В.Н.Глазков

Спектроскопия конденсированных сред

слайды к лекции 1

«ОБОБЩЁННАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ»

$$\vec{M}=\chi\vec{H}$$

привычное определения магнитной восприимчивости

вынуждающая сила $f(\vec{r},t)$

отклик $x(\vec{r},t)$

$$\boxed{\hat{V}=-\sum_{\vec{r}}\hat{x}_{\vec{r}}f(\vec{r},t)}$$

линейная связь среднего отклика с вынуждающей силой

$$\boxed{x(\vec{r},t)=\sum_{\vec{r}\,'}\int_{-\infty}^{t}dt'\alpha(\vec{r}\,'-\vec{r},t'-t)f(\vec{r}\,',t')}$$

однородность среды, поэтому разность координат

стационарность среды, поэтому разность времён гармоническое воздействие

$$f\left(\vec{r}\,',t'\right)=f_{\vec{k}.\,\omega}\,e^{i\left(\vec{k}\vec{r}\,'-\omega t\right)}$$

в стационарной и однородной среде даёт гармонический отклик

$$x\left(\vec{r},t\right)=x_{\vec{k},\omega}\,e^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\omega t\right)}$$

$$x_{\vec{k},\omega}=\alpha\left(\vec{k},\omega\right)f_{\vec{k},\omega}$$

обобщённая восприимчивость

$$\alpha\left(\vec{k},\omega\right)=\sum_{\vec{\rho}}\int_{-\infty}^{0}\alpha\left(\vec{\rho},\tau\right)e^{i\left(\vec{k}\vec{\rho}-\omega\tau\right)}d\tau$$

$$\alpha\left(\vec{k},\omega\right)=\alpha'\left(\vec{k},\omega\right)+i\,\alpha''\left(\vec{k},\omega\right)$$

Потери энергии

$$f=\mathrm{Re}\left\{f_{\vec{k},\omega}e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}\right\}=\frac{1}{2}\left[f_{\vec{k},\omega}e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}+f^{*}_{\vec{k},\omega}e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}\right]$$

$$\frac{dE}{dt}=\left\langle\frac{d\hat{H}}{dt}\right\rangle=\left\langle\frac{d\hat{V}}{dt}\right\rangle=-\sum_{\vec{r}}\langle\hat{x}\rangle\frac{df}{dt}=-\frac{1}{4}\sum_{\vec{r}}\left[\alpha(\vec{k},\omega)f_{\vec{k},\omega}e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}+\alpha^{*}(\vec{k},\omega)f^{*}_{\vec{k},\omega}e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}\right]\times$$
$$\times\left[i\omega f_{\vec{k},\omega}e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}-i\omega f^{*}_{\vec{k},\omega}e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}\right]$$

Угловые скобки подразумевают термодинамическое среднее, которое включает автоматически и квантовое усреднение. Это выражение необходимо дополнительно усреднить по времени, тогда остаются только независящие от времени слагаемые от произведения членов с сопряжёнными экспонентами

$$\boxed{\overline{\frac{dE}{dt}}=\frac{1}{4}i\omega\sum_{\vec{r}}\left(\alpha(\vec{k},\omega)-\alpha^{*}(\vec{k},\omega)\right)\left|f_{\vec{k},\omega}\right|^{2}=-\frac{1}{2}\omega N\alpha''(\vec{k},\omega)\left|f_{\vec{k},\omega}\right|^{2}}$$

