+_{k'\alpha'}\right] = \delta_{kk'}\delta_{\alpha\alpha'}$, $\left[b_{k\alpha}, b_{k'\alpha'}\right] = \left[b^+_{k\alpha}, b^+_{k'\alpha'}\right] = 0$.

Самосогласованный гамильтониан (16) в представлении операторов рождения и уничтожения фотонов принимает вид

$$H_S = \hbar\sum_{k,\alpha}\omega(k)b^+_{k\alpha}b_{k\alpha} + \frac{3}{2}\hbar\sum_k\omega(k) + \varepsilon_0. \tag{21}$$

где $\omega(k) = c_S k$, а скорость фононов с произвольной поляризацией $c_S = \sqrt{\tilde{\lambda}/\rho}$. Заметим, что в пренебрежении фонон-фононным взаимодействием гамильтониан (21) приводит к теории Дебая.

В дальнейшем усреднения будем проводить с помощью статистического оператора

$$\hat{\rho} = \exp\beta\left(F - H_S\right). \tag{22}$$

где $\beta = 1/T$ - обратная температура. Условие нормировки $\mathrm{Sp}\hat{\rho} = 1$ дает выражение для свободной энергии

$$F = \varepsilon_0 + \frac{3\hbar}{2}\sum_k\omega(k) + 3T\sum_k\ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega(k)}\right). \tag{23}$$

Величину ε_0 находим из обычного для теории среднего поля условия $\langle H\rangle = \langle H_S\rangle$ [18], так что

$$\varepsilon_0 = \int\left[\frac{1}{2}\left(\lambda_{aibj} - \tilde{\lambda}\delta_{ij}\delta_{ab}\right)\left\langle\nabla_i u_a\nabla_j u_b\right\rangle + \left\langle\tilde{U}_3\right\rangle + \left\langle\tilde{U}_4\right\rangle\right]d\mathbf{r}. \tag{24}$$

Здесь

$$\left\langle\nabla_i u_a\nabla_j u_b\right\rangle = \frac{\hbar}{2\rho V}\delta_{ab}\sum_k\frac{k_i k_j}{\omega(k)}(1 + 2f_k), \qquad \left\langle\tilde{U}_3\right\rangle = 0, \tag{25}$$

$$\left\langle\nabla_i u_a\nabla_j u_b\nabla_k u_c\nabla_l u_d\right\rangle = \\ = \frac{1}{V^2}\left(\frac{\hbar}{2\rho}\right)^2\sum_{k_1,k_2}\frac{\left(1+2f_{k_1}\right)\left(1+2f_{k_2}\right)}{\omega(k_1)\omega(k_2)}\left[k_{1i}k_{1j}k_{2k}k_{2l}\delta_{ab}\delta_{cd} + k_{1i}k_{1k}k_{2j}k_{2l}\delta_{ac}\delta_{bd} + k_{1i}k_{1l}k_{2j}k_{2k}\delta_{ad}\delta_{bc}\right], \tag{26}$$

$$\left\langle\nabla_i u_a\nabla_j u_b\nabla_k u_s\nabla_c u_s\right\rangle = \\ == \frac{1}{V^2}\left(\frac{\hbar}{2\rho}\right)^2\delta_{ab}\sum_{k_1,k_2}\frac{\left(1+2f_{k_1}\right)\left(1+2f_{k_2}\right)}{\omega(k_1)\omega(k_2)}\left[3k_{1i}k_{1j}k_{2k}k_{2c} + k_{1i}k_{1k}k_{2j}k_{2c} + k_{1i}k_{1c}k_{2j}k_{2k}\right], \tag{27}$$

$$\left\langle\nabla_i u_c\nabla_a u_c\nabla_b u_s\nabla_j u_s\right\rangle = \\ = \frac{3}{V^2}\left(\frac{\hbar}{2\rho}\right)^2\sum_{k_1,k_2}\frac{\left(1+2f_{k_1}\right)\left(1+2f_{k_2}\right)}{\omega(k_1)\omega(k_2)}\left[3k_{1i}k_{1a}k_{2b}k_{2j} + k_{1i}k_{1b}k_{2a}k_{2j} + k_{1i}k_{1j}k_{2a}k_{2b}\right]. \tag{28}$$

В (25)-(28)

$$f_k = \left[e^{\beta\hbar\omega(k)} - 1\right]^{-1} \tag{29}$$

- функция распределения фононов. Из этих соотношений следует

$$\varepsilon_0=\frac{3\hbar}{2c_S}\left[\frac{1}{3\rho}\sum_k\frac{k_ik_j\lambda_{aiaj}}{k}\left(f_k+\frac{1}{2}\right)-c_S^2\sum_k k\left(f_k+\frac{1}{2}\right)\right]+\frac{\hbar^2}{8V\rho^2c_S^2}I\,, \tag{30}$$

где

$$I\equiv\sum_{k_1,k_2}\frac{\left(f_{k_1}+1/2\right)\left(f_{k_1}+1/2\right)}{k_1k_2}\left\{\lambda_{aiajbkbl}k_{1i}k_{1j}k_{2k}k_{2l}+\right.$$
$$\left.+2\lambda_{aiajck}\left[3k_{1i}k_{1j}k_{2k}k_{2c}+2k_{1i}k_{1k}k_{2j}k_{2c}\right]+3\lambda_{aibj}\left[3k_{1i}k_{1a}k_{2b}k_{2j}+2k_{1i}k_{1b}k_{2a}k_{2j}\right]\right\}. \tag{31}$$

Перенормированная вследствие взаимодействия скорость фононов c_S находится из условия минимума свободной энергии (23) $\partial F/\partial c_S=0$. В результате приходим к нелинейному уравнению для определения скорости «новых» фононов

$$c_S^2=\frac{2\pi^2}{3\rho V}J^{-1}\sum_k\frac{k_ik_j\lambda_{aiaj}}{k}\left(f_k+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar\pi^2}{6\rho^2V^2c_S}\frac{I}{J} \tag{32}$$

где

$$J=\int_0^{k_D}\left(f_k+\frac{1}{2}\right)k^3dk\,. \tag{33}$$

Верхним пределом в интеграле (33) является волновое число Дебая k_D. Оно находится из того условия, что сфера радиуса k_D в k – пространстве должна содержать количество точек, равное числу частиц системы [25]

$$\frac{V4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{k_D}k^2dk=\frac{Vk_D^3}{6\pi^2}=N,\qquad k_D=\left(6\pi^2N/V\right)^{1/3}. \tag{34}$$

Уравнение в форме (32) справедливо для кристаллов произвольной симметрии.

