КВАЗИЧАСТИЦЫ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Александр КЛЮКАНОВ, Денис НИКА

CZU: 538.9

klyukanovalexandr@gmail.com

Полюса одночастичной полевой функции Грина, усредненной по основному состоянию системы, определяют квантовомеханический спектр квазичастиц (Бонч-Бруевич). Учесть температурную зависимость экспериментальных величин, таких как ширина запрещенной зоны $E_g(T)$, эффективная масса квазичастиц $m*(T)$, частота фононов $\omega_{qj}(T)$, спектральная частота перехода и других, а также найти спектр энергий и учесть экранировку с помощью продольной диэлектрической функции $\varepsilon(q,\omega)$, можно только в рамках расчета температурных функций Грина, в которых усреднение производится по большому каноническому распределению Гиббса [1]. В работе [1] в качестве возмущения $V = H - H_Q$ выступает разность между гамильтонианом системы H и гамильтонианом квазичастиц $H_Q = \sum_n E_n a_n^+ a_n$, которую мы используем в качестве самосогласованного решения по методу Хартри-Фока (HF). E_n – неопределенный множитель Лагранжа, n – символизирует набор квантовых чисел квазичастиц. Отметим, что H_Q не является частью гамильтониана системы H, а параметры E_n квазичастичного гамильтониана H_Q, которые и определяют спектр квазичастиц, необходимо найти из системы однородных алгебраических уравнений HF с учетом корреляций, экранировки и поляронного эфекта [1]

$$\sum_m \left(h_{lm}^C - E_l\delta_{lm}\right)\alpha_{mk} = 0, h_{lm}^C = h_{lm} - \sum_q V_q\left(\frac{e_{lm}^{iqr}}{\varepsilon(q,0)}\langle\rho_q\rangle + \sum_p e_{lp}^{-iqr} n_p(\omega_{lp}) e_{pm}^{iqr}\right), \quad n_p(\omega_{lp}) = \frac{n_p}{\varepsilon(q,\omega_{lp})} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu(N(\nu)+1)}{\pi(\nu-\omega_{lp})} Im\left\{\frac{1}{\varepsilon^*(q,\nu)}\right\} \quad (1)$$

Квантовомеханические уравнения HF можно получить из статистических (1), если положить функцию $\varepsilon(q,\omega)$ равной единице и снять усреднение на равновесной матрице плотности. Боровская частота перехода может быть легко опредлена с помощью вычисленного при диагонализации матрицы h_{lm}^{C} одночастичного энергетического спектра. Далее считаем, что матрица h_{lm}^{C} диагональна. Однако связанные состояния квазичастиц рассчитать таким образом невозможно. Частоты переходов, с учетом связанных состояний квазичастиц находят из анализа двухчастичных функций Грина, определяющих не только сами измеряемые величины (сечение рассеяния, спектр поглощения света, потери энергии и другие), но влияющих и на одночастичный спектр через продольную диэлектрическую функцию $\varepsilon(q,\omega)$ в уравнениях (1). Используя метод инфинитезимальных возмущений, приближение хаотических фаз RPA и метод среднего поля HF [1], представим двухчастичную функцию Грина электронной плазмы $\tilde{G}(q,\omega)=1-\varepsilon(q,\omega)$ в виде

$$\tilde{G}(q,\omega)=V_q\sum_{lm}\left|e_{lm}^{-iqr}\right|^2\frac{n_l-n_m}{\hbar(\omega+\omega_{lm})}\frac{e_{lm}^{-iqr}}{\left(e_{lm}^{-iqr}+\Xi_{lm}\right)},\Xi_{lm}=\left(\tilde{h}_-^c\alpha-\alpha\tilde{h}_+^c+\Gamma\right)_{lm},\tilde{h}=h-E,\Gamma=\sum_{q'}V_{q'}\left(e^{-iq'r}\left(n_-\alpha-\alpha n_+\right)e^{iq'r}\right) \quad (2)$$

