

Взаимодействующие электроны в нормальных металлах.

(Конспект лекций.)

В.Т. Долгополов

Черноголовка (2008)

Оглавление.

I. Введение.	Стр.4
1.1 Зачем я это делаю.	4
1.2 В чем, собственно, проблема.	4
1.3 Фазовые переходы, теорема Кона-Латтинджера	6
II Задача многих тел и теория ферми-жидкости Ландау.	7
2.1 Постановка задачи многих тел.	7
2.2 Метод канонических преобразований.	8
2.3 Энергия взаимодействия в теории ферми жидкости Ландау.	9
2.4 Локальная энергия квазичастиц.	11
2.5 Эффективная масса квазичастиц.	12
2.6 Спиновая восприимчивость.	13
2.7 Кинетическое уравнение для квазичастиц.	14
2.8 Плотность потока квазичастиц.	15
2.9 Термодинамическая плотность состояний и скорость звука в системе взаимодействующих фермионов.	16
2.10 Нулевой звук в ферми-жидкости.	17
2.11 Идея о конденсации фермионов.	18
III Та часть квантовой механики, которая в дальнейшем будет широко использоваться.	20
3.1 Золотое правило Ферми.	20
3.2 Квантовая механика в представлении Дирака.	22
3.3 Вторичное квантование в системе Ферми-частиц.	23
3.4 Гамильтониан в представлении чисел заполнения.	25
3.5 Электроны и дырки.	26
3.6 Операторы поля частиц.	27
IV Первая попытка вычислить энергию основного состояния в нормальной системе и разобраться с возбуждениями в сверхпроводниках.	28
4.1 Приближение Хартри-Фока.	28
4.2 Модель Бардина Купера-Шриффера.	29
V Методы описания систем из взаимодействующих ферми-частиц.	32
5.1 Концепция пробной частицы.	32
5.2 Динамический форм-фактор и корреляции плотности.	33
5.3 Статический форм – фактор.	34
5.4 Функция линейной реакции.	35
5.5 Вычисление функции реакции плотность-плотность.	36
5.6 Связь функции реакции плотность-плотность с динамическим форм-фактором.	37
5.7 Связь функции реакции плотность-плотность с термодинамической плотностью состояний.	37
5.8 Вычисление динамического форм-фактора газа невзаимодействующих ферми-частиц в случае малых передач импульса.	38
5.9 Динамический форм-фактор ферми-жидкости: структура вкладов.	39
VI . Заряженные ферми-жидкости.	40
6.1 Общие замечания	40
6.2 Статическое экранирование, приближение Томаса-Ферми.	41
6.3 Динамическое экранирование и плазменные колебания.	42
6.4 Диэлектрическая реакция на электрическое поле.	43
6.5 Уравнение Ландау-Силина.	44
6.6 Диэлектрическая проницаемость и функция реакции плотность-плотность.	45
VII. Микроскопические теории линейного отклика.	46
7.1 Диэлектрическая проницаемость в приближении Хартри-Фока.	46
7.2 Парная корреляционная функция и эффективная масса квазичастиц в приближении Хартри-Фока.	47
7.3 Диэлектрическая проницаемость в приближении хаотических фаз.	48
7.4 Замечание о правилах сумм.	49
7.5 Хаббардовские поправки.	49

VIII Отклик ферми-систем на однородное электрическое поле.	50
8.1 Гамильтониан взаимодействия.	50
8.2 Формула Кубо –Гринвуда	51
8.3 Соображения Таулесса и скейлинговая гипотеза.	52
IX. Практическое использование изученной техники	53
9.1. Вычисление диэлектрической проницаемости двумерного электронного газа в приближении хаотических фаз.	53
9.2 Рассеяние двумерных электронов на кулоновских центрах при $T=0$.	57
9.3 Температурная зависимость времени упругой релаксации в двумерных электронных системах.	59
Литература	61

I. Введение.

*Огромный мир открыт и манит
Бьет конь копытом...*

Н. Гумилев 1911.

1.1 Зачем я это делаю?

Мне всегда хотелось рассказать о свойствах электронных систем без пренебрежения взаимодействием между электронами. Рассказать экспериментаторам так, как это понимает экспериментатор. Попутно я попытаюсь объяснить, как можно читать и понимать «птичий язык», используемый теоретиками. Мой рассказ не будет оригинальным: на эту тему написано достаточное количество книг (см., например [1-4]), однако, как показывает опыт, физики-экспериментаторы читают эти книги без особой охоты и содержания книг не усваивают. Причин на то, на мой взгляд, две: во-первых, книги и не ориентированы на экспериментаторов, в них присутствует большая или меньшая строгость, зато отсутствует качественное представление результатов. Во-вторых, зачастую, у экспериментаторов нет мотивации к чтению подобных книг, они не понимают, в каких местах ранее полученные знания не составляют прочной основы для интерпретации эксперимента. Чтобы прилагаемые усилия не казались напрасными, я попытаюсь в первой части лекций рассмотреть взаимодействующий электронный газ сравнительно просто и старомодно, без привлечения всяких диаграммных трюков, и лишь после этого, во второй части курса, перейти к более современным методам.

Для понимания текста теоретической статьи нужно освоить, как минимум, два новых языка, выходящих за пределы традиционной квантовой механики: язык вторичного квантования и диаграммную технику. Для освоения каждого из них требуются значительные усилия. Экспериментаторы, не склонные к излишним усилиям, утешают себя рассуждением такого типа: «Для меня достаточно качественного понимания, а строгие расчеты - это дело теоретиков.» В результате сложилась парадоксальная ситуация, при которой большая часть экспериментаторов не в состоянии прочесть теоретическую статью и ограничивается аннотацией, введением и заключением. При этом масса экспериментаторов подразделяется на два сообщества. Члены первого из них твердо уверены, что никакие сложные вычисления в принципе не нужны, все можно понять «на пальцах» или, в крайнем случае, пользуясь теорией возмущений в двух нижних порядках. Вторая часть сообщества экспериментаторов, напротив, склонна верить теоретикам (особенно с заслуженными именами) буквально до последней запятой, не обращая внимания ни на приближенность модели, ни на принципиальную неточность использованных методов. Эта часть, в случае расхождения эксперимента с теорией, всегда готова списать эти расхождения на неточность или неудачность эксперимента и полностью лишена критического отношения к теории. Мне бы хотелось надеяться, что экспериментатор, прослушавший этот курс, будет понимать проблемы, стоявшие перед теоретиком, и сможет посмотреть критически на качество решения этих проблем.

Предлагаемый курс является, в сущности, изложением теории на общедоступном языке, поэтому в нем неизбежно будет присутствовать довольно большое количество формул, мало экспериментальных данных и практически не будет сравнения теории с экспериментом. Хотя формулы не будут сложными, предполагается, что читатель усвоил университетский курс квантовой механики и знаком с физикой металлов.

Опыт предыдущих поколений показывает, что те разделы физики, которые еще сравнительно недавно относились исключительно к области теории, постепенно были переведены на общедоступный язык и перешли в разделы общей физики. У меня нет сомнений, что и предмет этого курса лекций рано или поздно ожидает та же судьба. За мной, читатель!

I.2. В чем, собственно, проблема.

До сих пор мы всегда рассматривали электроны в металле как невзаимодействующий ферми-газ. Мы предполагали, что ионные остовы и электроны в среднем образуют почти электронейтральную среду, в которой движется пробный электрон. Насколько справедливо подобное приближение? При достаточно низких температурах параметром, характеризующим кинетическое поведение электронов, является фермиевская энергия ϵ_F . Чтобы можно было пренебречь взаимодействием между электронами, нужно, чтобы эта энергия существенно превышала энергию взаимодействия на характерном расстоянии между частицами. Легко догадаться, что при кулоновском взаимодействии между частицами это случится в области больших концентраций электронов. В двумерном случае, например, условие слабого взаимодействия выглядит следующим образом:

$$(p_F)^2 = 2\pi\hbar^2 N_s; \quad \epsilon_F = (\pi\hbar^2 N_s)/m > e^2 N_s^{1/2}/\epsilon_0, \quad (1.1)$$

где p_F – фермиевский импульс, m – эффективная масса частиц, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость, а N_s – число электронов на единице площади. Из (1.1) следует, что пренебрежение эффектами межэлектронного взаимодействия возможно при

$$N_s \gg (m e^2 / \pi\hbar^2 \epsilon_0)^2 \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}. \quad (1.2)$$

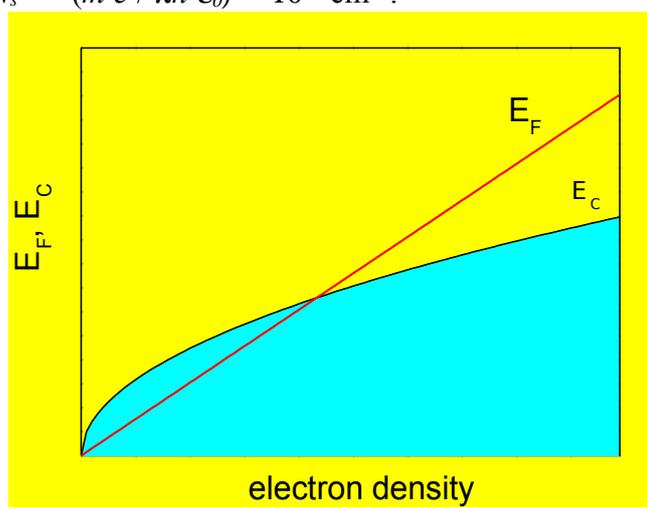


Рис.1.

Графически соревнование между фермиевской энергией и характерной энергией взаимодействия представлено на рис.1. Многочисленные эксперименты выполнены при электронных концентрациях меньших, чем характерное значение (1.2), соответствующее точке пересечения кривых на рис.1. В малых концентрациях, где взаимодействие сильное, мы можем ожидать особенностей в рассеянии электронов на примесях и друг на друге, больших корреляционных эффектов, появления новых фаз, наконец.

Обычно для того, чтобы численно охарактеризовать взаимодействие, используют безразмерный параметр r_s равный отношению радиуса Вигнера-Зейтца $[(\pi N_s)^{-1/2}$ в двумерном случае] к боровскому радиусу $a_B = \epsilon_0 \hbar / (2\pi m e^2)$. Легко убедиться, что этот параметр описывает отношение характерной кулоновской энергии к энергии Ферми. В современных двумерных электронных системах в полупроводниковых структурах сравнительно легко достигаются значения $r_s = 10$, в то время как условие (1.1) требует $r_s \ll 1$.

Такая же ситуация и в нормальных трехмерных металлах, где r_s попадает в интервал от двух до десяти (Рис.2.) Другими словами, использованные до сих пор версии рассмотрения электронного газа в металлах не имеют, в сущности, области применения, а взаимодействие между электронами должно играть решающую роль в кинетических

эффектах. Почему же до сих пор мы этого не замечали? Возможно ли радикальное проявление взаимодействия в эксперименте? Ответы на эти вопросы мы и постараемся сформулировать ниже.

Теории пока удалось успешно освоить только две области на оси r_s – область высоких электронных плотностей и область больших r_s . В последнем случае взаимодействие столь велико, что теряется пространственная однородность, и электроны образуют периодическую структуру, известную как вигнеровский кристалл. Самая интересная область, соответствующая сильному взаимодействию еще не приводящему к кристаллизации пока не исследована ни экспериментально, ни теоретически.

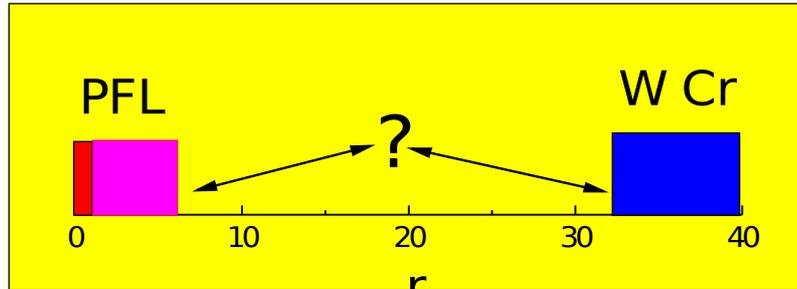


Рис.2.

Область PFL -парамагнитная ферми-жидкость, фиолетовая область –нормальные металлы, знаком вопроса отмечена область, свойства которой в настоящее время известны плохо, область WCr –вигнеровский кристалл.

Задача: На рис. 2а схематически изображен электронный спектр (схема долин) объемного кремния. Если из кремния (111) приготовить полевой транзистор, то спектр двумерного электронного газа будет состоять из шести эквивалентных долин, каждая из которых определит анизотропную эллиптическую ферми-поверхность с величинами эффективной массы на главных направлениях $0.19m_0$ и $0.674 m_0$, где m_0 –масса свободного электрона. Выписать для этого случая аналог соотношения (1.2) и оценить соответствующую плотность электронов.

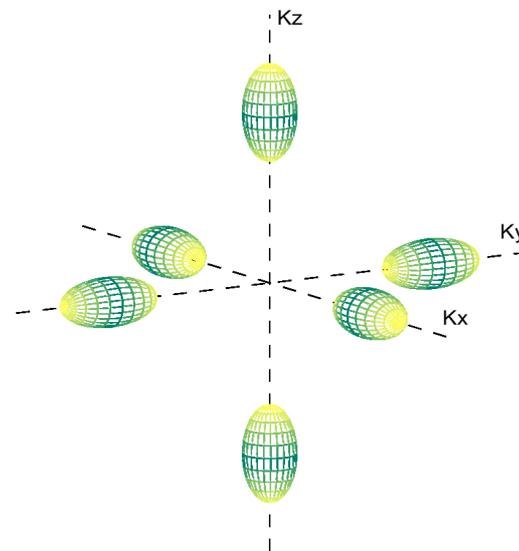


Рис. 2а.

1.3 Фазовые переходы, теорема Кона-Латтинджера

При приближении температуры к нулю всякая система стремится к основному состоянию. В случае, если основное состояние не вырождено, к нулю стремится и энтропия системы, т.е. система упорядочивается. Этот процесс может идти различными путями. Например, в системе без взаимодействия между частицами, соединенной с

внешним резервуаром, каждая их частиц занимает наинизший возможный уровень. Пусть, для иллюстрации, мы имеем дело с двухуровневой системой частиц с разностью энергий между уровнями Δ . (Двухуровневые молекулы или “туннельные” состояния для локализованных электронов).

Будем отсчитывать энергию от нижнего уровня. Тогда энергия системы равна

$$E = N \int_0^{\infty} \varepsilon (\exp(\varepsilon - \varepsilon_F) / kT + 1)^{-1} d\varepsilon = \Delta N (\exp(\Delta - \varepsilon_F) / kT + 1)^{-1}. \quad (1.3)$$

С другой стороны, число электронов на верхнем уровне должно совпадать с числом пустых мест на нижнем, следовательно:

$$\varepsilon_F = \Delta / 2.$$

Отсюда найдем теплоемкость

$$C = dE/dT = 2Nk (\Delta/2kT)^2 \exp(\Delta/2kT) / (1 + \exp(\Delta/2kT))^2. \quad (1.4)$$

В теплоемкости образуется гладкий пик (аномалия Шоттки), свидетельствующая об упорядочении.

В системах с взаимодействием упорядочение может происходить совершенно иначе, с помощью фазового перехода. Детектировать переход можно, как и в приведенном примере, по особенностям теплоемкости или ее производных. Обычные (термодинамические) фазовые переходы обусловлены тепловыми флуктуациями.

В 1956 году Коном и Латтинджером была сформулирована следующая теорема [5]:
Система слабо взаимодействующих фермионов независимо от вида взаимодействия не может оставаться в состоянии нормальной жидкости вплоть до абсолютного нуля температур.

Для систем пониженной размерности (1D и 2D) удалось получить ряд точных результатов, интересных для нас как иллюстрация к различию между системой упорядоченной и системой, претерпевающей фазовый переход. Утверждается, в частности, (см. [6]), что в одномерной системе с конечным радиусом взаимодействия между частицами дальний порядок существовать не может. Последнее не означает, что в такой системе по мере понижения температуры невозможно качественное изменение физических свойств, т.е. фазовый переход.

В последние годы внимание исследователей было привлечено к тому факту, что кроме рассмотренных выше термодинамических фазовых переходов (детектируемых по особенностям теплоемкости или ее производных) могут быть реализованы переходы между различными фазами при нулевой температуре. Такие фазовые переходы, в отличие от термодинамических, не связаны с тепловыми флуктуациями. Единственная возможность изменить состояние системы при $T = 0$ это квантовые флуктуации. Давайте разберемся с ними несколько более подробно. Повторные измерения какой-либо физической величины, оператор которой не коммутирует с гамильтонианом системы, будут приводить к различным результатам, даже если система находится в стационарном состоянии и при нулевой температуре. Если таких повторных измерений проводится много, то можно исследовать дисперсию, а в периодических измерениях – спектральную плотность квантовых флуктуаций. Обе эти величины будут определяться спектром возбужденных состояний исследуемой системы. При конечной температуре, превышающей характерную энергию между стационарными состояниями, главной причиной, приводящей к получению разных результатов при повторных измерениях, будет конечная вероятность найти систему в различных стационарных состояниях, т.е. тепловые флуктуации.

Чтобы достичь квантового фазового перехода, необходимо непрерывно менять свойства системы с помощью изменения какого-либо параметра (r_s , например). Таким образом, в области r_s , превышающих значения, типичные для нормальных металлов, но меньших, чем необходимые для вигнеровской кристаллизации, мы можем ожидать появления как термодинамических, так и квантовых фазовых переходов. Ситуация еще более усложняется в присутствии беспорядка. Наличие потенциального рельефа, приводящее в области больших электронных плотностей только к рассеянию, при малых плотностях способно локализовать электроны и, тем самым, ввести новые границы на рис.2.

На этом месте внимательный слушатель должен был бы прервать меня словами: «В нормальных металлах плотность электронов - это не тот параметр, который легко менять в эксперименте.» Утверждение абсолютно правильное в случае трехмерных металлов и совершенно неверное в случае двумерных электронных систем в полупроводниковых структурах. Как раз, наоборот, в последнем случае электронная плотность является одним из наиболее просто управляемых параметров.

II. Задача многих тел и теория ферми-жидкости Ландау.

*Наши Август смотрит сентябрем-
Н.Языков 1823.*

2.1 Постановка задачи многих тел.

Представим себе, что мы имеем дело с системой, составленной из большого числа частиц. Вопрос, который мы должны решить, состоит в предсказании поведения этой системы, зная, как ведут себя отдельные частицы. Естественно, что система невзаимодействующих частиц особых трудностей не представляет. В ней каждая из частиц ведет себя так, будто остальные частицы влияют на ее движение исключительно через акты рассеяния. Фактически, мы имеем дело в этом случае не с одной задачей многих тел, а с многими задачами одного тела в пространстве, хаотически заполненном рассеивающими центрами.

Проблемы возникают после включения взаимодействия между телами. Движение частиц перестает быть независимым. (Отметим специально, что в системе невзаимодействующих фермионов движение отдельных частиц также не было независимым, поскольку благодаря неразличимости частиц волновая функция системы была антисимметризована по всем частицам и в системе имелись так называемые кинематические корреляции. Тем не менее, для исследования свойств системы невзаимодействующих фермионов было достаточно знания одночастичной задачи.) В многочастичной задаче необходимо учитывать влияние каждой из частиц на поведение всех остальных.

Задача многих тел состоит в изучении влияния взаимодействия между частицами на поведение составленной ими системы.

Возникает естественный вопрос, собственно какое количество частиц соответствует слову «много»? Я не могу удержаться от того, чтобы не привести длинную цитату из книги [2]. «Лица, интересующиеся точными решениями, могут найти ответ на этот вопрос, заглянув в историю. Для ньютоновской механики XVIII века задача трех тел была неразрешимой. С рождением общей теории относительности (где-то около 1910 г.) и квантовой электродинамики (1930 г.) стали неразрешимыми задачи двух тел и одного тела. В современной квантовой теории поля неразрешимой оказывается задача нуля тел (вакуума). Так что если мы интересуемся точными решениями, то ни одного тела – это уже много.»

2.2 Метод канонических преобразований.

Один из наиболее удачных методов решения многочастичных задач состоит в каноническом преобразовании переменных таким образом, чтобы член, описывающий взаимодействие упростился, стал малым или исчез бы вовсе. Этот метод всем хорошо знаком на примере квантовой задачи о звуковых колебаниях в твердотельной решетке (фононах). Вспомним, как это делалось. В исходной задаче мы имели решетку сильно взаимодействующих атомов. Гамильтониан состоял из кинетической части и потенциальной, в которой запутывались координаты различных атомов. В результате разложения на бегущие плоские волны и введения обобщенных координат, гамильтониан представлялся в виде набора невзаимодействующих гармонических осцилляторов. Задача многих тел сводилась к многим задачам для одного тела.

Взаимодействие между частицами системы является «слабым», если оно приводит к небольшому возмущению решения для невзаимодействующей системы и его можно учесть в конечном порядке обычной теории возмущений. В противном случае, взаимодействие будет «сильным». (Даже слабое притяжение между электронами, приводящее к возникновению сверхпроводимости следует по предложенной шкале отнести к разряду «сильных» взаимодействий.) К сожалению, сильным является и кулоновское взаимодействие между электронами. Попытка вычислить энергию основного состояния системы электронов, взаимодействующих по Кулону, по теории возмущений дает следующий результат:

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + \infty + \infty + \infty + \dots$$

Бесконечности возникают во всех порядках теории возмущений, выше первого!

Для большинства систем многих тел трюк, аналогичный проделанному с атомами решетки, удастся воспроизвести в том смысле, что оказывается возможным перейти от системы сильно взаимодействующих исходных частиц к совокупности почти независимых возбуждений над основным состоянием. Эти возбуждения очень похожи на реальные частицы и называются квазичастицами. (Если речь идет об электронах в металле, то уже исходные электроны не являются истинными частицами – в них вложено взаимодействие с решеткой. У них не настоящий импульс и сложная ферми-поверхность. Сейчас мы обсуждаем квазичастицы следующего поколения, которые возникают из исходных в результате взаимодействия между самими частицами.)

Рассмотрим какое-либо состояние идеальной системы невзаимодействующих фермионов. Будем медленно, “адиабатически”, включать взаимодействие между частицами. В итоге, после включения мы получим одно из собственных состояний системы с взаимодействием. Не ясно, все ли собственные состояния системы с взаимодействием могут быть получены таким образом. Например, в сверхпроводниках с помощью указанной процедуры не может быть получено основное состояние. Будем говорить, что система взаимодействующих фермионов является “нормальной”, если с помощью указанной процедуры могут быть получены все ее состояния из собственных состояний системы невзаимодействующих частиц.

Теперь добавим к идеальной системе частицу с импульсом \mathbf{p} . После добавления новой частицы будем включать взаимодействие. Получаем возбужденное состояние системы взаимодействующих частиц с импульсом \mathbf{p} . (Импульс, естественно, сохраняется при включении взаимодействия.) Когда взаимодействие включено полностью, частица будет двигаться вместе с тем возмущением, которое она внесла в окружающие фермионы. “Одетую” частицу мы и будем называть квазичастицей в неидеальной системе. Наша ферми система теперь может быть рассмотрена как ферми-вакуум, в который попадут все частицы, соответствующие основному состоянию, плюс одна квазичастица на фоне вакуума.

С помощью той же самой процедуры можно получить и пустое место с импульсом \mathbf{p} в системе взаимодействующих частиц. Основная проблема заключается в том, что так ввести квазичастицы можно только вблизи ферми-уровня: взаимодействие должно быть включено медленно, а у частиц конечное время жизни (расходящееся при $\epsilon = \epsilon_F$).

Частицы в облаке находятся в виртуальных состояниях. При столкновениях между рассматриваемой частицей и частицами ферми-вакуума энергия, как правило, не сохраняется. Однако, несмотря на виртуальность и, следовательно, конечное время жизни каждой из частиц облака, само оно представляет собой абсолютно реальный объект.

2.3 Энергия взаимодействия в теории ферми жидкости Ландау.