В отсутствие взаимодействия в пренебрежении нелинейными эффектами, фононы в данной теории такие же, как в теории Дебая. Их естественно назвать «голыми» или «дебаевскими». Фононы, скорость которых перенормирована вследствие взаимодействия в соответствии с (32), будем называть «самосогласованными». Даже в случае пренебрежения зависимостью модулей λ_{aiaj} от температуры, что предполагается в теории Дебая, перенормированная скорость c_S в данном подходе существенно зависит от температуры, поскольку выражается через интегралы от функции распределения (29).

Можно убедиться, что при выполнении условий (24) и (32) справедливо соотношение $\partial\Gamma/\partial c_S=0$, где $\Gamma=\left\langle\left(H-H_S\right)\right\rangle$ - среднее от разности между точным и самосогласованным гамильтонианами. Таким образом, оказывается, что для введенного самосогласованного квадратичного гамильтониана (16), при условиях (24) и (32), величина Γ становится минимальной. Следовательно, параметр $\tilde{\lambda}$ выбирается так, что гамильтониан (16) оказывается максимально близким точному гамильтониану (15) и потому максимально хорошо описывает фононную систему при аппроксимации ее квадратичным гамильтонианом.

САМОСОГЛАСОВАННЫЕ ФОНОНЫ В ИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ

Рассмотрим более детально взаимодействующие фононы в изотропной среде. В этом случае тензор квадратичных модулей упругости имеет вид

$$\lambda_{aibj}=\lambda\delta_{ai}\delta_{bj}+\mu(ij,ba)\,. \tag{35}$$

где λ,μ - коэффициенты Ламе. Для краткости введено обозначение

$$(ij,ab)\equiv\delta_{ij}\delta_{ab}+\delta_{ia}\delta_{jb} \tag{36}$$

для которого выполнены условия симметрии:

$$(ij,ab)=(ji,ba)=(ab,ij)=(ba,ji)\,. \tag{37}$$

Тензоры ангармонических модулей упругости в изотропной упругой среде имеют вид

$$\lambda_{aibjck}=B_1\delta_{ai}\delta_{bj}\delta_{ck}+B_2\left[\delta_{ai}(jk,cb)+\delta_{bj}(ik,ca)+\delta_{ck}(ij,ba)\right]+$$
$$+B_3\left[\delta_{ac}(ij,bk)+\delta_{ak}(ij,bc)+\delta_{ic}(jk,ab)+\delta_{ik}(ab,jc)\right], \tag{38}$$

$$\lambda_{aibjckdl}=C_1\delta_{ai}\delta_{bj}\delta_{ck}\delta_{dl}+C_2\lambda^{(2)}_{aibjckdl}+C_3\lambda^{(3)}_{aibjckdl}+C_4\lambda^{(4)}_{aibjckdl}+C_5\lambda^{(5)}_{aibjckdl}\,, \tag{39}$$

где

$$\lambda^{(2)}_{aibjckdl}\equiv\delta_{ai}\delta_{bj}(lk,cd)+\delta_{ai}\delta_{ck}(jl,db)+\delta_{ai}\delta_{dl}(jk,cb)+$$
$$+\delta_{bj}\delta_{ck}(il,da)+\delta_{bj}\delta_{dl}(ik,ca)+\delta_{ck}\delta_{dl}(ij,ba), \tag{40}$$

$$\begin{aligned}\lambda^{(3)}_{aibjckdl} \equiv \delta_{ai}\left[\delta_{bd}\left(jk,cl\right)+\delta_{bl}\left(jk,cd\right)+\delta_{jd}\left(kl,bc\right)+\delta_{jl}\left(bc,kd\right)\right]+ \\ +\delta_{bj}\left[\delta_{ac}\left(kl,di\right)+\delta_{ci}\left(kl,da\right)+\delta_{ka}\left(li,cd\right)+\delta_{ik}\left(ad,lc\right)\right]+ \\ +\delta_{ck}\left[\delta_{bd}\left(il,ja\right)+\delta_{dj}\left(il,ba\right)+\delta_{lb}\left(ij,da\right)+\delta_{jl}\left(ab,di\right)\right]+ \\ +\delta_{dl}\left[\delta_{ac}\left(ij,bk\right)+\delta_{ak}\left(ij,bc\right)+\delta_{ic}\left(jk,ab\right)+\delta_{ik}\left(ab,jc\right)\right],\end{aligned} \tag{41}$$

$$\lambda^{(4)}_{aibjckdl} \equiv (il,da)(jk,cb)+(ik,ca)(jl,db)+(ij,ba)(kl,dc), \tag{42}$$

$$\begin{aligned}\lambda^{(5)}_{aibjckdl} \equiv (ab,ci)(jl,dk)+(ij,ca)(kl,db)+(ik,ba)(jl,dc)+(ij,ka)(bl,dc)+ \\ +(ab,jc)(il,dk)+(ij,bc)(kl,da)+(ab,jk)(il,dc)+(ij,bk)(cl,da)+ \\ +(ad,ci)(jk,lb)+(jl,cb)(ik,da)+(jk,db)(il,ca)+(il,ka)(cj,bd).\end{aligned} \tag{43}$$

Величину (31) можно записать в виде

$$I \equiv \sum_{k_1,k_2} \frac{\left(f_{k_1}+1/2\right)\left(f_{k_1}+1/2\right)}{k_1k_2}\left[V_0k_1^2k_2^2+V_1\left(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\right)^2\right], \tag{44}$$

