7. Фононы и флуктуации.

Напомню, что оператор смещения

$$\vec{\varphi}(\vec{x}) = -i\sum_{\vec{q},\lambda} \vec{e}^{\,\lambda}_{\vec{q}}\, \Delta X_{\vec{q}\lambda}\left[a_{\vec{q}\lambda} + a^{+}_{-\vec{q}\lambda}\right] e^{i\vec{q}x}$$

$\Delta X_{\vec{q}\lambda} = \left(\frac{\hbar}{2MN_s\,\omega_{\vec{q}\lambda}}\right)^{1/2}$, а для продольных $\hat{q}^2 = 1$ фононов $\vec{e}^{\,L}_{\vec{q}} = \hat{q}$. Мы как раз рассмотрим коррел. продольных смещений.

Фононный пропагатор определяется так:

$$D(\vec{q}, \tau-\tau') = -\langle T_\tau \varphi_{\vec{q}}(\tau)\, \varphi^{+}_{\vec{q}}(\tau')\rangle, \text{ где}$$

$$\varphi_{\vec{q}} = a_{\vec{q}} + a^{+}_{-\vec{q}}$$

$$D(\vec{q}, \tau-\tau') = T\sum_{i\nu_n} D(q)\, e^{-i\nu_n(\tau-\tau')}, \quad D(q) = \frac{2\omega_{\vec{q}}}{(i\nu_n)^2 - \omega_{\vec{q}}^2}.$$

Наша цель сейчас — найти корреляционную ф-ю атомных смещений

$$C_T(r) = \sum_{i,j}\langle \varphi_i(r)\,\varphi_j(0)\rangle \text{ и найти её асимптотику}$$

Если $C_T(r) \to 0$ при $r \to \infty$ то значительное отклонение $u(r)$ от средн. значения не приводит к сильному изменению $u(r)$!

$$\sum_{i,j} e^{L}_{\vec{q}\,i}\left(e^{L}_{\vec{q}\,j}\right)^{*} = \sum_{i,j}(\hat{q})_i(\hat{q})_j^{\delta_{ij}} = 1$$

$$(\hat{q})_i(\hat{q})_j = \delta_{ij}(\hat{q})^2_i \qquad -\vec{e}^{\,\lambda}_{-\vec{q}} \qquad \left(\vec{e}^{\,\lambda}_{\vec{q}}\right)^{*} = -\vec{e}^{\,\lambda}_{-\vec{q}}$$

$$\vec{\varphi}^{+}(\vec{x}) = i\sum_{\vec{q},\lambda} \vec{e}^{\,\lambda *}_{\vec{q}}\, \Delta X_{\vec{q}}\left[a^{+}_{\vec{q}\lambda} + a_{-\vec{q}\lambda}\right] e^{-i\vec{q}x} = \vec{\varphi}(\vec{x})$$

$$\vec{q} \to -\vec{q}$$

95 Конбріи такой корреляпор

$$\sum_{i,j} \langle T_\tau \varphi_i(\vec r,\tau)\varphi_j^+(\vec r',\tau')\rangle = +\sum_{\vec q,\vec q'} \Delta X_{\vec q}\Delta X_{\vec q'}\, e^{i\vec q\vec r - i\vec q'\vec r'} \times$$

$$\times \langle T_\tau \varphi_{\vec q}(\tau)\varphi^+_{\vec q'}(\tau')\rangle = -\sum_{\vec q}\Delta X^2_{\vec q}\, e^{i\vec q(\vec r-\vec r')} D(\vec q,\tau-\tau'$$

$$\langle T_\tau \varphi_{\vec q}(\tau)\varphi^+_{\vec q}(\tau')\rangle\,\delta_{\vec q\vec q'}$$

$$\Delta X^2_{\vec q} = \frac{\hbar}{2MN_s\omega_{\vec q}}, \quad \hbar = 1$$

$$= -\sum_{\vec q}\frac{\hbar}{2MN_s\omega_{\vec q}} e^{i\vec q(\vec r-\vec r')}\, T\sum_{i\nu_n} e^{-i\nu_n(\tau-\tau')}\frac{2\omega_{\vec q}}{(i\nu_n)^2-\omega^2_{\vec q}}.$$

$$\sum_{\vec q} = V\int\frac{d^d q}{(2\pi)^d} \qquad \vec q\to\vec k.$$

Go to (*).