Изложенные выше соображения помогают понять логику построения теории ферми жидкости Ландау. Действительно, представим себе, что преобразование, приводящее к введению небольшого количества квазичастиц на фоне ферми-вакуума нам не известно, но, в принципе, возможно. Возбуждения взаимодействуют только между собой (взаимодействие с вакуумом уже учтено самим введением квазичастиц), что и приводит к «жидкостному» поведению. Мы можем рассматривать систему квазичастиц феноменологически, вводя некоторые неизвестные параметры, которые могут быть найдены из эксперимента. Строго говоря, из-за конечности времени жизни, квазичастицы определены только вблизи ферми-поверхности, а их импульс близок к k_F . Тем не менее, поскольку свойства ферми-вакуума никак не будут в дальнейшем использованы, мы можем себе представить, что и вакуум составлен из тех же квазичастиц. Другими словами, мы, следуя Ландау, можем положить, что полное число квазичастиц в системе равно числу исходных частиц. В основном состоянии заполнены все квантовые состояния с импульсами, меньше фермиевского, который в случае трех измерений связан с числом частиц в системе обычным соотношением

$$k_F = (3\pi^2 N/\Omega)^{1/3}. \quad (2.1)$$

Здесь N/Ω - плотность частиц. В основе теории Л.Д. Ландау лежит предположение о том, что спектр возбуждений ферми-жидкости строится также как спектр возбуждений идеального ферми-газа. Возбужденное состояние может быть построено путем переноса одной из частиц из-под ферми-уровня наружу. При каждом таком переносе возникает возбуждение над ферми уровнем и «дырка» под ним. Энергию таких возбуждений удобно отсчитывать от ферми-уровня: энергию электронов вверх, энергию дырок – вниз. В результате возникает спектр квазичастичных возбуждений, показанный на рис.3. Соотношение (2.1) можно интерпретировать как условие равенства числа «частиц» числу «дырок». Для функции распределения квазичастиц $n(\mathbf{k})$ это означает:

$$\int \delta n d^3\mathbf{k} = 0. \quad (2.2)$$

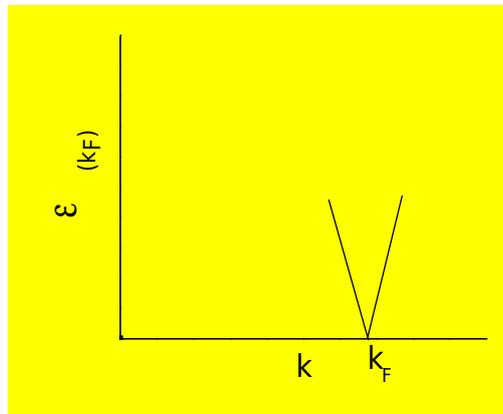


Рис. 3.

Систему квазичастиц будем считать подключенной к резервуару так, что задан уровень химического потенциала μ . Величину μ мы всегда можем найти в конце вычислений, приравняв число квазичастиц числу исходных частиц.

Перейдем теперь непосредственно к ландауовской ферми-жидкости. Будем рассматривать квазиклассическую систему частиц с короткодействующим взаимодействием между ними. Свободная энергия системы F запишется через внутреннюю энергию E и число частиц N :

$$F - F_0 = E - E_0 - \mu (N - N_0), \quad (2.3)$$

где E_0 и N_0 внутренняя энергия и число частиц в основном состоянии.

Разложим свободную энергию по степеням δn_p (здесь и далее мы не будем делать различий между волновым числом электрона k и его импульсом p). На первый взгляд кажется, что в низжайшем порядке разложение должно иметь вид

$$F - F_0 = \sum_p (\epsilon_p - \mu) \delta n_p$$

Легко убедиться в том, что этот член является квадратичным по отклонению от равновесия. Действительно, обозначив отклонение от равновесия символом δ , получим $\delta n_p \propto \delta$ и $(\epsilon_p - \mu) \propto \delta$. Следовательно в разложении должны быть учтены и другие члены второго порядка малости:

$$F - F_0 = \sum_p (\epsilon_p - \mu) \delta n_p + 1/2 \sum_{p,p'} f_{pp'} \delta n_p \delta n_{p'} + O(\delta^3) \quad (2.4)$$

Функция $f_{pp'}$ является второй вариационной производной, значит

$$f_{pp'} = f_{p'p}. \quad (2.5)$$

Для «нормальных систем $f_{pp'}$ непрерывна на ферми-поверхности, поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать только значение этой функции на ферми-поверхности. В действительности, выражения (2.4) и (2.5) должны содержать еще и проекцию спина. Из инвариантности энергии по отношению к обращению времени следует:

$$f_{p\sigma, p'\sigma'} = f_{-p-\sigma, -p'-\sigma'}. \quad (2.6)$$

Ферми поверхность сама инвариантна относительно замены $p \rightarrow -p$. Следовательно,

$$f_{p\sigma, p'\sigma'} = f_{p-\sigma, p'-\sigma'}. \quad (2.7)$$

Мы обнаружили, что f зависит только от относительной ориентации спинов частиц и имеет две компоненты, соответствующие параллельной и антипараллельной ориентациям.

$$\begin{aligned} f_{pp'}^{\uparrow\uparrow} &= f_{pp'}^s + f_{pp'}^a \\ f_{pp'}^{\uparrow\downarrow} &= f_{pp'}^s - f_{pp'}^a \end{aligned} \quad (2.8)$$

Здесь введены симметричная по спину $f_{pp'}^s$ и антисимметричная $f_{pp'}^a$ части взаимодействия.

В нашей литературе часто используют

$$f_{p\sigma, p'\sigma'} = \Phi_{pp'} + \sigma\sigma' \Psi_{pp'}$$

где $\Psi_{pp'} = 4 f_{pp'}^a$.

Для изотропной системы функции $f_{pp'}^{s,a}$, зависят только от угла ξ между импульсами \mathbf{p} и \mathbf{p}' :

$$f_{pp'}^{s,a} = \sum_l f_l^{s,a} P_l(\cos \xi), \quad (2.9)$$

где $P_l(\cos \xi)$ – полиномы Лежандра. Обычно коэффициенты $f_l^{s,a}$ приводят к безразмерному виду, умножив их на **плотность состояний квазичастиц** на ферми-уровне:

$$v f_l^{s,a} = [m^* p_F / (\pi^2 \hbar^3)] f_l^{s,a} = F_l^{s,a} \quad (2.10)$$

2.4 Локальная энергия квазичастиц.

Для решения многих вопросов, например, для рассмотрения транспорта в системе взаимодействующих частиц, удобно пользоваться величинами, учитывающими наличие возбуждений. В этом параграфе мы введем пару таких величин.

Зададим некоторое распределение квазичастиц δn_p и добавим в систему еще одну квазичастицу с импульсом \mathbf{p} . В результате этого действия свободная энергия вырастет на

$$\underline{\varepsilon}_p - \mu = \varepsilon_p - \mu + \sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'}, \quad (2.11)$$

Здесь штрих у знака суммы означает, что суммировать нужно по всем импульсам, за исключением \mathbf{p} . Величину $\underline{\varepsilon}_p$ будем называть локальной энергией квазичастиц.

Определим величину n_p как функцию распределения для единичного объема около точки \mathbf{r} . Локальная энергия квазичастиц будет функцией координат и времени. Полная энергия $E(n(\mathbf{r}, t))$ представляет собой функционал от функции распределения:

$$E = E_0 + \sum_p \int d^3r \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \delta n_p(\mathbf{r}) + 1/2 \sum_{p, p'} \int d^3r d^3r' f(p, \mathbf{r}, p', \mathbf{r}') \delta n_p(\mathbf{r}) \delta n_{p'}(\mathbf{r}'). \quad (2.12)$$

Если система инвариантна относительно пространственных переносов, то $\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{p})$, а $f(p, \mathbf{r}, p', \mathbf{r}')$ может зависеть только от разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. В случае короткодействующего взаимодействия (как, например, в He^3):

$$E = E_0 + 1/2 \sum_{p, p'} f_{pp'} \delta n_p(\mathbf{r}) \delta n_{p'}(\mathbf{r}); \quad f_{pp'} = \int d^3r f(p, \mathbf{r}, p', \mathbf{r}'). \quad (2.13)$$

Избыточная энергия является локальной функцией координат.

Если возмущение системы зависит от координаты, на нашу квазичастицу будет действовать сила:

$$-\nabla_r \underline{\varepsilon}_p = -\nabla_r \left(\sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'} \right). \quad (2.14)$$

Откуда видно, что динамика отдельной квазичастицы определяется ее локальной энергией.

Определим распределение локального равновесия как

$$\tilde{n}^0 = n^0(\underline{\varepsilon}_p - \mu), \quad (2.15)$$

где n^0 - функция фермиевского распределения. (Напомним, что истинное равновесное распределение рассчитывается как распределение, которое может быть реализовано максимальным числом способов при фиксированной температуре. К вопросу, как показать, что (2.15) задает равновесное распределение при конечной температуре, мы вернемся в пункте 2.9.). Определим также распределение истинного равновесия

(распределение в отсутствии возбуждений), как $n^0(\epsilon_p - \mu)$. Отклонения от локального равновесия и отклонение от истинного равновесия связаны между собой:

$$\delta \tilde{n} = n_p - \tilde{n}_p^0 = n_p - n_p^0 + n_p^0 - \tilde{n}_p^0 = n_p - n_p^0 - (\partial n_p^0 / \partial \epsilon_p)(\epsilon_p - \epsilon_p^0). \quad (2.16)$$

Откуда следует:

$$\delta n_p = \delta \tilde{n}_p + (\partial n_p^0 / \partial \epsilon_p) (\sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'}). \quad (2.17)$$

2.5 Эффективная масса квазичастиц.

Как мы помним, существуют различные определения эффективной массы квазичастиц. В случае ферми-жидкости Ландау эффективная масса должна быть задана через параметры, определенные на ферми-поверхности. Следуя Ландау, определим эффективную массу квазичастицы как отношение ее импульса к групповой скорости

$$m^* = p/v. \quad (2.18)$$

Не прозевайте: Данное выше определение совершенно не совпадает с определением через тензор обратных масс, использовавшееся нами ранее.

По определению поток **частиц** равен $\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{p}_i / m$. где \mathbf{p}_i – импульс i –той частицы, а m –ее масса: $\mathbf{J} = \mathbf{P} / m$. Здесь \mathbf{P} – суммарный импульс **частиц**. Рассмотрим состояние системы, у которой ферми-поверхность смещена на \mathbf{q} и в которой имеется избыточная частица с импульсом $\mathbf{p} + \mathbf{q}$ (см. рис. 4). Предполагается, что $q \ll p \sim p_F$. Смещение ферми-поверхности будет устранено, если мы перейдем в систему, движущуюся со скоростью \mathbf{q} / m . В движущейся системе координат взаимодействие нашей частицы с избыточным импульсом и остальными частицами системы не меняется, а ее кинетическая энергия изменится на величину:

$$\delta E = (\mathbf{q}\mathbf{p} / m + \mathbf{q}^2 / 2m) = \mathbf{q}\mathbf{j} + O(q^2),$$

Таким образом,

$$j_\alpha = \partial E / \partial q_\alpha,$$

Где δE – разность энергий частицы в покоящейся системе координат (в которой импульс частицы равен \mathbf{p}) и в движущейся (с импульсом $\mathbf{p} + \mathbf{q}$). В соответствии с нашими рассуждениями, эта разность может быть найдена в терминах квазичастиц. С этой целью мы

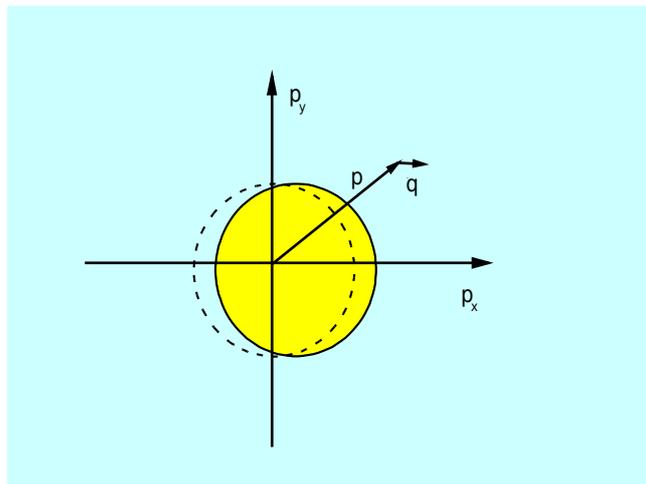


Рис.4.

сначала увеличим импульс квазичастицы на \mathbf{q} (что даст вклад в энергию $\mathbf{q} \nabla_{\mathbf{p}} \epsilon_p$, а потом сдвинем ферми-поверхность.

$$\delta E = \mathbf{q} \nabla_{\mathbf{p}} \epsilon_p + \sum_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}'}; \quad \delta n_{\mathbf{p}} = -\mathbf{q} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \cdot (\partial n^0 / \partial \epsilon_{\mathbf{p}}). \quad (2.19)$$

$$\mathbf{j}_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/m = \mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{p}'} |\mathbf{v}_{\mathbf{p}'}| \cos \theta f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} (\partial n^0 / \partial \epsilon_{\mathbf{p}'}). \quad (2.20)$$

суммирование по \mathbf{p}' в (2.20) заменим интегрированием, имея в виду, что $(\partial n^0 / \partial \epsilon_{\mathbf{p}'}) = -\delta(\epsilon_F - \epsilon_{\mathbf{p}'})$ и тот факт, что при интегрировании по углам от $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ останется симметричный член с $l=1$ (пропорциональный $\cos \theta$). Интегрируя по углам $\cos^2 \theta$ с учетом $\mathbf{v}_F = \mathbf{p}_F/m^*$, получим:

$$m^*/m = 1 + 1/3 F^s_1. \quad (2.21)$$

Как мы видели, эффективная масса квазичастиц изменена за счет того, что поток, который несет квазичастица, складывается из двух частей: собственного потока и потока увлечения. Плотность потока частиц и плотность потока квазичастиц совпадают (в заряженных системах заряды частицы и квазичастицы одинаковы и одинаковы переносимые ими токи).

Задача: как выглядит связь между m^ и m в двумерном случае?*

Задача: Пусть эффективная масса квазичастиц расходится при некоторой плотности ферми-жидкости. Найти абсолютную величину коэффициента взаимодействия F^s_1 при этой концентрации.

2.6 Спиновая восприимчивость.

Поместим ферми-жидкость в постоянное и однородное магнитное поле H и вычислим парамагнитный спиновый момент.

Частица со спином $s = \pm 1/2$ обладает энергией $-g\mu_B s H$, где g – фактор Ланде затравочных частиц, $\mu_B = e\hbar/4\pi m c$ – магнетон Бора, s – проекция спина. Химический потенциал двух подсистем частиц (с положительной и отрицательной проекциями спина на направление магнитного поля) остается, естественно общим, а ферми-поверхности изменяются: одна из них разбухает, а другая уменьшается в диаметре. Так как химический потенциал равен локальной энергии квазичастиц на ферми-поверхности (см. 2.15), равновесное распределение в присутствии магнитного поля имеет вид:

$$n_{ps}(H) = n^0(\underline{\epsilon}_p - \mu - g\mu_B s H), \quad (2.22)$$

что может быть формально переписано для каждой из проекций спина, как распределение со сдвинутым значением химического потенциала:

$$n_{ps}(H) = n^0(\underline{\epsilon}_p - \mu - \delta\mu), \quad (2.23)$$

где $\delta\tilde{n}_p = -\delta\mu (\partial n^0 / \partial \epsilon_p) = -g\mu_B s H (\partial n^0 / \partial \epsilon_p)$. Полная намагниченность равна

$$M = \sum_{\mathbf{p},s} g \mu_B s \delta n_{ps}. \quad (2.24)$$

Следовательно, нам нужно перейти от $\delta\tilde{n}_p$ к δn_p . Заметим, что для изотропной системы $\delta\tilde{n}_{ps}$ изотропно в \mathbf{p} -пространстве и анизотропно по спину. Возмущение электронного распределения может быть разложено по сферическим функциям (мы помним, что возмущение существует только вблизи ферми-поверхности):

$$\delta n_p = \sum_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \delta n_{l,m} \quad (2.25)$$

Подставив (2.23) в (2.15), получим:

$$\delta \tilde{n}_{l,m}^{s,a} = \delta n_{l,m}^{s,a} [1 + F_1^{s,a} (2l+1)^{-1}] \quad (2.26)$$

Следовательно, $\delta n_{ps} = \delta \tilde{n}_{p,s} (1+F_0^a)^{-1} = -g \mu_B s H (1+F_0^a)^{-1} (\partial n^0 / \partial \epsilon_p)$. Окончательно получаем:

$$M = \mu_B^2 v H g^2 (1+F_0^a)^{-1}, \quad (2.27)$$

где v – плотность состояний на уровне Ферми. Магнитная восприимчивость равна

$$\chi_p = M/H = (8\pi m^* p_F / h) g^2 \mu_B^2 (1+F_0^a)^{-1}. \quad (2.28)$$

Полученное соотношение имеет смысл только для $1+F_0^a > 0$. Если $F_0^a < -1$, длинноволновые флуктуации магнитного момента становятся неустойчивыми и система переходит в ферромагнитное состояние (знаменитая Стонеровская неустойчивость).

Рассмотрим в качестве примера двумерный случай. Плотность состояний как функция энергии изображена для этого случая на Рис.5.

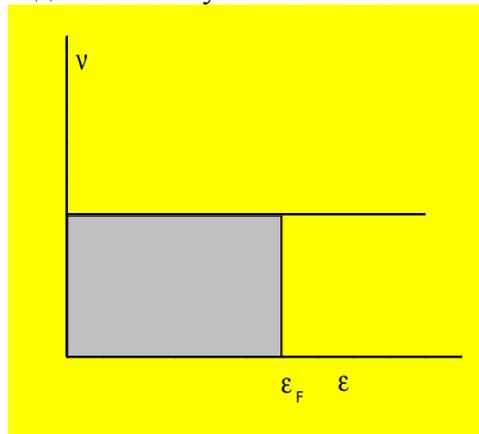


Рис.5.

Для частиц, поляризованных по спину, средняя кинетическая энергия возрастает в два раза, из-за падения плотности состояний. Однако обменная энергия при спиновой поляризации падает также примерно в два раза. В области малых плотностей, где обменная энергия превышает кинетическую системе выгодно стать ферромагнитной.

2.7 Кинетическое уравнение для квазичастиц.

До сих пор мы рассматривали только стационарные распределения квазичастиц, у которых зависимость от координат и времени отсутствовала. Теперь введем слабое возмущение, зависящее от координат и времени $n(\mathbf{r}, t)$. Вообще говоря, введение координатной зависимости для функции от импульса предполагает, что обе величины координата и импульс измеримы одновременно. Поэтому введение $n(\mathbf{r}, t)$ противоречит принципу неопределенности, а значит, все появляющиеся ниже уравнения имеют ограниченную точность. В приближении линейного отклика можно рассматривать возмущение только от одной фурье-компоненты.

$$n(\mathbf{r}, t) = n_p^0 + \delta n_p(q, \omega) \exp(i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t)).$$

Неопределенность энергии и импульса составляют $\hbar\omega/2\pi$ и $\hbar q/2\pi$, соответственно. Дальнейшие вычисления будут справедливы, если

$$\hbar\omega \ll 2\pi\mu; \quad \hbar q v_F \ll 2\pi\mu. \quad (2.29)$$

Рассмотрим баланс частиц внутри объема $d^3r d^3p$:

$$(\partial n_p / \partial t) + \nabla_{\mathbf{r}} n_p \nabla_{\mathbf{p}} \underline{\varepsilon}_p - \nabla_{\mathbf{p}} n_p \nabla_{\mathbf{r}} \underline{\varepsilon}_p = 0. \quad (2.30)$$

Здесь $\nabla_{\mathbf{p}} \underline{\varepsilon}_p$ дает групповую скорость квазичастиц, а $-\nabla_{\mathbf{r}} \underline{\varepsilon}_p$ определяет среднюю силу, действующую на квазичастицу со стороны окружения. Перепишем это уравнение для δn_p и сразу его линеаризуем. Для этого нам потребуются два известных соотношения

$$n_p = n_p^0 + \delta n_p; \quad \underline{\varepsilon}_p = \varepsilon_p + \sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'}.$$

В результате получаем:

$$(\partial \delta n_p / \partial t) + \mathbf{v}_p \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_p - \nabla_{\mathbf{p}} n_p^0 \sum_{p'} f_{pp'} \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{p'}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.31)$$

Благодаря множителю $\nabla_{\mathbf{p}} n_p^0 = -v_p \delta(\varepsilon_p - \mu)$ уравнение описывает квазичастицы только вблизи от уровня Ферми. Первые два члена этого уравнения типичны для газа невзаимодействующих частиц. Последний член описывает, в сущности, поток частиц основного состояния, увлекаемый неравновесным распределением возбужденных квазичастиц. Поскольку

$\delta n_p = \delta \tilde{n}_p + (\partial n_p^0 / \partial \varepsilon_p) (\sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'}) = \delta \tilde{n}_p - \partial n_p^0 / \partial p |\mathbf{v}_p|^{-1} (\sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'})$,
то кинетическое уравнение может быть переписано в виде:

$$(\partial \delta n_p / \partial t) + \mathbf{v}_p \nabla_{\mathbf{r}} \delta \tilde{n}_p(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.32)$$

В уравнение (2.32) следует, как обычно, добавить еще члены с внешней силой и интегралом столкновений. Окончательно получим:

$$(\partial \delta n_p / \partial t) + \mathbf{v}_p \nabla_{\mathbf{r}} \delta \tilde{n}_p(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) + \mathbf{F}_p \mathbf{v}_p (\partial n_p^0 / \partial \varepsilon_p) = \mathcal{I}(\delta n_p). \quad (2.33)$$

Задача: Переписать уравнение (2.33) для системы невзаимодействующих фермионов.

2.8 Плотность потока квазичастиц.

В этом разделе мы заново вычислим плотность потока квазичастиц, пользуясь выведенным кинетическим уравнением. Пусть $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ - плотность потока квазичастиц в точке \mathbf{r} . Чрезвычайно соблазнительно было бы написать, что $\mathbf{J} = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v}_p \delta n_p$. Как мы помним, этот результат не верен (см. пункт 2.5). Используем для получения плотности потока квазичастиц уравнение непрерывности.

$$\partial \rho / \partial t + \text{div } \mathbf{J} = 0, \quad (2.34)$$

где $\delta \rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}} \delta n_p(\mathbf{r}, t)$. Суммируем (2.33) по всем \mathbf{p} с учетом, что $\mathbf{F}_p = 0$.

$$\partial / \partial t (\delta \rho(\mathbf{r}, t)) + \nabla_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{p}} \delta \tilde{n}_p \mathbf{v}_p = 0. \quad (2.35)$$

Здесь учтено, что число частиц при столкновениях сохраняется, поэтому $\sum_{\mathbf{p}} \mathcal{I}(\delta n_p) = 0$. Из (2.35) следует, что $\mathbf{J} = \sum_{\mathbf{p}} \delta \tilde{n}_p \mathbf{v}_p$, или

$$\mathbf{J} = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v}_p (\delta n_p - 1/v_p (\partial n_p^0 / \partial p) \sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'}) = \sum_{\mathbf{p}} \delta n_p \mathbf{v}_p - \sum_{\mathbf{p}} \delta n_p \sum_{p'} f_{pp'} (\partial n_p^0 / \partial \varepsilon_p) \mathbf{v}_p.$$

В последнем члене мы сменили порядок суммирования и заменили \mathbf{p} на \mathbf{p}' . $\mathbf{J} = \sum_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}} \mathbf{j}_{\mathbf{p}}$, где как и раньше,

$$\mathbf{j}_{\mathbf{p}} = \mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{p}'} \mathbf{f}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} (\partial n^0 / \partial \epsilon_{\mathbf{p}'}) \mathbf{v}_{\mathbf{p}'}. \quad (2.36)$$

2.9 Термодинамическая плотность состояний и скорость звука в системе взаимодействующих фермионов.

Сначала найдем связь между термодинамической плотностью состояний и сжимаемостью системы фермионов. По определению давление $P = -dE_0/d\Omega$, где E_0 энергия основного состояния системы, а Ω - объем. Сжимаемость определяется как $\alpha^{-1} = -\Omega dP/d\Omega$. С другой стороны, для макроскопических систем справедливо соотношение $E_0 = \Omega \varphi(\rho)$, где $\rho = N/\Omega$ - плотность системы, N - число частиц, а φ - некоторая функция, своя для каждой системы. Отсюда:

$$P = -\varphi(\rho) + \Omega \varphi' N/\Omega^2 = -\varphi(\rho) + \rho \varphi'(\rho). \\ \alpha^{-1} = -\Omega \{ \varphi'(\rho) \cdot N/\Omega^2 - N/\Omega^2 \varphi'(\rho) - \rho \varphi''(\rho) N/\Omega^2 \} = \rho^2 \varphi''(\rho) \quad (2.37)$$

Химический потенциал $\mu = dE_0/dN = \varphi'(\rho)$.
Следовательно, $d\mu/dN = \varphi''(\rho)/\Omega$ и

$$\alpha^{-1} = \rho^2 \Omega (\partial \mu / \partial N)_{\Omega} = N \rho (\partial \mu / \partial N)_{\Omega} \quad (2.38)$$

Как мы видим, сжимаемость фермиевской системы и термодинамическая плотность состояний пропорциональны друг другу. Этот факт часто используют при обсуждении свойств двумерных электронных систем в режиме квантового эффекта Холла. Когда говорят о сжимаемых и несжимаемых фазах, полосках и т.д., имеют в виду зануление термодинамической плотности состояний в соответствующей фазе или полоске.