где

$$\begin{aligned}V_0 = 9\lambda+6\mu+6B_1+32B_2+32B_3+C_1+8C_2+8C_3+18C_4+28C_5, \\ V_1 = 6\lambda+24\mu+4B_1+48B_2+88B_3+8C_2+40C_3+10C_4+68C_5.\end{aligned} \tag{45}$$

С учетом этих соотношений, после интегрирования по углам в (44), приходим к следующему уравнению, определяющему скорость самосогласованных фононов в изотропной упругой среде

$$c_S^2 = c_0^2 + \frac{\hbar}{24\pi^2\rho^2 c_S}\left(V_0+\frac{V_1}{3}\right)J\ , \tag{46}$$

где усредненная скорость фононов c_0 без учета их взаимодействия определена формулой

$$c_0^2 = \frac{1}{3}\left(2c_t^2+c_l^2\right) = \frac{(\lambda+4\mu)}{3\rho}\ , \tag{47}$$

а продольная и поперечная скорости звука определяются известными соотношениями $c_l^2 = (\lambda+2\mu)/\rho$, $c_t^2 = \mu/\rho$. Отметим, что определение (47) отличается от определения средней скорости c_D по Дебаю [19]:

$$\frac{1}{c_D^3} = \rho^{3/2}\left[\frac{2}{\mu^{3/2}}+\frac{1}{(\lambda+2\mu)^{3/2}}\right], \tag{48}$$

Определение (47) представляется более естественным, однако, поскольку средняя скорость входит в определение энергии Дебая, которая является феноменологическим параметром теории, различие в определениях (47), (48) не влияет на структуру теории. Стандартная энергия Дебая определяется соотношением $\Theta_D \equiv \hbar c_0 k_D$ [25]. Поскольку теперь помимо скорости голых фононов c_0 возникает скорость самосогласованных фононов c_S, естественно определить «самосогласованную энергию Дебая» $\tilde{\Theta}_D \equiv \hbar c_S k_D$, которая, в отличие от стандартной энергии Дебая Θ_D, является функцией температуры. Отметим, однако, что хотя в своей исходной формулировке энергия Дебая Θ_D предполагается не зависящей от температуры, но на практике экспериментальные данные часто представляют в виде функции энергии Дебая от температуры [26]. В рассматриваемом подходе самосогласованная энергия Дебая $\tilde{\Theta}_D$ существенно зависит от температуры вследствие фонон-фононного взаимодействия уже в рамках самой теории и, следовательно, данный подход лучше отражает реальную ситуацию. Хотя, конечно, недостатки теории Дебая, связанные с очень упрощенным выбором спектральной плотности, не учитывающей детали строения решетки, остаются и в предлагаемом подходе.

Представляет интерес рассчитать число фононов как функцию температуры:

$$N_{ph} = 3\sum_k f_k = \frac{9}{2}N\frac{T}{\tilde{\Theta}_D}D_2\left(\frac{\tilde{\Theta}_D}{T}\right), \tag{49}$$

С учетом свойств (12) и (13), находим, что при низких температурах $T \ll \tilde{\Theta}_D$ имеем кубическую зависимость $N_{ph}/N \approx 18\zeta(3)\left(T/\tilde{\Theta}_D\right)^3$, а при высоких $T \gg \tilde{\Theta}_D$ - линейную $N_{ph}/N \approx (9/2)\left(T/\tilde{\Theta}_D\right)$. Таким образом, вследствие возрастания количества фононов, вклад взаимодействия между ними с повышением температуры должен быть все более существенным. При $T \sim \tilde{\Theta}_D$ число фононов становится порядка числа частиц. Вследствие того, что фононы подчиняются статистике Бозе- Эйнштейна и их количество в состоянии с определенным импульсом может быть произвольным, не должен вызывать удивления тот факт, что число фононов может превосходить число частиц в твердом теле. Удобно ввести обозначение σ для отношения перенормированной вследствие фонон-фононного взаимодействия скорости звука c_S к исходной скорости звука c_0, или, что тоже, отношения самосогласованной энергии Дебая к стандартной:

$$\sigma \equiv c_s/c_0 = \tilde{\Theta}_D/\Theta_D \;. \qquad (50)$$

Для дальнейшего анализа уравнение (46), с учетом введенных обозначений (50), удобно записать в безразмерном виде

$$\left(\sigma^2 - 1\right)\sigma = \Lambda\Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right), \qquad (51)$$

где $\tau \equiv T/\Theta_D$ - безразмерная температура. В (51) было учтено, что $J = \frac{k_D^4}{8}\Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)$, а функция $\Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)$ определена в (14). В уравнение (51) входит единственный безразмерный параметр, содержащий характеристики системы

$$\Lambda \equiv \frac{\Theta_D}{32\rho M c_0^4}\left(V_0 + \frac{V_1}{3}\right), \qquad (52)$$

M - масса атома решетки. Оценки показывают, что этот параметр может быть порядка и меньше единицы. Поскольку предполагается, что $\Lambda > 0$, то всегда $\sigma > 1$. Переход к теории Дебая происходит при $\Lambda = 0$ и $\sigma = 1$.