Итак,

$$C_T(r) = \sum_{i,j}\langle \varphi_i(\vec r,\tau)\varphi_j(\vec 0,\tau)\rangle = \underbrace{\frac{V}{MN_s}}_{1/\rho}\, T\sum_m\int\frac{d^d k}{(2\pi)^d}\frac{e^{ik\dots}}{\omega_m^2+\dots}$$

$1/\rho$ — плотность сред...

$$\omega_m = 2\pi m T$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{n^2+a^2} = \frac{\pi}{a}\,\mathrm{cth}(\pi a\dots$$

Изучим эту ф-ю поподробнее.

Правило для суммир. по $\omega_m$:

$$\sum_m h(\omega_m) = -\oint\sum_k \operatorname{res}\left[h(-iz)\,g(z)\right]\Big|_{z=z_k}$$

$$T\sum_m\frac{1}{\omega_m^2+\omega_k^2} = -\sum_{k=1,2}\operatorname{res}\left[\frac{1}{-z^2+\omega_k^2}\,\frac{1}{\exp(\beta z)+1}\right]_{z=z_k} =$$

$\omega_m \to -iz$

$$g(z) = \frac{\beta}{\exp(\beta z)+1}, \quad z_1 = \omega_k, \quad z_2 = -\omega_k$$

$$= \sum_i \operatorname{res}\left[\frac{1}{z^2-\omega_k^2}\frac{1}{\exp(\beta z)+1}\right]\Bigg|_{z_i} = \frac{1}{2\omega_k}\frac{1}{e^{\omega_k/T}+1} - \frac{1}{2\omega_k}\frac{1}{e^{-\omega\dots}}$$

$$\operatorname{res}_{z=a}\frac{\varphi(z)}{\psi(z)} = \frac{\varphi(a)}{\psi'(a)} \qquad \varphi(a)\neq 0,\ \psi(a)=0,\ \psi'(a\dots$$

$$= \frac{1}{2\omega_k}\left[\frac{1}{e^{\omega_k/2T}\left(e^{\omega_k/2T} - e^{-\omega_k/2T}\right)} - \frac{1}{e^{-\omega_k/2T}\left(e^{-\omega_k/2T} - e^{\omega_k/2T}\right)}\right] =$$

$$= \frac{1}{2\omega_k}\,\frac{e^{-\omega_k/2T}+e^{\omega_k/2T}}{e^{\omega_k/2T}-e^{-\omega_k/2T}} = \frac{1}{2\omega_k}\,\mathrm{cth}\,\frac{\omega_k}{2T}.$$

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{Prudnikov Mathema}\\ \text{5.1.25.4 v.1}\\ \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k^2+a^2} = \frac{1}{2a^2}+\frac{\pi}{2a}\mathrm{cth}\end{array}}$$

$$C_T(r) = \frac{1}{2\rho}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{\omega_k}\,\mathrm{cth}\,\frac{\omega_k}{2T}$$

$\frac{1}{2}\mathrm{cth}\,\frac{\omega}{2T} = \frac{1}{2}+n_B(\omega)$, $n_B(\omega)\to 0$, $T\to 0$

Таким обр. разделим вклады квантовых и тепловых флуктуаций в $C_T(r)$:

$C_T(r) = C_0(r)+\Delta C(r,T)$, где

$C_0(r) \equiv C_{T=0}(r) = \frac{1}{2\rho}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\,\frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\omega_k}$ — квант., и

$\Delta C(r,T) = \frac{1}{\rho}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\,\frac{n_B(\omega_k)}{\omega_k}\,e^{i\vec{k}\vec{r}}$.

Теперь исследуем эту ф-ю.
Нас интересует поведение при $r\to\infty$.
Поэтому в $\Delta C(r,T)$ дают вклад только малые $k\sim\frac{1}{r}$, т.е. $\omega_k \ll T$. Поэтому бозе-распредел. можно аппроксимировать как $n_B(\omega_k)\approx\frac{T}{\omega_k}$ и

$\Delta C(r,T)\approx\frac{T}{\rho}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\,\frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\omega_k^2}$ O.K. ← check! (рэлеевские)

Будем рассматривать звуковые фононы с
$\omega_k = ck$.

Сначала рассмотрим квантовые флуктуации

1) $d=3$

$$C_0^{(3)}(r) = \frac{2\pi}{(2\pi)^3\rho}\,\frac{1}{2}\int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta\; \overbrace{e^{ikr\cos\theta}}^{\int_0^\infty k^2dk}\;\frac{1}{ck} =$$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi)^3\rho}\int_0^{\infty}\frac{dk\,k^2}{ck}\,\frac{\sin kr}{kr} \sim \frac{1}{r^2},$$

где мы ввели обрезание не формально