Скорость звука в среде связана с сжимаемостью обычным способом:

$$s^2 = (\alpha m \rho)^{-1} = N/m (\partial \mu / \partial N). \quad (2.39)$$

Нам осталось определить обратную термодинамическую плотность состояний через параметры ферми-жидкости.

С этой целью обратим внимание на то, что локальная энергия частиц на ферми-уровне равна значению химического потенциала (снова см. 2.15) и равновесное распределение квазичастиц с увеличенным на $d\mu$ химическим потенциалом имеет вид $n^0(\underline{\epsilon}_{\mathbf{p}} - \mu - d\mu)$. Отклонение от локального равновесия $n^0(\underline{\epsilon}_{\mathbf{p}} - \mu)$ равно $\delta \tilde{n}_{\mathbf{p}} = -d\mu (\partial n^0 / \partial \epsilon_{\mathbf{p}})$. Если обе добавки к функции распределения изотропны, как в случае всестороннего сжатия, то связь между $\delta \tilde{n}_{\mathbf{p}}$ и $\delta n_{\mathbf{p}}$ задана уравнением

$$\delta n_{\mathbf{p}} = \delta \tilde{n}_{\mathbf{p}} (1 + F_0^s)^{-1}. \quad (2.40)$$

(Сравните с (2.26)). Термодинамическая плотность состояний равна

$$(\partial N / \partial \mu) = v (1 + F_0^s)^{-1}. \quad (2.41)$$

Не прозевайте: В плотность состояний на уровне Ферми v входит эффективная масса квазичастиц.

Для скорости звука в трехмерной системе из (2.39) получаем

$$s^2 = (p_F^2/3m^* m^*)(1+F_0^s). \quad (2.42)$$

По мере исчезновения взаимодействия $F_0^s \rightarrow 0$ и скорость звука приближается к $v_F/\sqrt{3}$.

2.10 Нулевой звук в ферми-жидкости.

Для распространения обычного звука в какой-либо среде необходимо установление локального равновесия, и следовательно, многократные столкновения между частицами составляющими эту среду. Затухание обычного звука оказывается пропорциональным времени между столкновениями. С другой стороны, мы знаем, что для передачи сигнала на расстояние столкновения вообще-то не нужны. Передачу сигнала без столкновений (прямым пролетом) использует, например, мальчишка, бросающий мелкие камешки в окно приятелю. Если камешки во время пролета еще испытывали бы взаимодействие между собой, то возникло бы коллективное возбуждение в бесстолкновительной системе, известное как нулевой звук.

Рассмотрим движение системы ферми-частиц в собственном самосогласованном поле. Будем предполагать, что ферми-жидкость находится в основном состоянии и рассмотрим бесстолкновительный режим.

$$\omega \gg v.$$

Кинетическое уравнение имеет вид (2.31):

$$(\partial \delta n_p / \partial t) + \mathbf{v}_p \nabla_r \delta n_p - \nabla_p n_p^0 \sum_{p'} f_{pp'} \nabla_r \delta n_{p'}(\mathbf{r}, t) = 0,$$

или для фурье гармоник:

$$(\mathbf{q} \mathbf{v}_p - \omega) \delta n_p - \mathbf{q} \mathbf{v}_p (\partial n^0 / \partial \epsilon_p) \sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'} = 0. \quad (2.43)$$

Будем предполагать, что возмущение δn_p является гладкой функцией, определенной на всей ферми-поверхности. При нулевой температуре коллективные моды связаны исключительно с колебаниями самой ферми-поверхности. Будем предполагать, что мы имеем дело с изотропной системой. Смещение ферми-поверхности по нормали на величину u_p приведет к изменению числа квазичастиц

$$\delta n_p = \delta(\epsilon_p - \mu) |v_F| u_p.$$

Вспомнив, что $(\partial n^0 / \partial \epsilon_p) = -\delta(\epsilon_p - \mu)$, напомним кинетическое уравнение для u_p :

$$(\mathbf{q} \mathbf{v}_p - \omega) u_p + \mathbf{q} \mathbf{v}_p \sum_{p'} f_{pp'} u_{p'} = 0.$$

Введем полярные координаты φ, θ и проекцию спина σ . Смещение является функцией $u = u(\varphi, \theta, \sigma)$, а кинетическое уравнение принимает вид:

$$(\cos \theta - \lambda) u(\varphi, \theta, \sigma) + \cos \theta (8\pi)^{-1} \sum_{\sigma'} \int d\Omega' F(\xi, \sigma, \sigma') u(\varphi', \theta', \sigma') = 0.$$

Здесь ξ - угол между направлениями φ, θ и φ', θ' , $\lambda = \omega/qv_F$. Коэффициент 8π получен как произведение 4π (соответствующих пространственному углу) и 2 (соответствующей двум направлениям спина). Представив смещение в виде $u(\varphi, \theta, \sigma) = u^s(\varphi, \theta) \pm u^a(\varphi, \theta)$, где \pm отвечают двум возможным взаимным ориентациям спина.

$$(\cos \theta - \lambda) u^{sa}(\varphi, \theta) + \cos \theta (4\pi)^{-1} \int d\Omega' F^{sa}(\xi) u^{sa}(\varphi', \theta') = 0. \quad (2.44)$$

Предположим теперь, что взаимодействие не зависит от \mathbf{p} и \mathbf{p}' и рассмотрим моду, соответствующую u^s . Из всех $F(\xi)$ останется только $F^s_0 = F_0$. Мода, описываемая в этом случае уравнением (2.44), отвечает за изменение плотности квазичастиц и похожа на звук, поэтому Ландау назвал ее нулевым звуком. Не составляет труда найти решение (2.44) для рассматриваемого случая:

$$u(\varphi, \theta) = C \cos \theta (\lambda - \cos \theta)^{-1} \quad (2.45)$$

Подставив (2.45) в (2.44), найдем связь между λ и F_0 .

$$\lambda/2 \ln[(\lambda + 1)(\lambda - 1)^{-1}] - 1 = F_0^{-1}. \quad (2.46)$$

Если $F_0 > 0$, как в случае отталкивания между частицами, то у (2.46) имеется один корень, $\lambda > 0$ соответствующий незатухающей нуль звуковой моде, со скоростью больше v_F . Если отталкивание между частицами является очень сильным ($F_0 \gg 1$), то $\lambda \gg 1$. Левую часть (2.46) можно при этом разложить по $1/\lambda$ и получить $\lambda \propto (F_0/3)^{1/2}$. При $F_0 \ll 1$ $\lambda \rightarrow 1$. В этих условиях возмущение ферми-поверхности существует только в окрестности точки $\theta = 0$ и волна распространяется со скоростью частиц в этой точке (вспомним бросание камешков). При $\lambda \gg 1$ звуковое возмущение соответствует сдвигу всей ферми-поверхности как целого.

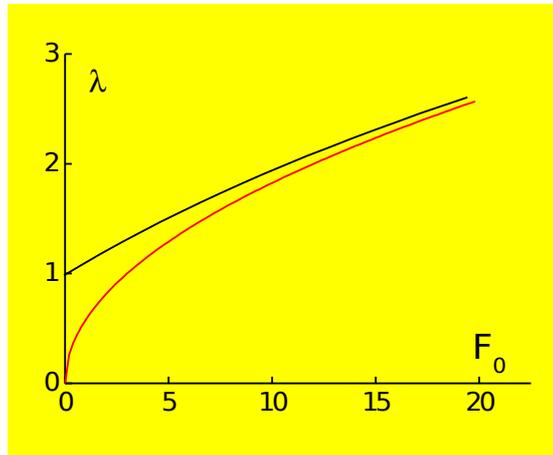


Рис. 6.

Зависимость скорости нулевого звука ($\lambda = \omega/qv_F$) от силы взаимодействия показана на Рис.6 черной сплошной линией.

Нулевой звук экспериментально обнаружен в жидком ^3He В. Абелем, А. Андерсоном и Дж. Уитли (1966). В температурном интервале от 2 до 100 мК и давлении 0,32 атм среднее значение скорости обычного звука составило 187,9 м/сек, а нулевого звука — 194,4 м/сек (на частотах 15,4 и 45,5 МГц). На высоких частотах нулевой звук может существовать также и в металлах, электроны в которых образуют заряженную ферми-жидкость.

Задача: Рассмотреть обычный (первый) звук при вязком столкновительном движении ферми-жидкости. Поскольку столкновения не меняют полной энергии и импульса системы, решение искать с помощью (2.44) в виде $u^s = a + b \cos \theta$. Определить скорость первого звука.

2.11 Идея о конденсации фермионов.

Вернемся теперь к функции распределения (2.15). Обычно ее получают из известного выражения для энтропии свободного газа ферми-частиц. (Напомним, что это выражение имеет чисто комбинаторное происхождение, а классификация уровней квазичастиц в ферми-жидкости Ландау по предположению соответствует классификации уровней в идеальном газе.)

$$S = - \int [\tilde{n} \ln \tilde{n} - (1 - \tilde{n}) \ln (1 - \tilde{n})] d^3\mathbf{p} / (2\pi)^3 \quad (2.47)$$

В соответствии с (2.4), $F - F_0 = \int d^3\mathbf{p} / (2\pi)^3 (\underline{\epsilon}_p - \mu) \delta \tilde{n}_p$. Вариация свободной энергии по функции распределения в равновесии должна быть равна нулю. Отсюда получаем

$$(\underline{\epsilon}_p - \mu) - T \ln[(1 - \tilde{n}) \tilde{n}^{-1}] = 0 \quad (2.48)$$

Или, как обычно,

$$\tilde{n} = (\exp(\underline{\epsilon}_p - \mu) / T + 1)^{-1} = n^0(\underline{\epsilon}_p - \mu) \quad (2.49)$$

Следует специально отметить, что (2.49) не является решением (2.48), а скорее представляет собой просто более компактную запись. Дело в том, что правая часть (2.49) сама зависит от функции распределения.

При введении неравновесности $\delta F = \mathbf{v}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_F)$ величина $\delta \tilde{n} > 0$ для произвольного $\delta \tilde{n}$, как это показано на Рис.3. Авторы работы [5] обратили внимание на то, что последнее утверждение справедливо только, если проекция скорости на импульс положительна. Вместе с тем, из (2.21) следует, что скорость стремится к нулю при увеличении взаимодействия. Что будет, если в результате взаимодействия при традиционном фермиевском распределении (2.49) проекция скорости на импульс станет отрицательной? Ответ, полученный в работе [5] и в последствии подтвержденный в нескольких независимых теоретических работах выглядит довольно забавно: появляется область импульсов $p_{1c} < p < p_{2c}$, в которой энергия $\underline{\epsilon}_p$ не зависит от импульса и равна $\underline{\epsilon}_p = \mu$.

Квазичастицы из определенной части импульсного пространства как бы конденсируются на ферми-уровне, поэтому ожидаемое явление было названо ферми-конденсацией.

Не прозевайте: Конденсация такого рода не имеет ничего общего с бозе-конденсацией. В последнем случае частицы скапливаются в одном состоянии, а при ферми-конденсации ожидается вырожденность энергетического состояния на ферми-уровне.

В качестве примера на Рис.7 приведено распределение квазичастиц по импульсам в случае конденсации фермионов, взаимодействующих с модельным потенциалом $U(q) = \exp(-\beta q)/q$. Напомним еще раз, что в интервале между p_{1c} и p_{2c} $\underline{\epsilon}_p = \mu$.

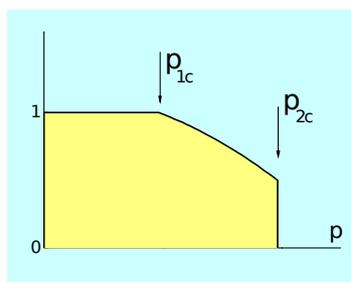


Рис. 7.

Специально отметим, что к настоящему времени в эксперименте не обнаружено систем, демонстрирующих ферми конденсацию.

Интересно рассмотреть и противоположный случай – слабого взаимодействия. Обычно в этом случае рассматривают ферми –жидкость низкой плотности.

Не прозевайте: В пункте 1.2 мы пришли к выводу, что в разбавленной ферми-жидкости взаимодействие является сильным. Однако, этот вывод справедлив только для кулоновского взаимодействия. Здесь мы рассматриваем короткодействующее взаимодействие, поэтому по мере уменьшения плотности фермионов взаимодействие может ослабевать.

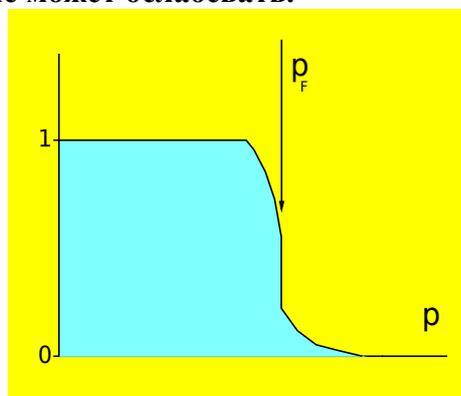


Рис. 8.

Распределение квазичастиц по импульсам представляет собой обычную ферми-ступеньку, Все состояния с импульсами меньше фермиевского заняты с вероятностью единица, все состояния с большими импульсами – пусты. Распределение же исходных частиц по импульсам выглядит совсем иначе (см. Рис. 8). Ступенька на ферми –импульсе сохраняется., но ее величина уже меньше единицы. Часть частиц с импульсами меньше p_F выбрасывается взаимодействием в состояния с импульсом , превышающим фермиевский. Возникает естественный вопрос, если при слабых возмущениях мы имеем дело с квазичастицами – одетыми облаком виртуальных частиц, то может быть можно использовать сильные возмущения, оторвать частицу из облака и увидеть на эксперименте распределение Рис.8 ? Насколько мне известно, таких экспериментов к настоящему времени еще не проведено. К рис. 8 мы еще вернемся.

Легко догадаться, что модель ферми-жидкости Ландау, развитая для короткодействующего потенциала взаимодействия (пример - He^3), не очень подходит для описания электронов в металлах. Тем не менее, мы еще не раз вспомним об этой модели, особенно при качественном обсуждении свойств ферми-жидкости.

III. Та часть квантовой механики, которая в дальнейшем будет широко использоваться.

*Мой друг, теория суха,
А древо жизни зеленеет.
Гете, Фауст.*

III.13Золотое правило Ферми.

Преыдущее рассмотрение строилось на квазиклассическом описании. Несмотря на то, что само по себе оно внутренне противоречиво (предполагаются одновременно измеримыми физические величины, операторы которых не коммутируют), с его помощью удастся построить последовательную теорию ферми жидкости. Для дальнейшего продвижения нам понадобится уже более строгое квантовомеханическое описание. Ниже мы напомним некоторые его принципы.

Мы стартуем с одного из наиболее употребимых законов одночастичной квантовой механики – золотого правила Ферми. Оно дает общие правила для вычисления скорости перехода из одного состояния в другое. Переходы осуществляются за счет возмущения, которое может быть независимым от времени (примеси, дефекты структуры) или гармонически зависеть от времени (рассеяние на тепловых колебаниях решетки). В первом случае процессы рассеяния происходят без изменения энергии, а во втором - величина изменения энергии определяется частотой гармонического возмущения.

Рассмотрим вначале первый случай. В качестве исходных волновых функций мы будем использовать волновые функции чистой системы (Блоховские волны для электронов в кристалле или плоские волны для свободных электронов). По мере возрастания времени к каждому такому состоянию за счет возмущения будут подмешиваться волновые функции других состояний. Как будет показано ниже, вероятность оказаться в состоянии, отличном от исходного состояния, возрастает линейно во времени.

Исходно ($t=0$) электрон находится в состоянии с волновой функцией

$$\Phi_i(t) = \phi_i \exp(-i\varepsilon_i t/\hbar). \quad (3.1)$$

Чтобы найти волновую функцию электрона при $t > 0$, нам нужно решить уравнение Шредингера с возмущающим потенциалом:

$$(H_0 + V) \Psi(t) = i\hbar (\partial \Psi(t) / \partial t). \quad (3.2)$$

Будем искать решение по теории возмущений, разлагая $\Psi(t)$ в ряд по собственным волновым функциям невозмущенного гамильтониана, с коэффициентами, зависящими от времени.

$$\Psi(t) = \sum_j a_j(t) \Phi_j(t). \quad (3.3)$$

Подставив (3.3) в (3.2) с учетом того, что $\Phi_j(t)$ являются собственными функциями невозмущенного гамильтониана, получим:

$$i\hbar \sum_j \phi_j (da_j/dt) \exp(-i\varepsilon_j t/\hbar) = \sum_j V a_j(t) \phi_j \exp(-i\varepsilon_j t/\hbar). \quad (3.4)$$

Умножив (3.4) на ϕ_f и проинтегрировав по координатам, найдем:

$$(da_f/dt) = (i\hbar)^{-1} \sum_j a_j(t) V_{fj} \exp(i\varepsilon_{fj} t/\hbar). \quad (3.5)$$

Здесь $\varepsilon_{fj} = (\varepsilon_f - \varepsilon_j)$, $V_{fj} = \int \phi_f^* V \phi_j d^3r$. Уравнение (3.5) есть не что иное, как другая запись уравнения (3.2). Будем его решать итерациями. В качестве нулевого приближения пренебрежем возмущающим потенциалом. Тогда $a_j = \delta_{ij}$. В первом приближении, подставив в правую часть (3.5) результат нулевого приближения и проинтегрировав, получим:

$$a_f(t) = (i\hbar)^{-1} \int_0^t V_{fi} \exp(i\varepsilon_{fi}t'/\hbar) dt' = -i \exp(i\varepsilon_{fi}t/2\hbar) V_{fi} \sin(\varepsilon_{fi}t/2\hbar) / (\varepsilon_{fi}/2) \quad (3.6)$$

Вероятность обнаружить электрон в конечном состоянии задается квадратом модуля $a_f(t)$:

$$|a_f(t)|^2 = |V_{fi}|^2 t^2 \hbar^{-2} [\sin(\varepsilon_{fi}t/2\hbar) / (t\varepsilon_{fi}/2\hbar)]^2. \quad (3.7)$$

График квадрата функции, стоящей в квадратных скобках, показан на рис.9 для трех последовательно возрастающих времен. Легко заметить, что кривая по мере увеличения времени становится все более узкой, а площадь под кривой сохраняется. Действительно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx [(\sin x)/x]^2 = \pi.$$

Следовательно, уравнение (3.7) может быть переписано на больших временах как:

$$|a_f(t)|^2 = (2\pi)/\hbar |V_{fi}|^2 t \delta(\varepsilon_{ij}). \quad (3.8)$$

Последнее означает, что вероятность перехода в единицу времени из состояния i в состояние f равна

$$W_{fi} = (2\pi)/\hbar |V_{fi}|^2 \delta(\varepsilon_{ij}). \quad (3.9)$$

Соотношение (3.9) и представляет золотое правило Ферми. Ясно, что закон сохранения энергии выполняется только на больших временах. Не сохранение энергии при рассеянии на статическом потенциале может оказаться существенным в грязных системах, где электрон не живет достаточно долго между двумя актами рассеяния.

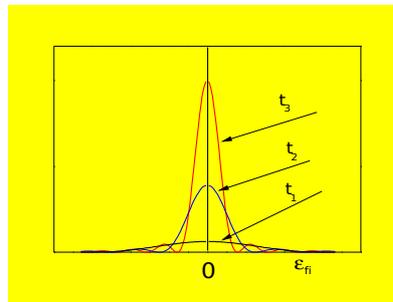


Рис.9.

Теперь перейдем к рассмотрению потенциалов, гармонически меняющихся во времени.

$$V(t) = 2V \cos \omega t = V(\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)). \quad (3.10)$$

Выражение (3.6) теперь запишется как

$$a_f(t) = -V_{fi} \{ [\exp(i(\varepsilon_{ij}/\hbar - \omega)t) - 1] (\varepsilon_{ij} - \hbar\omega)^{-1} + [\exp(i(\varepsilon_{ij}/\hbar + \omega)t) - 1] (\varepsilon_{ij} + \hbar\omega)^{-1} \}. \quad (3.11)$$

При вычислении квадрата модуля возникнут три члена. Первый из них будет соответствовать на больших временах $\delta(\varepsilon_f - \varepsilon_j - \hbar\omega)$, третий превратится в $\delta(\varepsilon_f - \varepsilon_j + \hbar\omega)$, а интерференционный член, содержащий обе частоты ω и $-\omega$ на больших временах обратится в нуль. Золотое правило Ферми запишется как

$$W_{fi} = (2\pi)/\hbar |V_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar \omega). \quad (3.12)$$

III.2 Квантовая механика в представлении Дирака.

Всякий студент, учивший квантовую механику, помнит шредингеровское ее представление, в котором состояние системы описывается волновой функцией, а динамическим переменным соответствуют дифференциальные операторы. Большинство помнит, наверняка, и матричное представление Гейзенберга, в котором волновая функция заменяется матрицей-столбцом, а комплексно сопряженная функция заменяется матрицей-строкой из комплексно сопряженных чисел. Динамические переменные в этом представлении являются квадратными матрицами. Для перехода от шредингеровского представления к представлению Гейзенберга нужен полный набор ортогональных шредингеровских функций, например, собственные функции произвольного шредингеровского оператора η_k . Тогда k -тый элемент гейзенберговского столбца будет иметь вид

$$\psi_k = \int \eta_k^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r},t) d^3r. \quad (3.13)$$

Аналогично находятся и элементы матрицы- оператора, как матричные элементы на функциях η_k .

Дираком для описания состояния системы предложено использовать бесконечномерные комплексные векторы (так называемые, кет-векторы $|A\rangle$). Каждому такому вектору соответствует эрмитово сопряженный бра-вектор $\langle A|$. Дираковские векторы обладают всеми свойствами обычных векторов. На них определены следующие операции:

Сложение $|A\rangle + |B\rangle = |C\rangle$,

Скалярное произведение $\langle A|B\rangle = c = \text{число}$.

С помощью скалярного произведения определяются *нормированный* (единичной длины) *вектор, ортогональные векторы и ортонормированная система векторов*.

Умножение на линейный оператор $\alpha |A\rangle = |B\rangle$.

В дополнение к этим операциям введены еще три:

Операторное произведение векторов кет и бра:

$|A\rangle\langle B| = \beta$ линейный оператор. Действительно, $\beta |C\rangle = |A\rangle\langle B| C\rangle =$ вектор.

Умножение на единичный оператор:

В полной ортонормированной системе векторов $|A_i\rangle$ единичный оператор вводится как $\sum_i |A_i\rangle\langle A_i|$, поскольку $\sum_i |A_i\rangle\langle A_i| A_j\rangle = \sum_i |A_i\rangle\delta_{ij} = |A_j\rangle$.

Комплексное сопряжение. Для получения комплексно сопряженного от любого произведения бра-векторов, кет-векторов и операторов необходимо заменить каждый множитель комплексно сопряженным с ним и обратить порядок сомножителей.

Оба знакомых нам представления квантовой механики шредингеровское и гейзенберговское могут рассматриваться как частные случаи представления Дирака.

III.3 Вторичное квантование в системе Ферми-частиц.

Прежде всего нам понадобится одночастичный базис – полная ортонормированная система одночастичных волновых функций. В принципе, в качестве такого одночастичного базиса может быть выбран набор собственных функций произвольного одночастичного оператора. Например, это могут быть собственные функции некоторого одночастичного гамильтониана

$$H_0 = p^2/2m + U(\mathbf{r}); H_0 \psi_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k \psi_k(\mathbf{r}) \quad (3.14)$$

Если в (3.14) $U(\mathbf{r}) = 0$, то мы имеем случай свободных частиц с волновыми функциями в виде плоских волн.

Полные волновые функции системы многих невзаимодействующих частиц представляют собой произведения одночастичных функций, антисимметризованных в виде детерминанта Слэтера:

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = 1/(N!)^{1/2} \det(\psi_{k_i}(\mathbf{r}_i)). \quad (3.15)$$

Определенные неприятности возникают со знаком определителя (3.15). Действительно, перестановка двух столбцов в определителе (замена местами k_1 и k_2 , например) приводит к смене знака многочастичной волновой функции, а с другой стороны, в силу тождественности частиц мы имеем одно и то же состояние. Избежать неопределенности знака можно путем соглашения $k_1 < k_2 < \dots < k_N$, приписывая этой комбинации положительный знак в (3.15). Волновые функции частиц, взаимодействующих между собой, выражаются через линейные комбинации функций Φ . Таким образом, бесконечный набор волновых функций $\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ используется в качестве многочастичного базиса при описании систем с взаимодействием. Этот базис всем хорош, за исключением того, что таскать детерминанты из выражения в выражение не слишком удобно. С другой стороны, какую, в сущности, информацию содержит функция $\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$? Если знать, сколько частиц находится в каждом из одночастичных состояний (одна или ни одной), то этой информации вполне достаточно для восстановления функции $\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Поэтому вместо этой функции в качестве базисной многочастичной функции мы можем использовать дираковский вектор, указывающий число занятых одночастичных состояний

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N} = |n_{k_1}, \dots, n_{k_i}, \dots\rangle. \quad (3.16)$$

Следует отметить, что так введенные векторы ортогональны и нормированы. Специально подчеркнем, что, хотя вектор в правой части (3.16) внешне сильно напоминает гейзенберговскую матрицу-столбец, составленную из нулей и единиц, он не имеет с ней ничего общего. (Чтобы в этом убедиться проверьте условия ортонормированности). В сущности, (3.16) просто смена формы записи выражения (3.15).