При нулевой температуре перенормировка скорости определяется уравнением

$$\left(\sigma_0^2 - 1\right)\sigma_0 = \Lambda \;. \qquad (53)$$

При низких температурах $\tau/\sigma_0 << 1$:

$$\sigma \approx \sigma_0 + \Lambda\frac{8\pi^4}{15\left(3\sigma_0^2 - 1\right)}\left(\frac{\tau}{\sigma_0}\right)^4. \qquad (54)$$

При высоких температурах $\tau/\sigma >> 1$ уравнение (51) сводится к биквадратному уравнению

$$\left(\sigma^2 - 1\right)\sigma^2 = \frac{8}{3}\Lambda\tau \;, \qquad (55)$$

решение которого имеет вид

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1 + \sqrt{1 + \frac{32}{3}\Lambda\tau}} \;. \qquad (56)$$

Здесь можно выделить два характерных температурных интервала. При наиболее вероятном случае малой величины постоянной фонон-фононного взаимодействия даже при высоких температурах возможно выполнение условия $8\Lambda\tau/3 << 1$. Тогда возникает линейная зависимость:

$$\sigma \approx 1 + \frac{4}{3}\Lambda\tau \;. \qquad (57)$$

При достаточно сильном фонон-фононном взаимодействии, когда $8\Lambda\tau/3 >> 1$, получаем:

$$\sigma \approx \left(\frac{8}{3}\Lambda\right)^{1/4}\tau^{1/4}. \qquad (58)$$

Зависимости параметра σ от температуры при некоторых значениях Λ представлены на рис. 1.

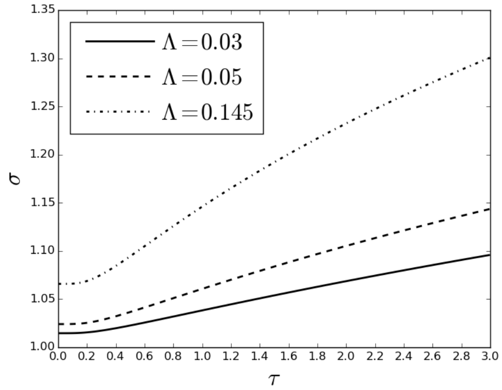

Рис. 1. Зависимости параметра $\sigma \equiv c_s/c_0 = \tilde{\Theta}_D/\Theta_D$ от безразмерной температуры $\tau \equiv T/\Theta_D$ при различных значениях параметра Λ.

ТЕРМОДИНАМИКА ГАЗА САМОСОГЛАСОВАННЫХ ФОНОНОВ

Свободная энергия (23) может быть представлена в виде

$$\frac{F}{N\Theta_D}=\frac{9}{16}\frac{\left(1-\sigma^2\right)}{\sigma}\Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)+\frac{9}{32}\frac{\Lambda}{\sigma^2}\Phi^2\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)+\frac{9}{8}\sigma+\tau\left[3\ln\left(1-e^{-\frac{\sigma}{\tau}}\right)-D_3\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)\right]. \quad (59)$$

В пренебрежении взаимодействием фононов при $\Lambda=0$ и $\sigma=1$ выражение (59), естественно, переходит в свободную энергию теории Дебая [19]. Энтропия дается формулой

$$S=-N\left[3\ln\left(1-e^{-\frac{\sigma}{\tau}}\right)-4D_3\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)\right]. \quad (60)$$

Отметим, что выражение для энтропии может быть получено как из общей формулы для энтропии газа бозонов [19], так и с помощью термодинамического соотношения $S=-\left(\partial F/\partial T\right)_V$, причем при дифференцировании, в силу условия $\partial F/\partial c_S=0$, параметр σ в (59) дифференцировать не следует. Энергия газа самосогласованных фононов $E=F+TS$ имеет вид

$$\frac{E}{N\Theta_D}=\frac{9}{16}\frac{\left(1-\sigma^2\right)}{\sigma}\Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)+\frac{9}{32}\frac{\Lambda}{\sigma^2}\Phi^2\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)+\frac{9}{8}\sigma+3\tau D_3\left(\frac{\sigma}{\tau}\right). \quad (61)$$

Давление находится по формуле $p=-\left(\partial F/\partial V\right)_T$:

$$p=\frac{N}{V}\Theta_D\left[\frac{9}{8}\sigma+3\tau D_3\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)-\frac{9}{32}\frac{\left(\sigma^2-1\right)}{\sigma}\Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)\right]\Gamma_G+\frac{N}{V}\Theta_D\frac{9}{32}\frac{\left(\sigma^2-1\right)}{\sigma}\Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)\Gamma_\Lambda. \quad (62)$$

В (62) входят два параметра

$$\Gamma_G=-\frac{\partial\ln\Theta_D}{\partial\ln V},\qquad \Gamma_\Lambda=-\frac{\partial\ln\Lambda}{\partial\ln V}. \quad (63)$$

Здесь Γ_G - параметр Грюнайзена и Γ_Λ - новый безразмерный параметр, описывающий вклад в давление эффектов фонон-фононного взаимодействия. Поскольку скорость звука c_0 и модули упругости предполагаются не зависящими от температуры, то коэффициенты (63) также не зависят от температуры. Учет влияния фонон-фононного взаимодействия на тепловое расширение твердых тел требует специального рассмотрения.

ТЕПЛОЕМКОСТЬ

Из выражения для энтропии (60) следует формула для теплоемкости $C_V=T\left(\partial S/\partial T\right)_V$:

$$C_V=3N\left[4\frac{\tau}{\sigma}D_3\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)-\frac{3}{e^{\sigma/\tau}-1}\right]\left(\frac{\sigma}{\tau}-\frac{d\sigma}{d\tau}\right). \quad (64)$$

Входящую в (64) производную от параметра σ по температуре можно найти из уравнения (51), так что:

$$\frac{\sigma}{\tau}-\frac{d\sigma}{d\tau}=\frac{\sigma}{\tau}\cdot\frac{\left(1-3\sigma^2\right)}{1-3\sigma^2+\frac{8}{3}\frac{\Lambda}{\sigma}\left[\frac{3}{e^{\frac{\sigma}{\tau}}-1}-4\frac{\tau}{\sigma}D_3\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)\right]}. \quad (65)$$

При $\sigma=1$ формула (64), естественно, дает результаты теории Дебая. Как известно, в теории Дебая выполняется закон соответственных состояний, заключающийся в том, что теплоемкость, а также другие термодинамические величины, являются функциями безразмерной температуры $\tau=T/\Theta$ [19]. Учет фонон-фононного взаимодействия приводит к нарушению этого закона, и каждая конкретная фононная система дополнительно характеризуется своим безразмерным параметром Λ. Рассмотрим предельные случаи высоких и низких температур.

