БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНОВСКИЙ КОНДЕНСАТ ЭКСИТОНОВ И СВЯЗАННЫЕ ФОНОН-РОТОННЫХ МОДЫ

BOSE-EINSTEIN CONDENSATE OF EXCITONS AND COUPLED PHONON-ROTON MODES

Александр КЛЮКАНОВ, ORCID: 0000-0002-4175-5261
Денис НИКА, ORCID: 0000-0002-3082-3118
Александр ВАРЗАРЬ, ORCID: 0000-0002-3391-6723
Серджиу ВАТАВУ, ORCID: 0000-0001-7328-126X
Молдавский государственный университет

CZU: 538.9

e-mail: alexandr.cliucanov@usm.md
e-mail: denis.nica@usm.md
e-mail: alexandru.varzari@usm.md
e-mail: sergiu.vatavu@usm.md

Ландау-парадигм сверхтекучести в своей основе содержит предсказанный Ландау энергетический спектр элементарных возбуждений с энергетической щелью. Здесь мы рассмотрим проблему спектра конденсата экситонов, используя уравнение для продольной диэлектрической функции $\varepsilon(q,\omega)$ системы ядер и электронов твердого тела с учетом взаимодействия с фононами [1]. Результаты работы [1] были использованы нами в анализе моттоского перехода экситонов [2]. С помощью $\varepsilon(q,\omega)$ [1] в данной работе мы исследуем конденсат экситонов Бозе-Эйнштейна. Связанные состояния бозонов с учетом взаимодействия с фононами второго звука подчиняются уравнению, вид которого аналогичен фермионному, так как парные взаимодействия бозонов формально совпадают с кулоновским взаимодействием электронов. Замена антикоммутаторов на коммутаторы меняет знак вершинной функции Γ_{lm}^{nk} [1] и обменного взаимодействия в уравнениях Хартри-Фока

$$\hbar\omega\varphi_{lm}^{n}(q) - \left\langle[\varphi^{n}(q),h_c]_{lm}^{nk}\right\rangle + \eta\sum_{q_1}V_{q_1}\left\langle\left(e^{-iq_1r}[n,\varphi^{n}(q)]e^{iq_1r}\right)^{nk}\right\rangle - \sum_{q_1j_1}\frac{\hbar^2\omega_{q_1j_1}}{2Nm_k}\left|q\cdot e_{q_1j_1}^{k}\right|^2 cth\left(\frac{\hbar\omega_{q_1j_1}}{2k_BT}\right)/\omega = 0 \qquad (1)$$

Здесь $n = \left(e^{\frac{E-\mu}{k_BT}} + \eta\right)^{-1}$ функция распределения. $\eta = 1$для фермионов и $\eta = -1$ для бозонов. Последнее слагаемое в уравнении (1) определяет взаимодействие с фононами второго звука. Для марковских процессов динамическая экранировка заключается в замене V_q на $V_q/\varepsilon(q,\omega)$ Здесь $\varepsilon(q,\omega) = 1 - \tilde{G}(q,\omega)$ продольная диэлектрическая функция фермионов, или ее аналог для бозонов. В импульсном представлении для пары бозонов $\vec{k}, -\vec{k}$ при $q = -2k$ уравнение, определяющее энергию взаимодействия пары атомов (ротонов) в полюсе экситонной функции Грина $\tilde{G}_{lm}(q,\omega)$ имеет вид

$$(E_{-k} - E_k)\varphi_{k,-k} = \sum_{q'} \frac{U_{q'}}{V}\left(N_{k+q'}/\varepsilon(\omega_{kk+q'}) - N_{-k+q'}/\varepsilon(\omega_{-k-k+q'})\right)\varphi_{k+q'-k+q'} \quad (2)$$

В приближении среднего поля HF $E_k = E_{-k}$. При температуре T=0 основное состояние конденсата Бозе-Эйнштейна $E_k = 0, k = 0$ отделено от возбужденного $E_{-k} = \Delta$ щелью $\Delta = E_{-k} - E_k$, которую найдем в рамках теории возмущений (ТВ). В нулевом по взаимодействию $U_0 = 0$ приближении для идеального бозе-газа химический потенциал равен нулю, а $\varepsilon = 1$. При $\mu = 0$, находим $N_{-k+q} = 0$, возбужденное состояние не заполнено, а $N_q = \left(exp\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2mk_0T}\right) + 1\right)^{-1}$. В первом порядке ТВ $\Delta = U_0 N/V$, где N - число атомов в конденсате.

Этот же результат можно получить прямым интегрированием с использованием известного выражения для температуры фазового перехода. Легко видеть, что ширина щели в первом порядке ТВ по константе взаимодействия равна химическому потенциалу $\mu = U_0 N/V$.