Теперь мы сделаем нетривиальный шаг: хотя число частиц в реальной системе N фиксировано, мы разрешим ему меняться от нуля до бесконечности. Для каждого N (за исключением $N = 0$) мы имеем бесконечномерный базис дираковских векторов. Объединим все эти пространства в так называемое «обобщенное гильбертово пространство». Мы получили новый набор базисных векторов, по которому может быть разложена собственная функция произвольного числа взаимодействующих ферми-частиц.

Определим теперь операторы рождения и уничтожения частиц следующим образом:

$$\begin{aligned} c_i^+ |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_i} (1 - n_i) |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \\ c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_i} n_i |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \end{aligned} \quad (3.17)$$

Мы ввели по множителю (-1) на каждую частицу, стоящую слева от состояния i .

$$(-1)^{\sum_i} = (-1)^{[n_1 + n_2 + \dots + n_{(i-1)}]}$$

Применяя многократно операторы c_i^+ к состоянию истинного вакуума можно получить любой из многочастичных базисных векторов.

Операторы c_k^+ и c_i подчиняются обычным фермионным правилам коммутации:

$$\begin{aligned} [c_i, c_k^+]_+ &= c_i c_k^+ + c_k^+ c_i = \delta_{ik} \\ [c_i^+, c_k^+]_+ &= 0 \end{aligned}$$

$$[c_i, c_k]_+ = 0 \quad (3.18)$$

Эти операторы не являются самосопряженными, а значит, не отвечают никаким физически наблюдаемым величинам., зато они эрмитово сопряжены друг другу:

$c_i^+ = (c_i)^*$. Здесь значком * мы обозначили эрмитово сопряжение. Легко проверить, что операторы $n_i = c_i^+ c_i$ (оператор числа частиц) и $N = \sum_i c_i^+ c_i$ (N – оператор полного числа частиц) эрмитовы.

$$c_i^+ c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (3.19)$$

Введем одночастичный, симметризованный по всем частицам оператор $G = \sum_i N G(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$. В представлении чисел заполнения он имеет вид:

$$G = \sum_{l,k} G_{l,k} c_l^+ c_k \quad (3.20)$$

с матричными элементами

$$G_{ij} = \langle \Phi_i | G | \Phi_j \rangle = \int \psi_i^*(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \psi_j(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (3.21)$$

Произвольный симметризованный по всем частицам двухчастичный оператор

$$G = \sum_{i,j=1}^N G(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i; \mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j), \quad i \neq j \quad (3.22)$$

в представлении чисел заполнения имеет вид:

$$G = \sum_{klmn} G_{klmn} c_l^+ c_k^+ c_m c_n \quad (3.23)$$

Не прозевайте: порядок индексов в матричном элементе и у операторов рождения/уничтожения в (3.23) различен!

Здесь матричный элемент

$$G_{klmn} = \int d^3\mathbf{r} \int \psi_k^*(\mathbf{r}) \psi_l^*(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{p}, \mathbf{p}') \psi_m(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (3.24)$$

Задачи:

1. **Прямым вычислением матричных элементов показать, что операторы c^+ и c являются эрмитово сопряженными.**
2. **Вычислить $c_i^+ |1, \dots, 1_i, \dots\rangle$**
3. **Вычислить $c_2^+ c_3 c_1^+ c_2 c_3^+ c_1 |1100, \dots\rangle$**

3.4 Гамильтониан в представлении чисел заполнения.

Гамильтониан системы N фермионов, находящихся во внешнем поле $U(\mathbf{r})$, взаимодействующих посредством двухчастичного взаимодействия $V(\mathbf{r})$, имеет вид:

$$H = H_0 + H_I = \sum_i \{ \mathbf{p}_i^2 / 2m + U(\mathbf{r}_i) \} + 1/2 \sum_{i,j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (3.25)$$

Первый член гамильтониана в представлении чисел заполнения выглядит так:

$$H_0 = \sum_{kl} \langle \psi_k | \mathbf{p}^2 / 2m + U(\mathbf{r}) | \psi_l \rangle c_k^+ c_l, \quad (3.26)$$

а если функции Φ_k являются собственными функциями гамильтониана $\mathbf{P}^2/2m + U(\mathbf{r})$, то

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k c_k^+ c_k.$$

Аналогично для H_1 имеем:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{klmn} V_{klmn} c_l^+ c_k^+ c_m c_n ; \quad (3.27)$$

Не прозевайте: во всех выписанных выше формулах для простоты записи опущены спиновые индексы.

В дальнейшем, как правило, мы будем иметь дело с системами без внешнего потенциала (при рассмотрении незаряженных систем) или с системами, имеющими однородно заряженный фон, и с взаимодействием между частицами, зависящим только от расстояния между ними. Тогда $\epsilon_k = k^2/2m$, а одночастичная волновая функция имеет вид $\psi_{k\sigma}(\mathbf{r}) = (\Omega)^{-1/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \eta_\sigma$. Из (3.25) и (3.27) при этом следует (после суммирования по спиновым переменным):

$$V_{k\sigma_1, l\sigma_2, m\sigma_3, n\sigma_4} = \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} (\Omega)^{-2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i[(\mathbf{k}-\mathbf{m})\mathbf{r} + (\mathbf{l}-\mathbf{n})\mathbf{r}']} \quad (3.28)$$

Если выразить V через фурье образ потенциала V_q (при кулоновском взаимодействии в трехмерном случае $V_q = 4\pi e^2 q^{-2}$,

$V_0 = 0$, см.(3.25), то

$$V_{m^+ q, \sigma_1, n^- q, \sigma_2, m\sigma_3, n\sigma_4} = (2\pi)^3 \Omega^{-1} \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} V_q . \quad (3.29)$$

Задача: В представлении чисел заполнения решить уравнение Шредингера для одной частицы во внешнем поле $V(\mathbf{r})$. Считать, что все матричные элементы возмущающего потенциала равны нулю за исключением V_{pq} и V_{qp} .

Решение:

$$\begin{aligned} H\Psi &= (H_0 + V)\Psi = E\Psi, \\ \det[(\epsilon_i - E)\delta_{ij} + V_{ij}] &= 0 \\ \text{для } i \neq p, q \quad E &= \epsilon_i, \\ \text{для } i = p, q \quad E &= 1/2\{(\epsilon_p + \epsilon_q) \pm [(\epsilon_p - \epsilon_q)^2 + 4|V_{pq}|^2]^{1/2}\}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

В терминах вторичного квантования:

$$H|\Psi\rangle = \left[\sum_k \epsilon_k c_k^+ c_k + \sum_{kl} V_{kl} c_k^+ c_l \right] |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (3.31)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_j A_j |0\ 0\ 0 \dots 1_j\ 0 \dots\rangle$$

Подставив последнее выражение в (3.19) и умножив результат слева на $\langle 0 \dots 1_i\ 0 \dots 0 |$, получим:

$$\sum_j A_j [\epsilon_i \delta_{ij} + V_{ij} - E \delta_{ij}] = 0,$$

что эквивалентно (3.30).

Запомним решение этой задачи. Оно нам еще понадобится в десятой главе.

3.5. Электроны и дырки.

В дальнейшем мы будем рассматривать ситуации, в которых только немногие из частиц системы изменяют свое состояние. Выписывать все единицы в волновой функции в таких ситуациях довольно бессмысленно. Можно представить себе основное состояние

системы как ферми-вакуум и указывать в волновой функции в представлении чисел заполнения только изменения по сравнению с основным состоянием.

$$\Phi_0 = |0\rangle. \quad (3.32)$$

Перенос электрона из-под ферми-уровня в состояние над ферми-уровнем мы теперь можем рассматривать как рождение одного электронного и одного дырочного возбуждения на фоне ферми-вакуума. Для этого необходимо ввести операторы рождения и уничтожения для квазичастиц- электронов a_i^+ и a_i , а также для квазичастиц-дырок b_i^+ и b_i .

$$\begin{aligned} \text{При } k_i > k_F \quad c_i &= a_i ; \quad c_i^+ = a_i^+ \\ \text{При } k_i < k_F \quad c_i^+ &= b_i ; \quad c_i = b_i^+ \end{aligned}$$

Не прозевайте: поскольку частицы в дырочно-частичном формализме существуют только выше уровня Ферми, а дырки - только ниже ферми-уровня, то

$$k_{\text{дыр}} \neq k_{\text{част}}$$

Правила коммутации для вновь введенных операторов выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} [a_k, a_l^+]_+ &= \delta_{kl}, [a_k, a_l]_+ = [a_k^+, a_l^+]_+ = 0 \\ [b_k, b_l^+]_+ &= \delta_{kl}, [b_k, b_l]_+ = [b_k^+, b_l^+]_+ = 0 \\ [a_k, b_l]_+ &= [a_k, b_l^+]_+ = [a_k^+, b_l]_+ = [a_k^+, b_l^+]_+ = 0 \end{aligned} \quad (3.33)$$

Не прозевайте: энергия так введенной дырки – отрицательна, ее импульс равен –k, а проекция спина равна -σ.

Задача: вычислить среднее по вакуумному состоянию от оператора b_k, b_l^+ .

Решение: $\langle 0 | b_k, b_l^+ | 0 \rangle = \langle 0 | \delta_{kl} - b_k^+, b_l | 0 \rangle = \delta_{kl}$, поскольку в ферми-вакууме дырок нет.

Многочастичный гамильтониан (3.13) в дырочно-частичной схеме переписывается следующим образом:

$$H_0 = \sum_{k < k_F} \epsilon_k - \sum_{k < k_F} \epsilon_k b_k^+ b_k + \sum_{k > k_F} \epsilon_k a_k^+ a_k \quad (3.34)$$

Первый член в (3.34) соответствует энергии ферми-вакуума, во втором явно показано, что энергия дырок отрицательна.

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{1}{2} \sum_{klmn > k_F} V_{klmn} a_l^+ a_k^+ a_m a_n + \frac{1}{2} \sum_{klm > k_F, n < k_F} V_{klmn} a_l^+ a_k^+ a_m b_n^+ + \dots \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{klmn < k_F} V_{klmn} b_l^+ b_k^+ b_m b_n \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$H_2 = \sum_{kl > k_F} V_{kl} a_k^+ a_l + \sum_{k > k_F, l < k_F} V_{kl} a_k^+ b_l^+ + \sum_{k < k_F, l > k_F} V_{kl} b_k a_l + \sum_{kl < k_F} V_{kl} b_k b_l^+ \quad (3.36)$$

3.6 Операторы поля частиц.

Техника вторичного квантования в представленной выше форме пригодна для решения ограниченного круга задач при слабом взаимодействии между частицами. В случае реального взаимодействия часто приходится сталкиваться с ситуацией, при которой нужно суммировать много членов ряда теории возмущений. Для этого необходимо иметь метод, позволяющий легко выписать произвольный член ряда теории возмущений. В качестве первого шага на пути поиска такого метода представим вторичное квантование в немного измененном виде.

Введем операторы поля частиц:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i(\mathbf{r}) c_i ; \quad \psi^+(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}) c_i^+ \quad (3.37)$$

Здесь $\psi_i(\mathbf{r})$ волновая функция частицы в состоянии i . Вновь введенные операторы можно рассматривать как операторы уничтожения или рождения частицы в данной точке пространства. Они подчиняются обычным правилам коммутации:

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}')]_+ &= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \\ [\psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}')]_+ &= 0 \\ [\psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}')]_+ &= 0 \end{aligned} \quad (3.38)$$

Одночастичный, симметризованный по всем частицам оператор \mathbf{G} запишется в виде

$$\mathbf{G} = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) \mathbf{G} \psi(\mathbf{r})$$

Совершенно аналогично запишется гамильтониан:

$$\begin{aligned} H = \int [1/2m \nabla \psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r}) \nabla \psi_\beta(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r}) \psi_\beta(\mathbf{r})] d\mathbf{r} + \\ + 1/2 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r}) \psi^\dagger_\beta(\mathbf{r}') U^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_\beta(\mathbf{r}') \psi_\alpha(\mathbf{r}) + \dots \end{aligned} \quad (3.39)$$

Здесь индексы α и β отмечают проекцию спина. По дважды повторяющимся индексам проводится суммирование. По внешнему виду формула (3.27) совпадает с выражением для средней энергии N частиц, находящихся в одинаковых состояниях $\psi_\beta(\mathbf{r})$, нормированных соотношением

$$\int d^3\mathbf{r} |\psi_\beta(\mathbf{r})|^2 = N.$$

Введем оператор плотности частиц в данной точке. В обычном представлении он имеет вид $n(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)$, то через операторы поля частиц он запишется как

$$n(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' \psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r}') \sum_i \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) \psi_\alpha(\mathbf{r}_i) = \psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r}) \psi_\alpha(\mathbf{r}), \quad (3.40)$$

соответственно, полное число частиц в системе равно

$$N = \int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r}) \psi_\alpha(\mathbf{r}). \quad (3.41)$$

IV. Первая попытка вычислить энергию основного состояния в нормальной системе и разобраться с возбуждениями в сверхпроводниках.

*Он подает куда как скупое
«Московский дождик» О.Мандельштам*

4.1. Приближение Хартри-Фока.

В этом разделе мы сделаем первую попытку приближенно вычислить энергию основного состояния системы взаимодействующих фермионов. Отметим еще раз, что сколько-нибудь надежно приближенные методы могут работать только при слабом взаимодействии ($r_s \ll 1$). Ниже мы проделаем вычисления традиционным путем в приближении Хартри-Фока. К полученным результатам мы будем относиться с большой долей скептицизма, поскольку это приближение является крайне грубым и при последовательном применении приводит к ряду парадоксальных результатов

(бесконечному времени жизни квазичастиц и нулевой эффективной массе при кулоновском взаимодействии, например).

Гамильтониан системы взаимодействующих фермионов записывается в виде (3.14), (3.15):

$$H = \sum_{p\sigma} \epsilon_p^0 c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} + 1/2 \sum_{p'q\sigma\sigma'} V_q c_{p+q\sigma}^+ c_{p'-q,\sigma'}^+ c_{p',\sigma'} c_{p,\sigma} . \quad (4.1)$$

Для нахождения волновой функции и энергии основного состояния мы должны бы решить уравнение Шредингера с таким гамильтонианом. К сожалению, это невозможно. Нам нужно разработать процедуру приближенного поиска решения. Заметим, что применение второго члена в гамильтониане к волновой функции основного состояния даст только тогда волновую функцию основного состояния, если $q=0$, либо если $p'-q=p$ и $\sigma=\sigma'$.

Поэтому для решения уравнения Шредингера, при поиске волновой функции основного состояния мы можем использовать гамильтониан:

$$(4.2)$$

$$H = \sum_{p\sigma} \epsilon_p^0 c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} + 1/2 \sum_{p'p''\sigma\sigma'} V_0 c_{p\sigma}^+ c_{p',\sigma'}^+ c_{p',\sigma'} c_{p,\sigma} + 1/2 \sum'_{p'q\sigma} V_q c_{p+q\sigma}^+ c_{p,\sigma}^+ c_{p+q,\sigma} c_{p,\sigma} .$$

В третьем члене q не равно нулю. Если речь идет о заряженной электронной фермижидкости, то для устойчивости ее необходим однородный, положительно заряженный фон. Поэтому $V_0=0$

(Легко догадаться, что нулевая компонента волнового вектора соответствует сдвигу электронной системы как целого относительно компенсирующего фона, что не приводит к появлению полей при наличии однородного компенсирующего заряда и бесконечных размерах системы).. В трехмерном случае, например,

$$V_q = 4\pi e^2 / q^2 (1 - \delta_{q0}) .$$

Последнее означает что второй член гамильтониана (хартриевский) обращается в нуль.

Не прозевайте: К виду и логике получения уравнения (4.2) мы будем еще неоднократно возвращаться.

Теперь произведем в третьем члене гамильтониана процедуру, известную как спаривание Хартри – Фока (Hartree-Fock pairing). Заменим третий член в (4.2) эффективным гамильтонианом

$$H_I^{HF} = -1/2 \sum'_{p'q\sigma} V_q c_{p+q\sigma}^+ c_{p+q,\sigma} c_{p,\sigma}^+ c_{p,\sigma} = - \sum_{p\sigma} X_{p\sigma} c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} , \quad (4.3)$$

где $X_{p\sigma} = \sum_q 1/2 V_q <0| c_{p+q\sigma}^+ c_{p+q,\sigma} c_{p,\sigma}^+ c_{p,\sigma} |0>$. Легко видеть, что $X_{p\sigma}$ – действительные (см. задачи в п.3.2), хотя и неизвестные числа. В общем случае мы должны были бы действовать по следующему рецепту: выбрав эти числа произвольным образом, решить уравнение Шредингера. Затем, найдя новый вектор основного состояния, вычислить эти неизвестные числа и приравнять их к затравочно предположенным. Это - точный рецепт процедуры Хартри – Фока. Прелесть ее состоит в том, что гамильтониан

$$H = \sum_{p\sigma} \epsilon_p^0 c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} + H_I^{HF}$$

пригоден для нахождения решений. В нашем случае свободного электронного газа с взаимодействием – дело еще упрощается. Структура эффективного гамильтониана точно подобна структуре гамильтониана для частиц без взаимодействия. Поэтому

$<0| c_{p\sigma}^+ c_{p,\sigma} |0> = n_{p\sigma}^0$, где $n_{p\sigma}^0$ – функция распределения Ферми-Дирака. Следовательно,

$$\langle 0|H|0\rangle = E_0^{\text{HFA}} = \sum_{\rho\sigma} \varepsilon_{\rho}^0 - 1/2 \sum_{\rho q\sigma} V_q n_{\rho\sigma}^0 n_{\rho+q\sigma}^0. \quad (4.4)$$

Подставляя сюда величины V_q и нормируя E_0^{HFA} на одну частицу, получим

$$E_0^{\text{HFA}}/N = (3/5) p_F^2/2m - N^{-1} \sum 2\pi e^2 (p-p')^{-2},$$

где суммирование ведется по состояниям $p < p_F, p' < p_F$. В терминах безразмерного расстояния между частицами r_s :

$$p_F = (4/9\pi)^{-1/3} r_s^{-1} a_B^{-1},$$

где a_B -боровский радиус. Произведя суммирование, получим:

$$E_0^{\text{HFA}} N^{-1} = 2,21 r_s^{-2} - 0,916 r_s^{-1} \text{ (ридберг)}. \quad (4.5)$$

Приближение Хартри – Фока отказывает по мере $r_s \rightarrow 1$. Наивная экстраполяция (4.5) к большому r_s приводит к ожиданию неустойчивости при $r_s \approx 3$ в трехмерном случае. Это ожидание на эксперименте не оправдывается.

Заметим, что в приближении Хартри – Фока мы учли корреляции в движении частиц с одним направлением спина $\langle 0|c_{\rho+q\sigma}^+ c_{\rho+q,\sigma}|0\rangle \neq 0$, т.е., так называемые, кинематические корреляции. Вклад, полученный нами в энергию основного состояния в процедуре Хартри-Фока, носит название обменной энергии. Обменная энергия всегда отрицательна.

4.2 Модель Бардина Купера-Шриффера.

Как мы сейчас увидим, процедура спаривания применяется не только в случае нормальных металлов. Чтобы лучше ее освоить и запомнить, рассмотрим спектр возбуждений в сверхпроводниках.

В принципе, взаимодействие между электронами может осуществляться не только кулоновским отталкиванием. Электроны, обмениваясь фононами, могут притягиваться друг к другу. В этой части взаимодействия участвуют только частицы с противоположными импульсами и направлениями спина.

Взаимодействие имеет вид:

$$V = (1/4)\Omega^{-1} \sum_{\rho, \rho'} V(\rho, \rho') c_{\rho}^+ c_{\rho}^- c_{-\rho'} c_{\rho'}, \quad (4.6)$$

где $V(\rho, \rho') = V(\rho', \rho) = -V(-\rho, \rho')$ и отлично от нуля в некоторой узкой области энергий вблизи μ . Точно также, как и в приближении Хартри-Фока предположим, что, $\langle 0|c_{-\rho} c_{\rho}|0\rangle \neq 0$, т.е. движение электронов с противоположными импульсами и спинами скоррелировано. Тогда мы можем ввести комплексное число

$$\Delta(\rho) = (1/2)\Omega^{-1} \sum_{\rho'} V(\rho, \rho') \langle 0|c_{-\rho'} c_{\rho'}|0\rangle. \quad (4.7)$$

Теперь заменим стартовый гамильтониан эффективным:

$$H' = \sum_{\rho} c_{\rho}^+ c_{\rho} (p^2/2m - \mu) + 1/2 \lambda \sum_{\rho} (\Delta(\rho) c_{\rho}^+ c_{-\rho} + \Delta^* c_{-\rho} c_{\rho}) \quad (4.8)$$

Где λ -заранее неизвестное число. Этот гамильтониан, являющийся билинейной функцией по операторам рождения и уничтожения, гораздо более удобен для решения, чем исходный (4.6).

Сделаем линейное преобразование (боголюбовский поворот в пространстве операторов)

$$c_k = u_k B_k + v_k B_{-k}^+, \quad (4.9)$$

где операторы B по-прежнему обладают свойством антикоммутиации. Коэффициенты u_k , и v_k - вещественны,

$$u_k = u_{-k}, \quad v_k = -v_{-k}. \quad (4.10)$$

Введенное преобразование является каноническим при условии

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \quad (4.11)$$

Теперь подставим выражение для операторов c_k в эффективный гамильтониан и потребуем, чтобы все произведения типа $B_k^+ B_{-k}^+$, $B_{-k} B_k$ имели перед собой нулевые коэффициенты. Последнее справедливо, если

$$u_k^2 - v_k^2 = (k^2/2m - \mu) [(k^2/2m - \mu)^2 + \lambda^2 \Delta^2(k)]^{-1/2}. \quad (4.12)$$

$$2u_k v_k = -\lambda \Delta(k) [(k^2/2m - \mu)^2 + \lambda^2 \Delta^2(k)]^{-1/2}. \quad (4.13)$$

Эффективный гамильтониан, выраженный через операторы B_k, B_k^+ , имеет вид

$$H' = \sum_k E_k B_k^+ B_k, \quad (4.14)$$

где $E_k = [(k^2/2m - \mu)^2 + \lambda^2 \Delta^2(k)]^{1/2}$.

Поскольку $E_k \geq 0$, то для волновой функции основного состояния имеем

$$B_k |0\rangle = 0.$$

(В основном состоянии нет возбуждений – нечего уничтожать). Последнее соотношение позволяет вычислить величины $\Delta(k)$ и, тем самым, самосогласовать процедуру:

$$\Delta(k) = (1/2)\Omega^{-1} \sum_{k'} V(k, k') \langle 0 | c_{-k} c_{k'} | 0 \rangle. \quad (4.15)$$

Выразив c_{-k} через B_k и воспользовавшись определением волновой функции основного состояния ($B_k |0\rangle = 0$ - в основном состоянии нет возбуждений – нечего уничтожать), получим

$$\Delta(k) = 1/16\pi^3 \int d^3k' V(k, k') u_{k'} v_{k'}. \quad (4.16)$$

Однако произведение $u_{k'} v_{k'}$ нам уже известно (см. 4.13), поэтому

$$\Delta(k) = -1/32\pi^3 \int d^3k' V(k, k') \lambda \Delta(k') [(k^2/2m - \mu)^2 + \lambda^2 \Delta^2(k)]^{-1/2}. \quad (4.17)$$

Возможным решением этого уравнения является $\Delta(k) = 0$ для всех k .

В этом случае

$$u_k = 1, \quad v_k = 0 \quad \text{при} \quad k^2/2m > \mu,$$

$$u_k = 0, \quad v_k = 1 \quad \text{при} \quad k^2/2m < \mu.$$

Это обычный ферми-газ (см. ранее введенное определение квазичастиц ферми-газа).

В выражении (4.17) заменим $V(k, k')$ через $V(k_F, k'_F)$ и будем использовать его среднее значение V_0 . Тогда остальные функции будут функциями только $|k|$, а

основной вклад в интеграл будет от окрестности $k'=k_F$. В результате, условие самосогласования (4.17) дает нам:

$$1 = -(\lambda/4\pi^2) k_F^2 V_0 \int dk [(k^2/2m - \mu)^2 + \lambda^2 \Delta^2(k)]^{-1/2}. \quad (4.18)$$

Решение имеется только при $\lambda < 0$, т.е. для случая притяжения на ферми-поверхности. Последнее выражение задает связь между V_0 и $\lambda\Delta$.