Низкие температуры

При $T=0$ параметр $\sigma=\sigma_0$, перенормирующий скорость звука, определяется из уравнения (53). При низких температурах $\sigma=\sigma_0+\sigma'$, причем полагаем $\sigma'/\sigma_0<<1$. С учетом формул (13), (14), находим

$$\sigma'=\Lambda\frac{8\pi^4}{15\left(3\sigma_0^2-1\right)}\left(\frac{\tau}{\sigma_0}\right)^4. \quad (66)$$

Тогда из (64) для теплоемкости получаем

$$C_V \approx \frac{12\pi^4}{5} N \left(\frac{\tau}{\sigma_0}\right)^3 \left[1 - \Lambda \frac{56\pi^4}{15\sigma_0\left(3\sigma_0^2 - 1\right)} \left(\frac{\tau}{\sigma_0}\right)^4\right]. \quad (67)$$

По сравнению с теорией Дебая поведение теплоемкости изменилось в двух отношениях. Во-первых, в силу того, что $\sigma_0 > 1$, уменьшился коэффициент при кубической зависимости и, во-вторых, наряду с кубической зависимостью появился член пропорциональный τ^7.

Часто энергию Дебая определяют по поведению теплоемкости при низких температурах [27,28], которая согласно (67) имеет вид

$$\frac{C_V}{N} \approx \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\tilde{\Theta}_{D0}}\right)^3. \quad (68)$$

Здесь $\tilde{\Theta}_{D0} = \sigma_0 \Theta_D$. Как видим, при измерениях низкотемпературной теплоемкости определяется самосогласованная энергия Дебая $\tilde{\Theta}_{D0}$, которая отличается от самосогласованной энергии $\tilde{\Theta}_D = \sigma\Theta_D$ при конечных температурах.

Для того чтобы поведение теплоемкости подчинялось закону T^3, необходимо, чтобы второе слагаемое в (67) было много меньше первого, т.е. выполнялось условие

$$\left(\frac{\tau}{\sigma_0}\right)^4 << \frac{15\sigma_0\left(3\sigma_0^2 - 1\right)}{56\pi^4\Lambda}. \quad (69)$$

Если Λ мало, то $\sigma_0 \approx 1$ и $\left(T/\Theta_D\right)^4 << 15/28\pi^4\Lambda$. По измерениям отклонения теплоемкости от кубического закона при низких температурах может быть определена безразмерная постоянная Λ. Заметим, что в обычной теории Дебая степенная поправка к кубическому слагаемому для низкотемпературной теплоемкости отсутствует и поправка имеет экспоненциальный характер:

$$C_V^D \approx 3N \left[\frac{4\pi^4}{5}\tau^3 - \frac{3}{\tau} e^{-\frac{1}{\tau}}\right]. \quad (70)$$

Как видно из (69), с увеличением фонон-фононного взаимодействия температурная область, где справедлив закон τ^3 сужается. Так, при $\Lambda = 0{,}1$ закон τ^3 хорошо выполняется при $\tau^4 << 0{,}08$, а в случае $\Lambda = 1$ - при $\tau^4 << 0{,}05$. Как известно, чтобы ход изменения теплоемкости был достаточно близок к закону τ^3, обычно необходима область температур ниже $\tau \approx 1/50$ [27]. Наличие степенной поправки к низкотемпературной теплоемкости пропорциональной τ^7 и зависимость температурного интервала, где справедлив закон τ^3, от величины постоянной фонон-фононного взаимодействия, возможно, объясняют причину, по которой закон τ^3 наблюдается при более низких температурах, чем можно было бы ожидать.

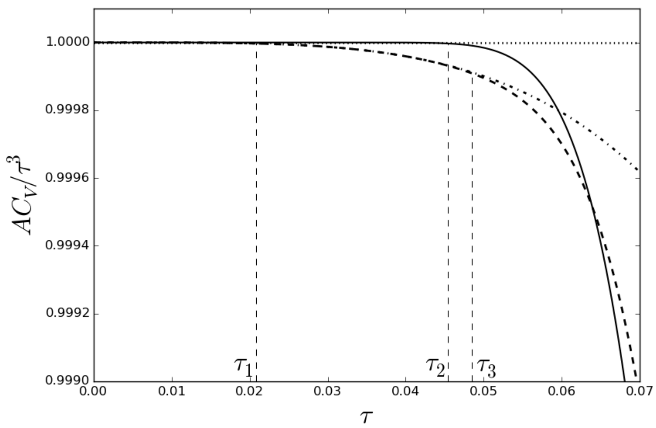

Рис. 2. Поведение теплоемкости при низких температурах.

Здесь $\Lambda = 0{,}145$ и $A = 5\sigma_0^3/12\pi^4 N$. Теплоемкости: сплошная линия – по теории Дебая; штриховая – для самосогласованных фононов; штрихпунктирная – по приближенной формуле (67). Характерные температуры: $\tau_1 \approx 0{,}021$, $\tau_2 \approx 0{,}045$, $\tau_3 \approx 0{,}048$ (см. пояснение в тексте).

Температурные зависимости отношения теплоемкости к кубу температуры в теории Дебая и в данном подходе представлены на рис. 2. Как видно из данного рисунка, отклонение теплоемкости от кубического закона для самосогласованных фононов начинается существенно раньше (при $\tau_1 \approx 0{,}021$), чем для фононов Дебая (при

$\tau_2 \approx 0,045$). Температура $\tau_3 \approx 0,048$ показывает, когда значения, вычисленные по приближенной формуле (67) начинают отклоняться от рассчитанных по точной формуле (64). В качестве критерия отклонения двух кривых $f_1(\tau)$ и $f_2(\tau)$ выбиралось условие $2\frac{\left|f_1(\tau)-f_2(\tau)\right|}{f_1(\tau)+f_2(\tau)}=3\cdot 10^{-6}$. Обнаружение в низкотемпературных измерениях теплоемкости степенной поправки пропорциональной T^7, подтверждало бы справедливость предлагаемой модели.