Матрицы E и n являются диагональными $\left(e^{-iqr}n\alpha e^{iqr}\right)_{lm}=e_{ll'}^{-iqr}n_{l'}\alpha_{l'm'}e_{m'm}^{-iqr}$. По повторяющимся индексам предполагается суммирование. Здесь $\tilde{h}_{\pm}^{c}=h-E-\sum_q V_q\left(\frac{<\rho_q>e^{iqr}}{\varepsilon(q,\omega+\omega_{lm})}+e^{-iqr}n(\Omega_{\pm})e^{iqr}\right)$ и введены обозначения $n_p(\Omega_{\pm})(1)$ и $\Omega_+=\omega+\omega_{lp},\Omega_-=-\omega+\omega_{mp}$, n_p- распределение Ферми-Дирака. Вершинная функция Γ (диаграммы “четыреххвостки”) определяет энергию связи квазичастиц и спектр возбуждений бозонного типа. Диэлектрическая функция в приближении Бома и Пайнса соответствует пределу $\Xi_{lm}(\omega)=0$. Из уравнения (2) следует, что полюс функции Грина $\tilde{G}(q,\omega)=G_Q(q,\omega)$ в этом пределе находится в точке $\omega=\omega_{ml}$. С учётом связанных состояний, частоты переходов ω_{ml} фермионов определяются уравнением

$$\Xi_{lm}(\omega_{ml})=(\varepsilon_l(k_l)-\varepsilon_m(k_m)+E_l(k_l)-E_m(k_m))\alpha_{lm}+\sum_q V_q e_{ll'}^{-iqr}\left(n_{l'}(\omega_{ll'})-n_{m'}(\omega_{mm'})\right)\alpha_{l'm'}e_{m'm}^{-iqr}=0 \cdot \quad (3)$$

Здесь $\varepsilon_l\left(k_l\right)$–решение уравнений HF (1), а $E_l\left(k_l\right)$ – решение уравнений (3) с учетом связанных состояний. В случае прямых междузонных переходов между состояниями $l=c\vec{k}$ и $m=v\vec{k}$ находим для экситона
$\varepsilon_c(k)-\varepsilon_v(k)=E_g+\hbar^2k^2/2\mu,\quad \mu=m_em_h/(m_e+m_h), E_v(k)-E_c(k)=E_n-E_g$, n – главное квантовое число экситона, $E_n=\left|E_n\right|$ и в длинноволновом приближении $q\to 0$. Уравнение Ванье для экситона в импульсном представлении с учетом экранировки, заселенности двух зон энергии электронов и поляронного эффекта имеет следующий вид:
$\left(1+\dfrac{\hbar^2k^2}{2\mu E_n}\right)E_n\alpha_n(k)+\sum_{q'}V_{q'}\left(n_c\left(\omega^c_{kk+q'}\right)-n_v\left(\omega^v_{kk+q'}\right)\right)\alpha_n(k+q')=0$ При $n_c=0, n_v=1/\varepsilon(0)$ (зона проводимости пуста, а валентная зона полностью заполнена) уравнение экситона формально совпадает с уравнением Шредингера для атома водорода в импульсном представлении. Для основного состояния волновая функция имеет вид $\alpha_1(k)=\left(1+k^2a^2\right)^{-2}$. В уравнении Шредингера $\left(1+a^2k^2\right)E_1\alpha_1(k)-\sum_{q'}V_{q'}\alpha_1(k+q')/\varepsilon(0)=0$ переходим от суммирования по q' к интегрированию $\left(1+a^2k^2\right)^{-2}E_1\left(1+\dfrac{\hbar^2k^2}{2\mu E_1}\right)=\dfrac{4\pi e^2}{(2\pi)^3}\int\left(1+\left(\vec{k}+\vec{q}\right)^2a^2\right)^{-2}\dfrac{d\vec{q}}{\varepsilon(0)q^2}$. Двойной интеграл здесь легко вычисляется аналитически и мы приходим к следующему результату:

$$\left(1+a^2k^2\right)^{-2}E_1\left(1+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu E_1}\right)=\frac{e^2}{2a\varepsilon(0)}\left(1+a^2k^2\right)^{-1}, E_1=\frac{e^2}{2a\varepsilon(0)}, a=\frac{\hbar^2\varepsilon(0)}{\mu e^2}$$