В спектре возбуждений появилась щель. Коэффициенты преобразования u_k и v_k , в зависимости от k качественно выглядят следующим образом:

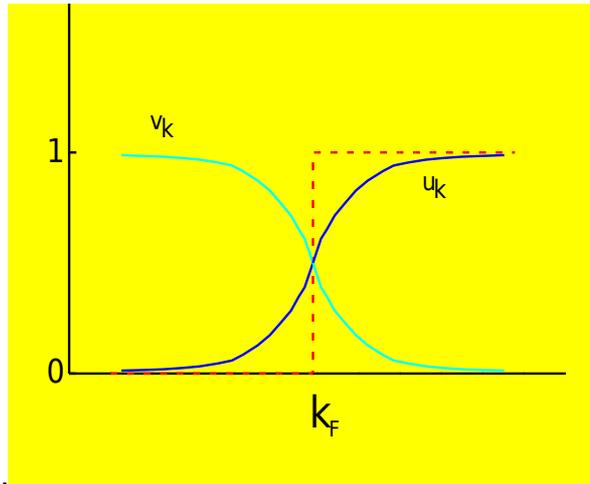


Рис. 10 Случай нормальных возбуждений ферми-жидкости показан красным пунктиром.

Мы видим, что «нормальные» возбуждения над основным состоянием в БКШ, строго говоря, являются нормальными квазичастицами только вдалеке от k_F .

Задача: Сравнить спектр возбуждений нормального ферми-газа со спектром возбуждений сверхпроводящего состояния.

V. Методы описания систем из взаимодействующих ферми-частиц.

*Один идет прямым путем,
Другой идет по кругу
И ждет возврата...
А. Ахматова, 1940.*

5.1 Концепция пробной частицы.

Для простоты мы вначале будем предполагать, что рассматриваемая система составлена из частиц не обладающим электрическим зарядом. Любой эксперимент состоит во внешнем воздействии на изучаемую систему и исследовании ее реакции. Если внешнее возмущение достаточно мало, то отклик системы будет пропорционален возмущению и будет определяться свойствами невозмущенной системы. Ответная реакция задается спектром элементарных возбуждений исследуемой системы, который, в свою очередь зависит от корреляций в положениях и импульсах частиц составляющих систему.

Представим себе, что мы собираемся исследовать свойства системы взаимодействующих частиц так, как это делается в ядерной физике, с помощью рассеяния пробной частицы. Пусть пробная частица, отличимая от частиц, составляющих систему, и

сами частицы, составляющие систему, - электронейтральны. (Например, в качестве пробной частицы используется нейтрон, а система представляет собой жидкий He^3).

Пробная частица до рассеяния имела импульс \mathbf{P} , массу M и энергию $P^2/2M$. После столкновения пробная частица имеет импульс $\mathbf{P}-\mathbf{q}$, а система попадает из основного в возбужденное состояние $|n\rangle$. Энергия этого состояния E_n .

Переданный импульс мы можем разбить так, как это показано на рисунке 11:

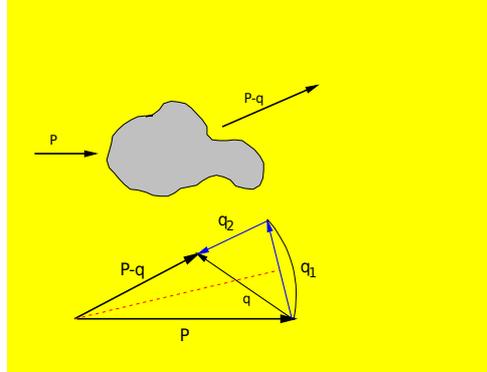


Рис.11.

Здесь импульс \mathbf{q}_1 соответствует упругому рассеянию на тот же угол, а \mathbf{q}_2 - определяет передачу энергии и не связан с углом рассеяния.

$$q_1 = 2 P \sin(\theta/2)$$

$$\omega = q_2 P / M - q_2^2 / 2M,$$

т.к. вектор \mathbf{P} укоротился на \mathbf{q}_2 . Если $q_1, q_2 \ll P$, то $q_1 = P\theta$; $q_2 = \omega M / P$. В эксперименте мы можем измерить угол рассеяния пробной частицы θ и переданную пробной частицей энергию ω , а следовательно, и \mathbf{q} .

$$q^2 = q_1^2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 \sin(\theta/2)$$

Таким образом, исследуя рассеяние пробных частиц мы можем определить вероятность рассеяния на определенный угол θ с передачей определенной энергии ω .

5.2. Динамический форм-фактор и корреляции плотности.

Предположим, что взаимодействие пробной частицы с системой не зависит от скоростей пробной частицы и частиц, составляющих систему, а зависит лишь от их координат:

$$H_{int} = \sum_i V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}), \quad (5.1)$$

где \mathbf{R} соответствует координате пробной частицы. Разложим гамильтониан взаимодействия в ряд Фурье:

$$H_{int} = \sum_i \sum_q V_q \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R})] = \sum_q V_q \rho^+(\mathbf{q}) \exp[-i\mathbf{q}\mathbf{R}]. \quad (5.2)$$

Где введено определение:

$$\rho(\mathbf{q}) = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \exp[-i\mathbf{q}\mathbf{r}] = \int d^3r \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \exp[-i\mathbf{q}\mathbf{r}] = \sum_i \exp[-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i]. \quad (5.3)$$

$$\rho^+(\mathbf{q}) = \sum_i \exp[i\mathbf{q}\mathbf{r}_i]. \quad (5.4)$$

Величина $\rho(q)$ соответствует фурье-компоненте флуктуаций плотности частиц в системе. Частицы мы считаем точечными.

В борновском приближении пробная частица до и после процесса рассеяния слабо связана с системой. Следовательно, ее импульсы до столкновения и после столкновения являются хорошими квантовыми числами. Матричный элемент перехода системы в точное возбужденное $|n\rangle$ состояние равен:

$$\langle n, \mathbf{P}-\mathbf{q} | H_{int} | \mathbf{P}, 0 \rangle = \langle n | \rho_{\mathbf{q}}^+ | 0 \rangle V_{\mathbf{q}}, \quad (5.5)$$

поскольку по координатам пробной частицы и начальное и конечное состояние являются плоскими волнами.

Таким образом, для пробной частицы, играющей роль измерительного зонда, определены передаваемый в единицу времени импульс \mathbf{q} и энергия ω . Матричный элемент для перехода системы в возбужденное состояние под воздействием пробной частицы, задан флуктуациями плотности в системе. В соответствии с золотым правилом Ферми, вероятность перехода системы в возбужденное состояние в единицу времени равна :

$$P(\mathbf{q}, \omega) = 2\pi |V_{\mathbf{q}}|^2 \sum_n |\rho_{\mathbf{q}}^+|^2_{n0} \delta(\omega - \omega_{n0}), \quad (5.6)$$

Здесь $\omega_{n0} = E_n - E_0$. В выражении для вероятности перехода под влиянием пробной частицы \mathbf{q} и ω не независимы, что можно формально учесть, умножив написанное выражение на $\delta(\omega - \mathbf{qP}/M + q^2/2M)$.

Следовательно, согласно (5.6), вероятность перехода системы в возбужденное состояние может быть представлена в виде произведения двух сомножителей, один из которых зависит от типа взаимодействия пробной частицы с системой, а второй определяется исключительно свойствами самой системы.

$$P(\mathbf{q}, \omega) = 2\pi |V_{\mathbf{q}}|^2 S(\mathbf{q}, \omega), \quad (5.7)$$

где вновь введенная величина

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \sum_n |\rho_{\mathbf{q}}^+|^2_{n0} \delta(\omega - \omega_{n0}), \quad (5.8)$$

называется **динамическим форм-фактором**.

Покажем, что динамический форм-фактор связан с корреляциями плотности частиц. В представлении Гейзенберга зависимость от времени (см. Квантовую механику Ландау и Лифшица) может быть перенесена с волновых функций на операторы.

$$\rho_{\mathbf{q}}^+(t) = e^{iHt} \rho_{\mathbf{q}}^+ e^{-iHt} \quad (5.9)$$

Корреляция между флуктуациями плотности в моменты времени $t = 0$ и $t = \tau$

$$S(\mathbf{q}, \tau) = \langle 0 | \rho_{\mathbf{q}}(\tau) \rho_{\mathbf{q}}^+(0) | 0 \rangle. \quad (5.10)$$

Разложим величину $S(\mathbf{q}, \tau)$ по полному набору функций, описывающему все состояния нашей системы:

$$S(\mathbf{q}, \tau) = \langle 0 | \rho_{\mathbf{q}}(\tau) | n \rangle \langle n | \rho_{\mathbf{q}}^+(0) | 0 \rangle = \langle 0 | e^{iH\tau} \rho_{\mathbf{q}} e^{-iH\tau} | n \rangle \langle n | \rho_{\mathbf{q}}^+(0) | 0 \rangle = \sum_n |\rho_{\mathbf{q}}^+|^2_{n0} e^{-i\omega_{n0}\tau}$$

Последнее равенство следует из следующих правил квантовой механики:

1. Матричные элементы операторов не изменяются при унитарном преобразовании.

$$2. \psi(\xi, t) = \exp[-iH t] \psi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} (-iHt)^n / n! \sum_k a_k \phi_k = \sum_n a_n \phi_n \exp(-iE_n t).$$

Очевидно, что $S(q, \tau)$ получается из $S(q, \omega)$ с помощью Фурье преобразования.

5.3 Статический форм – фактор.

Часто в эксперименте бывает невозможно измерить переданный системой импульс. Измеряется только угол отклонения пробной частицы и потерянная энергия. В этом случае нам необходимо иметь более грубое описание вероятности рассеяния. Определим дифференциальное сечение рассеяния с передачей энергии ω при рассеянии в телесный угол $d\Omega$ следующим образом:

$$P(\Omega, \omega) d\Omega = \sum_q P(q, \omega) \delta(\omega - \mathbf{qP}/M + q^2/2M).$$

Суммируем по тем q , для которых переданный импульс лежит в интервале $d\Omega$.

Если $P(q, \omega)$ устроено так, что при рассеянии $q \ll P$, то вероятность рассеяния в единичный телесный угол:

$$P(\Omega, \omega) = P^2 / (2\pi)^3 \int dq_{\parallel} P(q, \omega) \delta(\omega - q_{\parallel} V)$$

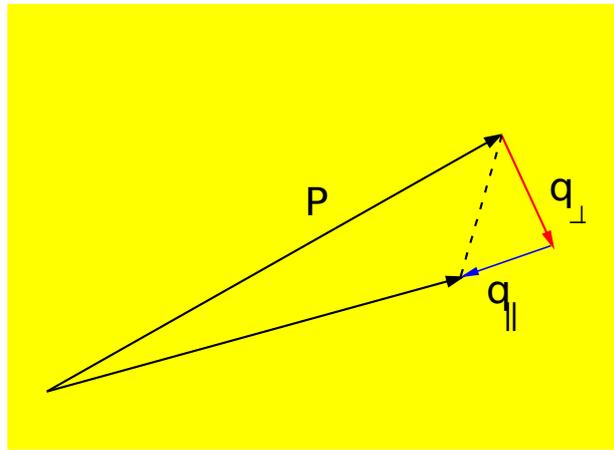


Рис. 12.

Действительно, в этом случае из рис.12 следует, что $q_{\perp} = P \theta$; $d^3q = 2\pi q_{\perp} dq_{\perp} dq_{\parallel} = 2\pi P^2 \theta d\theta dq_{\parallel} = P^2 d\Omega dq_{\parallel}$; $\omega = q_{\parallel} V$. Зачастую в эксперименте не удастся определить даже переданную энергию, следовательно, описание придется делать еще более грубым.

Дифференциальное сечение при рассеянии на угол θ определим как:

$$\sigma(\theta) = \int P(\Omega, \omega) d\omega.$$

Сделаем еще одно предположение, что переданный импульс не зависит от передаваемой энергии (в случае $q \ll P$ это предположение выполняется автоматически). Тогда:

$$\sigma(\theta) = \int_0^{\infty} d\omega P^2 / (2\pi)^3 \int dq_{\parallel} P(q, \omega) \delta(\omega - q_{\parallel} V) = \int_0^{\infty} d\omega P(q, \omega) M P / (2\pi)^3. \quad (5.11)$$

Или

$$\sigma(\theta) = M P / (2\pi)^3 2\pi |V_{q_{\parallel}}|^2 N S_q. \quad (5.12)$$

Здесь введено определение **статического форм – фактора** :

$$S_q = N^{-1} \int_0^{\infty} d\omega S(q, \omega). \quad (5.13)$$

Здесь N – число частиц в системе. Хотя как статический, так и динамический форм-факторы определены нами через отклик системы на воздействие пробной частицей, оба они имеют более широкое употребление и неоднократно встретятся нам в дальнейшем.

5.4 Функция линейной реакции.

Пусть в результате внешнего воздействия локально изменяется плотность ферми-системы. Исследуем изменение плотности, вызванные в линейном режиме потенциалом, воздействующим на плотность, т.е. **функцию реакции плотность-плотность**.

Гамильтониан взаимодействия мы запишем в виде суммы по фурье гармоникам импульса и интеграла от фурье гармоник энергии:

$$H_e = \sum_{\mathbf{q}} \int_0^{\infty} d\omega / (2\pi) \rho_{\mathbf{q}}^+ \varphi(\mathbf{q}, \omega) \exp(-i\omega t), \quad (5.14)$$

где $\varphi(\mathbf{q}, \omega)$ - фурье компонента потенциала по \mathbf{q} и ω . Для действительных возмущений, реализуемых в реальности

$$\varphi(\mathbf{q}, \omega) = \varphi^*(-\mathbf{q}, -\omega) \quad (5.15)$$

Этим свойством, например, обладает потенциал пробной частицы.

Будем предполагать, что внешний потенциал является слабым, реакция системы линейна по возмущению. В таких условиях каждая фурье – компонента действует независимо. Рассмотрим одну из Фурье – компонент. Полностью потенциал возмущения для одной гармоники должен быть записан в виде

$$H_e = \rho_{\mathbf{q}}^+ \varphi(\mathbf{q}, \omega) \exp(-i\omega t) + \text{комплексно сопряженное}. \quad (5.16)$$

С возмущением такого рода вычислить ничего невозможно, поскольку оно действует постоянно (с момента $t = -\infty$ до момента t), а система под воздействием возмущения с конечной частотой поглощает энергию. Разделим эти две проблемы:

1. В написанном виде возмущение действует в период от $-\infty$ до ∞ .

2. Конечная частота приводит к диссипации энергии, и как следствие, к нелинейным эффектам.

Обе эти трудности можно преодолеть правильным выбором начальных условий. Примем адиабатические начальные условия, соответствующие отсутствию возмущения при $t = -\infty$ и очень медленно включению возмущения во времени. Умножим H_e на $\exp(\eta t)$, где $\eta > 0$. Энергия, передаваемая системе, пропорциональна $\varphi_{\mathbf{q}}^2/\eta$. Нагрева и нелинейных эффектов не будет, если сначала $|\varphi_{\mathbf{q}}| \rightarrow 0$, а затем $\eta \rightarrow 0$. Другими словами, при вычислении линейной реакции следует считать η конечной величиной вплоть до ответа, а затем стремиться к нулю.

Введем теперь функцию реакции плотность-плотность. Средняя флуктуация плотности в момент времени t равна:

$$\langle \rho(\mathbf{q}, t) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}, t) | \rho_{\mathbf{q}} | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle,$$

где $\psi(\mathbf{r}, t)$ точная волновая функция системы при наличии возмущения.

$$\langle \rho(\mathbf{q}, t) \rangle = \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle \exp(-i\omega t) \exp(\eta t). \quad (5.17)$$

Равенство (5.17) как раз и соответствует периодическому очень медленно нарастающему возмущению. (Мы снова перешли к одной фурье гармонике частоты. Время от времени мы будем вспоминать, что в реальности гамильтониан имеет вид (5.16).)

По определению, функция реакции плотность – плотность равна:

$$\chi = \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle / \varphi(\mathbf{q}, \omega). \quad (5.18)$$

Таким образом, функция реакции плотность–плотность это нечто вроде восприимчивости системы. Реакция системы не локализована ни в пространстве, ни во времени.

5.4 Вычисление функции реакции плотность-плотность.

Для вычисления линейного отклика применим теорию возмущений в первом порядке:

$$i d/dt |\psi(t)\rangle = (H + H_e) |\psi(t)\rangle,$$

где H_e имеет симметричный вид (5.16). Такой вид возмущения выбран нами потому, что реальное возмущение действительно. Тем не менее, мы будем иметь в виду, что функция реакции плотность –плотность определена нами для гармонического возмущения (5.17). Поэтому мы выделим в решении гармоническую часть, соответствующую частоте ω и используем соотношение (5.18).

При $t = -\infty$ система находилась в основном состоянии. Разложим $|\psi(t)\rangle$ по собственным состояниям нашей системы:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) \exp(iE_n t) |n\rangle. \quad (5.19)$$

$$a_n(-\infty) = 1 \text{ для } n=0$$

$$0 \text{ для } n \neq 0.$$

Воспользуемся теорией зависящих от времени возмущений

$$a_n(t) = \left\{ (\rho_{q^+})_{n0} \varphi(q, \omega) (\omega - \omega_{n0} + i\eta)^{-1} \exp(-i\omega + i\omega_{n0} + \eta)t - (\rho_{q^-})_{n0} \varphi^+(q, \omega) (\omega + \omega_{n0} - i\eta)^{-1} \exp(i\omega + i\omega_{n0} + \eta)t \right\} \quad (5.20)$$

$$n \neq 0.$$

Теперь, для нахождения функции реакции плотность – плотность нам необходимо вычислить среднюю q -компоненту плотности возмущенной системы $\langle \rho(q, t) \rangle$. Мы будем оставлять только члены первого порядка малости по возмущению, т.е. только те, которые имеют в матричном элементе $|0\rangle$ слева или справа. Кроме того, мы помним, что $\langle 0 | \rho_q | 0 \rangle = 0$ вследствие трансляционной инвариантности.

Подставив теперь в выражение для $\langle \rho(q, t) \rangle$ функции $|\psi(t)\rangle$ в виде (5.19) с коэффициентами $a_n(t)$ из (5.20), получим:

$$\langle \rho(q, t) \rangle = \sum_n \{ (\rho_q)_{0n} a_n(t) \exp(-i\omega_{n0} t) + a_n^+(t) (\rho_q)_{n0} \exp(i\omega_{n0} t) \} \quad (5.21)$$

Нам осталось подставить в (5.21) коэффициенты из (5.20). При подстановке следует удержать только члены, пропорциональные $\exp(-i\omega t)$.

$$\langle \rho(q, \omega) \rangle = \varphi(q, \omega) \sum_n |\rho_{q^+}|_{n0}^2 \{ (\omega - \omega_{n0} + i\eta)^{-1} - (\omega + \omega_{n0} + i\eta)^{-1} \}$$

Таким образом, функция реакции плотность-плотность имеет вид:

$$\chi(q, \omega) = \sum_n |\rho_{q^+}|_{n0}^2 2\omega_{n0} \{ (\omega + i\eta)^2 - \omega_{n0}^2 \}^{-1}. \quad (5.22)$$

Эта функция описывает реакцию нашей системы на периодическое воздействие с передачей энергии ω и импульса q .

5.5 Связь функции реакции плотность-плотность с динамическим форм-фактором.

По определению, динамический форм-фактор $S(q, \omega)$ равен

$$S(q, \omega) = \sum_n |\rho_{q|n0}^+|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}),$$

Следовательно,

$$\chi(q, \omega) = \int_0^\infty d\omega' S(q, \omega') \{(\omega - \omega' + i\eta)^{-1} - (\omega + \omega' + i\eta)^{-1}\} \quad (5.23)$$

Разобьем χ на мнимую и действительную части $\chi = \chi' + i\chi''$.

Поскольку

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} (x - a + i\eta)^{-1} = P\{(x - a)^{-1}\} - i\pi\delta(x - a), \quad (5.24)$$

где P означает главное значение,

$$\chi' = \int_0^\infty d\omega' S(q, \omega') P\{2\omega' (\omega^2 - \omega'^2)^{-1}\} \quad (5.25)$$

$$\chi'' = -\pi\{S(q, \omega) - S(q, -\omega)\}. \quad (5.26)$$

Мы видим, что χ' является четной функцией частоты, а χ'' – нечетной. Функция реакции плотность-плотность и динамический форм-фактор выражаются друг через друга, и следовательно, несут одинаковую информацию. В дальнейшем мы будем вычислять эти величины для различных систем и с разной точностью. С какой из указанных величин начинать вычисления – дело вкуса и удобства.

5.7 Связь функции реакции плотность-плотность с термодинамической плотностью состояний.

В пределе низкочастотного и длинноволнового воздействия на систему фермионов функция реакции плотность –плотность описывает реакцию системы на статическое макроскопическое воздействие, а следовательно, должна выражаться через сжимаемость. Пусть на отдельную частицу действует статическое поле сил, соответствующее скалярному потенциалу:

$$F(\mathbf{r}) = -i\mathbf{q} \varphi(\mathbf{q}, 0) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + \text{компл. сопр.} \quad (5.27)$$

Мы, естественно, предполагаем, что в длинноволновом пределе сила слабо изменяется на характерном расстоянии между частицами. Сила, действующая на единицу объема, равна $F(\mathbf{r}) N/\Omega$. Эта сила вызывает изменение плотности $\delta\rho(\mathbf{r})$ и давление, равное $\delta P = \delta\rho(\mathbf{r}) (\rho \kappa)^{-1}$. В статическом случае градиент давления должен компенсировать внешнюю силу.

$$F(\mathbf{r}) N/\Omega - \nabla P = 0. \quad (5.28)$$

Откуда

$$\delta\rho = -\rho^2 \kappa \varphi(\mathbf{q}, 0) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + \text{компл. Сопр.} \quad (5.29)$$

Последнее равенство означает, что предел функции реакции плотность-плотность равен:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \{\chi(q, 0)\} = -\rho^2 \kappa = -\partial\rho/\partial\mu, \quad (5.30)$$

т.е., термодинамической плотности состояний.

5.8 Вычисление динамического форм-фактора газа невзаимодействующих ферми-частиц в случае малых передач импульса.

В основном состоянии системы заполнены все одночастичные квантовые состояния типа плоских волн внутри Ферми-сферы. Оператор $\rho_{\mathbf{q}}^+$, действуя на основное состояние $|0\rangle$, вызывает переход частиц из состояния с импульсом \mathbf{p} в состояние с импульсом $\mathbf{p}+\mathbf{q}$. В силу принципа Паули исходное состояние должно быть занято, а состояние с импульсом $\mathbf{p}+\mathbf{q}$ - свободно. Разрешенные переходы легко представить графически. Для этого необходимо сдвинуть ферми-сферу на \mathbf{q} так, как это сделано на рис.4. Область на рисунке, имеющая вид полумесяца, соответствует разрешенным конечным состояниям.

Матричный элемент $(\rho_{\mathbf{q}}^+)_{n_0}$ взятый по двум плоским волнам (начального и конечного состояний) равен единице. Поэтому динамический форм-фактор свободного электронного газа равен:

$$S^0(\mathbf{q}, \omega) = \sum \delta(\omega - \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0), \quad (5.31)$$

где $\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 = 1/2m \{ (\mathbf{p}+\mathbf{q})^2 - \mathbf{p}^2 \}$, а суммирование проводится для $p < p_F$ и $|\mathbf{p}+\mathbf{q}| > p_F$.

Выражение (5.31) может быть переписано в виде, явно учитывающем заполнение начальных и конечных состояний:

$$S^0(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma}^0 (1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^0) \delta(\omega - \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0). \quad (5.32)$$

Последнее означает, что функция реакции плотность-плотность для газа невзаимодействующих фермионов имеет вид:

$$\chi^0(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma}^0 (1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^0) \{ (\omega - \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 + i\eta)^{-1} - (\omega + \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 + i\eta)^{-1} \} \quad (5.33)$$

Ниже, в качестве примера, мы рассмотрим случай $q \ll p_F$. В этом случае $\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 = pqm^{-1} \cos \theta$, где θ – угол рассеяния. Суммирование в (5.31) нужно вести по кольцу, сечение которого на рис.13 изображено двумя жирными отрезками.

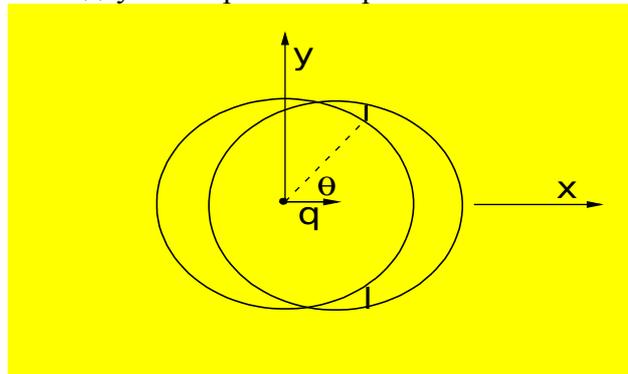


Рис.13.