Следовательно, функция распределения определяется уравнением

$$N_k = \left(exp\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2mk_0T}\right) + 1\right)^{-1} \quad (3)$$

не только в нулевом, но и в первом приближении для неидеального бозе-газа, когда $\mu = \Delta > 0$ С учетом фононов второго звука полюс электронной функции Грина для частот элементарных возбуждений приводит к уравнению $\omega^2 \pm \omega\omega_r - \omega_E^2(q) = 0$, а его решение

$$2\omega_+ = \pm\omega_r + \sqrt{\omega_r^2 + 4\omega_E^2}, \hbar\omega_r = \Delta + \hbar^2 k^2/2m \quad (4)$$

соответствует теории Боголюбова. Верхняя мода $\omega_+ = \omega_r + \sqrt{\omega_r^2 + 4\omega_E^2}$ является ротон-подобной, а нижняя $\omega_- = -\omega_r + \sqrt{\omega_r^2 + 4\omega_E^2}$ определяется, в основном, частотой фононов второго звука $\omega_E(q)$. Приближение Дебая-Уоллера [1] позволяет найти колебательное уравнение движения, которое определяется прежде всего свойствами ядер $-i\hbar\dot{P}_{q_1j_1} = [\tilde{H}, P_{q_1j_1}]$, в соответствии с теоремой Эренфеста $\ddot{B}_{q_1j_1} = \frac{\omega_{q_1j_1}}{\hbar}[\tilde{H}, P_{q_1j_1}]$ (матрица $S^{q_1}_{j_2j_1}$), а также колебаниями энергии фононного поля (второй звук), которые описываются функцией $E_Q = \left[T_N, e^{iQ_{ml}^q \cdot R_n^k}\right]$ [1]. Спектр колебаний находим в полюсе фононной фунции Грина $\tilde{G}_{nk}(q,\omega)$ из уравнения

$$(\omega^2 - \omega_E^2)\delta_{j_1 j_2} - S_{j_2 j_1}^{q_1} = 0 \tag{5}$$

в котором тензор $S_{j_2 j_1}^{q_1}$ определяет динамическую матрицу колебательного уравнения кристалла (первый звук).

$$\left(\omega_{qj}^2 - \omega_E^2\right) e_{qj\alpha}^k = \sum_{k'n}\sum_{\beta q'} \frac{V_{q'}}{m_k} e^{in\cdot q'} \left(\sum_{lm} |\varphi_{lm}(q')|^2 n_l n_m Q_\alpha\, Q_\beta \left\langle e^{iQ_{ml}^{q'}\cdot\left(U_n^{k'} - U^k\right)}\right\rangle - z_{k'}(q') z_k(q')^* q'_\alpha q'_\beta \left\langle e^{iq'\cdot\left(U_n^{k'} - U^k\right)}\right\rangle\right) \left(e_{qj\beta}^k - e^{iq\cdot n}\sqrt{\frac{m_k}{m_{k'}}}\, e_{qj\beta}^{k'}\right) \tag{6}$$

$$\omega_E^2 = \sum\nolimits_{q_1 j_1} \omega_{q_1 j_1}^2 \left|q \cdot e_{q_1 j_1}^{nk}\right|^2 \left(2N_{q_1 j_1} + 1\right) = \sum\nolimits_{q_1 j_1} \frac{\hbar\omega_{q_1 j_1}}{2N m_k} \left|q \cdot e_{q_1 j_1}^k\right|^2 cth\left(\frac{\hbar\omega_{q_1 j_1}}{2k_B T}\right) \propto q^2 \tag{7}$$

описывает коллективный режим колебаний фононной подсистемы (второй звук). Если одночастичная фононная функция Грина $\left\langle\left[B_{qj}^+(t), B_{qj}\right]\right\rangle, B_{qj} = \left(b_{qj} + b_{-qj}^+\right)$ позволяет найти динамическую матрицу отдельных квазичастиц (уравнение (6) при $\omega_E^2 = 0$), то многочастичная функция $\tilde{G}_{nk}(q,\omega)$ вводит в расчет многоквантовый колебательный процесс (3,4) аналогично плазменным колебаниям электронных квазичастиц (коллективный режим). Для марковских процессов V_q необходимо заменить на $V_q/\varepsilon(q,\omega)$. Частоты фононов определяются из уравнений (6,7). Суммируя по nn в уравнении (6) с учетом ближайших ячеек-соседей, находим.

$$\sum\nolimits_{n_2}\left\langle e^{iq'\cdot(U_{n_2} - U)}\right\rangle\left(e^{iq\cdot n_2} - 1\right)e^{in_2\cdot q'} = \sum\nolimits_{n_2}\left\langle e^{iq'\cdot(U_1 - U)}\right\rangle(1 - cos(qa))e^{in_2\cdot q' + q} = e^{-W_q}\left(1 - Cos(qa)\right)N\delta_{-q'q}$$