В представлении плоских волн без учета спина уравнение (3) для ферми-частиц имеет следующий вид:

$$\left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}+E_{k+q}-E_k\right)\alpha_{k,k+q}+\sum_{q'}V_{q'}\left(n_{k+q'}\left(\omega_{kk+q'}\right)-n_{k+q+q'}\left(\omega_{k+qk+q+q'}\right)\right)\alpha_{k+q'k+q+q'}=0. \quad (4)$$

Частота перехода в HF приближении будет равна нулю при $q=-2k, \varepsilon_k=\varepsilon_{-k}$. С учетом взаимодействия электронов вблизи уровня Ферми частота перехода $E_k - E_{-k} = \Delta_k$ определяет ширину энергетической щели Δ_k. Как и в случае экситона, $\alpha_{k,-k}$ есть фурье-образ волновой функции относительного движения пары. В теории Бардина, Купера, Шриффера (BCS) $\frac{\alpha_{k+q',-k+q'}}{\alpha_{k,-k}} = \frac{g_{k+q'}}{g_k} = \frac{\Delta_{k+q'}}{2E_{k+q'}}\frac{2E_k}{\Delta_k}$. Уравнение щели $\Delta_k = -\sum_{q'} V_{k,q'} \frac{\Delta_{k+q'}}{2E_{k+q'}}$ совпадает с результатом теории BCS, в котором по определению $V_{k,q'} = V_{q'} \frac{2E_k}{\Delta_k}\left(n_{-k+q'}\left(\omega_{-k,-k+q'}\right) - n_{k+q'}\left(\omega_{k,k+q'}\right)\right)$.

В случае бозонов в конденсате также спариваются квазича -стицы в состояниях $\vec{k},-\vec{k}$, формируя ротоны. Расчет функции Грина для бозонов с отталкиванием выполняется аналогично фермионам. В импульсном представлении уравнение для частоты перехода формально совпадает с уравнением (4) , в котором необходимо произвести замену $n \to N$, где N – распределение Бозе-Эйнштейна и изменить знак вершинной функции Γ. Для пары бозонов $\vec{k},-\vec{k}$ при $q = -2k$ спектр энергий ротонов (пары бозонов) определяется уравнением

$$\left(E_{-k} - E_k\right)\alpha_{k,-k} = \sum_{q'} V_{q'}\left(N_{k+q'}\left(\omega_{kk+q'}\right) - N_{-k+q'}\left(\omega_{-k-k+q'}\right)\right)\alpha_{k+q'-k+q'} \quad (5),$$

которое зависит от функций $N_{k'}\left(\omega_{kk'}\right) = N_{k'} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{\pi}\left(N(\nu)+1\right) Im\left\{G^*(q,\nu)\right\}\left(\frac{N_{k'}+1}{\omega_{kk'}-\nu} - \frac{N_{k'}}{\omega_{kk'}+\nu}\right)$.

В приближении среднего поля HF $E_k = E_{-k}$. При температуре T=0 основное состояние конденсата Бозе-Эйнштейна отделено от возбужденного щелью $\Delta = V_0 N / \varepsilon(0)$. Здесь N – число бозонов в конденсате, V_0 и $\varepsilon(0)$– энергия взаимодействия атомов и диэлектрическая проницаемость при $q = 0$. Для потенциала Юкавы с эффективным зарядом Q ширина – щели порядка температуры перехода в сверхтекучее состояние $\Delta = 4\pi Q^2 N / V q_c^2 \varepsilon(0) = k_B T_\lambda$. Здесь мы использовали дебаевскую длину экранировки.

Referenses:

1. КЛЮКАНОВ, А., НИКА, Д. Двухчастичные функции Грина Ферми-жидкости. В: *Rezumate ale comunicărilor. Ştiinţe ale naturii şi exacte* Chişinău; USM, 2019, p.237.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке в рамках институционального проекта Республики Молдова ***15.817.02.29F.***