Высокие температуры

Рассмотрим случай высоких температур, таких что $\tau >> \sigma$. Принимая во внимание (14), приходим из (52) к уравнению

$$\sigma^4 - \sigma^2 - \frac{8}{3}\Lambda\tau = 0\,. \qquad (71)$$

Здесь возможны два случая. При малых Λ наряду с условием $\tau >> 1$ может быть выполнено условие $8\Lambda\tau/3 << 1$, так что на температуру имеется ограничение $\sigma << \tau << 3/8\Lambda$. Тогда в этом интервале температур $\sigma \approx 1 + \frac{4}{3}\Lambda\tau$ и имеем линейное по температуре отклонение от закона Дюлонга - Пти

$$C_V \approx 3N\left(1 - \frac{4}{3}\Lambda\tau\right). \qquad (72)$$

Аналогичная зависимость вида $C_V = 3N(1 - BT)$ в рамках совершенно иного подхода была получена в [29]. Согласно [29] $B = 0,63\frac{a^6}{z\varepsilon_{LJ}\sigma_{LJ}^6}$, где $\varepsilon_{LJ}, \sigma_{LJ}$ - параметры потенциала Леннард-Джонса, a - расстояние между ближайшими соседями, z - число ближайших соседей. Рассчитанные с помощью этой формулы величины безразмерной постоянной фонон-фононного взаимодействия для неона, аргона и криптона приведены в таблице 1. Для всех элементов $z = 12$ и предполагалось, что $a/\sigma_{LJ} = 1{,}1$ [29]. Вычисленное значение B согласуется с известными экспериментальными данными для криптона [30]. Заметим, однако, что отношение a/σ_{LJ} должно расти с температурой [29], поэтому значения для B и Λ в таблице 1, скорее всего несколько занижены.

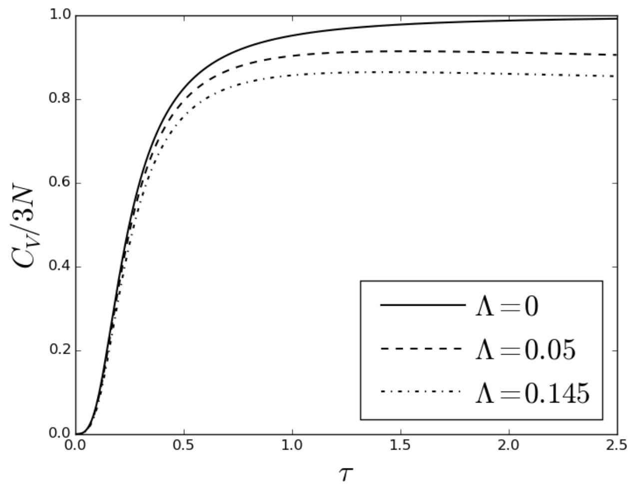

Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости при различных значениях параметра фонон-фононного взаимодействия

При выполнении условий $8\Lambda\tau/3 >> 1$ или $\tau >> 3/8\Lambda$, которые в области ниже температуры плавления могут выполняться для твердых тел с достаточно сильным фонон-фононным взаимодействием, из (71) следует, что

$$\sigma \approx \left(\frac{8\Lambda}{3}\right)^{1/4}\tau^{1/4} \qquad (73)$$

а теплоемкость выходит на постоянное значение

$$C_V \approx \frac{3}{4}\cdot 3N \qquad (74)$$

которое составляет $3/4$ от значения, даваемого законом Дюлонга – Пти. Зависимости теплоемкости от температуры при некоторых значениях параметра Λ показаны на рис. 3.

Таблица 1

Безразмерный параметр фонон-фононного взаимодействия

	Ne	Ar	Kr
ε_{LJ}, K	36	121	173
Θ_D, K	75	92	72
B, K^{-1}	0,0026	0,0008	0,0005
Λ	0,145	0,05	0,03

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ САМОСОГЛАСОВАННЫХ ФОНОНОВ

Приближенный учет фонон-фононного взаимодействия в модели самосогласованного поля с гамильтонианом (16) привел к перенормировке скорости фононов и появлению ее зависимости от температуры. Неучтенное в этом приближении взаимодействие, которое содержится в корреляционном гамильтониане (17), описывает взаимодействие самосогласованных фононов. Хотя в данной работе не исследуются эффекты, связанные с таким взаимодействием, приведем вид гамильтониана (17), записанного в терминах операторов рождения и уничтожения самосогласованных фононов:

$$H_C \equiv H_{ph-ph} = H_C^{(2)} + H_C^{(3)} + H_C^{(4)}, \tag{75}$$

где

$$H_C^{(2)} = \frac{\hbar}{4\rho c_S}\left(\lambda_{aibj} - \lambda\delta_{ab}\delta_{ij}\right)\sum_{\mathbf{k},\alpha,\beta}\frac{k_i k_j}{k} e_a^*(k,\alpha) e_b(k,\beta)\left[\psi_{\mathbf{k}\alpha}^+\psi_{\mathbf{k}\beta} - \left\langle\psi_{\mathbf{k}\alpha}^+\psi_{\mathbf{k}\beta}\right\rangle\right], \tag{76}$$

$$H_C^{(3)} = \frac{1}{2\sqrt{V}}\left(\frac{\hbar}{2\rho c_S}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\lambda_{aikj}\delta_{bc} + \frac{1}{3}\lambda_{aibjck}\right)\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3\\ \alpha,\beta,\gamma}}\frac{k_{1i}k_{2j}k_{3k}}{\sqrt{k_1k_2k_3}}\Delta(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3) e_a(k_1,\alpha) e_b(k_2,\beta) e_c(k_3,\gamma)\psi_{\mathbf{k}_1\alpha}\psi_{\mathbf{k}_2\beta}\psi_{\mathbf{k}_3\gamma}, \tag{77}$$