мнимая часть обобщённой восприимчивости определяет потери энергии

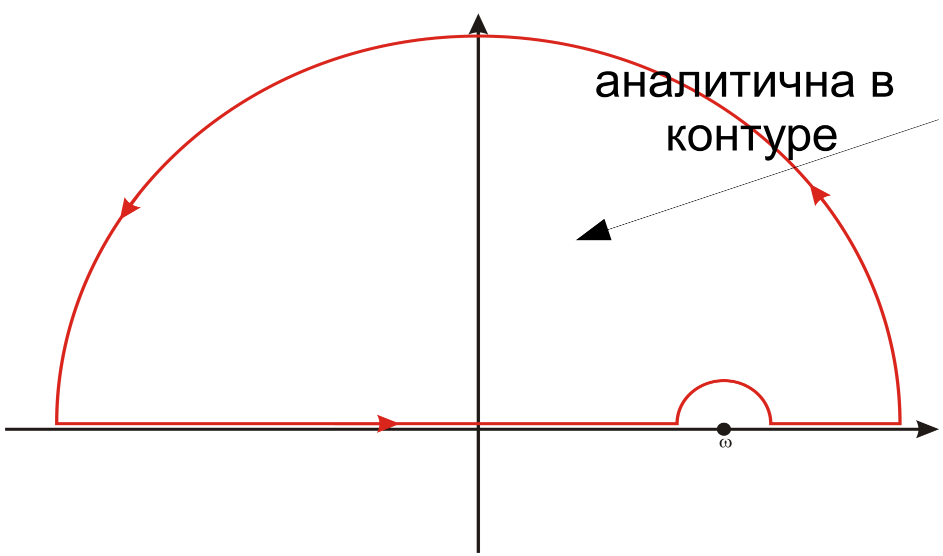
Соотношения Крамерса-Кронига

k=const, доопределим восприимчивость в верхней комплексной полуплоскости

$$\alpha(\omega)=\int_{-\infty}^{0}\alpha(\tau)e^{-i\omega\tau}d\tau$$

- На действительной оси обращается в ноль на бесконечности (отсутствие отклика на быстрое воздействие из-за инертности физической системы)
- На мнимой положительной полуоси также обращается в ноль на бесконечности (проверяется подстановкой).
- Полюсов в верхней полуплоскости нет (соответствуют нефизическому бесконечному отклику на конечное воздействие, см. также ЛандауЛифшиц-5)

$$\boxed{\oint\frac{\alpha(z)}{z-\omega}dz=0}$$



$$\frac{\alpha(z)}{z-\omega}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega'-i\pi\alpha(\omega)=0$$

$$\boxed{\begin{aligned}\alpha'(\omega)&=\frac{1}{\pi}\int\frac{\alpha''(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega'\\ \alpha''(\omega)&=\frac{1}{\pi}\int\frac{\alpha'(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega'\end{aligned}}$$

К выводу соотношений Крамерса-Кронига. Выбор контура для интегрирования. Горизонтальная часть контура смещена от действительной оси для наглядности.

Флуктуационно-диссипативная теорема.

$$\hat{V}(t) = -\sum_{\vec{r}} \hat{x}(\vec{r}) f_{\vec{k},\omega} \cos(\vec{k}\vec{r}) \cos(\omega t)$$

возмущение зависящее от времени, вызывает переходы между уровнями

вероятность перехода в единицу времени

$$w_p = \frac{\pi}{8\hbar^2} \left| x_{pn}(\vec{k}) + x_{pn}(-\vec{k}) \right|^2 \left| f_{\vec{k},\omega} \right|^2 \left(\delta(\omega_{pn} + \omega) + \delta(\omega_{pn} - \omega) \right)$$

поглощаемая мощность при таких переходах

$$Q(\vec{k},\omega) = \sum_n \rho_n \sum_p \hbar \omega_{pn} w_p = \frac{\pi \left| f_{\vec{k},\omega} \right|^2 \omega}{8\hbar} \sum_{p,n} \rho_n \left| x_{pn}(\vec{k}) + x_{pn}(-\vec{k}) \right|^2 \left(\delta(\omega_{pn} - \omega) - \delta(\omega_{pn} + \omega) \right)$$

но по определению восприимчивости

$$Q(\vec{k},\omega) = \frac{N\omega}{2} \alpha''(\vec{k},\omega) \left| f_{\vec{k},\omega} \right|^2$$

то есть, мы можем выразить восприимчивость через некоторые термодинамические средние. После упрощений получается →

$$\boxed{\begin{gathered} N\alpha''(\vec{k},\omega) = \frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle [\hat{x}(-\vec{k}), \hat{x}(\vec{k},t)] \rangle e^{-i\omega t} \, dt \\ \hat{x}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{x} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \end{gathered}}$$