Ширина кольца Δ равна:

$$\Delta = q \, dy/dx = q \, d\{(p^2 - x^2)^{1/2}\}/dx = q \, \text{Cos}\theta / \text{Sin}\theta .$$

Площадь кольца:

$$S = 2\pi r \, \text{Sin}\theta \, q \, \text{Cos}\theta / \text{Sin}\theta = 2\pi \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 m .$$

Заменив в (5.31) суммирование на интегрирование по $dp_x dp_y dp_z / (2\pi)^3$ и вспомнив, что $dp_x = p \cos\theta$, получим для динамического форм-фактора при $q \ll p_F$:

$$S^0(\mathbf{q}, \omega) = m^2 \omega / 2\pi^2 q \quad \text{для } \omega < qv_F$$

$$S^0(q, \omega) = 0 \quad \text{для } \omega > qv_F, \quad (5.34)$$

что показано на рис.14.

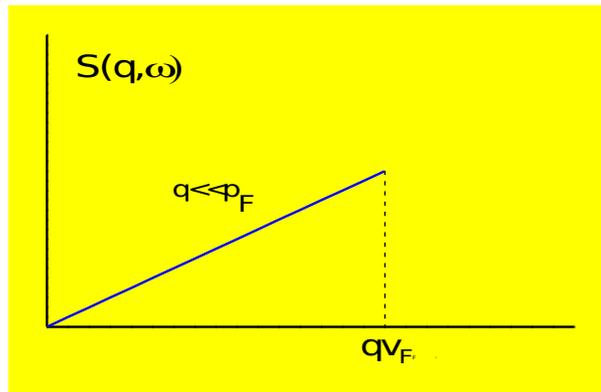


Рис.14.

5.9 Динамический форм-фактор ферми-жидкости: структура вкладов.

Как уже упоминалось, возбужденное состояние нейтральной ферми-жидкости должно иметь то же число частиц, что и основное состояние, но обладать импульсом \mathbf{q} . Это возможно при возбуждении одной частицы и появлении одного пустого места: т.е. при однопарном возбуждении. Возможны, также многопарные возбуждения, соответствующие рождению многих частиц и появлению многих пустых мест. Помимо индивидуальных возбуждений, флуктуации плотности могут быть связаны с коллективными модами. В нейтральной системе представителем коллективных мод является нулевой звук.

Рассмотрим вклад каждого типа возбуждений более подробно:

1. Однопарные возбуждения.

Спектр качественно похож на спектр ранее рассмотренных однопарных возбуждений у невзаимодействующих ферми-частиц. При $q \ll p_F$ имеет резкую границу, при $q \approx p_F$ граница размыта. Основное отличие от случая невзаимодействующих частиц состоит в том, что $|\rho^+_{\mathbf{q}}|$ не равен единице. Поэтому зависимость форм-фактора от частоты, оставаясь качественно похожей на случай невзаимодействующего ферми-газа, может быть более сложной.

2. Многопарные возбуждения.

При сохранении импульса энергия многопарных возбуждений простирается от нуля до бесконечности. Число многопарных комбинаций в интервале $d\omega$ максимально при энергии возбуждения масштаба фермиевской. В результате мы имеем следующую качественную картину для динамического форм-фактора:

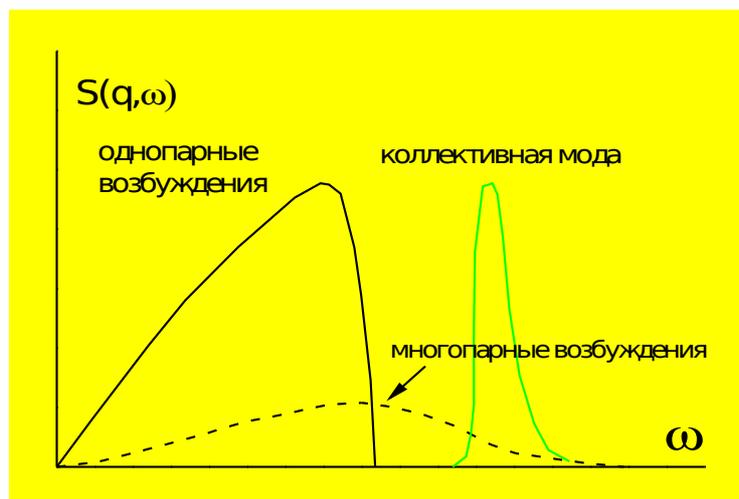


Рис.15.

В области малых частот требуется только учет одних однопарных возбуждений. Действительно, вследствие сохранения энергии, каждая из $2n$ частиц многопарного возбуждения (n пар) должна лежать в интервале ω от ферми-поверхности. Число конфигураций, в которых $2n$ частиц располагаются в интервале ω , равно ω^{2n} . Однако суммарная энергия всех возбуждений лежит в интервале $d\omega$, что уменьшает степень до ω^{2n-1} . Для двухпарных возбуждений это означает, что соответствующий вклад в динамический форм-фактор будет пропорционален ω^3 . Теория ферми-жидкости Ландау соответствует пренебрежению многопарными возбуждениями. Поскольку $S(q, \omega)$ в низких частотах качественно подобен в случаях присутствия и отсутствия взаимодействия, в качестве модели мы в дальнейшем попробуем использовать динамический форм-фактор невзаимодействующего газа.

VI. Заряженные ферми-жидкости.

Прежде, чем подключить зарядное устройство, убедитесь в безопасности выполняемой процедуры, а также в том, что напряжение вашей сети соответствует рекомендованному номиналу.

Из инструкции по использованию зарядного устройства.

6.1 Общие замечания.

Прежде всего отметим, что система одинаковых заряженных частиц неустойчива. Кулоновское отталкивание приведет к разбеганию частиц в пространстве. Чтобы этого не произошло, мы будем считать, что в целом система электронейтральна, т.е. заряд электронов компенсируется однородным положительным зарядом (зарядом ионных остовов, например). В двумерных электронных системах удастся разделить положительные и отрицательные заряды пространственно так, как это показано на Рис.16. В этом случае для положительного заряда очень хороша модель однородного положительно заряженного фона. Часто мы будем применять ту же модель и к трехмерным системам

Кулоновские силы очень медленно спадают с расстоянием (у взаимодействия вообще нет характерного радиуса). Из-за дальнедействующего характера кулоновского поля любой расчет с необрезанным взаимодействием приведет к расходимости. Подобные расходимости возникают, например, при вычислении энергии основного состояния во втором порядке теории возмущений или при вычислении групповой скорости на поверхности Ферми в приближении Хартри-Фока.

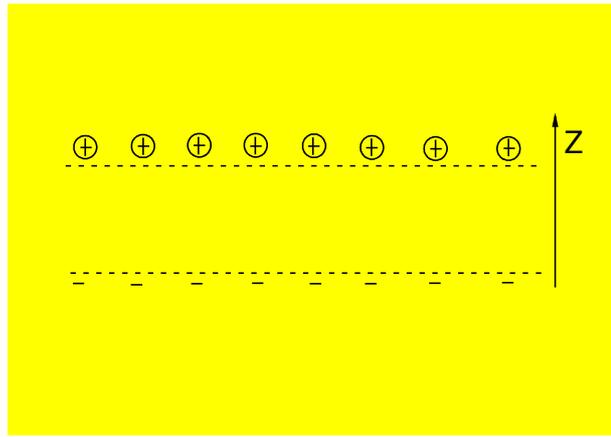


Рис.16. Плюсики отмечены неподвижные ионные остовы доноров в полупроводниковой структуре. Минусы соответствуют делокализованным двумерным электронам заряженной ферми-жидкости. Фурье компонента кулоновского потенциала равна в трехмерном случае:

$$V_q = \int d^3\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) e^2/r = 4\pi e^2 q^{-2} \quad (6.1)$$

а для двумерных систем соответствующая компонента равна

$$V_q = \int d^2\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) e^2/r = 2\pi e^2 q^{-1}. \quad (6.2)$$

Именно появление степени q в знаменателе выражений (6.1) и (6.2) приводит к упомянутым расходимостям. Из-за отталкивания между электронами, любой «пробный» электрон окружен обеднением электронной плотности. Компенсирующий положительный заряд области обеднения и обрезает взаимодействие.

Движущийся электрон старается перенести с собой экранирующую его дырку. Однако степень успешности этого действия зависит от скорости экранируемой частицы. Другими словами, можно ожидать, что динамическое экранирование перемещающегося заряда будет отличаться от статического экранирования. Основной проблемой дальнейшего рассмотрения будет последовательное рассмотрение динамического экранирования.

Наличие компенсирующего заряда повышает жесткость ферми-системы и приводит к новой ветви коллективных колебаний – плазменным колебаниям. Все сказанное означает, что перенос ранее развитых представлений на заряженные системы требует осторожности.

6.2 Статическое экранирование, приближение Томаса-Ферми.

Пусть «пробный» заряд z находится в начале координат. Эффективный потенциал $\phi(\mathbf{r})$ и поляризационный заряд $\langle\rho(\mathbf{r})\rangle$ связаны уравнением Пуассона:

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = -4\pi (z \delta(\mathbf{r}) + e\langle\rho(\mathbf{r})\rangle). \quad (6.3)$$

Вычислим плотность индуцированных заряда $\langle\rho(\mathbf{r})\rangle$ в приближении, известном как приближение Томаса-Ферми. Примем, что электрохимический потенциал равен сумме потенциальной энергии и кинетической энергии невзаимодействующих фермионов, определяемой в трехмерном случае из соотношения

$$N/\Omega = (2m E_F)^{3/2}/3\pi^2. \quad (6.4)$$

Задача: Получить соотношение, аналогичное (6.4), в двумерном случае.

В условиях равновесия электрохимический потенциал электронов не зависит от координат, следовательно:

$$\mu = E_F(\mathbf{r}) - e\varphi(\mathbf{r}) \quad (6.5)$$

Изменение ферми-энергии приводит к изменению плотности электронов. В первом порядке:

$$\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = 3/2 e\varphi(\mathbf{r}) N / (\Omega E_F(\varphi=0)). \quad (6.6)$$

В фурье-компонентах комбинации уравнений (6.3) и (6.6) соответствует:

$$(q^2 + q_{TF}^2) \varphi(q) = 4\pi z \quad \text{или} \quad \varphi(q) = 4\pi z (q^2 + q_{TF}^2)^{-1}, \quad (6.7)$$

где $q_{TF} = (6\pi N e^2 / (\Omega E_F(\varphi=0)))^{1/2}$. (Строго говоря, в выражении для q_{TF} отношение $N / (\Omega E_F(\varphi=0))$ следует заменить на термодинамическую плотность состояний.) Переходя к реальному пространству, имеем:

$$\varphi(\mathbf{r}) = z/r \exp(-q_{TF}r). \quad (6.8)$$

Откуда видно, что кулоновский потенциал в статическом случае обрезается на расстоянии, равном обратному Томас-Фермиевскому вектору.

Задача: Переписать уравнения (6.5) – (6.8) для двумерного случая.

Интересно сравнить обратный Томас-Фермиевский вектор со средним расстоянием между электронами $r_0^{-1} = (N/\Omega)^{1/3}$:

$$(q_{TF}r_0)^{-1} = (E_F(\varphi=0) r_0 / 6\pi e^2)^{1/2} \quad (6.9)$$

В типичных металлах потенциальная энергия сравнима с кинетической (см. п.1.2) и поля экранируются на межатомных расстояниях. Приближение Томаса-Ферми при этом не работает по двум причинам:

Во-первых отсутствует приближение среднего поля, пригодное на масштабах больше межатомного.

Во-вторых, в Томас-Фермиевском приближении мы пренебрегли взаимодействием между электронами, что возможно только при $E_F \gg e^2 / r_0$.

6.3 Динамическое экранирование и плазменные колебания.

Приведенный выше расчет экранирования не может быть использован при вычислениях экранирования межэлектронного взаимодействия, поскольку электроны движутся. Рассмотрим в качестве примера экранирование пробного заряда, движущегося со скоростью V_e в плазме, состоящей из однородного положительного фона и электронной жидкости.

Плотность заряда, связанная с пробной частицей равна $\rho_e(\mathbf{r},t) = z\delta(\mathbf{r}-V_e t)$. Пробный заряд создает зависящую от времени поляризацию среды:

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r},t) = -4\pi (z \delta(\mathbf{r}-V_e t) + e\langle \rho(\mathbf{r},t) \rangle). \quad (6.10)$$

В фурье-компонентах

$$\varphi(\mathbf{q}, \omega) = 4\pi/q^2 [z \delta(\omega - V_e q) + e\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle]. \quad (6.11)$$

Задача об экранировании пробного заряда свелась к проблеме отыскания $\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle$. К той же проблеме сводится и вопрос об экранировании межэлектронного взаимодействия. Электроны среды, взаимодействующие с пробной частицей, видят не только ее заряд, но и созданную ей поляризационную область. Поэтому, как известно из курса общей физики, в среде взаимодействующих частиц могут распространяться плазменные колебания. В трехмерном случае в пределе длинных волн их частота равна

$$\omega_p = (4\pi N e^2 / m \Omega)^{1/2}.$$

Поскольку и экранирование и плазменные колебания являются результатом поляризационных явлений в плазме, они должны рассматриваться в рамках общего подхода.

6.4. Диэлектрическая реакция на электрическое поле.

Пусть в электронной системе присутствуют внешние заряды $z\rho_e(\mathbf{r}, t)$, создающие внутри системы электрическое поле \mathbf{D} (мы предполагаем, что диэлектрическая проницаемость, связанная с зарядами ионных остовов, равна единице):

$$\text{div } \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 4\pi z\rho_e(\mathbf{r}, t), \quad (6.12)$$

Появление индуцированного полем $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ пространственного заряда $\langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle$ в системе создаст дополнительное электрическое поле \mathbf{G}_p .

Полное электрическое поле \mathbf{G} составит из суммы

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{G}_p(\mathbf{r}, t), \quad (6.13)$$

где $\text{div } \mathbf{G}_p(\mathbf{r}, t) = 4\pi \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle$.

Те же соотношения в Фурье компонентах выглядят так:

$$i\mathbf{q} \mathbf{D}(\mathbf{q}, \omega) = 4\pi z \rho_e(\mathbf{q}, \omega); \quad (6.14)$$

$$i\mathbf{q} \mathbf{G}(\mathbf{q}, \omega) = 4\pi [z\rho_e(\mathbf{q}, \omega) + e\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle]. \quad (6.15)$$

Предположим, что индуцированный заряд $\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle$ сам пропорционален приложенному полю \mathbf{D} (условие линейной реакции). В результате, \mathbf{D} и \mathbf{G} оказываются пропорциональными величинами:

$$\mathbf{G}(\mathbf{q}, \omega) = \mathbf{D}(\mathbf{q}, \omega) / \epsilon(\mathbf{q}, \omega), \quad (6.16)$$

где $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ - зависящая от волнового вектора и частоты диэлектрическая проницаемость.

Она выражается следующими соотношениями через $\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle$:

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 + 4\pi e \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle / (\mathbf{q} \mathbf{G}(\mathbf{q}, \omega)); \quad (6.17)$$

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = 1 - 4\pi e \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle / (\mathbf{q} \mathbf{D}(\mathbf{q}, \omega)). \quad (6.18)$$

Не прозевайте: В уравнениях (6.12)-(6.18) мы рассматривали продольную компоненту реакции, т.е. предполагали, что векторы \mathbf{G} и \mathbf{D} параллельны.

Легко догадаться, что в проводящей среде изменение заряда под действием внешнего поля будет определяться проводимостью. Действительно,

$$e\langle \mathbf{J}(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \sigma(\mathbf{q}, \omega) \mathbf{G}(\mathbf{q}, \omega); \quad (6.19)$$

Здесь $\langle \mathbf{J}(\mathbf{q}, \omega) \rangle$ средний поток частиц. $\partial \langle \rho \rangle / \partial t + \text{div}(\langle \mathbf{J} \rangle) = 0$, следовательно, $\mathbf{q} \langle \mathbf{J}(\mathbf{q}, \omega) \rangle - \omega \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle = 0$. Из этих соотношений получаем:

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 + 4\pi i \sigma(\mathbf{q}, \omega) / \omega. \quad (6.20)$$

6.5 Уравнение Ландау-Силина.

Теория ферми-жидкости Ландау может быть распространена на системы с кулоновским взаимодействием, если самосогласованным образом учесть эффекты динамического экранирования [6]. Делается это следующим образом. Будем строить теорию Ландау по отношению к динамически экранированным частицам. Взаимодействие между двумя экранированными частицами, в отличие от исходного кулоновского, является короткодействующим. Для него справедливо соотношение (2.11) и кинетическое уравнение (2.33), если в это кинетическое уравнение дополнительно ввести член, связанный с средним электрическим полем, созданным остальными частицами. Возмущение функции распределения приводит к изменению электронной плотности:

$$\langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle = \sum_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t), \quad (6.21)$$

с которой связано поляризационное электрическое поле $\mathbf{G}_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$

$$\text{div} \mathbf{G}_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = 4\pi e \sum_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \quad (6.22)$$

Поле $\mathbf{G}_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ должно быть учтено в кинетическом уравнении как дополнительное электрическое поле. В простейшем случае отсутствия столкновений и внешних полей, кинетическое уравнение приобретает вид:

$$(\partial \delta n_{\mathbf{p}} / \partial t) + \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{p}} + \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \sum_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}, t) - e \mathbf{G}_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu) = 0, \quad (6.23)$$

где поляризационное поле определено выражением (6.22). В фурье-компонентах оно имеет вид:

$$(\mathbf{q} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \omega) \delta n_{\mathbf{p}} + \mathbf{q} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \sum_{\mathbf{p}'} (f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} + 4\pi e^2 / q^2) \delta n_{\mathbf{p}'} = 0. \quad (6.24)$$

Как мы видим, полное взаимодействие между квазичастицами описывается суммой $(f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} + 4\pi e^2 / q^2)$, в которой $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ не имеет сингулярности при нулевой передаче импульса. Уравнение Ландау-Силина (6.24) справедливо в отсутствие внешних полей при выполнении следующих условий:

Волновые векторы и частоты должны быть макроскопическими

$$\omega \ll \mu, \quad q v_F \ll \mu.$$

Частота столкновений ν должна быть малой

$$\nu \ll \omega \quad \text{или} \quad \nu \ll q v_F.$$

Уравнение Ландау-Силина позволяет описать многие макроскопические свойства бесстолкновительной плазмы, в частности, найти ее диэлектрическую проницаемость. В последнем случае в уравнение необходимо ввести внешнее возмущение в виде плоской монохроматической волны. Мы не будем проводить соответствующих вычислений, а приведем только ответ для трехмерных систем:

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - 4\pi e^2/q^2 \chi^n(\mathbf{q}, \omega). \quad (6.25)$$

Здесь через $\chi^n(\mathbf{q}, \omega)$ обозначена функция реакции плотность-плотность нейтральной системы с теми же f_{pp} , ϵ_p и плотностью ферми-жидкости. Выражение (6.25) еще не раз встретится нам в дальнейшем.

При вычислении сжимаемости мы предполагали, что положительный фон сжимается вместе с системой. Это предположение находится в противоречии с предположениями, сделанными при выводе уравнения Ландау-Силина. Следовательно, сжимаемость не может быть получена из (6.24) и должна быть вычислена отдельно. Впрочем, ответ не сложно угадать. Если мы полагаем, что система в процессе сжатия остается электронейтральной, то ответ будет точно совпадать с ответом для сжимаемости незаряженной системы (2.41).

6.6 Диэлектрическая проницаемость и функция реакции плотность-плотность.

В общем случае отклик электронной системы должен описываться тензором, в котором для изотропной системы остаются лишь две независимые компоненты: продольная и поперечная. Ниже мы продолжим рассмотрение продольной реакции. Пусть в систему внесен внешний заряд $e\rho_e(\mathbf{r}, t)$. Реакция электронной системы находится из соотношений:

$$\begin{aligned} i\mathbf{q} \mathbf{D}(\mathbf{q}, \omega) &= 4\pi e \rho_e(\mathbf{q}, \omega); \\ \epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) &= 1 - 4\pi e \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle / (\mathbf{q} \mathbf{D}(\mathbf{q}, \omega)). \end{aligned}$$

Откуда мгновенно получаем

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle / \rho_e(\mathbf{q}, \omega); \quad (6.26)$$

Умножив и разделив второй член в правой части (6.26) на $V_q = 4\pi e^2/q^2$ (в трехмерном случае) и вспомнив определение функции реакции плотность-плотность, получим:

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + (4\pi e^2/q^2) \chi(\mathbf{q}, \omega). \quad (6.27)$$

По определению, функция реакции плотность-плотность введена по отношению к внешнему возмущению. На самом деле, частицы системы должны испытывать возмущение не затравочным, а экранированным потенциалом $V_q \rho_e(\mathbf{q}, \omega) / \epsilon(\mathbf{q}, \omega)$. Введем функцию реакции плотность-плотность на экранированном поле:

$$\chi^{\text{эк}}(\mathbf{q}, \omega) = \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle / [V_q \rho_e(\mathbf{q}, \omega) / \epsilon(\mathbf{q}, \omega)] = \epsilon(\mathbf{q}, \omega) \chi(\mathbf{q}, \omega). \quad (6.28)$$

С помощью вновь введенной функции соотношение (6.27) можно переписать как

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - (4\pi e^2/q^2) \chi^{\text{эк}}(\mathbf{q}, \omega), \quad (6.29)$$

что есть точная копия (6.25), если считать, что в длинноволновом пределе $\chi^{\text{эк}}(\mathbf{q}, \omega)$ описывает функцию реакции плотность-плотность нейтральной системы с эквивалентной плотностью, таким же взаимодействием на расстояниях, больших радиуса экранирования и спектром. В сущности, выражение (6.29) задает путь приближенного вычисления $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ для $r_s \ll 1$. Для этого достаточно заменить в (6.29) $\chi^{\text{эк}}(\mathbf{q}, \omega)$ на величину функции реакции плотность-плотность системы невзаимодействующих фермионов той же массы и плотности $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$. Последнюю можно вычислить следующим образом: сначала

находим динамический форм –фактор по формуле (5.8), пренебрегая многопарными возбуждениями и коллективными модами, а затем вычисляем $\chi^0(q, \omega)$ по формуле (5.24). Ответ, известный как формула Линдхардта, выглядит следующим образом:

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - (4\pi e^2/q^2) \sum_{\mathbf{p}\sigma} 2\omega_{\mathbf{p}q}^0 n_{\mathbf{p}\sigma}^0 (1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^0) [(\omega - i\eta)^2 - (\omega_{\mathbf{p}q}^0)^2]^{-1}. \quad (6.30)$$

VII. Микроскопические теории линейного отклика.

*Злые козни объединившихся микроскопистов
и непрекращающаяся их глупость. Новые испытания....
Э.Т.А. Гофман Повелитель блох.*

7.1 Диэлектрическая проницаемость в приближении Хартри-Фока.

Рассмотрим электрон-дырочную пару с импульсом $-\mathbf{q}$:

$$\rho_{\mathbf{p}q\sigma} = c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}. \quad (7.1)$$

На нее действует поле, определяемое гамильтонианом (4.1), и гармоническое возмущение (5.16). Наша цель состоит в отыскании средней плотности

$$\rho_q = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \rho_{\mathbf{p}q\sigma}. \quad (7.2)$$

Для реализации этой цели используем операторное уравнение

$$i d/dt (\rho_{\mathbf{p}q}) = [\rho_{\mathbf{p}q} H] \quad (7.3)$$

В качестве самого грубого приближения не будем учитывать в гамильтониане H электрон-электронное взаимодействие, т.е. опустим второй член в правой части (4.1).

Результат коммутации выглядит как

$$i d/dt (\rho_{\mathbf{p}q}) = \omega_{\mathbf{p}q}^0 \rho_{\mathbf{p}q} + \{c_{\mathbf{p}}^+ c_{\mathbf{p}} - c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}\} e\varphi \exp(-i\omega t + i\eta t) + \{c_{\mathbf{p}}^+ c_{\mathbf{p}+2\mathbf{q}} - c_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}\} e\varphi^+ \exp(i\omega t + i\eta t)$$

Третий член в правой части соответствует передаче импульса $2\mathbf{q}$ и должен быть опущен при вычислении функции линейного отклика. Вычислив среднее от правой и левой части по основному состоянию, получим:

$$\langle \rho_q \rangle = \sum_{\mathbf{p}} \rho_{\mathbf{p}q} = \sum_{\mathbf{p}} (n_{\mathbf{p}}^0 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0) (\omega - \omega_{\mathbf{p}q}^0 + i\eta)^{-1} e\varphi. \quad (7.4)$$

Естественно, что действуя подобным образом, мы получили функцию реакции плотность-плотность для газа невзаимодействующих фермионов.

$$\chi^0(q, \omega) = \sum_{\mathbf{p}} (n_{\mathbf{p}}^0 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0) (\omega - \omega_{\mathbf{p}q}^0 + i\eta)^{-1}. \quad (7.5)$$

Выражение (7.5) совпадает с ранее полученным выражением (5.33), если в последнем во втором члене изменить индексы суммирования $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}-\mathbf{q}$, $\omega_{\mathbf{p}q}^0 \rightarrow -\omega_{\mathbf{p}q}^0$.