$$H_C^{(4)} = \frac{\hbar^2}{16\rho^2\tilde{c}_S^2 V}\left(\frac{1}{2}\lambda_{ijkl}\delta_{ab}\delta_{cd} + \lambda_{aibjkl}\delta_{cd} + \frac{1}{6}\lambda_{aibjckdl}\right)\times$$
$$\times\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\\ \alpha,\beta,\gamma,\delta}}\frac{k_{1i}k_{2j}k_{3k}k_{4l}}{\sqrt{k_1k_2k_3k_4}}\Delta(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4) e_a(k_1,\alpha) e_b(k_2,\beta) e_c(k_3,\gamma) e_d(k_4,\delta)\times \tag{78}$$
$$\times\left[\psi_{\mathbf{k}_1\alpha}\psi_{\mathbf{k}_2\beta}\psi_{\mathbf{k}_3\gamma}\psi_{\mathbf{k}_4\delta} - \left\langle\psi_{\mathbf{k}_1\alpha}\psi_{\mathbf{k}_2\beta}\psi_{\mathbf{k}_3\gamma}\psi_{\mathbf{k}_4\delta}\right\rangle\right].$$

Здесь $\psi_{k\alpha} = \psi_{-k\alpha}^+ = b_{k\alpha} + b_{-k\alpha}^+$, а также: $\Delta(\mathbf{k}) = 1$ если $\mathbf{k} = 0$ и $\Delta(\mathbf{k}) = 0$ если $\mathbf{k} \neq 0$. Вклад фонон-фононного взаимодействия самосогласованных фононов (75) в термодинамику системы может быть учтен по теории возмущений с использованием диаграммной техники [22]. На основе гамильтониана фонон-фононного взаимодействия (75) может быть построена кинетика самосогласованных фононов [31,32]. Предложенный подход может быть также применен для формулировки самосогласованной кинетической теории квазичастиц произвольной природы, подобной газодинамической теории, развитой в работах [33,34].

ВЫВОДЫ

Метод самосогласованного поля применен для описания взаимодействующих фононов в твердом теле. Учет фонон-фононного взаимодействия в приближении самосогласованного поля приводит к появлению зависимости скорости таких фононов от температуры. Введенные в предлагаемом подходе фононы, могут быть названы «самосогласованными» или «одетыми», в отличие от «голых» фононов теории Дебая. Построена термодинамика системы «самосогласованных» фононов. Вычислена фононная теплоемкость и показано, что при низких температурах к зависимости T^3 имеется степенная поправка, пропорциональная T^7. Это, по-видимому, позволяет объяснить, почему закон T^3 для теплоемкости наблюдается только при довольно низких температурах. Наблюдение в эксперименте, наряду с кубической, зависимости T^7 в низкотемпературной теплоемкости может быть критерием правильности предложенной теории. При высоких температурах предсказывается отклонение от закона Дюлонга-Пти, пропорциональное T, что наблюдается в эксперименте.