Таким образом

$$\omega_q^2 = \left(u_2^2 + u_1^2\left(\frac{\sin x}{x}\right)^2\right) q^2, x = qa/2 \tag{8}$$

Здесь скорости первого и второго звука определяются как

$u_1^2 = \frac{V_q N}{M} e^{-W_q} \left(\sum_{lm} |\varphi_{lm}(q)|^2 n_l n_m \left| e_{-q} \cdot Q_{ml}^q \right|^2 - |z(q)|^2 \left| e_{-q} \cdot q \right|^2 \right)$,
$u_2^2 = \sum_{q'} \frac{\hbar \omega_{q'}}{6NM} \left(2N_{q'} + 1 \right) = \sum_{q'} \frac{\hbar \omega_{q'}}{6NM} cth\beta,\ \beta = \frac{\hbar \omega_{q'}}{2k_B T}$. Уравнения (1-8) определяют полюса фононной $\tilde{G}_{nk}(q, \omega) = \frac{\omega_q^2}{\omega^2 - \omega_q^2}$ и экситонной $\tilde{G}_{lm}(q, \omega) = \frac{\omega_r^2}{\omega^2 - \omega_r^2}$ функций Грина. Вкладом второго звука здесь пренебрежем. Особыми точками являются также нули функции $1 - \tilde{G}(q, \omega)$, которые определяют закон дисперсии связанных фонон-ротонных мод

$$\omega_{\pm} = \sqrt{\omega_r^2 + \omega_q^2 \pm \sqrt{\left(\omega_r^2 - \omega_q^2 \right)^2 + \omega_r^2 \cdot \omega_q^2}} \qquad (9)$$

На рисунке (a) представлены зависимости частот фононов ω_q (8) и ротонов ω_r (4) от волнового вектора. В точке пересечения фононной дисперсионной кривой и ротонной возникает взаимодействие фононов и ротонов $b)$, которое приводит к двум ветвям $\omega_{\pm}$ связанных фонон-ротонных мод. Верхняя мода ω_+начинается как фонон и в области больших волновых чисел переходит в ротон. Нижняя ветвь ω_- начинается как ротон и переходит в фонон.

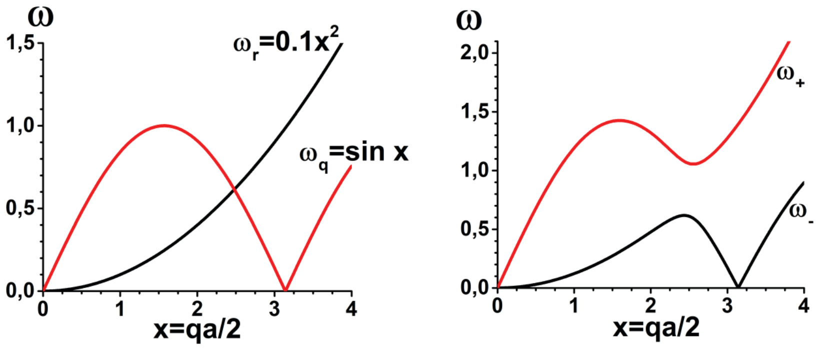

Рис. 1 а) Дисперсия фононов и ротонов без учета их взаимодействия. $\omega_r = \frac{2\hbar}{ma^2} x^2 = 0.1x^2$; $\omega_q == \frac{2}{a} u_1 \sin x = \sin x$. б) Связанные фонон-ротонные колебательные моды $\omega_{\pm}$с энергетической щелью. Верхняя фонон-ротонная ветвь и представляет собой спектр возбуждений, предложенный Ландау

***Литература*:**

1. КЛЮКАНОВ, А., НИКА, Д., ВАТАВУ, С. *Квазичастицы в физике конденсированного состояния.* În: Conferința științifică națională cu participare

internațională „Integrare prin cercetare și inovare”, USM, 10-11 noiembrie 2020. Rezumate ale comunicărilor. Ştiinţe ale naturii şi exacte. USM, 2020, pp. 267-271.

2. KLYUKANOV, A.A., VARZARI, A., VATAVU, S. *Quasiparticle bound states in the solid state physics: a CdTe case study*. In: European Materials Research Society (EMRS-2022) Spring Meeting Symposium K, K.11.8: Thin film chalcogenide photovoltaic materials, May 30- June 03, 2022, Strasbourg, France (virtual conference).

Данная работа выполнена при поддержке грантов РМ: 20.80009.5007.12 и 20.80009.5007.02.