Осталось подставить (7.5) в выражение для диэлектрической проницаемости (6.27). Получим,

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + (4\pi e^2/q^2) \chi^0(\mathbf{q}, \omega) = 1 + (4\pi e^2/q^2) \sum_{\mathbf{p}} (n_{\mathbf{p}}^0 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0) (\omega - \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 + i\eta)^{-1}. \quad (7.6)$$

Это и есть результат в приближении Хартри-Фока. Если второй член в (7.6) мал по сравнению с единицей, то (7.6) с точностью до членов второго порядка малости совпадает с (6.30).

7.2 Парная корреляционная функция и эффективная масса квазичастиц в приближении Хартри-Фока.

Прежде всего определим парную функцию распределения $g(\mathbf{r})$. Для этого рассмотрим функцию корреляции плотность-плотность.

$$S(\mathbf{r}) = N^{-1} \langle 0 | \rho(\mathbf{r}+\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') | 0 \rangle \quad (7.7)$$

Здесь и ниже для простоты будем считать объем системы Ω единичным. Простыми преобразованиями можно выразить парную корреляционную функцию (7.7) через парную функцию распределения, выделив автокорреляционную часть:

$$S(\mathbf{r}) = N^{-1} \langle 0 | \sum_{ij} \delta(\mathbf{r}+\mathbf{r}'-\mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_j) | 0 \rangle = N^{-1} \langle 0 | \sum_{ij} \delta(\mathbf{r}+\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i) | 0 \rangle = \delta(\mathbf{r}) + (N-1) g(\mathbf{r}). \quad (7.8)$$

Здесь

$$g(\mathbf{r}) = N^{-1}(N-1)^{-1} \langle 0 | \sum_{i \neq j} \delta(\mathbf{r}+\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i) | 0 \rangle. \quad (7.9)$$

Очевидно, что статический форм-фактор является фурье-компонентой функции корреляции плотность-плотность.

$$S_{\mathbf{q}} = \int d^3\mathbf{r} S(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) = N^{-1} \langle 0 | \rho_{+\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle \quad (7.10)$$

В приближении Хартри-Фока мы заменяем реальный статический форм-фактор на форм-фактор невзаимодействующего ферми газа. Последний, согласно (5.13) и (5.31), вычисляется как нормированный на число частиц объем, заштрихованный отрезками жирной прямой на рис.12.

$$S_{\mathbf{q}}^0 = S_{\mathbf{q}}^{\text{HFA}} = \begin{cases} 3q/4p_F - q^3/16(p_F)^3 & \text{для } 0 < q < 2 p_F \\ = 1 & \text{для } q > 2 p_F. \end{cases} \quad (7.11)$$

Для отыскания парной функции распределения осталось сделать обратное преобразование Фурье от найденного выражения для $S_{\mathbf{q}}^0$. Ответ равен:

$$g^{\text{HFA}}(\mathbf{r}) = 1 - 9/2 \{ [\sin(p_F r) - p_F r \cos(p_F r)] / p_F^3 \}^2. \quad (7.12)$$

График этой функции изображен на рис.17.

Если бы корреляции между положениями частиц вообще отсутствовали, то $g(\mathbf{r})$ была бы равна единице. Отклонение функции парного распределения от единицы связано с принципом Паули. Корреляции в распределении частиц с противоположно направленными спинами отсутствуют, а вероятность найти в одной точке две частицы с одинаково направленными спинами равна нулю. Как мы видим, в приближении Хартри-Фока учитываются только кинематические (обусловленные принципом Паули) корреляции. Ясно, что в реальности функция парного распределения а нуле обязана занулиться: каждый из электронов обладает конечной энергией, а потенциальная энергия

взаимодействия обращается в бесконечность при нулевом расстоянии между частицами. Следовательно, должен существовать другой тип корреляций (динамические корреляции), обусловленный взаимодействием.

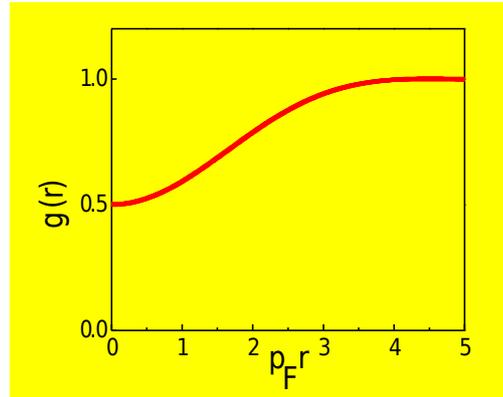


Рис. 17.

Не составляет труда определить параметры квазичастиц в приближении Хартри-Фока. Пользуясь выражением (4.4), найдем:

$$\varepsilon_{p\sigma}^{\text{HFA}} = \partial E^{\text{HFA}} / \partial n_{p\sigma} = \varepsilon_{p\sigma}^0 - \sum_{p'\sigma'} n_{p'\sigma'}^0 V_{p'-p} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (7.13)$$

Здесь $p' \geq p_F$, $p_F \geq p$.

$$f_{p\sigma, p'\sigma'}^{\text{HFA}} = \partial^2 E^{\text{HFA}} / \partial n_{p\sigma} \partial n_{p'\sigma'} = V_{p'-p} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (7.14)$$

В изотропном случае $f_{p\sigma, p'\sigma'}^{\text{HFA}}$ зависит только от косинуса угла рассеяния $\cos\theta = \mathbf{p}' \cdot \mathbf{p} / p'^2$.

$$f_{\text{HFA}}^s = f_{\text{HFA}}^a = \pi e^2 [p_F^2 (1 - \cos\theta)]^{-1}. \quad (7.15)$$

Откуда с помощью (2.19) получаем:

$$m/m^* = 1 - p_F m / (2\pi^2) \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \cos\theta f_{\text{HFA}}(\cos\theta). \quad (7.16)$$

Выражение (7.16) обладает логарифмической расходимостью, обусловленной тем, что мы пренебрегли экранированием в потенциале взаимодействия электронов.

Задача: Определить сжимаемость трехмерного электронного газа в приближении Хартри-Фока.

7.3 Диэлектрическая проницаемость в приближении хаотических фаз.

Вернемся вновь к выражению (7.3). Теперь нам, собственно, нужно перейти к учету взаимодействия между электронами. Результат коммутации оператора ρ_{pq} с оператором потенциальной энергии выглядят следующим образом: (необходимо провести коммутации и замены переменных)

$$\sum_{\mathbf{k}} 1/2 V_{\mathbf{k}} \{ \rho_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{p}}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}} - c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + (c_{\mathbf{p}}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}} - c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \rho_{\mathbf{k}} \}. \quad (7.17)$$

В сумме удержим только члены с $\mathbf{k}=\mathbf{q}$ (что и будет соответствовать приближению хаотических фаз). Среднее от коммутатора по основному состоянию равно:

$$V_{\mathbf{q}} \langle \rho_{\mathbf{q}} \{ c_{\mathbf{p}}^+ c_{\mathbf{p}} - c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} \} \rangle = V_{\mathbf{q}} (n_{\mathbf{p}}^0 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0). \quad (7.18)$$

Уравнение (7.3) приобретает вид:

$$\langle \rho_q \rangle = \sum_q (\omega - \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 + i\eta)^{-1} \{ (n_{\mathbf{p}}^0 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0) e\varphi + 4\pi e^2/q^2 (n_{\mathbf{p}}^0 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0) \}. \quad (7.19)$$

Или

$$\begin{aligned} \langle \rho_q \rangle &= \chi^0(\mathbf{q}, \omega) e\varphi (1 - 4\pi e^2/q^2 \chi^0(\mathbf{q}, \omega))^{-1}, \\ \epsilon_{\text{RPA}} &= 1 - 4\pi e^2/q^2 \chi^0(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (7.20)$$

Этот результат мы уже получали ранее (см. (6.29)). В приближении хаотических фаз частично учтены динамические корреляции. Взаимодействие между электронами заэкранировано, поэтому эффективная масса квазичастиц конечна.

7.4. Замечание о правилах сумм.

Мы видели в предыдущих параграфах, что для вычислений приходится делать радикальные упрощающие предположения. Встает вопрос, крайне актуальный для теоретиков, можно ли как-то проверить аккуратность и разумность сделанных предположений. Для контроля за теоретическими предположениями придумано несколько точных, вообще говоря, интегральных соотношений, называемых правилами сумм. Одно из них сформулировано нами в виде соотношения (5.30).

Правила сумм играют роль своеобразных светофоров для теоретиков: если одно из них не выполняется, следовать выбранным путем нельзя. Приведем без вывода в качестве примера еще одно из таких правил

$$\int_0^\infty \omega S(\mathbf{q}, \omega) d\omega = Nq^2/2m, \quad (7.21)$$

где N – число частиц в системе, а m – масса голой частицы.

7.5. Хаббардовские поправки.

При высоких плотностях электронной системы (случай малых r_s) основной вклад в корреляционную энергию обусловлен процессами с малыми передачами импульса. Для этих процессов результаты, полученные в приближении хаотических фаз, должны быть довольно точными, поскольку предположение о динамическом экранировании квазичастиц, на характерных расстояниях много больше обратного фермиевского импульса, выполняется хорошо. Однако по мере увеличения r_s становятся заметными процессы передачи импульса порядка фермиевского. Ясно, что потенциал на расстояниях, сравнимых с межчастичным будет экранироваться плохо. Приближенное выражение, описывающее процесс ухудшения экранирования при больших передачах импульса, было предложено Хаббардом:

$$\chi_{\text{экp}}^{\text{H}}(\mathbf{q}, \omega) = \chi^0(\mathbf{q}, \omega) \{ 1 + G(\mathbf{q}) 4\pi e^2/q^2 \chi^0(\mathbf{q}, \omega) \}^{-1}. \quad (7.22)$$

(Сравните с (7.20) и (6.29) согласно которым $\chi_{\text{экp}}^{\text{H}}(\mathbf{q}, \omega) = \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$.) Здесь введена функция $G(\mathbf{q})$, описывающая так называемые поправки на локальное поле (local field corrections, LFC). Хаббардом был предложен следующий вид этой функции для трехмерных электронных систем :

$$G(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} q^2 (q^2 + p_F^2)^{-1}, \quad (7.23)$$

имеющий правильные асимптотики при $q \ll p_F$ и $q \gg p_F$. С помощью (7.22) и (6.28) легко вычислить исправленную функцию реакции плотность-плотность

$$\chi^H(\mathbf{q}, \omega) = \chi^0(\mathbf{q}, \omega) \{1 - (1 - G(\mathbf{q})) 4\pi e^2 / q^2 \chi^0(\mathbf{q}, \omega)\}^{-1}. \quad (7.24)$$

В настоящее время предложено несколько видов поправок на локальное поле. Считается, что использование такого рода поправок позволяет приблизиться к рубежу $r_s = 1$ и даже продвинуться в область больших r_s .

Хаббардовская поправка в двумерном случае имеет вид:

$$G(\mathbf{q}) = (2g_v)^{-1} q (q^2 + p_F^2)^{-1/2}, \quad (7.25)$$

где g_v – число эквивалентных долин.

VIII Отклик ферми-систем на однородное электрическое поле.

На том стою – я не могу иначе.

М. Лютер.

8.2 Гамильтониан возмущения.

Отклик ферми систем на однородное электрическое поле мы рассматривали ранее неоднократно и в различных приближениях. Здесь мы несколько изменим подход к отклику на однородное статическое поле, а именно, будем рассматривать статическое поле, как предел переменного поля при частоте, стремящейся в нуль. С этой целью прежде всего перепишем гамильтониан возмущения (Поскольку материал этого раздела может быть использован для практических вычислений, здесь мы всюду явно будем выписывать постоянную Планка.)

Будем считать, что электромагнитное поле имеет вихревое происхождение и может быть описано зависящим от времени вектор – потенциалом \mathbf{A} . При наличии возмущения гамильтониан системы взаимодействующих частиц выглядит следующим образом:

$$H = 1/2m \sum_k (\mathbf{p}_k - e/c \mathbf{A}_k)^2 + 1/2 \sum_{i \neq j} e^2 / r_{ij}. \quad (8.1)$$

Разделим гамильтониан на два члена: $H = H_0 + V$, где V – потенциал взаимодействия:

$$V = - 1/2 \sum_k e/(mc) (\mathbf{p}_k \mathbf{A}_k + \mathbf{A}_k \mathbf{p}_k) + \sum_k e^2 / (2mc^2) \mathbf{A}_k^2. \quad (8.2)$$

Для произвольного оператора справедливо следующее равенство:

$$(\mathbf{p}f - f\mathbf{p}) \phi = - i\hbar (\nabla f \phi - f \nabla \phi) = - i\hbar \phi \nabla f. \quad (8.3)$$

В частности, $(\mathbf{p} \mathbf{A} - \mathbf{A} \mathbf{p}) = - i\hbar \text{div} \mathbf{A}$. Теперь выберем условия калибровки:

$$\text{div} \mathbf{A} = 0; \quad (8.4)$$

тогда

$$V = - \sum_k e/(mc) \mathbf{A}_k \mathbf{p}_k + \sum_k e^2 / (2mc^2) \mathbf{A}_k^2. \quad (8.5)$$

Второй член сразу отбросим, поскольку нас интересует только линейный отклик.

В однородном гармоническом электрическом поле $\mathbf{E} = -1/c \partial \mathbf{A} / \partial t$

$$|A_x| = cE_x/\omega, \quad (8.6)$$

а гамильтониан возмущения имеет вид:

$$V = \sum_k (e\hbar)/(m\omega) E_x \partial/\partial x_k; \quad (8.7)$$

где индекс k, как и ранее, номерует частицы системы.

8.2 Формула Кубо - Гринвуда

Перейдем теперь к вычислению проводимости на частоте ω . Определим ее через среднюю мощность потерь на частоте ω в единице объема системы. Мощность потерь равна:

$$\frac{1}{2} E_x^2 \sigma(\omega). \quad (8.8)$$

Вычислим эту же величину рассматривая переходы частиц системы в возбужденные состояния. Вероятность перехода из состояния с энергией ϵ в состояние с энергией $\epsilon + \hbar\omega$, в соответствии с золотым правилом Ферми, равна:

$$w = 2\pi/\hbar E_x^2 (e\hbar)^2/(m\omega)^2 |D|^2 N(\epsilon + \hbar\omega), \quad (8.9)$$

где $N(\epsilon + \hbar\omega)$ – плотность конечных состояний, а D , согласно предыдущему параграфу,

$$D = \int d^3x \psi_{\epsilon}^* \partial \psi_{\epsilon} / \partial x. \quad (8.10)$$

. Имея в виду, что нам потребуется величина $w(\omega) d\omega$, интеграл перекрытия следует усреднить по небольшой области энергий

$$w = 2\pi/\hbar E_x^2 (e\hbar)^2/(m\omega)^2 D_{cp}^2 N(\epsilon + \hbar\omega),$$

Теперь вычислим потери энергии: Нужно учесть прямые и обратные переходы, а также число электронов, совершающих переходы, и число свободных мест. Приравнявая потери энергии, вычисленные двумя способами, получим:

$$\sigma(\omega) = 4\pi e^2 \hbar / (m^2 \omega^2) \int d\epsilon \{ n^0(\epsilon)(1 - n^0(\epsilon + \hbar\omega)) - n^0(\epsilon + \hbar\omega)(1 - n^0(\epsilon)) \} D_{cp}^2 N(\epsilon) N(\epsilon + \hbar\omega),$$

(8.11)

В фигурных скобках перекрестные произведения исчезают и остается $n^0(\epsilon) - n^0(\epsilon + \hbar\omega) = \hbar\omega (-\partial n^0/\partial \epsilon)$.

Следовательно,

$$\sigma(\omega) = \int \sigma(\epsilon, \omega) (-\partial n^0/\partial \epsilon) d\epsilon; \\ \sigma(\epsilon, \omega) = 4\pi e^2 \hbar^2 / (m^2 \omega) D_{cp}^2 N(\epsilon) N(\epsilon + \hbar\omega). \quad (8.12)$$

Выражения (8.12) известны как формула Кубо- Гринвуда. Мы видим, что если для электронов или квазичастиц можно ввести проводимость, зависящую от энергии, то полная проводимость будет суммой таких, зависящих от энергии проводимостей вблизи Ферми-уровня.

Случай нулевой температуры.

Функция распределения в этом случае имеет вид ступени. Разность функций распределения в (8.11) отлична от нуля на интервале $\hbar\omega$. Поэтому

$$\sigma(\omega) = 4\pi e^2 \hbar^2 / (m^2 \omega) \int_{\epsilon_F - \hbar\omega}^{\epsilon_F} D_{cp}^2 N(\epsilon) N(\epsilon + \hbar\omega) d\epsilon. \quad (8.13)$$

Устремляя частоту к нулю, получим проводимость на постоянном токе.

$$\sigma(0) = 4\pi e^2 \hbar^3 / m^2 D_{cp}^2 N^2(\epsilon_F). \quad (8.14)$$

Если электрон локализован, то $D_{cp}^2 = 0$, поскольку перекрытие двух волновых функций у локализованных электронов с одной энергией отсутствует.

Задача: Показать, что диссипативная проводимость идеальной двумерной электронной системы в квантующем магнитном поле равна нулю при любом факторе заполнения.

8.3 Соображения Таулесса и скейлинговая гипотеза.

Знание формулы Кубо-Гринвуда позволяет нам проследить ход соображений, приведший к скейлинговой гипотезе при исследовании перехода металл-диэлектрик. Сразу оговоримся, что в этом параграфе не будет точных вычислений. Нас будет интересовать только логика рассуждений, приведшая к скейлинговой гипотезе. Исходно задача ставилась следующим образом: как определить локализованы или делокализованы электроны на ферми-уровне не решая задачу о транспорте. Рассмотрим этот вопрос более подробно.

Пусть имеется ограниченная электронная система. Наложим на нее периодические граничные условия

$$\psi(x+L) = \exp(i\phi)\psi(x). \quad (8.15)$$

Условие (8.15) эквивалентно введению эффективного гамильтониана с фиктивным векторным потенциалом

$$A(\phi) \propto \phi/L. \quad (8.16)$$

Действительно, мы можем убрать границу, свернув систему в x -направлении в трубочку и введя вдоль оси этой трубочки поток магнитной индукции. Тогда каждый обход трубки электроном будет изменять фазу волновой функции согласно (8.15).

Рассматривая член с векторным потенциалом как возмущение, можно определить сдвиг уровней в зависимости от ϕ ... по теории возмущений:

$$(\partial^2 E_n / \partial \phi^2)_{\phi=0} = \hbar^2 / (2mL^2) \{ 1 + 2/m \sum_{j \neq n} | \langle j | p_x | n \rangle |^2 (E_j - E_n)^{-1} \}. \quad (8.17)$$

Наличие или отсутствие сдвига уровней свидетельствует о делокализованности или локализованности электронной волновой функции. Чтобы описать этот эффект количественно, введем число Таулесса

$$G_T = \Delta^{-1} \langle (\partial^2 E_n / \partial \phi^2)_{\phi=0}^2 \rangle^{1/2}. \quad (8.18)$$

Здесь Δ среднее расстояние между энергетическими уровнями вблизи уровня Ферми, а угловые скобки означают усреднение по различным конфигурациям беспорядка.

Использование числа Таулесса или его аналогов удобно при численных исследованиях перехода металл-диэлектрик. При этом рассчитывают структуру уровней системы конечного числа электронов с беспорядком, изменяют граничные условия, например, с симметричных на антисимметричные. Прodelывая эту операцию много раз для различных конфигураций беспорядка вычисляют аналог выражения (8.18). Известно, какому значению величины G_T соответствует диэлектрическое состояние.

Сделаем теперь следующие предположения:

а) Второй член в круглых скобках много больше 1.

б) $E_j - E_n = \Delta = L^{-d} N^{-1}(\epsilon_F)$,

где d – размерность системы, а $N(\epsilon_F)$ – плотность состояний на ферми-уровне.

в) $\langle |j|p_x|n\rangle$ – матричные элементы берутся при одной энергии.

Тогда

$$(\partial^2 E_n / \partial \varphi^2)_{\varphi=0} = \hbar^2 / (2mL^2) \cdot 2/m L^d N(\epsilon_F) \sum_{j \neq n} |\langle j|p_x|n\rangle|^2, \quad (8.19)$$

что следует сравнить с выражением для статической проводимости (8.14)

$$\sigma(0) = 4\pi e^2 \hbar / m^2 N^2(\epsilon_F) \Omega \sum_{j \neq n} |\langle j|p_x|n\rangle|^2 \quad (8.20)$$

Вводя кондактанс, трехмерной (в качестве примера) системы, как

$$G = \hbar / e^2 L \sigma(0) \quad (8.22)$$

(введенный таким образом кондактанс не имеет размерности), получим

$$(\partial^2 E_n / \partial \varphi^2)_{\varphi=0} = G \Delta. \quad (8.23)$$

Другими словами, число Таулесса с некоторой точностью может быть заменено безразмерным кондактансом системы. Этот факт является следствием более глубокого наблюдения – в квантовой физике систем многих частиц резкое различие между термодинамическими и кинетическими характеристиками, характерное для классической физики, замывается, поскольку и те и другие определяются спектром вблизи ферми-уровня.

Осталось сделать последний шаг: декларировать, что кондактанс (подобно числу Таулесса) может характеризовать состояние системы и кондактанс увеличенной системы является функцией коэффициента увеличения и исходного кондактанса.

$$G(qL) = f(q, G(L)); \quad q = 1 + \alpha; \quad \alpha \ll 1. \quad (8.24)$$

В нулевом приближении

$$G(L) = f[1, G(L)].$$

В первом приближении

$$\alpha L G'(L) = \alpha (\partial f / \partial q)|_{q=1}. \quad (8.25)$$

Введем новую универсальную функцию $\beta(G)$. (функцию Геллмана-Лоу):

$$(\partial f / \partial q)|_{q=1} G^{-1} = \beta(G).$$

С помощью новой функции соотношение (8.25) может быть записано как:

$$(\partial \ln G / \partial \ln L) = \beta(G). \quad (8.26)$$

Скейлинговая гипотеза предполагает, что поведение кондактанса при изменении размеров есть универсальная функция исходного кондактанса. Обсуждение следствий скейлинговой гипотезы было изложено в прошлом году (см., также [7]).

Задача: Для одномерного провода в режиме одного канала и хаотического расположения барьеров-примесей найти функцию Геллмана-Лоу пользуясь техникой Ландауэра.

Решение: Разделим обратный кондактанс провода длины L на сумму обратных кондактансов «идеальной области» (от резервуаров до ближайшей примеси) и «примесной области»:

$$y^{-1} = y_{id}^{-1} + y_{imp}^{-1} = (h/e^2)[1 + R/T]. \quad (5.19 \text{ в } [7])$$

Обратный кондактанс «идеальной области» известен и равен (h/e^2) . Нам необходимо найти коэффициенты прохождения T и отражения $R=1-T$, с учетом набега фазы в каждом акте рассеяния. Для случая двух барьеров, с усреднением по расстоянию между ними, ответ найден в [7] (5.24)

$$y_{imp}^{-1} = (1 + R_1 R_2 - T_1 T_2)(T_1 T_2)^{-1} = y_1^{-1} + y_2^{-1} + 2 y_1^{-1} y_2^{-1} e^2/h, \quad (8.27)$$

где $y_1^{-1}, y_2^{-1} = (h/e^2) R_2 / T_2$ – обратные кондактансы первого и второго барьера, соответственно.

Легко догадаться, что то же выражение будет получено и для двух областей с длинами L_1 и L_2 , если их рассматривать как последовательно включенные барьеры.

Частные производные обратного кондактанса по длинам L_1 и L_2 равны:

$$\begin{aligned} (\partial y^{-1}(L_1 + L_2))/\partial L_1 &= dy(L_1)dL_1 [1 + 2e^2/h y^{-1}(L_2)], \\ (\partial y^{-1}(L_1 + L_2))/\partial L_2 &= dy(L_2)dL_2 [1 + 2e^2/h y^{-1}(L_1)]. \end{aligned} \quad (8.28)$$

Поскольку $(\partial y^{-1}(L_1 + L_2))/\partial L_1 = (\partial y^{-1}(L_1 + L_2))/\partial L_2$, то

$$dy(L_1)dL_1 [1 + 2e^2/h y^{-1}(L_1)]^{-1} = dy(L_2)dL_2 [1 + 2e^2/h y^{-1}(L_2)]^{-1} = C. \quad (8.29)$$

Поскольку $\rho(0)=0$, то решением (8.29) является найденное Ландауэром выражение:

$$y^{-1}(L) = h/2e^2 \{ \exp[(2e^2/h)CL] - 1 \}. \quad (8.30)$$

Из (8.30) найдем для безразмерного кондактанса $G=yh/e^2$

$$d \ln G / d \ln L = \beta(G) = -G/2 (\ln(1+2/G))(1+2/G) \quad (8.31)$$

Не прозевайте: Уравнение (8.30) позволяет найти слаболокализационную поправку в одномерном случае.