Поскольку в данной работе вводится представление о различных типах квазичастиц-фононов, а именно, «голых» (или «дебаевских») и «одетых» (или «самосогласованных»), то в заключении сделаем общее замечание о квазичастичном описании многочастичных систем. Представление о квазичастицах, является приближенным по своей сути, поскольку, если бы была возможность точно решить многочастичную задачу, то необходимость во введении понятия о квазичастицах не возникало бы. Однако, поскольку многочастичная задача заведомо точно решена быть не может, то представление о квазичастицах, несомненно, носит фундаментальный характер, хотя само введение квазичастиц для той или иной системы является неоднозначным. Может быть задан вопрос: «Какие из различным образом определенных квазичастиц являются наиболее «реальными»?» Очевидно, что такими наиболее «реальными» следует считать те квазичастицы, которые максимально хорошо описывают данную систему в модели идеального газа этих квазичастиц. Модель самосогласованного поля строится таким образом, что квадратичный гамильтониан модели выбирается наиболее близким к точному гамильтониану системы [18, 20-22], и, следовательно, квазичастицы, возникающие в рамках такой модели, максимально хорошо описывают данную систему. Для дальнейшего улучшения описания, следует учитывать взаимодействие между квазичастицами. Сделанное замечание полностью относится к «самосогласованным» фононам, с помощью которых, как было показано, удается описывать более тонкие эффекты, чем с помощью фононов в дебаевском приближении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Einstein A. Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme // Ann. Phys. – 1906. – Vol. 327. – No.1. – P. 180-190.
2. Einstein A. Elementare Betrachtungen über die thermische Molekularbewegung in festen Körpern // Ann. Phys. – 1911. – Vol. 340. – No.9. – P. 679-694.
3. Debye P. Zur Theorie der spezifischen Wärmen // Ann. Phys. – 1912. – Vol. 344. – No.14. – P. 789-839.
4. Born M., von Karman Th. Zs. Phys. – 1912. – Vol. 13. – P. 297.
5. Born M., von Karman Th. Zs. Phys. – 1913. – Vol. 14. – P. 15.
6. Born M., Huang K. Dinamicheskaya teoriya kristallicheskikh reshotok [Dynamical theory of crystal lattices]. – M.: IIL, 1958. – 488 c. (In Russian)
7. Hooton D.J. A new treatment of anharmonicity in lattice thermodynamics I // Philos. Mag. – 1955. – Vol. 46. – P. 422-432.
8. Hooton D.J. The use of a model in anharmonic lattice dynamics // Philos. Mag. – 1958. – Vol. 49. – P. 49-54.
9. Hui J.C.K., Allen P.B. Thermodynamics of anharmonic crystals with application to Nb // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1975. – Vol. 8. – P. 2923-2935.
10. Kunc K., Martin R.M. *Ab initio* force constants of GaAs: a new approach to calculation of phonons and dielectric properties // Phys. Rev. Lett. – 1982. – Vol. 48. – No.6. – P. 406-409.
11. Baroni S., de Gironcoli S., Corso A.D. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory // Reviews of Modern Physics. – 2001. – Vol. 73. – No.2. – P**.** 515-562.
12. Souvatzis P., Eriksson O., Katsnelson M.I., Rudin S.P. Entropy driven stabilization of energetically unstable crystal structures explained from first principles theory // Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 100. – P. 095901-(1-4).
13. Hellman O., Abrikosov I.A., Simak S.I. Lattice dynamics of anharmonic solids from first principles // Phys. Rev. B – 2011. – Vol. 84. – P. 180301 - (1-4).
14. Errea I., Rousseau B., Bergara A. Anharmonic stabilization of the high-pressure simple cubic phase of calcium // Phys. Rev. Lett. – 2011. – Vol. 106. – P. 165501-(1-4).
15. Antolin N., Restrepo O.D., Windl W. Fast free-energy calculations for unstable high-temperature phases // Phys. Rev. B. – 2012. – Vol. 86. – P. 054119 - (1-5).
16. Monserrat B., Drummond N.D., Needs R.J. Anharmonic vibrational properties in periodic systems: energy, electron-phonon coupling, and stress // Phys. Rev. B. – 2013. – Vol. 87. – P. 144302 - (1-10).
17. Errea I., Calandra M., Mauri F. Anharmonic free-energy and phonon despersions from the stochastic self-consistent harmonic approximation: Application to platinum and palladium hydrides // Phys. Rev. B. – 2014. – Vol. 89. – P. 064302 - (1-16).
18. Poluektov Yu.M. Samosoglasovannoe opisanie sistemy vzaimodeistvuyushchikh fononov [Self-consistent description of a system of interacting phonons] // FNT. – 2015. – Vol. 41, No.11. – P. 1081-1090. [Low Temperature Physics. – 2015. – Vol. 41. – No.11. – P. 922-929]. (In Russian)
19. Landau L.D., Lifshic E.M. Statisticheskaya fizika. Chast' I [Statistical physics. Part I.]. – M.: Nauka, 1976. – 584 p. (In Russian)
20. Poluektov Yu.M. Pro kvantovopol'ovyi opys bagatochastynkovykh Fermi-system zi spontanno porushenymy simetriyamy [On the quantum-field description of many particles Fermi systems with spontaneously broken symmetry] // UFZh. – 2005. – Vol. 50. – No.11. – P. 1303-1315 [arXiv.org cond-mat arXiv: 1303.4913]. (In Russian)
21. Poluektov Yu.M. Model' samosoglasovannogo polya dlya prostranstvenno-neodnorodnykh Boze-sistem [Self-consistent field model for spatially inhomogeneous Bose systems] // FNT. – 2002. – Vol. 28, No.6. – S. 604-620. [Low Temperature Physics. – 2002. – Vol. 28. – No.6. – P. 429-441]. (In Russian)
22. Poluektov Yu.M. Pro kvantovopol'ovyi opys bagatochastynkovych Boze-system zi spontanno porushenymy symetriyamy [On the quantum-field description of many particles Bose systems with spontaneously broken symmetry] // UFZh. – 2007. – Vol. 52. – No.6. – SP. 578-594 [arXiv.org cond-mat arXiv: 1306.2103]. (In Russian)
23. Poluektov Yu.M. Modifitcirovannaya teoriya vozmushchenii dlya angarmonicheskogo oscillyatora [A modified perturbation theory for anharmonic oscillator] // Izvestiya vuzov. Fizika. – 2004. – Vol. 47. – No.6. – P. 74-79. [Russian physics journal. – 2004. – Vol. 47. – No.6. – P. 656-663]. (In Russian)
24. Poluektov Yu.M. O teorii vozmushchenii dlya asimmetrichnogo angarmonicheskogo oscillyatora [On the perturbation theory for asymmetric anharmonic oscillator] // Izvestiya vuzov. Fizika. – 2009. – Vol. 52, No.1. – P. 30-40. [Russian physics journal. – 2009. – Vol. 52. – No.1. – P. 33-45]. (In Russian)
25. Zaiman Dzh. Printcipy teorii tverdogo tela [Principles of solid state theory]. – M.: Mir, 1966. – 416 p. (In Russian)
26. Reislend Dzh. Fizika fononov [Phonons Physics]. – M.: Mir, 1975. – 365 p. (In Russian)
27. Kittel' Ch. Vvedenie v fiziku tverdogo tela [Introduction to Solid State Physics]. – M.: Nauka, 1978. – 792 p. (In Russian)
28. Ashkroft N., Mermin N. Fizika tverdogo tela. Tom 2 [Solid State Physics. Volume 2.]. – M.: Mir, 1979. – 422 p. (In Russian)
29. Bazarov I.P. Statisticheskaya teoriya kristallicheskogo sostoyaniya [Statistical theory of the crystal state.]. Izdatel'stvo Moskovskogo universiteta, 1972. – 118 p. (In Russian)
30. Clusius K. Zeit. Phys. Chem. – 1936. – B31. – P. 459. (In Russian)
31. Zaiman Dzh. Elektrony i fonony [The electrons and phonons]. – M.: IIL, 1962. – 488 p. (In Russian)
32. Gurevich V.L. Kinetika fononnykh system [Kinetics of phonon systems]. – M.: Nauka, 1980. – 400 p. (In Russian)
33. Akhiezer A.I., Aleksin V.F., Khodusov V.D. Gazodinamika kvazichastitc. I. Obshchaya teoriya [Gas dynamics of quasiparticles. I. General theory] // FNT. – 1994. – Vol. 20. – No.12. – P. 1199-1238. (In Russian)
34. Akhiezer A.I., Aleksin V.F., Khodusov V.D. Gazodinamika kvazichastic. II. Kineticheskie koeffitcienty v uravneniyakh perenosa kvazichastitc [Gas dynamics of quasiparticles. II. Transport coefficients in the equations of the quasiparticle transport]. // FNT. – 1995. – Vol. 21. – No.1. – P. 3-23. (In Russian)