IX. Практическое использование изученной техники.

До болота идти далеко,
До болота идти не легко.
«Вот камень лежит у дороги,
Присядем и вытянем ноги».
К. Чуковский.

9.1. Вычисление диэлектрической проницаемости двумерного электронного газа в приближении хаотических фаз.

Прежде всего отметим, что соотношение (7.20) в двумерном случае запишется как

$$\epsilon_{RPA} = 1 - 2\pi e^2/q \chi^0(\mathbf{q}, \omega). \quad (9.1)$$

Поэтому задача отыскания ϵ_{RPA} сводится к вычислению функции реакции плотность-плотность $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ для двумерных невзаимодействующих фермионов. В свою очередь, вычисление $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ мы можем начать с динамического форм-фактора $S^0(\mathbf{q}, \omega)$ (см.5.32), с которым искомая величина $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ связана соотношениями (5.25) и (5.26).

Итак, мы должны сосчитать число переходов с фиксированным \mathbf{q} и $\omega > 0$ из занятых состояний в пустые. При этом у нас имеются следующие ограничения: закон сохранения импульса, закон сохранения энергии и старт из занятого состояния при финише в пустом.

Для определения точки старта введем новый вектор \mathbf{a} , $\mathbf{a} \parallel \mathbf{q}$; $\mathbf{p} = \mathbf{p}_F - \mathbf{a}$; $0 < a < q$.
Законы сохранения энергии и импульса дают:

$$\omega = (\mathbf{p} + \mathbf{q})^2 / 2m - \mathbf{p}^2 / 2m = m^{-1} p_F q \cos\theta - m^{-1} a q + q^2 / 2m. \quad (9.2)$$

Для удобства введем безразмерную частоту $\Omega = \omega m / (p_F q)$. Соотношение (9.2) перепишется как

$$a / p_F = -\Omega + \cos\theta + q / 2p_F. \quad (9.3)$$

Это выражение определяет связь между a и θ при фиксированных q и Ω . Вспомним теперь, как вычисляется динамический форм-фактор. Число переходов с фиксированными dp_y и da равно dN :

$$dN = - (2\pi)^{-2} dp_y da; \quad d\omega = -(q/m) da; \quad dp_y = p_F \cos\theta d\theta. \quad (9.4)$$

Для определения динамического форм-фактора необходимо продифференцировать число переходов из (9.4) по $d\omega$ и проинтегрировать по dp_y .

$$S^0(q, \omega) = m p_F [4\pi^2 q]^{-1} \int_{\theta_1}^{\theta_2} \cos\theta d\theta = m p_F [4\pi^2 q]^{-1} \{ \sin\theta_2 - \sin\theta_1 \} \quad (9.5)$$

Таким образом, для нахождения $S^0(q, \omega)$ нам нужно определить пределы изменения угла θ при фиксированных q, ω .

Рассмотрим три различных предела по q , пытаясь в каждом из них определить область изменения $\cos\theta$.

1. $q < p_F$

Прежде всего определим область возможных a и $\cos\theta$ при фиксированном q . С этой целью обратимся к рис.18.

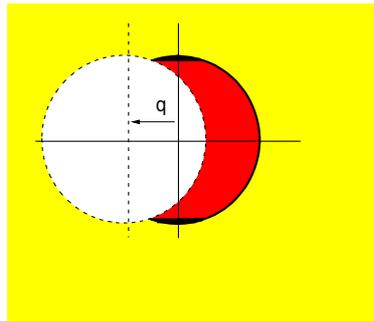


Рис.18.

На рисунке показан исходный ферми-круг и ферми-круг, сдвинутый на $-q$. Из области, закрашенной красным возможны переходы с $0 < a < q$. В областях, закрашенных черным цветом, $0 < a < 2p_F \cos\theta$. Поэтому на плоскости $(a, \cos\theta)$ переходы возможны из области, закрашенной желтым цветом. Ее удобно разбить на три района, так, как это показано на рис.18. При фиксированных q и Ω зависимость $a(\cos\theta)$ изобразится отрезком прямой. В каждом из районов длина и положение отрезка определяются величиной Ω . Легко проверить, что в третьем районе $0 < \Omega < q/2p_F$, во втором, $q/2p_F < \Omega < 1 - q/2p_F$, наконец, в первом, $1 - q/2p_F < \Omega < 1 + q/2p_F$.

В каждом из этих районов вычислим пределы изменения $\cos\theta$. Получим:

- Район 1 $\Omega - q/2p_F < \cos\theta < 1$.
 Район 2 $\Omega - q/2p_F < \cos\theta < \Omega + q/2p_F$.
 Район 3 $-\Omega + q/2p_F < \cos\theta < \Omega + q/2p_F$

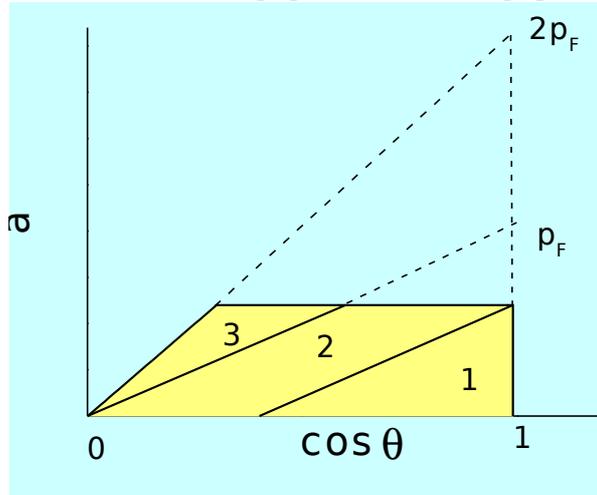


Рис. 19.

2. $2p_F > q > p_F$

Снова на плоскости $(a, \cos\theta)$ строим множество стартовых точек и разбиваем его на три района (см. рис. 20).

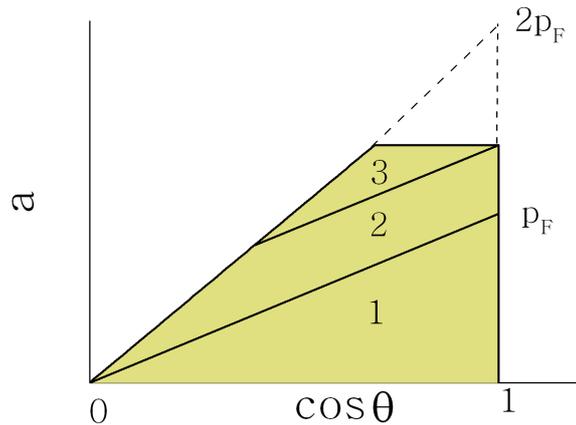


Рис.20.

Границы районов по Ω составляют: первый $q/2p_F < \Omega < 1 + q/2p_F$; второй - $1 - q/2p_F < \Omega < q/2p_F$; третий - $0 < \Omega < 1 - q/2p_F$. Соответствующие пределы изменения $\cos\theta$ равны:

- Район 1 $\Omega - q/2p_F < \cos\theta < 1$.
 Район 2 $-\Omega + q/2p_F < \cos\theta < 1$.
 Район 3 $-\Omega + q/2p_F < \cos\theta < \Omega + q/2p_F$

3. $q > 2p_F$

Множество стартовых точек и разбиение на районы показаны на рис.20. Границы районов по Ω : первый - $q/2p_F < \Omega < 1 + q/2p_F$; второй - $q/2p_F - 1 < \Omega < q/2p_F$. Пределы изменения $\cos\theta$ составляют

- Район 1 $\Omega - q/2p_F < \cos\theta < 1$.
 Район 2 $-\Omega + q/2p_F < \cos\theta < 1$.

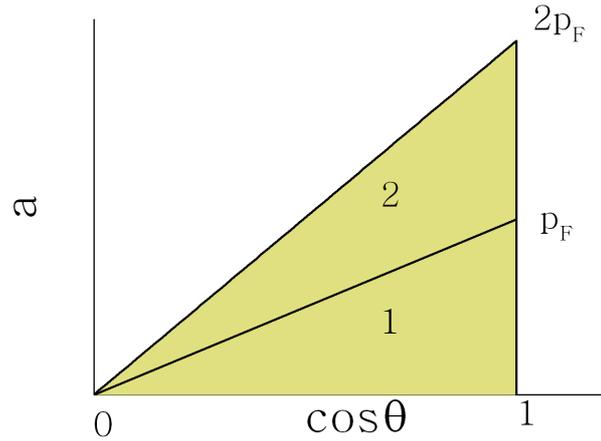


Рис. 21.

Для дальнейших вычислений рассмотрим, в качестве примера последний случай $q > 2p_F$ и вычислим, для простоты функцию реакции плотность-плотность на нулевой частоте. Прежде всего подставим в (9.5) значения углов:

$$S^0(q, \omega) = N(\epsilon_F) p_F (q\pi)^{-1} [1 - (\Omega - q/2p_F)^2]^{1/2}. \quad (9.6)$$

Здесь учтено, что (9.5) учитывает переходы только из одной (верхней, например) полуплоскости). Поскольку χ'' антисимметрична по частоте, $\chi''_0(q, 0) = 0$ и вычислять следует только χ'_0 . Согласно (5.25):

$$\chi'_0 = - \int 2d\Omega' / \Omega' N(\epsilon_F) p_F (q\pi)^{-1} [1 - (\Omega' - q/2p_F)^2]^{1/2} \quad (9.7)$$

Здесь интеграл вычисляется в пределах от $(q/2p_F - 1)$ до $(1 + q/2p_F)$. Осталась техническая, хотя и хлопотная работа по вычислению интеграла. Ответ выглядит следующим образом:

$$\chi'_0 = - N(\epsilon_F) \{ 1 - [1 - (2 p_F/q)^2]^{1/2} \} \quad q > 2 p_F. \quad (9.8)$$

В результате, при $q > 2 p_F$ в приближении хаотических фаз диэлектрическая проницаемость двумерного электронного газа равна:

$$\epsilon(q, 0) = 1 + q_{TF}/q \{ 1 - [1 - (2 p_F/q)^2]^{1/2} \}. \quad (9.9)$$

$$\epsilon(q, 0) = 1 + q_{TF}/q \quad q < 2 p_F \quad (9.10)$$

Качественно зависимость $\epsilon(q, 0)$ показана на рис. 22.

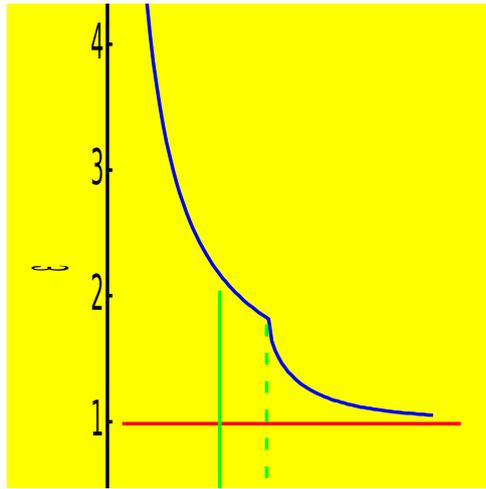


Рис.22.

Особенность в экранировании при $q=2 r_F$ и ухудшение экранирования при больших импульсах ответственны за Фриделевские осцилляции. Очевидно, что по мере уменьшения электронной плотности амплитуда осцилляций будет возрастать. На рис.23 показано сравнение экранированного кулоновского потенциала (красная линия) с затравочным потенциалом.

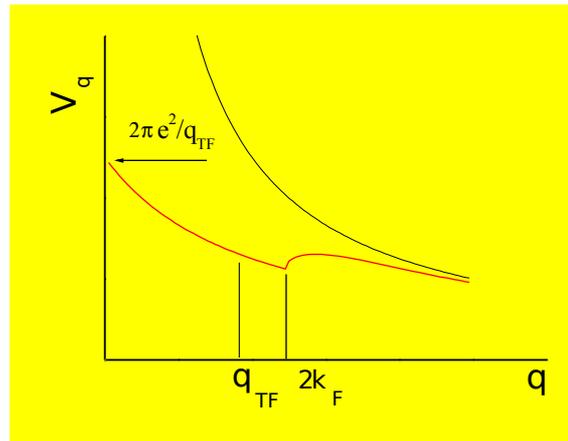


Рис.23.

9.2 Рассеяние двумерных электронов на кулоновских центрах при $T=0$.

Рассеяние электронов на заряженных примесях ограничивает длину свободного пробега электронов при очень низких температурах (когда процессы рассеяния на фононах уже несущественны) и при сравнительно малых электронных плотностях. Для вычисления времени релаксации вновь вернемся к одноэлектронной задаче, рассматривавшейся в (3.1). Будем считать, что у двумерной электронной системы единичная площадь, а волновые функции начального и конечного состояний имеют вид:

$$\varphi_i = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad \varphi_f = \exp(i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{r}). \quad (9.11)$$

Возмущением служит потенциальная энергия в поле примеси $V(\mathbf{r})$. Рассмотрим вначале частоту переходов электрона из начального состояния в во все возможные конечные. Будем полагать, что начальное состояние занято с вероятностью единица, а конечные – пустые.

$$\hbar \tau^{-1} = \hbar \sum_{\mathbf{q}} W_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}} = 2\pi \sum_{\mathbf{q}} |V(\mathbf{q})|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{k})-\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q})) \quad (9.12)$$

(см.(3.9)). Как уже обсуждалось, $V(\mathbf{0})=0$, поэтому поправка к энергии каждого из электронных состояний в поле примеси определяется теорией возмущений во втором порядке:

$$\Delta\varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q} \neq 0} |V(\mathbf{q})|^2 (\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}))^{-1}. \quad (9.13)$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \neq \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}).$$

Определив комплексную энергию как

$$\Sigma = \Delta\varepsilon - 1/2 i \hbar \tau^{-1} = \sum_{\mathbf{q}} |V(\mathbf{q})|^2 (\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i0)^{-1}. \quad (9.14)$$

(Вспомним (5.24)!) Величина Σ называется собственно энергетической функцией (self energy). Ее мнимая часть определяет частоту реальных переходов и, тем самым, задает характерное время затухания исходного состояния. Действительная часть, задающая изменение энергии, определяется виртуальными переходами (при которых энергия, не сохраняется).

Вернемся к вычислению времени релаксации. Прежде всего заменим в (9.12) суммирование на интегрирование. Кроме того, предположим, что интерференцией потенциалов, создаваемых различными примесями можно пренебречь (каждая из примесей действует как независимый рассеивающий центр), а число примесей на единице площади равно N_i . Тогда

$$\tau^{-1} = N_i 2\pi \hbar^{-1} \int |V(\mathbf{q})|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})) d^2\mathbf{q} / (2\pi)^2. \quad (9.15)$$

Здесь уже $V(\mathbf{q})$ – фурье гармоника потенциала индивидуальной примеси. Перейдем теперь от одночастичного к транспортному времени релаксации. Напомним, что переход совершается добавлением под интеграл дополнительного множителя $(1 - \cos\theta)$, где θ – угол рассеяния.

$$(1 - \cos\theta) = q^2 / 2k^2.$$

Считая температуру достаточно низкой и рассматривая исходный электрон на ферми уровне, вычислим $\tau_{\text{тр}}^{-1}(\varepsilon_F)$. В качестве потенциала примеси используем в линейном приближении экранированный потенциал $V(\mathbf{q}) = V_q = 2\pi e^2 / (q\varepsilon(q))$, где $\varepsilon(q)$ задано соотношениями (9.9) и (9.10). Легко видеть, что выбранный нами вид потенциала соответствует примесям, расположенным в плоскости двумерного электронного газа. Переходя к новым переменным по формуле $d^2\mathbf{q}/m = d\varepsilon d\theta / 2\hbar^2$, снимем δ -функцию под интегралом.

$$\tau_{\text{тр}}^{-1}(\varepsilon_F) = N_i m / (\pi \hbar^3) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta (1 - \cos\theta) |V_q|^2 \quad (9.16)$$

Пользуясь соотношениями $\hbar q = 2p_F \sin(\theta/2)$, $(1 - \cos\theta) = 2\sin^2(\theta/2)$, $\hbar dq = p_F \cos(\theta/2) d\theta$, введем новую переменную $x = \hbar q / 2p_F$. Уравнение (6.19) перепишется в виде:

$$\tau_{\text{тр}}^{-1} = \hbar^{-1} N_i / n_s [e^4 m / (\pi \hbar^2)] \int_0^1 x^2 (1 - x^2)^{-1/2} (x + x_0)^{-2} dx, \quad (9.17)$$

где $x_0 = \hbar q_{\text{TF}} / 2p_F$, а n_s – плотность двумерных электронов. Здесь учтено, что при нулевой температуре передаваемый при рассеянии импульс меньше, чем $2p_F$ и диэлектрическая проницаемость определяется выражением (9.10).

Построим на графике зависимость (9.17) (см. рис. 24). Как видно из рисунка, при больших электронных плотностях ($r_s \ll 1$) время релаксации возрастает примерно пропорционально электронной плотности. Этот режим соответствует рассеянию на практически незранированном потенциале, поскольку основной вклад дает рассеяние на большие углы, для которых в подинтегральном выражении $x \gg x_0$. Для случая $r_s > 1$ полученное выражение формально неприменимо, однако, забавным образом, именно в этой области обычно находятся результаты эксперимента и довольно хорошо описываются полученным выражением. При больших электронных плотностях в реальных электронных системах за время релаксации ответственны другие механизмы рассеяния.

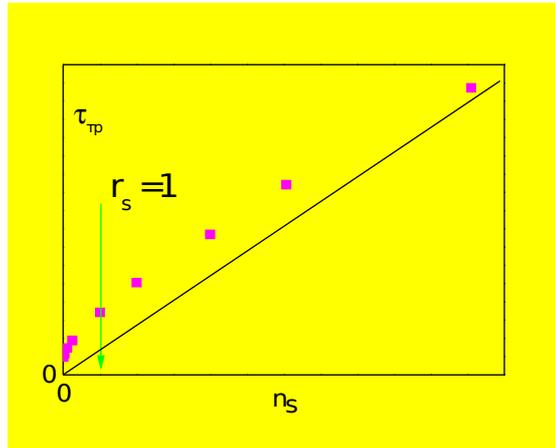


Рис.24.

9.3 Температурная зависимость времени упругой релаксации в двумерных электронных системах.

При высоких температурах основным механизмом рассеяния электронов является неупругое рассеяние на фононах. По мере понижения температуры превалирующим становится упругое рассеяние на примесях. Вообще говоря, частота упругого рассеяния могла бы из-за конечности температуры и размытия фермиевской ступеньки иметь слабую температурозависящую добавку, пропорциональную $(kT/\epsilon_F)^2$. Как будет показано ниже, в металлических двумерных системах температурная зависимость гораздо сильнее, а температурозависящая добавка пропорциональна kT/ϵ_F .

Почему это случается легко догадаться, разглядывая рисунки 22 и 23. По мере увеличения температуры растет число электронов с энергией, превышающей фермиевскую. Эти электроны способны рассеяться с передачей импульса больше, чем $2r_F$, а рассеяние с такой передачей импульса происходит на плохо экранированном потенциале. Доля электронов, участвующих в таких процессах рассеяния равна kT/ϵ_F , поэтому мы вправе ожидать, что именно этой величине будет пропорциональна относительная поправка к проводимости.

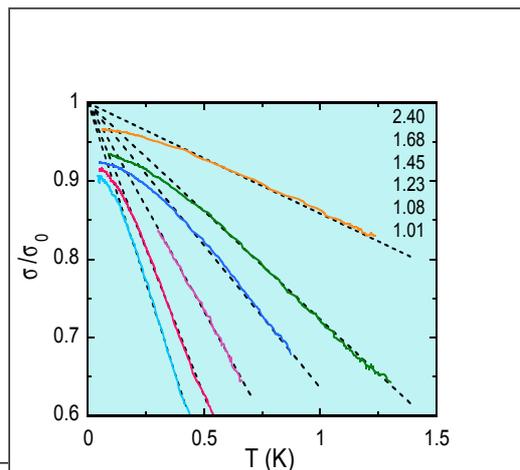


Рис. 25.

На рисунке 25 показаны измерения температурной зависимости проводимости двумерного электронного газа в высокоподвижной кремниевой структуре металл-диэлектрик-полупроводник. Цифры на рисунке обозначают электронную плотность в единицах 10^{11}см^{-2} . На всех экспериментальных кривых прослеживаются линейные участки с наклоном, зависящим от электронной плотности.

Таким образом, линейная температурная зависимость проводимости обусловлена рассеянием электронов на фриделевских осцилляциях, амплитуда которых возрастает при уменьшении электронной плотности. Данные рисунка 25 соответствуют $r_s=8$, а с учетом двухдолинности электронного спектра в исследованных кремниевых полевых структурах, отношение потенциальной энергии к кинетической в эксперименте достигало 16. Ясно, что с формальной точки зрения, это далеко за пределами применимости развитой теории. Тем более удивительно, что расчет дает не только правильное качественное описание, но и вполне разумное количественное.

Встает естественный вопрос, неужели столь сильное взаимодействие никак не проявляется в физических свойствах электронной системы? Недавно было обнаружено аномальное возрастание эффективной электронной массы (см.рис. 26). Собственно говоря,

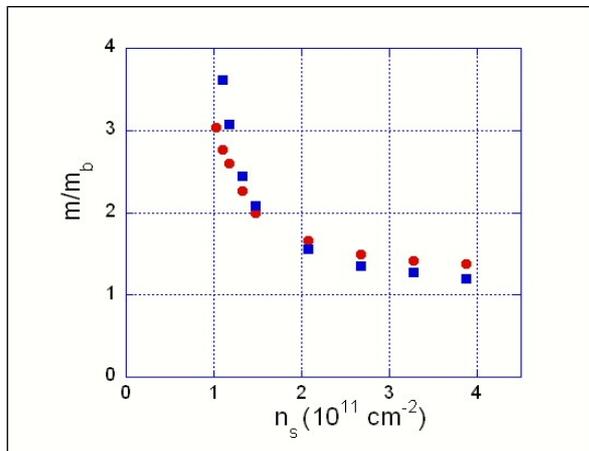


Рис. 26.

это возрастание можно усмотреть и из внимательного анализа данных на рис.25, поскольку рост наклона на этом рисунке при уменьшении электронной плотности соответствует уменьшению фермиевской энергии более быстрому, чем ожидаемое $\epsilon_F \propto n_s$.

Вернемся теперь к процедуре вычислений. Мы не будем их здесь проделывать, а наметим только путь, по которому следует двигаться к ответу. Прежде всего нам нужно вычислить $\tau(\epsilon)$. Для этого нам необходимо воспользоваться выражением (9.15) с экранированным потенциалом примеси, согласно (9.9) и (9.10). Затем подставить полученное выражение в формулу Кубо-Гринвуда (8.12), которая в нашем случае нулевой частоты может быть представлена как:

$$\tau(\epsilon_F, T) = (4kT)^{-1} \int d\epsilon \tau(\epsilon) \text{ch}^{-2}[(\epsilon - \epsilon_F)/2kT]. \quad (9.18)$$

Полученное выражение для $\tau(\epsilon_F, T)$ следует вставить в обычную формулу для проводимости.

Легко видеть, что сингулярность в экранировании приведет к линейной поправке в (9.18) и к ожидаемому результату для проводимости.

Литература.

1. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е., Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, М., 1962.
2. Маттук Р., Феймановские диаграммы в проблеме многих тел, Мир, М., 1969.
3. Л.С.Левитов, А.В. Шитов Функции Грина, задачи и решения, «Физматлит», Москва, 2003.
4. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Статистическая физика , часть 2, «Наука», 1972.
5. W. Kohn, J. Luttinger, Phys. Rev. Lett., **15**, 524 (1956)
6. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Статистическая физика , часть 1, «Наука», 1966.
- 5 V.A. Khodel and V.R. Shaginyan, JETP Lett., **51**, 553 (1990).
6. Силин В.П. ЖЭТФ 33, 495 (1957).
7. Гантмахер В.Ф. Электроны в неупорядоченных средах.. «Физматлит», Москва, 2005.
8. Галицкий В.М. ЖЭТФ **34**, 151 (1958).
9. Luttinger J.M. Phys.Rev. 121,942 (1961).
10. Мигдал А.Б. ЖЭТФ, 34, 1438 (1958).
11. R. Brout, P. Carruthers, Lectures on the many electron problem, New York, 1963.